

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

ESTADO POLARÔNICO DE ELÉTRONS EM CANAIS QUASE- UNIDIMENSIONAIS NA SUPERFÍCIE DE HÉLIO LÍQUIDO

Antônio Carlos Alonge Ramos



Dissertação submetida ao programa de Pós-
Graduação em Física da Universidade Federal
de São Carlos como parte dos requisitos para
obtenção do título de Mestre em Física

Orientador: Prof. Dr. Nelson Studart Filho

São Carlos - SP

1998



DOAÇÃO
DE Outen
EM 22/10/98
VALOR EST. R\$20,00

Clas. T 539
Cutt. R 175 ep
e. 2
Fundo: 120137

ATA DA 49ª DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO
DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

MESTRANDO: **ANTONIO CARLOS ALONGE RAMOS**
DATA: 18/08/98
HORÁRIO: 14:00 h.
LOCAL: Sala "Jorge André Swieca" do DF
TÍTULO: "Estado polarônico de elétrons em canais quase-unidimensionais (Q1D) na superfície de hélio líquido"

BANCA EXAMINADORA:

Prof. Dr. Nelson Studart - Presidente - DF/UFSCar
Prof. Dr. Silvio Vitiello - Membro - IFGW-UNICAMP
Prof. Dr. Jayme Vicente De Luca Filho - Membro - DF/UFSCar

Reuniu-se a Banca Examinadora acima descrita, nas formas e termos do artigo 25 do Regimento Interno do Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos, para *Exame de Dissertação de Mestrado* sob o título "*Estado polarônico de elétrons em canais quase-unidimensionais (Q1D) na superfície de hélio líquido*", do candidato **Antonio Carlos Alonge Ramos**. A sessão foi aberta pelo Presidente da Banca Examinadora - Prof. Dr. Nelson Studart. Após a explanação do candidato, o presidente passou a palavra aos componentes da Banca Examinadora. Terminada a arguição, a Banca Examinadora reuniu-se em sessão secreta para atribuição dos conceitos, os quais transcreveram:

Prof. Dr. Nelson Studart conceito = A
Prof. Dr. Silvio Vitiello conceito = A
Prof. Dr. Jayme Vicente De Luca Filho conceito = A

De acordo com o parágrafo 1º do artigo 26 do Regimento Interno do PPG-FIS, o candidato foi considerado aprovado, com o conceito: A.

Encerrada a sessão secreta, o presidente informou o resultado. Nada mais havendo a tratar, foi encerrada a sessão, e para constar, eu, Benedito Wilson de Oliveira, lavrei a presente ata, que assino com os membros da Banca Examinadora.

Prof. Dr. Nelson Studart
Presidente

N Studart

Prof. Dr. Silvio Vitiello
Membro

Silvio Vitiello

Prof. Dr. Jayme Vicente De Luca Filho
Membro

Jayme De Luca Filho

Benedito Wilson de Oliveira
Secretário do PPG-FIS

X.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Nelson Studart Filho - Orientador
Dep. Física - UFSCar

Prof. Dr. Silvio Vitiello
Inst. Física - UNICAMP

Prof. Dr. Jayme Vicente De Luca Filho
Dep. Física - UFSCar

Dedico este trabalho aos meus pais

Gerson e Dirce e irmãos Rubens, Ana Lúcia, Jair
e Elâine.

Agradecimentos

O ato de agradecer é um ato nobre e necessário, um ato profundamente importante. Por isso quero destacar algumas pessoas que de alguma maneira ajudaram-me a realizar este trabalho, mas peço desculpas antecipadamente se eu vier a esquecer alguma que de uma forma direta ou indireta tenha me ajudado.

Ao Prof. Nelson pela sua orientação, pela amizade e o entusiasmo, assim como a sua disposição para discutir quaisquer problemas, aqui deixo o meu muito obrigado.

À FAPESP que apoiou este projeto dando todas as condições para a realização do mesmo.

Não poderia deixar de reconhecer também a grande ajuda que o Prof. Sokolov prestou com as inúmeras discussões que tivemos, fundamentais para que este trabalho fosse concluído.

Quero agradecer pelo auxílio importante que o Colato, a Cris, Villas, Branício, Eudes, Celso, Constante, Roberto, Débora, Hai e William que com frutuosas discussões ajudaram-me no decorrer deste trabalho.

Não posso deixar de agradecer ao Sr. Edson e a Sra. Edna, juntamente com Toco, Alessandra, Rafaela, Michele, Willians, Nessa, César, Marina, Paula, Rozi, Cezão, Henrique, Heraldo, Rose, Gabriel, Santinho, Ber, Maurício, Silmara, Simone, Cecília Marrara, Cecília Roseli, Maria José, Maria de Lourdes, Renato, Luis, ... e a todos que com muito amor me proporcionaram um ambiente de fé e confiança para que esse trabalho chegasse ao seu término.

Aos meus pais Gerson e Dirce, irmãos Rubens, Ana Lúcia, Jair e a Elâine, o meu cunhado Marcelo e os sobrinhos Gabriella e Thiago que sempre me apoiaram e me compreenderam.

Quero agradecer ao Deus Uno e Trino que é Pai, Filho e Espírito Santo que habita em mim desde o batismo e que me capacitou a realizar este trabalho. E também a Maria Santíssima que sempre esteve ao meu lado.

Resumo

Neste trabalho, nós investigamos o estado polarônico formado no sistema de elétrons superficiais confinados em um canal quase-unidimensional sobre hélio líquido. Os elétrons ligados à superfície por um campo elétrico aplicado podem ser confinados lateralmente por meios eletrostáticos ou estruturais e este confinamento pode ser modelado por um potencial parabólico. O polaron é uma quase-partícula composta pelo elétron acoplado à deformação superficial (“dimple”) que resulta do campo aplicado.

As propriedades do polaron são obtidas da solução de um sistema não-linear acoplado, formado pela equação de Schrödinger e a equação de equilíbrio mecânico da superfície de deformação. Nós empregamos dois tipos de aproximações para resolver o sistema. O primeiro deles, chamado aproximação harmônica, consiste na expansão da deformação superficial até segunda ordem para dimensões menores do que um raio de localização, e o outro é o método variacional, no qual a função tentativa é do tipo oscilador harmônico.

Nós determinamos a deformação superficial, a energia do elétron no “dimple”, e a energia do polaron como função do campo elétrico aplicado. Nós também estudamos a influência do campo magnético aplicado na direção perpendicular à superfície. Nós estabelecemos o campo limite para a existência de estados ligados no sistema. Nossos resultados para o estado de energia fundamental são os mesmos em ambas aproximações. Entretanto, para os estados excitados, nós mostramos que a aproximação harmônica apresenta resultados confiáveis somente em certas condições.

Abstract

In this work, we have investigated the polaronic state formed in the system of surface electrons confined in a quasi-one-dimensional channel over liquid helium. The electrons bound to the surface by a holding electric field can be laterally confined by electrostatic or structural means and the lateral confinement can be modeled by a parabolic potential. The polaron is a quasi-particle composed by the electron coupled to the surface deformation (dimple) which arises from the pressing field.

The polaron properties are obtained from the solution of the coupled nonlinear system formed by the Schrödinger equation and the equation for mechanical equilibrium of the surface deformation. We have employed two kinds of approximations to solve the system. The first one, named the harmonic approximation, consists in expanding the surface deformation in second order for dimensions smaller than a localization radius, and the other one is the variational method, in which a harmonic-oscillator like trial function is proposed.

We have determined the surface deformation, the electron energy in the dimple, and the polaron energy as a function of the holding electric field. We have also studied the influence of a magnetic field applied in the direction perpendicular to the surface. We established the field threshold for the existence of bound states in the system. Our results for the ground-state energy are the same in both approximations. However, for the excited states, we show that the harmonic approximation is reliable only in certain conditions.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	2
2	SISTEMA QUASE-UNIDIMENSIONAL DE ELÉTRONS NA SUPERFÍCIE DE HÉLIO	9
2.1	INTRODUÇÃO	9
2.2	ESPECTRO ELETRÔNICO	13
3	EFEITOS POLARÔNICOS EM ELÉTRONS SUPERFICIAIS SOBRE HÉLIO	17
4	EFEITOS POLARÔNICOS EM ELÉTRONS EM CANAIS Q1D	24
4.1	INTRODUÇÃO	24
4.2	ESTADO FUNDAMENTAL DO POLARON	27
4.2.1	APROXIMAÇÃO HARMÔNICA (AH)	29
4.2.2	MÉTODO VARIACIONAL	34
4.3	ESTADOS EXCITADOS DO POLARON	41
4.3.1	APROXIMAÇÃO HARMÔNICA (AH)	44
4.3.2	MÉTODO VARIACIONAL	54
5	CONCLUSÕES	67
	APÊNDICE	69
	BIBLIOGRAFIA	72

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

Durante as últimas décadas o estudo de sistemas carregados de baixa dimensionalidade tornou-se um dos mais interessantes tópicos da Física de sistemas com dimensões espaciais reduzidas. Sistemas carregados bidimensionais (2D), onde elétrons são livres para se moverem no plano, mas estão confinados na terceira dimensão espacial, são formados em estruturas semicondutoras e na superfície de materiais criogênicos, especialmente na superfície de hélio líquido. Estes bem conhecidos sistemas 2D cobrem um grande intervalo de densidades eletrônicas conduzindo a exemplos como o gás de elétrons degenerado em heteroestruturas semicondutoras como os MOSFETs (metal-oxide semiconductor field effect transistor), heterojunções e poços quânticos [1] até sistemas não degenerados de elétrons superficiais sobre hélio líquido [2, 3].

O sistema de elétrons na superfície de hélio apresenta muitos efeitos interessantes dentre eles a cristalização de Wigner, devido ao fato de que a razão entre a energia potencial e a energia cinética por elétron ser suficientemente grande a ponto dos elétrons formarem uma rede na superfície de hélio, como descoberto por Grimes e Adams [4].

Os estados da superfície eletrônica são induzidos pelo potencial entre o elétron e a superfície de hélio, que resulta de duas contribuições diferentes: (i) uma interação de longo alcance vindo da polarização da superfície de hélio, dada por um potencial imagem atrativo, (ii) um potencial barreira devido ao princípio de exclusão de Pauli que não permite um elétron extra no átomo de He. O modelo de potencial para o elétron é dado por

$$V(z) = -\frac{Qe^2}{z}, \text{ para } z > 0, \quad (1.1)$$

e

$$V(z) = V_0, \text{ para } z \leq 0, \quad (1.2)$$

tal que $Q = (\epsilon - 1) / 4(\epsilon + 1)$, a constante dielétrica do hélio é $\epsilon = 1.057$ e o valor experimental para a barreira determinado por Sommer [5] é $V_0 = 1$ eV. A equação de Schrödinger que descreve o sistema é

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_{n,k}(\vec{r}, z) + V(z) \Psi_{n,k}(\vec{r}, z) = E_{n,k} \Psi_{n,k}(\vec{r}, z) \quad (1.3)$$

e os movimentos perpendiculares e paralelos a superfície podem ser desacoplados da forma

$$\Psi_{n,k}(\vec{r}, z) = A^{-1/2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \phi_n(z). \quad (1.4)$$

Se considerarmos $V_0 \rightarrow \infty$, a equação de Schrödinger pode ser resolvida exatamente com as condições de contorno $\phi_n(0) = \phi_n(\infty) = 0$. As soluções da equação de Schrödinger unidimensional são dadas por

$$\phi_n(z) = z R_{n,0}(z) \quad (1.5)$$

sendo $R_{n,0}(z)$ as funções de onda da equação radial do átomo de hidrogênio com momento angular nulo. O espectro de energia das subbandas é então similar ao do átomo de hidrogênio que é bem conhecido, e portanto

$$E_{n,k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_n \quad (1.6)$$

tal que

$$E_n = -\frac{Q^2 m e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}. \quad (1.7)$$

Para a subbanda mais baixa tem-se que

$$\phi_1(z) = \frac{2}{a_0^{3/2}} z e^{-z/a_0}, \quad a_0 = \hbar^2 / m Q e^2 \quad (1.8)$$

sendo a_0 o raio efetivo de Bohr. Todavia, a carga efetiva Qe é pequena ($Q^2 \sim 10^{-4}$) de maneira que a energia de ligação é pequena (≈ 0.7 meV) e o raio efetivo de Bohr a_0 é grande ($\approx 75 \text{ \AA}$). A pequenez de Q é consequência da pequena polarizabilidade do átomo de hélio. Vemos então que a aproximação para barreira infinita é boa, porque o potencial barreira é da ordem de 1.0 eV que é muito maior do que a energia de ligação 7×10^{-4} eV.

A existência destes estados superficiais eletrônicos e este tipo de modelo hidrogênico para os elétrons na superfície de hélio foram propostos independentemente por Cole e Cohen [6] e Shikin [7].

A este potencial confinante é adicionado um campo elétrico que colabora para prender os elétrons na superfície, já que como vimos, a energia de ligação é bastante pequena. Tal campo origina-se de um capacitor como apresentado no diagrama esquemático da Fig.(1.1).

A energia de Fermi do sistema de elétrons em duas dimensões é dada por $\varepsilon_F = \hbar^2 \pi \sigma / m$, sendo σ a densidade dos elétrons. Como as densidades experimentais para elétrons na super-

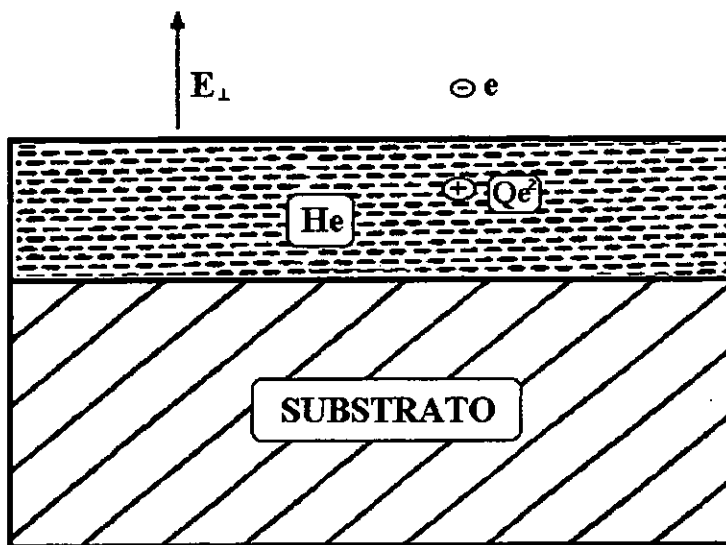


Fig. 1.1 Ilustração esquemática do arranjo para o elétron no filme de hélio líquido sobre um substrato, em presença de um campo elétrico aplicado perpendicularmente à superfície pelas placas de um capacitor.

fície de hélio estão no intervalo de $10^5 - 10^9 \text{ cm}^{-2}$, os elétrons podem ser descritos por uma função de distribuição de Boltzmann, ou seja, classicamente já que neste caso $\varepsilon_F \ll k_B T$ para temperaturas T mesmo da ordem de milikelvins, os efeitos de degenerescência quântica serão relevantes apenas a densidades mais altas no hélio líquido.

Quanto às propriedades de transporte há dois mecanismos de espalhamento dos elétrons na superfície de hélio: o espalhamento por riplons, de maneira análoga à interação do elétron com os fônons nos cristais polares, que são ondas de capilaridade-gravidade quantizadas da superfície de hélio (Edwards e Saam, [8]) e o espalhamento por átomos de vapor de hélio (coexistência de fases). Para $T \leq 0.5 \text{ K}$, temos a predominância do espalhamento dos elétrons pelos riplons. Para $T \geq 1.5 \text{ K}$, o espalhamento acontece devido aos átomos de vapor de hélio e nesse limite os elétrons podem tornar-se mais localizados com a presença de uma grande quantidade dos átomos do gás de hélio que impediria o movimento dos elétrons (bolha de elétrons) [9].

Shikin [7, 10] foi o primeiro a mostrar que a polarização efetiva do meio conduz à formação do “dimple” (pequena depressão) e o acoplamento do elétron à superfície é determinado principalmente pela pressão exercida pelo campo elétrico perpendicular a superfície. A baixas temperaturas com a aplicação de campos elétricos fortes, um “dimple” na superfície seria formado e, por sua vez, o elétron se tornaria bem localizado. Esta quase-partícula formada pelo elétron acoplado à deformação superficial pode ser denominada polaron, no sentido de Landau [11] que atribuía ao acoplamento do elétron com a polarização auto-induzida em cristais. E neste sentido a auto-localização do elétron em um “dimple”, possui a sua massa efetiva bastante aumentada ($m^* \simeq 10^3 m_{He}$) e a sua mobilidade drasticamente reduzida. Análises teóricas detalhadas das propriedades do estado polarônico foram realizadas por Shikin e Monarkha [12] e Monarkha [13]. Novos avanços nestas linhas foram conduzidas por Sander [14], Cheng e Platzman [15] e

finalmente por Marques e Studart [16] que estenderam os trabalhos anteriores a cálculos do estado fundamental e de propriedades de transporte do polaron de uma forma auto-consistente. A formação de “dimples” de muitos elétrons sobre o filme de hélio foi investigada por Shikin e Leiderer [17, 18], e recentemente por Shikin e Lebedeva [19], e o estado polarônico, ligado a uma impureza, foi estudado por Farias e Peeters [20].

A proposta teórica sobre a descrição do estado do “dimple” em termos de um polaron de Fröhlich foi introduzida por Farias, Hipólito e Studart [21, 22] e independentemente por Jackson e Platzman [23, 24] que usaram o formalismo de integrais de trajetória de Feynman para descrever as propriedades estáticas do polaron. Neste caso a interação do elétron com a superfície é descrito em termos do polaron onde o elétron está acoplado aos riplons. Este estado tem sido denominado ainda de polaron riplônico. Diferentemente do polaron em cristais polares, o polaron riplônico é valioso para testar as previsões do modelo polarônico porque a intensidade do acoplamento da interação pode ser variada de um estado quase-livre para um estado auto-localizado no regime de acoplamento forte, pela variação do campo elétrico efetivo aplicado.

Recentemente o progresso tecnológico na fabricação de novos materiais produziu estruturas semicondutoras onde os portadores de carga estão confinados lateralmente formando um sistema carregado Q1D (quase-unidimensional). Devido às altas densidades eletrônicas obtidas nestas estruturas, o sistema comporta-se como um gás degenerado e exhibe vários efeitos interessantes. [45] O estudo intensivo de sistemas carregados Q1D em semicondutores, bem como a procura para atingir densidades mais altas no sistema de elétrons superficiais (2D), motivaram a busca de um sistema Q1D similar ao sistema de elétrons 2D sobre hélio líquido. Tal sistema teria todas as vantagens típicas daquelas dos elétrons superficiais sobre hélio, tais como a limpeza, homogeneidade, e a possibilidade de grande variação dos parâmetros experimentais,

como a densidade eletrônica, a largura do filme de hélio e o campo externo aplicado. Deste modo, a realização experimental deste sistema abriu as portas para a investigação de diferentes fenômenos no gás Q1D não-degenerado [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 39, 41, 42, 43]. Os estudos intensivos nestes sistemas de cargas Q1D em semicondutores, motivaram muitos pesquisadores a tentarem construir este sistema.

O objetivo deste trabalho consiste no estudo da formação do polaron em canais quase unidimensionais de elétrons sobre hélio líquido. A motivação deste estudo deve-se à recente comprovação experimental do estado polarônico para elétrons sobre filmes de hélio líquido [44] e à realização experimental de confinamento de elétrons em canais unidimensionais sobre hélio líquido [25, 26, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 41, 42, 43]. Na determinação dos estados fundamental e excitados do polaron utilizamos o modelo hidrodinâmico proposto por Shikin e Monarkha, que consiste na solução da equação de Schrödinger e da equação de equilíbrio mecânico.

A organização da dissertação é como segue: - No capítulo 2 descrevemos as propostas de realização experimental do sistema Q1D para elétrons sobre hélio, bem como o espectro de energia dos elétrons nestes canais supondo que a superfície de hélio seja plana e suave. No capítulo 3 introduzimos o modelo hidrodinâmico para estudar os efeitos polarônicos para elétrons superficiais no hélio. No capítulo 4 determinamos os efeitos polarônicos para o sistema Q1D que constitui a parte central desta dissertação. As energias dos estados fundamental e excitados, como função de campos elétrico e magnético aplicados, foram obtidas. Para isto, utilizamos uma aproximação harmônica para o potencial que descreve o “dimple”, bem como um método variacional. No capítulo 5 apresentamos as nossas conclusões. Um apêndice detalhando os procedimentos de cálculo não essenciais à compreensão do trabalho é introduzido no final da dissertação.

Capítulo 2

SISTEMA QUASE-UNIDIMENSIONAL DE ELÉTRONS NA SUPERFÍCIE DE HÉLIO

2.1 INTRODUÇÃO

Diferentes propostas de realização experimental do sistema Q1D têm sido apresentadas. Parte delas consiste na utilização de meios eletrostáticos para confinar lateralmente os elétrons e outra emprega a redução estrutural do tamanho do sistema, tal como a utilização de um substrato de cunhas. A primeira técnica mencionada foi proposta inicialmente por Chaplik [25] que sugeriu que um sistema de elétrons Q1D poderia ser criado carregando positivamente fios metálicos muito finos localizados abaixo da superfície de hélio líquido. Marty [26] usou lâminas de cobre colocadas uma do lado da outra na transversal do substrato formando assim vários canais como mostra a Fig.(2.1).

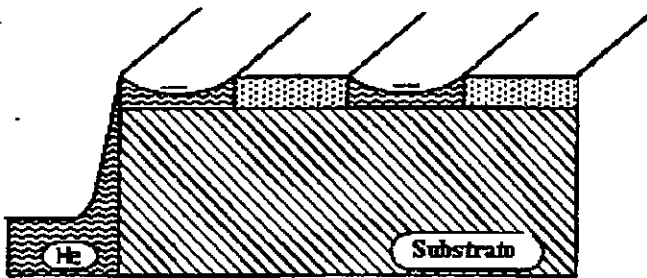


Fig. 2.1 Ilustração esquemática de vários canais de elétrons confinados eletrostaticamente. O sistema consiste de várias placas metálicas carregadas negativamente dispostas paralelamente com a aplicação de um campo elétrico perpendicularmente à superfície para a obtenção de estados ligados.

Baseados na mesma idéia, Valkering et al. [27] construíram um canal Q1D solitário de elétrons na superfície de hélio. O sistema consiste de duas placas metálicas dispostas paralelamente, separadas de uma distância d e altura H , ambas carregadas negativamente, colocadas sobre o substrato de quartzo. Todo o sistema é preenchido com hélio líquido, conforme mostra a Fig. (2.2).

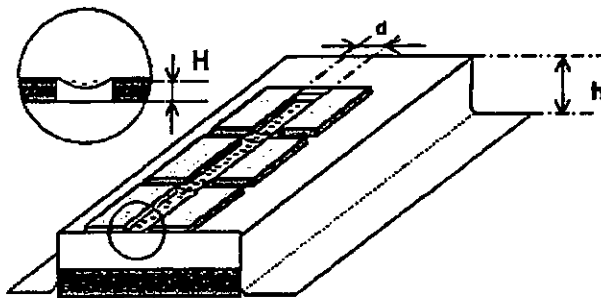


Fig. 2.2 Ilustração de um canal único de elétrons na superfície de hélio confinado eletrostaticamente.

Os elétrons são confinados no canal devido ao potencial negativo das placas e ao campo E_{\perp} aplicado externamente na direção perpendicular, para se conseguir estados ligados.

O outro método consiste na redução estrutural do tamanho do sistema, aproveitando a forma geométrica da superfície do substrato e preenchendo-o por hélio. Os primeiros a proporem este tipo de sistema foram Ginzburg e Monarkha [29]. Eles sugeriram o uso de um substrato dielétrico com um perfil superficial triangular periódico do mesmo modo que uma rede de difração. Volodin e Edel'man [30] propuseram usar um método similar para estabilizar os elétrons superficiais (ES) sobre uma camada de hélio depositada na superfície ondulada de um substrato dielétrico a altas densidades de elétrons.

Em 1986, Kovdrya e Monarkha [32] propuseram outra maneira de criar o sistema eletrônico Q1D, usando a finitude do raio de curvatura do hélio líquido em canais paralelos sobre a superfície de um substrato dielétrico de cunhas lineares. Estes canais deformam a superfície do líquido devido às forças de capilaridade. O diagrama esquemático do arranjo experimental do sistema está mostrado na Fig.(2.3). Se o substrato está localizado a uma distância H acima do nível do hélio líquido, o raio de curvatura da superfície é dada por $R = \alpha/\rho g H$. Como no caso anterior, quando a superfície de hélio sobre o substrato dielétrico é carregado por um filamento aquecido, as forças de polarização do substrato tenderão a concentrar os elétrons ao longo das protuberâncias. Contudo, se um campo elétrico externo E_{\perp} for aplicado perpendicularmente à superfície (eixo z), os elétrons serão deslocados para o fundo do canal, concentrando-se preferencialmente ao longo do eixo do canal (eixo x). Além disto, os elétrons estarão bastante distantes do substrato porque o tamanho do raio, tipicamente $R = 10^{-4} - 10^{-3}$ cm, que é muito maior do que o tamanho dos defeitos superficiais (da ordem de $10^{-6} - 10^{-5}$ cm) e a profundidade do líquido abaixo do canal é da ordem de R . Assim a influência da rugosidade do substrato pode ser desprezada e o gás de elétrons Q1D poderia ser muito puro e homogêneo, como no caso 2D, e exibir altas mobilidades. Kovdrya e Nikolaenko [33] realizaram medidas de transporte e encontraram uma forte anisotropia na condutividade ao longo das direções transversal e longitudinal. Novos estudos experimentais neste aparato foram recentemente reportados por Kovdrya et al.[41, 42, 43] e Yayama e Yomokiyo [35].

Recentemente, Kirichek et al.[34] descreveram um método simples de criar um canal solitário de elétrons com alta mobilidade sobre a superfície de hélio fortemente distorcida por forças de capilaridade provenientes de um substrato formado por duas placas de polímero dielétrico, formando um ângulo pontiagudo como mostrado na Fig.(2.4). Neste método, o perfil da superfície de hélio e as condições para criar o sistema de elétrons Q1D são as mesmas

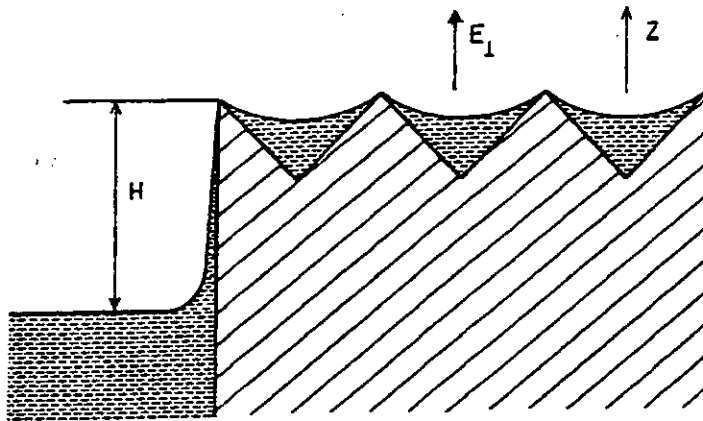


Fig. 2.3 Desenho esquemático de um sistema quase unidimensional de elétrons sobre uma superfície de hélio.

que nos trabalhos anteriores. Mas, ao contrário do que foi proposto por Kovdrya e Monarkha [32], não haveria a interação entre os elétrons dos canais adjacentes, somente entre os elétrons no canal.

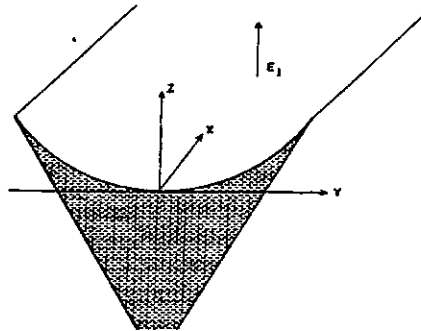


Fig. 2.4 Seção transversal de um canal preenchido por hélio líquido entre dois planos dielétricos. Os elétrons estão localizados ao longo do eixo x ; o campo E_{\perp} está ao longo do eixo z .

Kovdrya et al. [41, 42, 43, 35] observaram que as propriedades de transporte do elétron ao longo do canal possui uma dependência não-monotônica como uma função da temperatura que

é uma assinatura do comportamento unidimensional como foi demonstrado por Sokolov, Hai e Studart [38].

2.2 ESPECTRO ELETRÔNICO

Primeiramente determinamos os estados ligados e suas respectivas autofunções, para elétrons presos em um canal solitário, conforme mostra a Fig.(2.4), supondo que a superfície não seja deformada.

O perfil da superfície do hélio, é um semicírculo descrito pela equação

$$(z - R)^2 + y^2 = R^2, \quad (2.1)$$

e para pequenos deslocamentos do elétron na direção y , $y \ll R$ temos

$$z = R \left(1 - \sqrt{1 - \frac{y^2}{R^2}} \right) \simeq \frac{y^2}{2R}. \quad (2.2)$$

O campo elétrico aplicado E_{\perp} é aplicado na direção z . Se um elétron move-se no fundo do canal a uma distância y do centro, ele está sujeito a um potencial dado por

$$V(y) = eE_{\perp}z = \frac{eE_{\perp}}{2R}y^2 = \frac{1}{2}m \left[\frac{eE_{\perp}}{mR} \right] y^2 = \frac{1}{2}m\omega_0^2 y^2, \quad (2.3)$$

que confina lateralmente o elétron na direção y com frequência característica $\omega_0 = \sqrt{eE_{\perp}/mR}$, onde e e m são a carga e a massa do elétron respectivamente. Devido a este potencial de confinamento parabólico, o movimento do elétron nesta direção é quantizado. As autoenergias e as autofunções correspondentes são dadas por

$$\varepsilon_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.4)$$

e

$$\varphi_n(y) = \frac{1}{\pi^{1/4} l^{1/2} \sqrt{2^n n!}} \exp\left(-\frac{1}{2} \frac{y^2}{l^2}\right) H_n\left(\frac{y}{l}\right), \quad (2.5)$$

respectivamente, sendo $l = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$ o comprimento de localização na direção y , e $H_n(x)$ o polinômio de Hermite. Para a raiz quadrada do deslocamento médio do elétron com $n > 0$, a desigualdade

$$\sqrt{\langle y_n^2 \rangle} = \left(n + \frac{1}{2} \right)^{1/2} l \ll R \quad (2.6)$$

é satisfeita sempre para $n \leq 10^2$ e campos elétricos da ordem de $E_{\perp} = 10^2 - 10^3$ V/cm. Então a aproximação parabólica do potencial de confinamento dada pela Eq.(2.3) é boa para a descrição do movimento do elétron ao longo do eixo y para um grande avanço do campo elétrico aplicado e do número quântico n .

Como o elétron pode se mover livremente na direção x , a energia total e a função de onda podem ser escritas como

$$E_{n,l}(k_x) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \varepsilon_n + \Delta_l \quad (2.7)$$

e

$$\Psi_{n,l,k_x}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp(ik_x x) \varphi_n(y) \Phi_l(z), \quad (2.8)$$

respectivamente, tal que Δ_l e $\Phi_l(z)$ indicam as autoenergias do elétron e as funções de onda na direção z com índice $l = 1, 2, 3, \dots$, k_x é o vetor de onda do elétron, L_x é o tamanho do sistema na direção x . Na direção z os estados ligados são provocados pelo potencial associado ao campo elétrico externo, pelo potencial de atração eletrostático das cargas imagens e pela barreira de potencial devido ao princípio de exclusão de Pauli, análogo ao caso de ES, apresentados no capítulo 1. Portanto, na direção z a solução do potencial é análogo ao caso bidimensional descrito no capítulo 1. Como existe a aplicação do campo elétrico, a solução não é mais do tipo hidrogênica, e o problema não tem solução exata. Podemos no entanto descrever o estado fundamental através do método variacional como foi proposto por Sokolov et al. [36] que propôs uma função tentativa para o estado fundamental, $l = 1$, dada por

$$\Phi_1(z) = 2\gamma^{\frac{3}{2}} z \exp(-\gamma z), \quad (2.9)$$

sendo γ um parâmetro dependente do campo E_{\perp} e é determinado variacionalmente. A distância média do elétron à superfície para o estado fundamental é dada da ordem de $\langle z \rangle_1 = 114 \text{ \AA}$, para $E_{\perp} = 0$ e é menor para $E_{\perp} \neq 0$. Assim, a condição $\langle z \rangle_1 \ll R$ é satisfeita e a função de onda $\Phi_l(z)$ e a autoenergia Δ_l podem ser determinadas, como no caso bidimensional, por métodos aproximativos. Para campos $E_{\perp} \geq 300 \text{ V/cm}$, podemos desprezar a transição eletrônica do estado fundamental para estados excitados no caso de $T \leq 2 \text{ K}$.

A menor energia $eE_{\perp}R$ para confinar o elétron no fundo do canal deve exceder um valor típico, por exemplo, $E_b \sim 10^2 \text{ K}$. Por esta razão, consideramos somente campos $E_{\perp} > 300 \text{ V/cm}$ tal que a condição $eE_{\perp}R \gg E_b$ seja satisfeita para $R \sim 10^{-4} - 10^{-3} \text{ cm}$, que é a

condição para que os defeitos do material possam ser desprezados, pois estes efeitos são da ordem de $10^{-5} - 10^{-6}$ cm e a profundidade do líquido abaixo do canal é da ordem de R .

Estudos deste sistema na presença de campo magnético uniforme foram realizados por Sokolov e Studart [36]. Atualmente este trabalho está sendo complementado por Villas-Bôas [37] para o caso de campos magnéticos não homogêneos. A mobilidade dos elétrons no canal Q1D foi estudada teoricamente por Sokolov, Hai e Studart [38]. Eles investigaram os efeitos sobre a mobilidade devido à interação elétron-riplon e devido ao espalhamento dos elétrons pelos átomos de vapor. Estudos dos efeitos de muitos corpos, usando o confinamento parabólico para modelar este sistema Q1D, foram realizados por Sokolov e Studart na determinação das excitações de plasmons [39]. Uma revisão detalhada das propostas experimentais, do estado polarônico bem como as propriedades de transporte nos canais quase unidimensionais de elétrons encontram-se na ref. [40].

Capítulo 3

EFEITOS POLARÔNICOS EM ELÉTRONS SUPERFICIAIS SOBRE HÉLIO

Vamo-nos concentrar, por agora, no movimento dos elétrons superficiais ao longo do plano a baixas temperaturas sem confinamento lateral. Na situação experimental existe um potencial adicional vindo de um campo elétrico E_{\perp} , que pressiona os elétrons contra a superfície. A polarização efetiva do meio conduz à formação do “dimple” e isto se deve ao acoplamento do elétron à superfície que é modificada devido a um campo efetivo formado pelo campo elétrico externo e pelas forças que vêm do substrato e que dependem essencialmente da espessura do filme como mostra a Fig.(3.1). O campo elétrico efetivo é dado por

$$E_{\perp} = E_{ext}^{(0)} + \frac{Q_1 e}{d^2}, \quad (3.1)$$

tal que

$$Q_1 = \frac{e\epsilon(\epsilon_s - \epsilon)}{(\epsilon_s + \epsilon)(\epsilon + 1)^2}, \quad (3.2)$$

sendo ϵ a constante dielétrica do filme de hélio, ϵ_s a constante dielétrica do substrato, e a carga do elétron e d a espessura do filme de hélio.

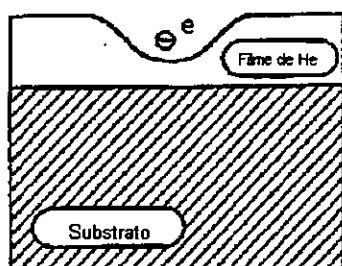


Fig. 3.1 Visão esquemática do elétron no estado auto-aprisionado.

A solução deste problema é obtida resolvendo duas equações sendo a primeira a equação de Schrödinger dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \Psi(r) + eE_{\perp} \xi(r) \Psi(r) = E \Psi(r), \quad (3.3)$$

sendo $\xi(r)$ a deformação induzida pelo campo elétrico efetivo, que pressiona o elétron contra a superfície. A segunda é obtida da minimização da energia total do polaron que é dada por

$$W = \int d^2r \left\{ \frac{\sigma}{2} [(\nabla \xi)^2 + k_c^2 \xi^2] + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \Psi)^2 + eE_{\perp} \xi |\Psi|^2 \right\}, \quad (3.4)$$

de modo que o termo $\frac{\sigma}{2} (\nabla \xi)^2$ corresponde à tensão superficial e o termo $\frac{\sigma}{2} k_c^2 \xi^2$ aos efeitos de gravidade e de forças de van der Waals do substrato sobre o filme de hélio. Se minimizarmos a Eq.(3.4) com relação a ξ , obteremos a equação de equilíbrio mecânico

$$\nabla^2 \xi(r) - k_c^2 \xi(r) = \frac{eE_{\perp}}{\sigma} |\Psi|^2, \quad (3.5)$$

sendo $k_c^2 = \rho g' / \sigma$ a constante de capilaridade, $g' = g(1 + 3c/\rho g d^4)$ a aceleração efetiva do fluido, c o acoplamento de van der Waals do hélio ao substrato, σ a tensão superficial, ρ densidade do hélio e g a aceleração gravitacional.

O estado do polaron no modelo hidrodinâmico é descrito pelo poço de potencial $\Phi(r) = eE_{\perp}\xi(r)$. As autofunções $\Psi(r)$ e os autovalores E são determinados pelas Eqs.(3.3) e (3.5). Fisicamente, o polaron é formado devido ao campo E_{\perp} aplicado exercendo uma pressão $eE_{\perp} |\Psi(r)|^2$ sobre a superfície, que a deforma pela quantidade $\xi(r)$. Daí se determina o poço de potencial de ligação do elétron no “dimple”. Aproveitando a simetria cilíndrica da Eq.(3.5), podemos escrever a sua solução em termos de uma transformada de Fourier-Bessel

$$\xi(r) = \int_0^{\infty} \xi(k) J_0(kr) k dk \quad (3.6)$$

de modo que a transformada inversa é dada por

$$\xi(k) = -\frac{eE_{\perp}}{\sigma(k^2 + k_c^2)} \int_0^{\infty} |\Psi(r)|^2 J_0(kr) r dr, \quad (3.7)$$

sendo $J_0(x)$ a função de Bessel de ordem zero.

Shikin e Monarkha [12] e Monarkha [13] consideraram uma aproximação em que a deformação superficial é expandida como

$$\xi(r) = \xi(0) + \frac{1}{2} \xi''(0) r^2 \text{ para } r < L, \quad (3.8)$$

sendo L o comprimento de localização que representa o raio de localização do elétron no dimple. Chamam esta aproximação de aproximação harmônica. A função de onda normalizada do

estado fundamental para esta distorção será tomada como a do oscilador harmônico bidimensional que possui a forma gaussiana

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}L} \exp\left(-\frac{r^2}{2L^2}\right), \quad (3.9)$$

o autovalor de energia mais baixa é dada por

$$E = eE_{\perp}\xi(0) + \frac{\hbar^2}{L^2m}, \quad (3.10)$$

tal que

$$L^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \text{ e } \omega^2 = \frac{eE_{\perp}\xi''(0)}{m}. \quad (3.11)$$

Substituindo a função de onda gaussiana na Eq.(3.7), e o resultado de $\xi(k)$ na Eq.(3.6) obteve-se a seguinte expressão para a deformação superficial:

$$\xi(r) = -\frac{eE_{\perp}}{2\pi\sigma} \int_0^{\infty} \frac{J_0(kr)}{(k^2 + k_c^2)} \exp\left(-\frac{k^2 L^2}{4}\right) k dk, \quad (3.12)$$

e para o limite assintótico da deformação superficial

$$\xi(0) = \frac{eE_{\perp}}{2\pi\sigma} \left[\frac{1}{2} \exp(k_c^2 L^2/4) \text{Ei}(-k_c^2 L^2/4) \right]. \quad (3.13)$$

Para $r \gg k_c^{-1}$,

$$\xi(r) \simeq -\frac{eE_{\perp}}{2\pi\sigma} \left[\frac{\pi}{2k_c r} \right]^{\frac{1}{2}} \exp(-k_c r), \quad (3.14)$$

sendo $Ei(x)$ a função exponencial-integral.

No limite $k_c L \ll 1$, tem-se que

$$\xi(0) \simeq -\frac{eE_{\perp}}{2\pi\sigma} \ln \left(\frac{2}{k_c L \sqrt{\exp C}} \right), \quad (3.15)$$

e

$$\xi''(0) \simeq \frac{eE_{\perp}}{2\pi\sigma L^2}, \quad (3.16)$$

sendo $C = 0.5772\dots$ a constante de Euler-Mascheroni. Nesta aproximação, a energia do estado fundamental do polaron é da Eq.(3.4), dada por

$$W = -\frac{(eE_{\perp})^2}{4\pi\sigma} \left[\ln \frac{2}{k_c L \sqrt{\exp C}} - \frac{1}{2} \right], \quad (3.17)$$

e o comprimento de localização dado por

$$L^2 = L_F^2 = \frac{2\pi\sigma\hbar^2}{m(eE_{\perp})^2}. \quad (3.18)$$

Monarkha [13] introduziu um método variacional que consiste em supor a função de onda gaussiana como função tentativa e minimizar a energia total (Eq.(3.4)) com relação ao parâmetro

L_{var} . A diferença da aproximação harmônica descrita acima e o procedimento variacional é

$$L_{var}^2 = 2L^2.$$

Uma outra aproximação foi proposta por Sander [14] que usou uma forma variacional para a deformação potencial com dois parâmetros. Ele escolheu

$$\xi(r) = -\frac{\xi_0}{\cosh^2(r/L)}, \quad (3.19)$$

sendo a profundidade do dimple ξ_0 e o raio de localização L são os parâmetros variacionais. Se $\xi(r)$ é substituída na Eq.(3.4), então a equação de Shrödinger pode ser resolvida exatamente, se trocarmos $1/4r^2$ por $(L^2/4) \sinh^2(r/L)$. Assim o estado eletrônico fundamental e a função de onda são dadas por

$$E = -\frac{\hbar^2}{2mL^2}(a-1)^2 \quad (3.20)$$

e

$$\Psi(r) = N \left[\frac{\tanh r/L}{r} \right]^{1/2} (\operatorname{sech} r/L)^{a-1}, \quad (3.21)$$

tal que

$$a = \left(\frac{1}{4} + \frac{2meE_1\xi_0L^2}{\hbar^2} \right)^{1/2} \quad (3.22)$$

e N é uma constante normalizada.

Embora estas aproximações descrevem o estado polarônico qualitativamente, a comparação quantitativa entre eles é difícil devido aos diferentes procedimentos numéricos e as escalas das variáveis usadas nos cálculos.

As propriedades estáticas e dinâmicas do estado polarônico, formado na superfície de um filme de hélio líquido sobre substratos diferentes, foram estudadas do ponto do vista hidrodinâmico por Marques e Studart [16]. A formação do “dimple” e a auto-localização dos elétrons são obtidas através da solução auto-consistente das equações de Schrödinger e da de equilíbrio mecânico. Um estudo detalhado sobre o estado polarônico no regime hidrodinâmico foi feito por Studart [40].

Capítulo 4

EFEITOS POLARÔNICOS EM ELÉTRONS EM CANAIS Q1D

4.1 INTRODUÇÃO

Descrevemos no capítulo 2 o espectro de estados ligados dos elétrons no sistema Q1D, assumindo que não ocorria a deformação da superfície de hélio no canal. No entanto, como evidenciamos no capítulo 3, o efeito de campo elétrico efetivo forte leva a uma deformação do elétron na superfície de hélio suficiente para localizá-lo. É este limite de acoplamento forte que investigamos neste capítulo.

Vamos determinar os estados fundamental e excitados do polaron no sistema Q1D, usando o mesmo método apresentado no capítulo 3. Além disso vamos estudar a influência do campo magnético sobre o polaron quando o elétron está no estado fundamental e nos estados excitados.

Sabemos que a equação de Schrödinger em coordenadas cartesianas em duas dimensões é dada por

$$\frac{1}{2m}(\hat{P}_x + \hat{P}_y)\Psi(x, y) + eE_1\xi(x, y) = E\Psi(x, y). \quad (4.1)$$

Para escrevermos a equação de Schrödinger com campo magnético temos que fazer a seguinte transformação

$$\hat{P}_x \rightarrow \hat{P}_x - e\hat{A}_x;$$

$$\hat{P}_y \rightarrow \hat{P}_y - e \hat{A}_y.$$

Escolhendo o potencial vetor na gauge simétrica $\vec{A} = \{-By/2; Bx/2; 0\}$ obtemos a equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + i \frac{\hbar \omega_c}{2} \left(x \frac{\partial \Psi}{\partial y} - y \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + \left[\frac{m \omega_c^2 (x^2 + y^2)}{8} + e E_{\perp} \xi(x, y) + \frac{m \omega_0^2 y^2}{2} \right] \Psi = E \Psi. \quad (4.2)$$

Neste caso a simetria cilíndrica do problema é quebrada, devido ao confinamento do elétron na direção y .

O canal Q1D está localizado ao longo da direção x , onde os elétrons estão depositados, e uma deformação $\xi(x, y)$ é considerada devido à aplicação do campo elétrico E_{\perp} . O termo $m \omega_0^2 y^2 / 2$ é devido ao confinamento parabólico na direção y , e o $\omega_c = eB/m$ é frequência ciclotrônica devido à aplicação do campo magnético. O problema deve ser resolvido para uma função de onda real e que tenda a zero em $x, y \rightarrow \infty$. Portanto, o segundo termo da equação de Schrödinger não contribui para os autovalores da energia do elétron. Assim sendo a energia do elétron é dada por

$$E = \iint \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \Psi)^2 + \frac{m \omega_c^2 (x^2 + y^2)}{8} \Psi^2 + \frac{m}{2} \omega_0^2 y^2 \Psi^2 + e E_{\perp} \xi(x, y) \Psi^2 \right\} dx dy. \quad (4.3)$$

A energia total dada pela energia do elétron mais a energia de deformação superficial é

$$W = \iint \left\{ \frac{\sigma}{2} [(\nabla\xi)^2 + k_c^2 \xi^2] + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\Psi)^2 + \left[\frac{m\omega_c^2(x^2 + y^2)}{8} + \frac{m}{2}\omega_0^2 y^2 + eE_{\perp}\xi(x, y) \right] \Psi^2 \right\} dx dy. \quad (4.4)$$

A equação de equilíbrio mecânico, que é obtida através da minimização da Eq.(4.4) com relação a ξ , é dada por

$$\nabla^2 \xi(x, y) - k_c^2 \xi(x, y) = \frac{eE_{\perp}}{\sigma} |\Psi(x, y)|^2, \quad (4.5)$$

de modo que usamos a Eq.(4.5) para eliminar o termo $k_c^2 \xi^2$ na Eq.(4.4). Empregando a integração por partes, sabemos que

$$\iint \left\{ \frac{\sigma}{2} [(\nabla\xi(x, y))^2 + \xi(x, y)\nabla^2 \xi(x, y)] \right\} dx dy = 0. \quad (4.6)$$

Portanto, podemos escrever a Eq.(4.4) como

$$W = \iint \left\{ \left[\frac{m\omega_c^2(x^2 + y^2)}{8} + \frac{m}{2}\omega_0^2 y^2 + \frac{eE_{\perp}\xi}{2} \right] \Psi^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla\Psi)^2 \right\} dx dy. \quad (4.7)$$

Para resolvermos a Eq.(4.7) é necessário resolver a Eq.(4.5). Para isto utilizamos a transformada de Fourier em duas dimensões:

$$\xi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{S}} \int \xi(k_x, k_y) \exp(i \vec{k} \cdot \vec{r}) d^2 r, \quad (4.8)$$

com sua transformada inversa dada por

$$\xi(k_x, k_y) = \frac{1}{\sqrt{S}} \int \xi(x, y) \exp(-i \vec{k} \cdot \vec{r}) d^2r, \quad (4.9)$$

sendo S a área do sistema.

Portanto, aplicando a transformada de Fourier na Eq.(4.5), obtemos

$$\xi(k_x, k_y) = -\frac{eE_{\perp}}{\sigma(k^2 + k_c^2)} \Psi^2(k_x, k_y), \quad (4.10)$$

tal que

$$\Psi^2(k_x, k_y) = \frac{1}{S} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy \exp(-ik_x x - ik_y y) \Psi^2(x, y). \quad (4.11)$$

Observe-se que a solução da Eq.(4.7) não traz sérios problemas matemáticos, exceto a primeira integração que pode ser transformada para

$$\frac{eE_{\perp}}{2} \iint \xi(x, y) \Psi^2(x, y) dx dy = \frac{eE_{\perp} S^2}{8\pi} \iint dk_x dk_y \xi(k_x, k_y) \Psi^2(k_x, k_y). \quad (4.12)$$

Deste modo, utilizando funções de onda razoáveis, podemos calcular a energia total do elétron bem como a do polaron. Na próxima seção iremos apresentar estas energias propondo funções de onda para os estados fundamental e excitados.

4.2 ESTADO FUNDAMENTAL DO POLARON

Para determinar o estado fundamental, propomos uma função de onda tentativa que é similar à função de onda do estado fundamental para o oscilador harmônico em duas dimensões:

$$\Psi_{00}(x, y) = \frac{1}{\pi^{1/4} l_x^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2l_x^2}\right) \frac{1}{\pi^{1/4} l_y^{1/2}} \exp\left(-\frac{y^2}{2l_y^2}\right), \quad (4.13)$$

sendo l_x e l_y os parâmetros de localização do elétron nas direções x e y respectivamente. Observe-se que, em vista da assimetria do confinamento eletrônico ao longo das direções x e y , introduz-se dois parâmetros de localização. A transformação de Fourier do quadrado da função de onda, dada pela Eq.(4.13) é

$$\Psi_{00}^2(k_x, k_y) = \frac{1}{S} \exp\left(-\frac{k_x^2 l_x^2}{4} - \frac{k_y^2 l_y^2}{4}\right). \quad (4.14)$$

Podemos calcular a deformação da superfície no estado fundamental, $\xi_{00}(x, y)$, pelo uso das Eqs.(4.8), (4.10) e (4.14). Mas ainda podemos calcular a energia total do polaron, W_{00} através da Eq.(4.7). Os resultados são

$$\xi_{00}(x, y) = -\frac{eE_{\perp}}{4\pi^2\sigma} \iint dk_x dk_y \frac{\exp\left[-(k_x^2 l_x^2 + k_y^2 l_y^2)/4\right] \cos(k_x x) \cos(k_y y)}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2}, \quad (4.15)$$

e

$$W_{00} = -\frac{(eE_{\perp})^2}{8\pi^2\sigma} \iint dk_x dk_y \frac{\exp\left[-(k_x^2 l_x^2 + k_y^2 l_y^2)/2\right]}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2} + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{l_x^2} + \frac{1}{l_y^2}\right) + \frac{m\omega_c^2(l_x^2 + l_y^2)}{16} + \frac{m\omega_0^2 l_y^2}{4}. \quad (4.16)$$

e

$$E_{00} = -\frac{(eE_{\perp})^2}{4\pi^2\sigma} \iint dk_x dk_y \frac{\exp\left[-(k_x^2 l_x^2 + k_y^2 l_y^2)/2\right]}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2} + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{l_x^2} + \frac{1}{l_y^2}\right) + \frac{m\omega_c^2(l_x^2 + l_y^2)}{16} + \frac{m\omega_0^2 l_y^2}{4}. \quad (4.17)$$

Estamos trabalhando no limite $k_c^2(l_x^2 + l_y^2) \ll 1$ onde os efeitos de capilaridade são desprezados, pois $\lambda_c \propto k_c^{-1}$ é grande, comparado aos parâmetros de localização l_x e l_y .

Calculando a integral na Eq.(4.16) no limite de $k_c^2(l_x^2 + l_y^2) \ll 1$ (veja apêndice), chegamos às seguintes expressões para W_{00} e E_{00} :

$$W_{00} \simeq -\frac{(eE_{\perp})^2}{4\pi\sigma} \ln \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\gamma}k_c(l_x + l_y)} + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{l_x^2} + \frac{1}{l_y^2} \right) + \frac{m\omega_c^2(l_x^2 + l_y^2)}{16} + \frac{m\omega_0^2 l_y^2}{4}; \quad (4.18)$$

$$E_{00} \simeq -\frac{(eE_{\perp})^2}{2\pi\sigma} \ln \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\gamma}k_c(l_x + l_y)} + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{l_x^2} + \frac{1}{l_y^2} \right) + \frac{m\omega_c^2(l_x^2 + l_y^2)}{16} + \frac{m\omega_0^2 l_y^2}{4}, \quad (4.19)$$

sendo $\gamma = \exp C$, e $C = 0.5772\dots$ a constante de Euler-Mascheroni.

No presente trabalho, usamos a aproximação harmônica e o método variacional, para determinar os comprimentos de localização l_x e l_y através das Eqs.(4.15), (4.18) e(4.19).

4.2.1 APROXIMAÇÃO HARMÔNICA (AH)

A aproximação harmônica usada na determinação das propriedades do polaron na superfície de hélio líquido consiste na expansão da função $\xi(x, y)$ até a segunda ordem nos valores próximos às coordenadas $x = 0$ e $y = 0$. A função $\xi(x, y)$ é expressa na AH como

$$\xi(x, y) \simeq \xi(0, 0) + \frac{1}{2} [\xi_{xx}''(0, 0)x^2 + \xi_{yy}''(0, 0)y^2] \quad (4.20)$$

tal que os valores de $\xi(0, 0)$ e as derivadas parciais de segunda ordem, obtidas para o estado fundamental, são dadas por

$$\xi_{00}(0,0) = -\frac{eE_{\perp}}{4\pi^2\sigma} \iint dk_x dk_y \frac{\exp[-(k_x^2 l_x^2 + k_y^2 l_y^2)/4]}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2}. \quad (4.21)$$

$$[\xi_{xx(yy)}]_{00}^r(0,0) = \frac{eE_{\perp}}{4\pi^2\sigma} \iint dk_x dk_y \frac{\exp[-(k_x^2 l_x^2 + k_y^2 l_y^2)/4] k_x^2}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2}. \quad (4.22)$$

A solução pode ser obtida numericamente, mas calculando as integrais das Eqs.(4.21) e (4.22) e no limite de $k_c^2(l_x^2 + l_y^2) \ll 1$, obtemos

$$\xi_{00}(0,0) \simeq -\frac{eE_{\perp}}{2\pi\sigma} \ln \frac{4}{k_c \sqrt{\gamma}(l_x + l_y)}; \quad (4.23)$$

$$[\xi_{xx}]_{00}^r(0,0) \simeq \frac{eE_{\perp}}{\pi\sigma l_x(l_x + l_y)}; \quad (4.24)$$

$$[\xi_{yy}]_{00}^r(0,0) \simeq \frac{eE_{\perp}}{\pi\sigma l_y(l_x + l_y)}. \quad (4.25)$$

Através da Eqs.(4.20) e (4.3), podemos escrever, na AH, a equação para a energia do elétron no “dimple” para o estado fundamental

$$E_{e(AH)} \simeq eE_{\perp} \xi_{00}(0,0) + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{l_x^2} + \frac{1}{l_y^2} \right) + \frac{m}{4} \left(\omega_x^2 + \frac{\omega_c^2}{4} \right) l_x^2 + \frac{m}{4} \left(\omega_y^2 + \frac{\omega_c^2}{4} + \omega_0^2 \right) l_y^2, \quad (4.26)$$

tal que

$$\omega_x^2 = \frac{eE_{\perp} [\xi_{xx}]''_{00}(0,0)}{m} \quad (4.27)$$

e

$$\omega_y^2 = \frac{eE_{\perp} [\xi_{yy}]''_{00}(0,0)}{m}. \quad (4.28)$$

Podemos facilmente notar que a Eq.(4.26) descreve a energia do estado fundamental do oscilador harmônico deslocado pelo valor $eE_{\perp}\xi_{00}(0,0)$. Isto nos permite definir

$$l_x^2 = \frac{\hbar}{m\sqrt{\omega_x^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}}; l_y^2 = \frac{\hbar}{m\sqrt{\omega_y^2 + \frac{\omega_c^2}{4} + \omega_0^2}}. \quad (4.29)$$

Se introduzirmos os três comprimentos característicos com o campo elétrico externo $L_F^2 = 2\pi\sigma\hbar^2/m(eE_{\perp})^2$, com a frequência de confinamento geométrico $L_0^2 = \hbar/m\omega_0$ e o campo magnético $L_H^2 = 2\hbar/m\omega_c$, obteremos da Eq.(4.29), um sistema não-linear de equações para a determinação dos parâmetros l_x e l_y dado por

$$\begin{aligned} \frac{1}{l_x^4} &= \frac{2}{L_F^2 l_x (l_x + l_y)} + \frac{1}{L_H^4}; \\ \frac{1}{l_y^4} &= \frac{2}{L_F^2 l_y (l_x + l_y)} + \frac{1}{L_H^4} + \frac{1}{L_0^4}. \end{aligned} \quad (4.30)$$

É possível solucionar o sistema dado pelas Eqs.(4.30) analiticamente em alguns casos limites. Primeiro vamos estudar os limites deste sistema desconsiderando o campo magnético, ou seja, colocando $\frac{1}{L_H} = 0$. No limite $L_F \ll L_0$, a solução é $l_{xh} = l_{yh} \simeq L_F$ e para $L_F \gg L_0$, temos que $l_{xh} \simeq L_F/\sqrt{2}$ e $l_{yh} \simeq L_0$. Considerando este sistema na presença de

campo magnético, no limite quando $L_F \ll L_H$, a solução do sistema de Eqs.(4.30) é tal que $l_{xh} = l_{yh} \simeq L_F$. No limite oposto $L_F \gg L_H$, obtemos $l_{xh} = l_{yh} \simeq L_H$. Isto significa que os intervalos dos valores de $l_{xh(yh)}$ calculados pelo sistema é limitado pelos comprimentos de localização L_F e L_H , na presença de campo magnético. E na ausência de campo magnético, os intervalos dos valores dos comprimentos de localização são limitados por $L_F/\sqrt{2}$ e L_F na direção x e L_0 e L_F na direção y . Com campo magnético os intervalos dos parâmetros de localização são L_F e L_H . Para $\frac{1}{L_H} = 0$, e $l_x = l_y = L$ temos que o sistema de Eqs.(4.30) reduz-se a $L^2 = L_F^2$ que é o resultado no caso bidimensional.

Definindo um parâmetro de localização adimensional $l_x = L_F\beta$ e $l_y = L_F\gamma$, chegamos a um sistema de equações que determinam os parâmetros de localização β e γ escritos na forma:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta^4} &= \frac{2}{\beta(\beta + \gamma)} + \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4}; \\ \frac{1}{\gamma^4} &= \frac{2}{\gamma(\beta + \gamma)} + \frac{A}{E_{\perp}^3} + \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

tal que $\left(\frac{L_F}{L_0}\right)^4 = \frac{A}{E_{\perp}^3} = \frac{3,35 \times 10^{12} [\text{V/cm}]^{-3}}{E_{\perp}^3}$ em que E_{\perp} , o campo elétrico aplicado na direção perpendicular, está em unidades de V/cm, B em Tesla e $\left(\frac{L_F}{L_H}\right)^4 = \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} = \frac{(B^2) 7,36 \times 10^{15} [\text{V}^2/\text{s}^2]}{E_{\perp}^4}$.

Os resultados para os parâmetros de localização β e γ como função do campo elétrico estão mostrados nas Figs.(4.1) e (4.2). Observe que o parâmetro de localização β é mais dependente do campo elétrico do que γ . Esta dependência é uma consequência do fato de que, o potencial do “dimple” na direção x é menos intenso do que na direção y , devido ao confinamento lateral.

Com os valores dos parâmetros de localização, β e γ podemos calcular a energia do elétron no “dimple” usando a Eq.(4.26). Estes resultados, apresentados na Fig.(4.3), nos revelam que para $B = 0$ o elétron começa a apresentar estado ligado no poço do “dimple” a partir de 2500 V/cm e com aplicação do campo magnético o elétron tende a ser mais delocalizado.

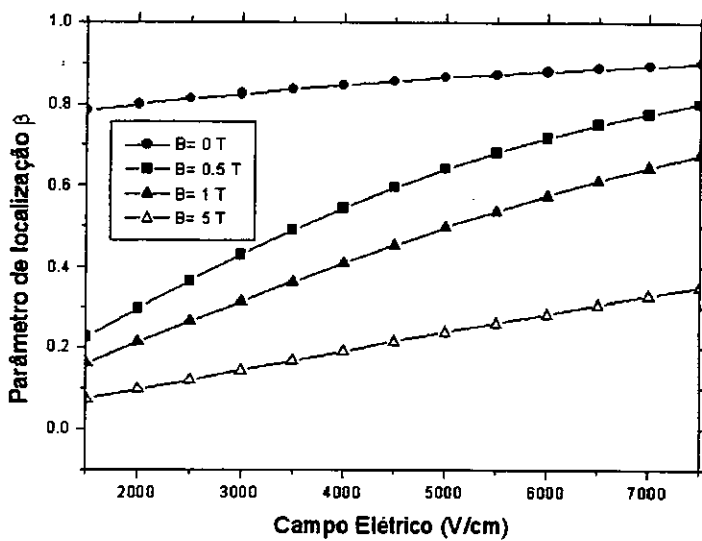


Fig. 4.1 Parâmetro de localização do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético na aproximação harmônica.

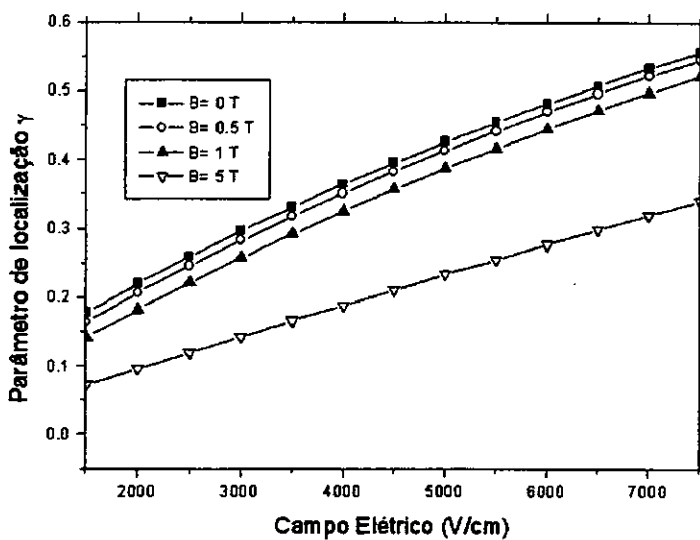


Fig. 4.2 Parâmetro de localização do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético na aproximação harmônica.

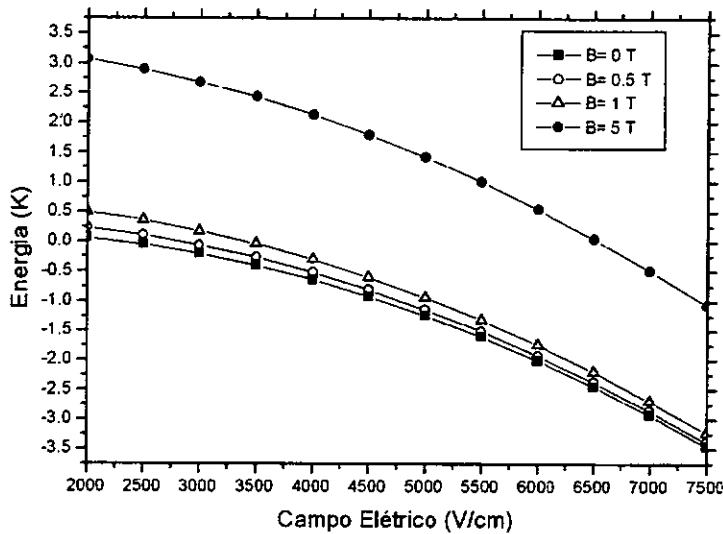


Fig. 4.3 Energia do estado fundamental do elétron em função do campo elétrico, obtida para vários valores de campo magnético na aproximação harmônica.

Isto acontece porque o campo magnético introduz uma frequência ciclotrônica para o elétron aumentando a sua energia cinética. Essa energia predomina sobre a energia de ligação fazendo com que o elétron tenda a delocalizar.

Através dos parâmetros de localização obtidos da Eq.(4.31) podemos calcular a profundidade do “dimple” usando a Eq.(4.23). Nos resultados mostrados na Fig.(4.4) observamos que o campo magnético pouco influi na deformação superficial, justamente porque o campo magnético atua predominantemente no movimento do elétron dentro do “dimple”, em órbitas definidas pelo campo B , e não tanto na deformação da superfície que aumentaria o seu estado ligado.

4.2.2 MÉTODO VARIACIONAL

No método variacional os parâmetros de localização l_x e l_y são determinados a partir da minimização da energia do polaron W_{00} . As condições

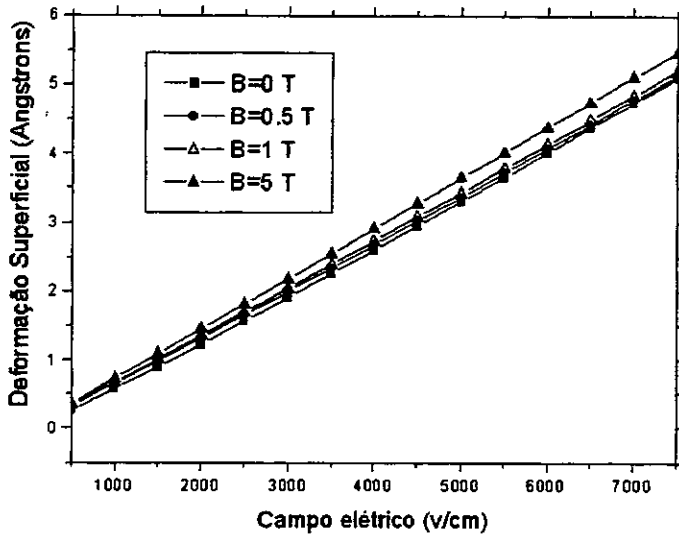


Fig. 4.4 Deformação superficial do elétron na superfície de hélio para o estado fundamental em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético pela aproximação harmônica.

$$\frac{\partial W_{00}}{\partial l_x} = \frac{\partial W_{00}}{\partial l_y} = 0, \quad (4.32)$$

tal que W_{00} é dado pela Eq.(4.18), implicam no sistema de equações dada por

$$\begin{aligned} \frac{1}{l_x^4} &= \frac{1}{L_F^2 l_x (l_x + l_y)} + \frac{1}{L_H^4}, \\ \frac{1}{l_y^4} &= \frac{1}{L_F^2 l_y (l_x + l_y)} + \frac{1}{L_H^4} + \frac{1}{L_0^4}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Para $B = 0$, no limite $L_F \ll L_0$ as soluções do sistema de Eqs.(4.33) são $l_{xw} = l_{yw} \simeq \sqrt{2}L_F$. No limite oposto, $L_F \gg L_0$, as soluções são $l_{xw} \simeq L_F$; $l_{yw} \simeq L_0$. Levando em conta o campo magnético, temos $L_F \ll L_H$, as soluções são $l_{xw} = l_{yw} \simeq L_F\sqrt{2}$. Para $L_F \gg L_H$ obtemos uma vez mais $l_{xw} = l_{yw} \simeq L_H$. Então vemos que os intervalos de $l_{xw(yw)}$ obtidos pela Eqs.(4.33) são limitados pelos comprimentos característicos dados por $\sqrt{2}L_F$ e L_H , na

presença de campo magnético. Desconsiderando o campo magnético, o intervalo é limitado pelos comprimentos de localização $l_{xw} \simeq L_F$, $l_{yw} \simeq L_0$ e $l_{xw} = l_{yw} \simeq \sqrt{2}L_F$. Para $\frac{1}{L_H} = 0$ e $l_x = l_y = L$ temos que, como era de se esperar, o sistema de Eqs.(4.33) se reduz a $L^2 = 2L_F^2$ recuperando o caso 2D determinado por Monarkha [13].

Definindo uma vez mais os parâmetros de localização adimensional $l_x = \beta L_F$ e $l_y = \gamma L_F$, chegamos a um sistema de equações que determinam os parâmetros de localização β e γ escritos como

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta^4} &= \frac{1}{\beta(\beta + \gamma)} + \frac{B^2 K}{E_1^4}; \\ \frac{1}{\gamma^4} &= \frac{1}{\gamma(\beta + \gamma)} + \frac{A}{E_1^3} + \frac{B^2 K}{E_1^4}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Os parâmetros adimensionais de localização pelo método variacional são mostrados nas Figs.(4.5) e (4.6) β possui maior dependência com campo elétrico do que γ , conforme esperado. Não existe diferença significativa com os resultados obtidos usando a AH.

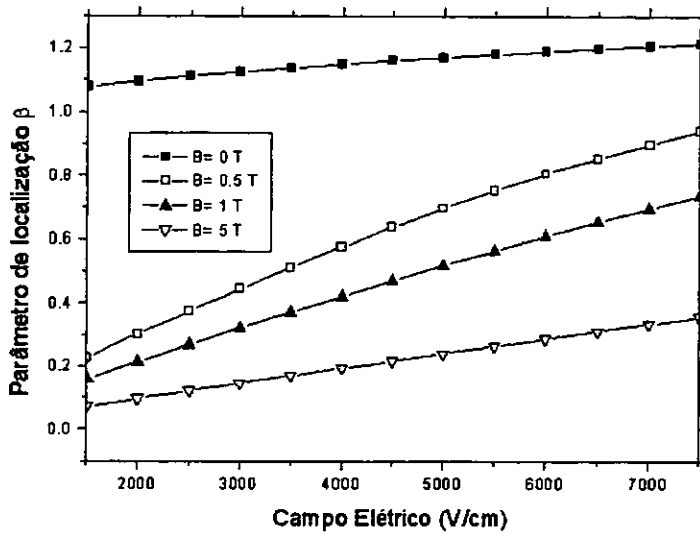


Fig. 4.5 Parâmetro de localização do polaron na superfície de hélio obtido pelo método variacional em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético.

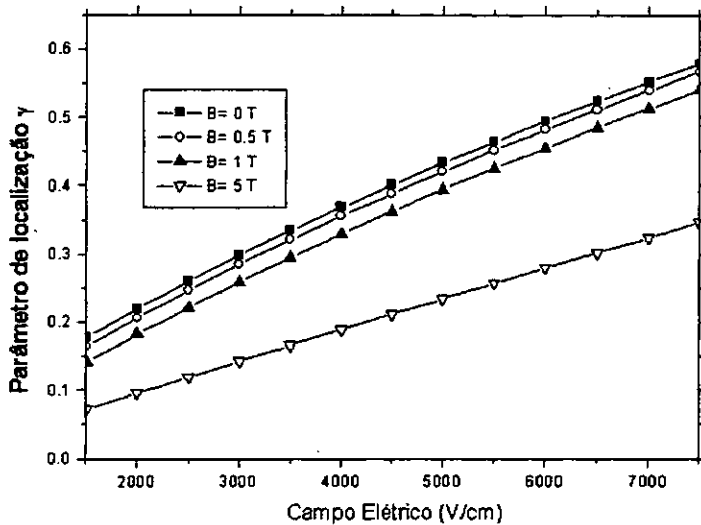


Fig. 4.6 Parâmetro de localização do polaron na superfície de hélio obtido pelo método variacional em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético.

Utilizando os resultados para β e γ nós calculamos numericamente a energia do polaron para o estado fundamental usando a Eq.(4.18). Os resultados são apresentados na Fig.(4.7) e como vemos o estado fundamental do polaron forma-se a partir de 4000 V/cm e que também como explicado anteriormente o campo magnético delocaliza o polaron.

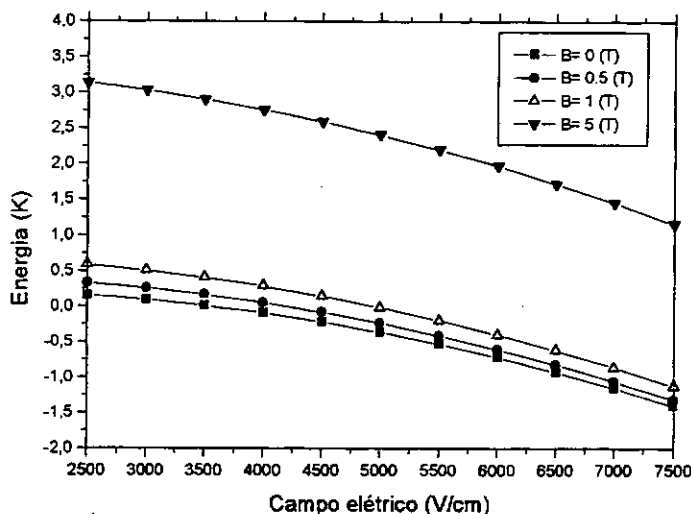


Fig. 4.7 Energia do estado fundamental do polaron em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

A partir dos resultados de β e γ é possível ainda calcular a deformação superficial usando a Eq.(4.23) os resultados para $\xi(0)$ estão mostrados na Fig.(4.8) que o campo magnético pouco influi na deformação superficial conforme vimos anteriormente.

A energia do elétron no “dimple” pode ser obtida no método variacional a partir da condição

$$\frac{\partial E_{00}}{\partial l_x} = \frac{\partial E_{00}}{\partial l_y} = 0,$$

tal que E_{00} é dado pela Eq.(4.19) temos o sistema de equações

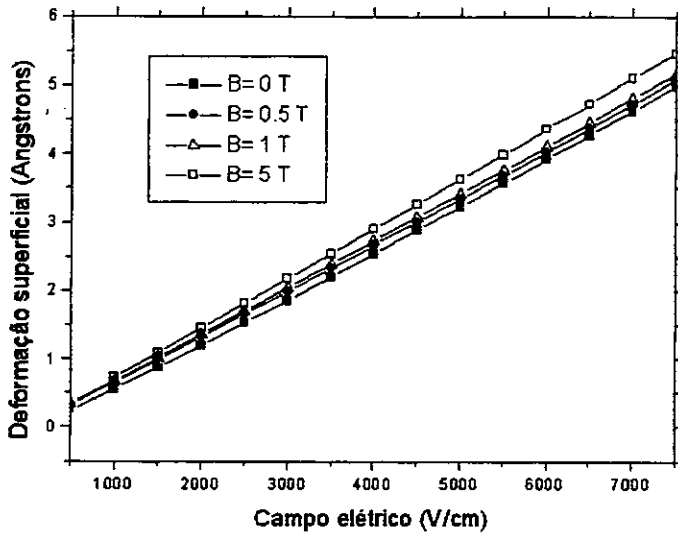


Fig. 4.8 Deformação superficial do polaron na superfície de hélio para o estado fundamental em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

$$\begin{aligned} \frac{1}{l_x^4} &= \frac{2}{L_F^2 l_x (l_x + l_y)} + \frac{1}{L_H^4}; \\ \frac{1}{l_y^4} &= \frac{2}{L_F^2 l_y (l_x + l_y)} + \frac{1}{L_H^4} + \frac{1}{L_0^4}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

O sistema de Eqs.(4.35) é o mesmo obtido pela aproximação harmônica. Isto significa que tanto a aproximação harmônica quanto o método variacional conduzem aos mesmos valores de comprimento de localização l_{xe} e l_{ye} , e conseqüentemente, da deformação $\xi(x, y)$ e dos valores de $\xi(0, 0)$ e das derivadas parciais de segunda ordem $\xi_{xx}(yy)$. A solução numérica portanto é a mesma já apresentada na Figs.(4.1) e (4.2). Aplicamos estes resultados para encontrar a energia do estado fundamental do elétron usando a Eq.(4.19) e os resultados estão na Fig.(4.9). Percebemos através da figura que o elétron passa a ser localizado no poço do “dimple” a partir de 2500 V/cm, e que o aumento do campo magnético tende a delocalizar o elétron.



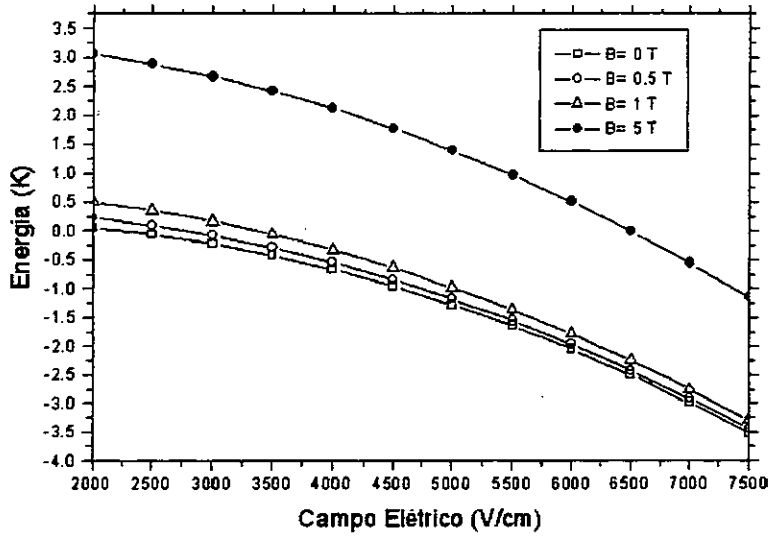


Fig. 4.9 Energia do estado fundamental do elétron em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

Com os resultados apresentados na Figs.(4.1) e (4.2) calculamos a deformação superficial usando a Eq.(4.23). Os resultados estão apresentados na Fig.(4.10), como antes, vemos que o campo magnético pouco influi na deformação superficial.

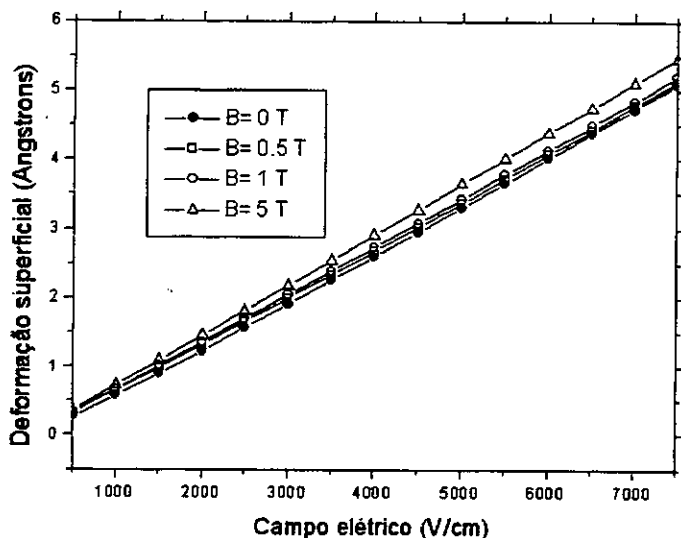


Fig. 4.10 Deformação superficial do elétron para o estado fundamental em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

4.3 ESTADOS EXCITADOS DO POLARON

Considerando as propriedades dos estados excitados devemos escolher uma função de onda tentativa, que seja ortogonal à função de onda do estado fundamental que foi dada pela função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico em 2D. Por esta razão parece bastante natural escolhermos as funções de onda dos estados excitados do oscilador harmônico como funções de onda tentativa para os estados excitados do polaron. Portanto

$$\Psi_{10}(x, y) = \frac{x}{\pi^{\frac{1}{4}} \Delta_x^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\Delta_x^2}\right) \frac{\sqrt{2}}{\pi^{\frac{1}{4}} \Delta_y^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\Delta_y^2}\right), \quad (4.36)$$

$$\Psi_{01}(x, y) = \frac{y}{\pi^{\frac{1}{4}} \Delta_x^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\Delta_x^2}\right) \frac{\sqrt{2}}{\pi^{\frac{1}{4}} \Delta_y^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{y^2}{2\Delta_y^2}\right). \quad (4.37)$$

Ambas as funções, Ψ_{10} e Ψ_{01} , satisfazem as condições de ortogonalidade. Os índices referem à natureza par ou ímpar da função variacional com relação aos movimentos na direção x e y . Assim, a função de onda Ψ_{01} descreve o estado excitado oscilatório para o movimento ao longo da direção y enquanto que a função Ψ_{10} ao longo da direção x . Usando as Eqs.(4.37) e (4.36), podemos calcular a transformada de Fourier das funções de onda. O resultado é

$$\Psi_{10}^2(k_x, k_y) = \frac{1}{S} \left(1 - \frac{k_x^2 \Xi_x^2}{2} \right) \exp \left(-\frac{k_x^2 \Xi_x^2 + k_y^2 \Xi_y^2}{4} \right), \quad (4.38)$$

e

$$\Psi_{01}^2(k_x, k_y) = \frac{1}{S} \left(1 - \frac{k_y^2 \Delta_y^2}{2} \right) \exp \left(-\frac{k_x^2 \Delta_x^2 + k_y^2 \Delta_y^2}{4} \right), \quad (4.39)$$

que nos permite explicitar a forma da deformação superficial e as energias do polaron nos estados excitados como

$$\xi_{01}(x, y) = -\frac{eE_{\perp}}{4\pi^2\sigma} \int dk_x \int dk_y \frac{(1 - k_y^2 \Delta_y^2/2) \exp [-(k_x^2 \Delta_x^2 + k_y^2 \Delta_y^2)/4] \cos(k_x x) \cos(k_y y)}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2}; \quad (4.40)$$

e

$$W_{01} = -\frac{(eE_{\perp})^2}{8\pi^2\sigma} \int dk_x \int dk_y \frac{(1 - k_y^2 \Delta_y^2/2)^2 \exp [-(k_x^2 \Delta_x^2 + k_y^2 \Delta_y^2)/2]}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2} + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{\Delta_x^2} + \frac{3}{\Delta_y^2} \right) + \frac{m\omega_c^2(\Delta_x^2 + 3\Delta_y^2)}{16} + \frac{3m}{4}\omega_0^2\Delta_y^2. \quad (4.41)$$

e

$$\xi_{10}(x, y) = -\frac{eE_{\perp}}{4\pi^2\sigma} \int dk_x \int dk_y \frac{(1 - k_x^2 \Xi_x^2/2) \exp [-(k_x^2 \Xi_x^2 + k_y^2 \Xi_y^2)/4] \cos(k_x x) \cos(k_y y)}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2}; \quad (4.42)$$

e

$$W_{10} = -\frac{(eE_{\perp})^2}{8\pi^2\sigma} \int dk_x \int dk_y \frac{(1 - k_x^2 \Xi_x^2/2)^2 \exp[-(k_x^2 \Xi_x^2 + k_y^2 \Xi_y^2)/2]}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2} + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{3}{\Xi_x^2} + \frac{1}{\Xi_y^2} \right) + \frac{m\omega_c^2(3\Xi_x^2 + \Xi_y^2)}{16} + \frac{m}{4}\omega_0^2\Xi_y^2. \quad (4.43)$$

Como discutido anteriormente, as expressões para as energias do elétron E_{01} e E_{10} , podem ser obtidas a partir da energia do polaron pela troca do coeficiente $-\frac{(eE_{\perp})^2}{8\pi^2\sigma}$ no primeiro termo das Eqs.(4.41) e (4.43) por $-\frac{(eE_{\perp})^2}{4\pi^2\sigma}$.

Calculando as integrais nas Eqs.(4.41) e (4.43) no limite de $k_c^2(\Delta_x^2 + \Delta_y^2) \ll 1$; $k_c^2(\Xi_x^2 + \Xi_y^2) \ll 1$, obtemos as seguintes expressões para as energias dos estados excitados do polaron e do elétron:

$$W_{01} \simeq -\frac{(eE_{\perp})^2}{4\pi\sigma} \left[\ln \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\gamma}k_c(\Delta_x + \Delta_y)} - \frac{\Delta_y(3\Delta_x + 2\Delta_y)}{4(\Delta_x + \Delta_y)^2} \right] + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{\Delta_x^2} + \frac{3}{\Delta_y^2} \right) + \frac{m\omega_c^2(\Delta_x^2 + 3\Delta_y^2)}{16} + \frac{3m}{4}\omega_0^2\Delta_y^2; \quad (4.44)$$

$$E_{01} \simeq -\frac{(eE_{\perp})^2}{2\pi\sigma} \left[\ln \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\gamma}k_c(\Delta_x + \Delta_y)} - \frac{\Delta_y(3\Delta_x + 2\Delta_y)}{4(\Delta_x + \Delta_y)^2} \right] + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{\Delta_x^2} + \frac{3}{\Delta_y^2} \right) + \frac{m\omega_c^2(\Delta_x^2 + 3\Delta_y^2)}{16} + \frac{3m}{4}\omega_0^2\Delta_y^2; \quad (4.45)$$

$$W_{10} \simeq -\frac{(eE_{\perp})^2}{4\pi\sigma} \left[\ln \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\gamma}k_c(\Xi_x + \Xi_y)} - \frac{\Xi_x(2\Xi_x + 3\Xi_y)}{4(\Xi_x + \Xi_y)^2} \right] + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{3}{\Xi_x^2} + \frac{1}{\Xi_y^2} \right) + \frac{m\omega_c^2(3\Xi_x^2 + \Xi_y^2)}{16} + \frac{m}{4}\omega_0^2\Xi_y^2; \quad (4.46)$$

$$E_{10} \simeq -\frac{(eE_{\perp})^2}{2\pi\sigma} \left[\ln \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\gamma}k_c(\Xi_x + \Xi_y)} - \frac{\Xi_x(2\Xi_x + 3\Xi_y)}{4(\Xi_x + \Xi_y)^2} \right] + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{3}{\Xi_x^2} + \frac{1}{\Xi_y^2} \right) + \frac{m\omega_c^2(3\Xi_x^2 + \Xi_y^2)}{16} + \frac{m}{4}\omega_0^2\Xi_y^2. \quad (4.47)$$

Para definirmos os parâmetros de localização encontrados nas Eqs.(4.40)-(4.47), usamos as mesmas aproximações empregadas na descrição do estado fundamental.

4.3.1 APROXIMAÇÃO HARMÔNICA (AH)

Nesta aproximação usamos a função deformação superficial $\xi(x, y)$ dada pela Eq.(4.20).

Usando as Eqs.(4.39) e (4.38) obtemos as seguintes expressões para os valores de $\xi(0, 0)$

e suas derivadas parciais de segunda ordem para os estados excitados:

$$\xi_{01}(0, 0) = -\frac{eE_{\perp}}{4\pi^2\sigma} \int dk_x \int dk_y \frac{(1 - k_y^2\Delta_y^2/2) \exp[-(k_x^2\Delta_x^2 + k_y^2\Delta_y^2)/4]}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2}; \quad (4.48)$$

$$[\xi_{xx(yy)}]_{01}''(0, 0) = -\frac{eE_{\perp}}{4\pi^2\sigma} \int dk_x \int dk_y \frac{(1 - k_y^2\Delta_y^2/2) \exp[-(k_x^2\Delta_x^2 + k_y^2\Delta_y^2)/4] k_{x(y)}^2}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2}. \quad (4.49)$$

As equações para o estado Ψ_{10} podem ser obtidas se trocarmos Δ_x e Δ_y por Ξ_x e Ξ_y , respectivamente, nas Eqs.(4.48) e (4.49), trocando simultaneamente o termo $1 - k_y^2\Delta_y^2/2$ nos integrandos destas integrais por $1 - k_x^2\Xi_x^2/2$. Calculando as integrais no limite de $k_c^2(\Delta_x^2 + \Delta_y^2) \ll 1$; $k_c^2(\Xi_x^2 + \Xi_y^2) \ll 1$, obtemos para o estado excitado Ψ_{01}

$$\xi_{01}(0,0) = -\frac{eE_{\perp}}{2\pi\sigma} \left[\ln \frac{4}{\sqrt{\gamma}k_c(\Delta_x + \Delta_y)} - \frac{\Delta_y}{\Delta_x + \Delta_y} \right], \quad (4.50)$$

$$[\xi_{xx}]_{01}^{\prime\prime}(0,0) \simeq \frac{eE_{\perp}}{\pi\sigma(\Delta_x + \Delta_y)^2}, \quad (4.51)$$

$$[\xi_{yy}]_{01}^{\prime\prime}(0,0) \simeq -\frac{eE_{\perp}}{\pi\sigma(\Delta_x + \Delta_y)^2}. \quad (4.52)$$

Para o estado excitado Ψ_{10} temos que

$$\xi_{10}(0,0) = -\frac{eE_{\perp}}{2\pi\sigma} \left[\ln \frac{4}{\sqrt{\gamma}k_c(\Xi_x + \Xi_y)} - \frac{\Xi_x}{\Xi_x + \Xi_y} \right], \quad (4.53)$$

$$[\xi_{xx}]_{10}^{\prime\prime}(0,0) \simeq -\frac{eE_{\perp}}{\pi\sigma(\Xi_x + \Xi_y)^2}, \quad (4.54)$$

$$[\xi_{yy}]_{10}^{\prime\prime}(0,0) \simeq \frac{eE_{\perp}}{\pi\sigma(\Xi_x + \Xi_y)^2}. \quad (4.55)$$

Da mesma maneira que escrevemos a energia do estado fundamental na AH, podemos escrever a energia para o elétron confinado pelo potencial do “dimple” para os estados excitados

$$E_{(AH)}^{(01)} \simeq eE_{\perp} \xi_{01}(0,0) + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{1}{\Delta_x^2} + \frac{3}{\Delta_y^2} \right) + \frac{m}{4} \left(\omega_{01}^2 + \frac{\omega_c^2}{4} \right) \Delta_x^2 + \frac{3m}{4} \left(-\omega_{01}^2 + \omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4} \right) \Delta_y^2, \quad (4.56)$$

$$E_{(AH)}^{(10)} \simeq eE_{\perp} \xi_{10}(0,0) + \frac{\hbar^2}{4m} \left(\frac{3}{\Xi_x^2} + \frac{1}{\Xi_y^2} \right) + \frac{3m}{4} \left(-\omega_{10}^2 + \frac{\omega_c^2}{4} \right) \Xi_x^2 + \frac{m}{4} \left(\omega_{10}^2 + \omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4} \right) \Xi_y^2 \quad (4.57)$$

tal que

$$\omega_{01}^2 = \frac{eE_{\perp} [\xi_{xx}]_{01}''(0,0)}{m} = -\frac{eE_{\perp} [\xi_{yy}]_{01}''(0,0)}{m}; \quad (4.58)$$

$$\omega_{10}^2 = \frac{eE_{\perp} [\xi_{yy}]_{10}''(0,0)}{m} = -\frac{eE_{\perp} [\xi_{xx}]_{10}''(0,0)}{m}. \quad (4.59)$$

Se todos os termos das Eqs.(4.56) e (4.57) são positivos, estas equações descrevem os primeiros estados do oscilador harmônico bidimensional quando o movimento está em estado excitado somente em uma das direções espaciais, ao longo da direção y (Eq.(4.56)) ou ao longo da direção x (Eq.(4.57)). Obviamente, as condições

$$\omega_c^2 + 4\omega_0^2 > 4\omega_{01}^2; \quad (4.60)$$

$$\omega_c^2 > 4\omega_{10}^2, \quad (4.61)$$

satisfazem a aplicabilidade do método da AH nos estados Ψ_{01} e Ψ_{10} , respectivamente.

Se as condições (4.60) e (4.61) não são satisfeitas, a aplicação do método da AH para a investigação dos estados excitados do polaron torna-se inconsistente em virtude da negatividade da derivada parcial de segunda ordem apresentada nas Eqs.(4.52) e (4.54). A negatividade de uma das derivadas parciais de segunda ordem mostra um ponto de máximo no centro do “dimple”, devido à pressão eletrônica na superfície de hélio, e é uma consequência direta da forma da função de onda escolhida e dada pelas Eqs.(4.37) e (4.36). Realmente, a pressão eletrônica é proporcional ao quadrado do módulo da função de onda tentativa que diminui no centro do “dimple” (em $x \rightarrow 0$ ou $y \rightarrow 0$) que pode conduzir a um máximo na deformação superficial. Este tipo de problema não acontece para o estado fundamental onde as derivadas parciais de segunda ordem $[\xi_{xx(yy)}]_{00}$ são positivas (veja Eqs.(4.24) e (4.25)) e a pressão eletrônica possui um máximo no centro do “dimple”. Está claro, das Eqs.(4.60) e (4.61), que a AH para o estado excitado do polaron pode ser usada somente se a contribuição da energia potencial de confinamento $m\omega_0^2 y^2/2$ na Eq.(4.2) for muito maior do que a contribuição do termo $eE_{\perp}\xi(x, y)$ na energia potencial do elétron próximo ao ponto de coordenadas $x = y = 0$. As Eqs.(4.60) e (4.61) nos dão os critérios para satisfazer aquelas condições totalmente.

Supondo que as desigualdades (4.60) e (4.61) sejam satisfeitas podemos escrever para o estado excitado Ψ_{01}

$$\Delta_x^2 = \frac{\hbar}{m\sqrt{\omega_{01}^2 + \frac{\omega_z^2}{4}}}; \quad \Delta_y^2 = \frac{\hbar}{m\sqrt{-\omega_{01}^2 + \omega_0^2 + \frac{\omega_z^2}{4}}}, \quad (4.62)$$

que nos conduz a um sistema de equações que nos permite obter os parâmetros de localização

Δ_x e Δ_y :

$$\begin{aligned}\frac{1}{\Delta_x^4} &= \frac{1}{L_H^4} + \frac{2}{L_F^2(\Delta_x + \Delta_y)^2}; \\ \frac{1}{\Delta_y^4} &= \frac{1}{L_H^4} + \frac{1}{L_0^4} - \frac{2}{L_F^2(\Delta_x + \Delta_y)^2}.\end{aligned}\quad (4.63)$$

As soluções do sistema de Eqs.(4.63) na ausência do campo magnético, podem ser obtidas analiticamente no limite $L_F \gg L_0$. As soluções são $\Delta_x \simeq L_F/\sqrt{2}$ e $\Delta_y \simeq L_0$. Na presença do campo magnético e no limite $L_F \gg L_H$ as soluções são $\Delta_x = \Delta_y \simeq L_H$. Para obtermos a solução geral serão necessário cálculos numéricos. Observe que L_F , L_0 e L_H devem ser escolhidos de maneira tal que a condição dada pela Eq.(4.60) não seja violada. Definindo os parâmetros de localização adimensionalmente $\Delta_x = \alpha L_F$ e $\Delta_y = \eta L_F$, o sistema (4.63) torna-se

$$\begin{aligned}\frac{1}{\alpha^4} &= \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} + \frac{2}{(\alpha + \eta)^2}; \\ \frac{1}{\eta^4} &= \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} + \frac{A}{E_{\perp}^3} - \frac{2}{(\alpha + \eta)^2}.\end{aligned}\quad (4.64)$$

Resolvemos este sistema numericamente para campos magnéticos iguais a 0, 0.5 T, 1 T, 5 T. Os parâmetros de localização α e η estão mostrados nas Figs.(4.11) e (4.12). Os resultados demonstram que α é mais sensível ao campo elétrico do que η e isto acontece, como já foi explicado antes, porque o potencial de confinamento na direção x é menor do que na direção y .

Usando os valores das Figs.(4.11) e (4.12) na Eq.(4.56) obtemos os valores de energia do estado excitado Ψ_{01} para o elétron na AH. Notemos na Fig.(4.13) que a partir de 5000 V/cm o elétron torna-se localizado no poço do "dimple" para $B = 0$. No entanto, a medida que aumentamos o campo magnético há uma delocalização do elétron, como observado na descrição do estado fundamental.

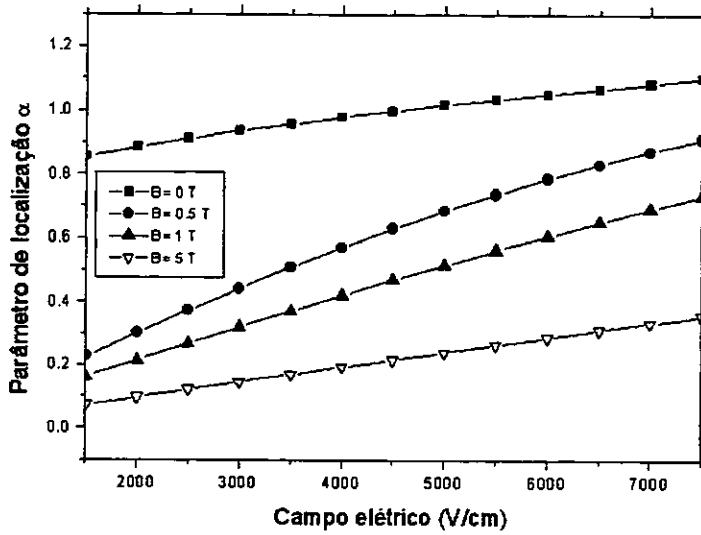


Fig. 4.11 Parâmetros de localização do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtidos pela aproximação harmônica.

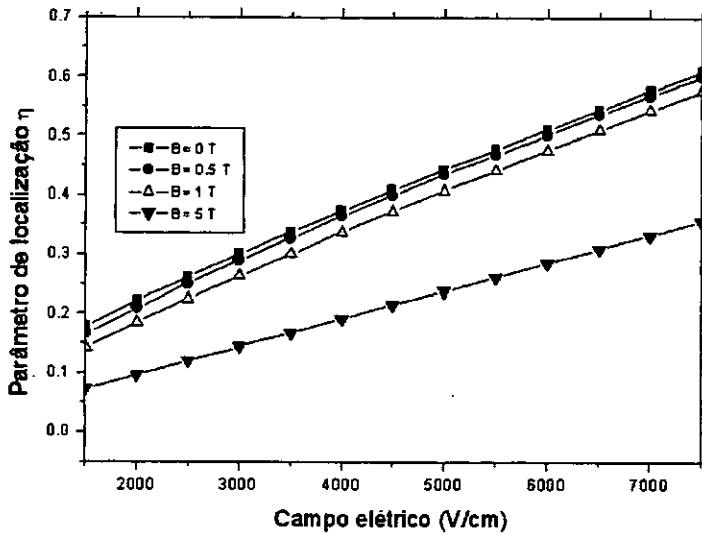


Fig. 4.12 Parâmetro de localização do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pela aproximação harmônica.

A partir dos resultados de α e η calculamos a deformação superficial usando a Eq.(4.50).

Obtivemos os resultados que estão apresentados na Fig.(4.14). Estes resultados nos revelam que o campo magnético pouco influi na deformação superficial. Para o estado excitado Ψ_{10}

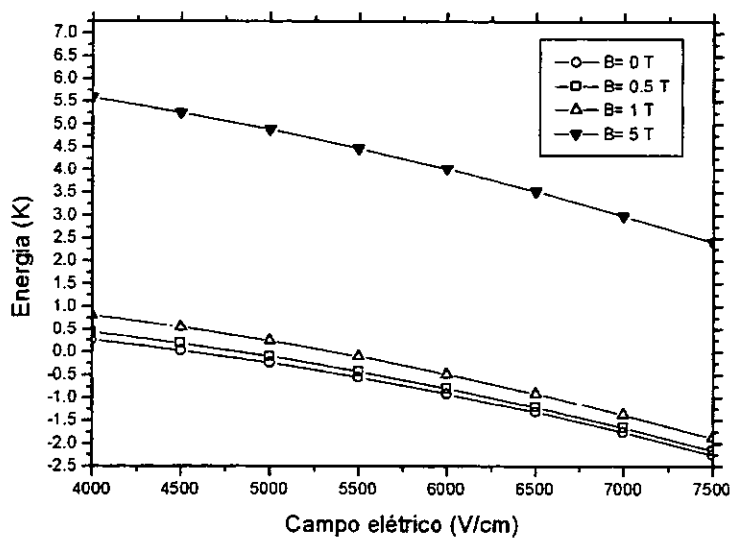


Fig. 4.13 Energia do estado (0,1) do elétron em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pela aproximação harmônica.

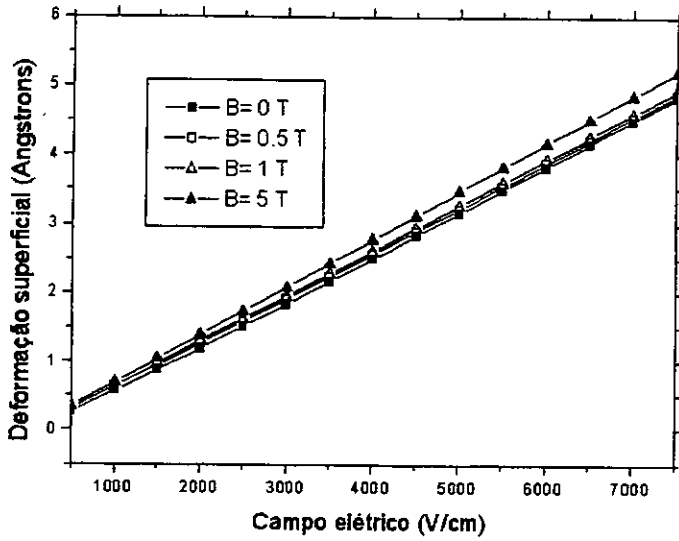


Fig. 4.14 Deformação superficial do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pela aproximação harmônica.

podemos escrever

$$\Xi_x^2 = \frac{\hbar}{m\sqrt{-\omega_{10}^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}}; \quad \Xi_y^2 = \frac{\hbar}{m\sqrt{\omega_{10}^2 + \omega_0^2 + \frac{\omega_c^2}{4}}}. \quad (4.65)$$

que nos conduz a um sistema de equações semelhante ao anterior

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Xi_x^4} &= \frac{1}{L_H^4} - \frac{2}{L_F^2(\Xi_x + \Xi_y)^2}; \\ \frac{1}{\Xi_y^4} &= \frac{1}{L_H^4} + \frac{1}{L_0^4} + \frac{2}{L_F^2(\Xi_x + \Xi_y)^2}. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Observe que para campo magnético igual a zero isto é, $\frac{1}{L_H^4} = 0$, a condição (4.61) é violada. Portanto, para este caso, os parâmetros de localização obtidos no sistema (4.66) são negativos o que não apresenta sentido físico. Por conseguinte AH não é válida neste caso. Com a aplicação do campo magnético no limite de $L_F \gg L_H$ as soluções do sistema de Eqs.(4.66)

são $\Xi_x = \Xi_y \simeq L_H$. Para estudarmos o limite oposto é necessário uma solução numérica, mas observe que devemos escolher L_F e L_H de maneira que a condição (4.61) não seja violada. Definindo os parâmetros de localização adimensionalmente $\Xi_x = \zeta L_F$ e $\Xi_y = \mu L_F$ o sistema de equações ((4.66)) torna-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{\zeta^4} &= \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} - \frac{2}{(\zeta + \mu)^2}; \\ \frac{1}{\mu^4} &= \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} + \frac{A}{E_{\perp}^3} + \frac{2}{(\zeta + \mu)^2}. \end{aligned} \quad (4.67)$$

Calculamos numericamente o sistema (4.67) variando o campo magnético e chegamos aos resultados apresentados nas Figs.(4.15) e (4.16). As figuras nos mostram que o parâmetro de localização ζ é mais sensível ao campo elétrico do que μ .

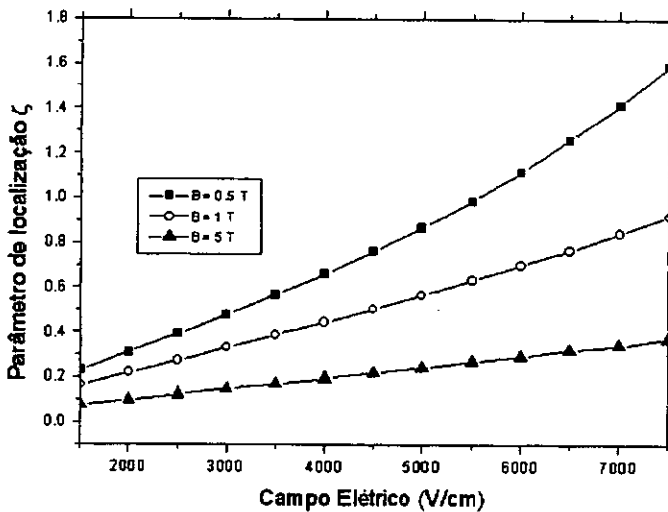


Fig. 4.15 Parâmetro de localização do elétron em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético usando a aproximação harmônica.

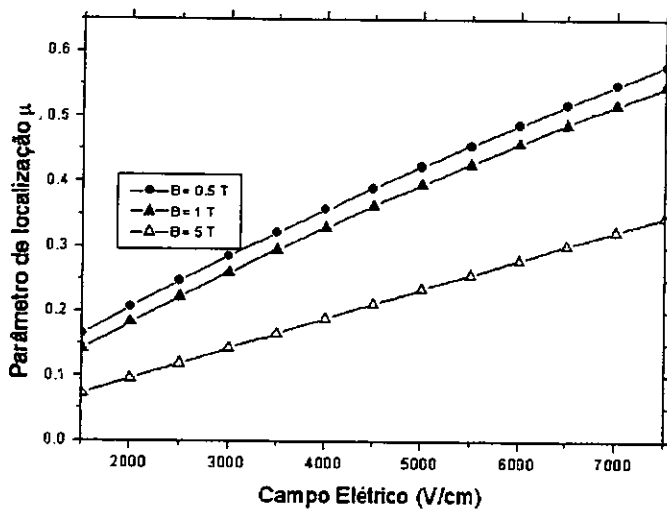


Fig. 4.16 Parâmetro de localização do elétron em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético utilizando aproximação harmônica.

Com os resultados numéricos de ζ e μ calculamos a energia do estado excitado Ψ_{10} usando a Eq.(4.57). Mostramos os resultados na Fig.(4.17). Obtemos que para $B = 0.5$ T o elétron passa a ser localizado a partir de 4000 V/cm.

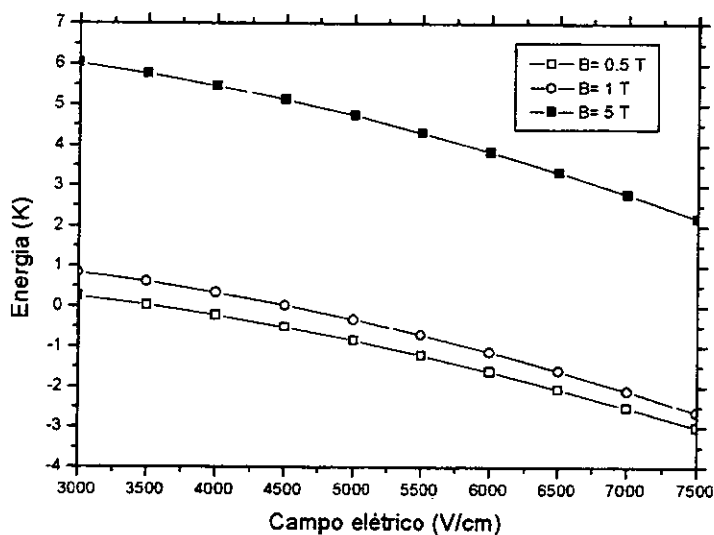


Fig. 4.17 Energia do estado (1,0) do elétron em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pela aproximação harmônica.

Usamos os mesmos resultados e calculamos a deformação superficial utilizando a Eq.(4.53).

Os resultados são apresentados na Fig.(4.18).

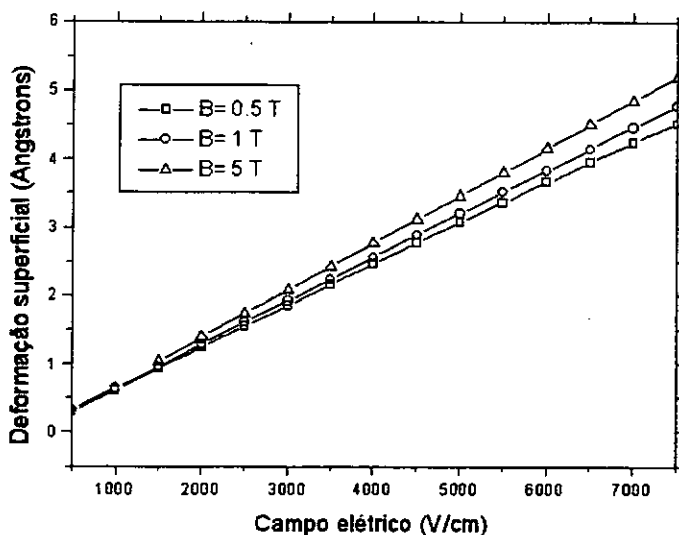


Fig. 4.18 Deformação superficial do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pela aproximação harmônica.

4.3.2 MÉTODO VARIACIONAL

Os problemas e limitações apresentados na descrição dos estados polarônicos na aproximação harmônica nos obrigam a estudá-las usando o método variacional. Como no caso do estado polarônico fundamental, as equações para os cálculos dos parâmetros de localização $\Delta_{x(y)}$ e $\Xi_{x(y)}$ podem ser obtidos da minimização de ambas energias $W_{01(10)}$ ou $E_{01(10)}$ que são dadas pelas Eqs.(4.44) a (4.47). Para o estado Ψ_{01} o sistema de equações e os parâmetros de localização Δ_x e Δ_y são obtidos das condições $\partial W_{01}/\partial \Delta_x = 0$ e $\partial W_{01}/\partial \Delta_y = 0$, e o resultado é

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta_x^4} - \frac{1}{L_F^2 \Delta_x (\Delta_x + \Delta_y)} \left[1 - \frac{\Delta_y (3\Delta_x + \Delta_y)}{4(\Delta_x + \Delta_y)^2} \right] - \frac{1}{L_H^4} &= 0, \\ \frac{3}{\Delta_y^4} - \frac{1}{L_F^2 \Delta_y (\Delta_x + \Delta_y)} \left[1 + \frac{\Delta_x (3\Delta_x + \Delta_y)}{4(\Delta_x + \Delta_y)^2} \right] - \frac{3}{L_H^4} - \frac{3}{L_0^4} &= 0. \end{aligned} \quad (4.68)$$

Tornando o campo magnético igual a zero, no limite $L_F \ll L_0$, obtemos $\Delta_{xw} \simeq 1.7344L_F$ e $\Delta_{yw} \simeq 2.1199L_F$. Supondo que $\Delta_{xw} \simeq \alpha_w L_F$ e $\Delta_{yw} \simeq \eta_w L_F$, portanto $\alpha_w \simeq 1.7344$ e $\eta_w \simeq 2.1199$. No limite $L_F \gg L_0$ obtemos $\Delta_{xw} \simeq L_F$, $\Delta_{yw} \simeq L_0$. Na presença de campo magnético e fazendo o limite $L_F \ll L_H$, obtemos o mesmos resultados sem a aplicação do campo magnético no limite, $L_F \ll L_0$. No limite $L_F \gg L_H$, obtemos $\Delta_{xw} = \Delta_{yw} \simeq L_H$.

Em unidades adimensionais, os parâmetros são escritos

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha^4} - \frac{1}{\alpha(\alpha + \eta)} \left[1 - \frac{\eta(3\alpha + \eta)}{4(\alpha + \eta)^2} \right] - \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} &= 0, \\ \frac{3}{\eta^4} - \frac{1}{\eta(\alpha + \eta)} \left[1 + \frac{\alpha(3\alpha + \eta)}{4(\alpha + \eta)^2} \right] - 3 \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} - 3 \frac{A}{E_{\perp}^3} &= 0. \end{aligned} \quad (4.69)$$

Os resultados obtidos a partir da solução numérica da Eq.(4.69) estão mostrados nas Figs.(4.19) e (4.20).

Usando os valores de α e η calculamos a energia W_{01} usando a Eq.(4.44) e a deformação superficial usando a Eq.(4.50). Apresentamos estes resultados nas Figs.(4.21) e (4.22) respectivamente. Observamos que a formação do estado excitado de energia Ψ_{01} ocorre a partir de 7500 V/cm e que o campo B tende a delocalizar o polaron.

Minimizando a energia do elétron, $\partial E_{01}/\partial \Delta_x = 0$ e $\partial E_{01}/\partial \Delta_y = 0$, obtemos as seguintes equações

$$\frac{1}{\Delta_x^4} - \frac{2}{L_F^2 \Delta_x (\Delta_x + \Delta_y)} \left[1 - \frac{\Delta_y (3\Delta_x + \Delta_y)}{4(\Delta_x + \Delta_y)^2} \right] - \frac{1}{L_H^4} = 0;$$

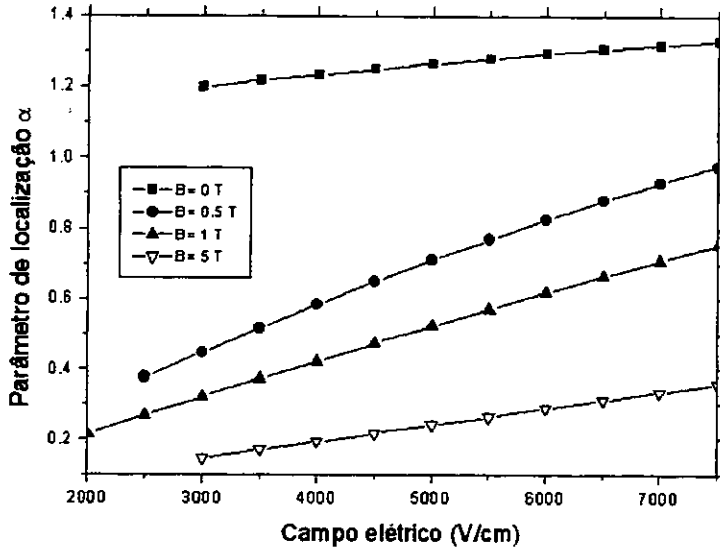


Fig. 4.19 Parâmetro de localização do polaron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

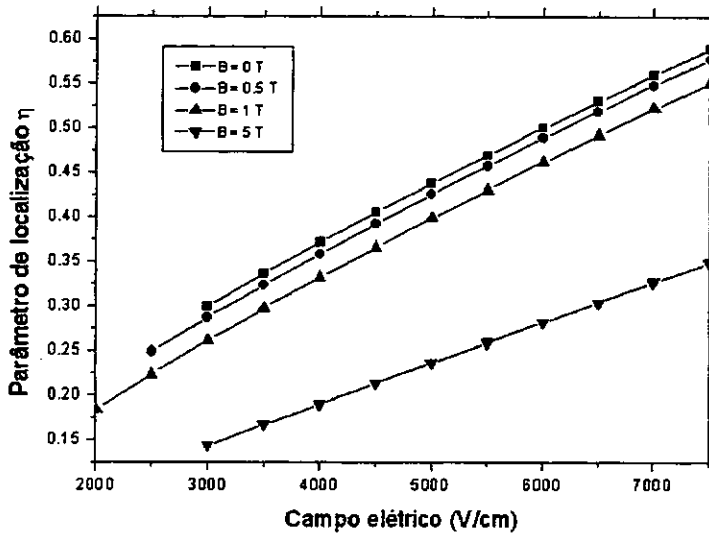


Fig. 4.20 Parâmetro de localização do polaron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

$$\frac{3}{\Delta_y^4} - \frac{2}{L_F^2 \Delta_y (\Delta_x + \Delta_y)} \left[1 + \frac{\Delta_x (3\Delta_x + \Delta_y)}{4(\Delta_x + \Delta_y)^2} \right] - \frac{3}{L_H^4} - \frac{3}{L_0^4} = 0, \quad (4.70)$$

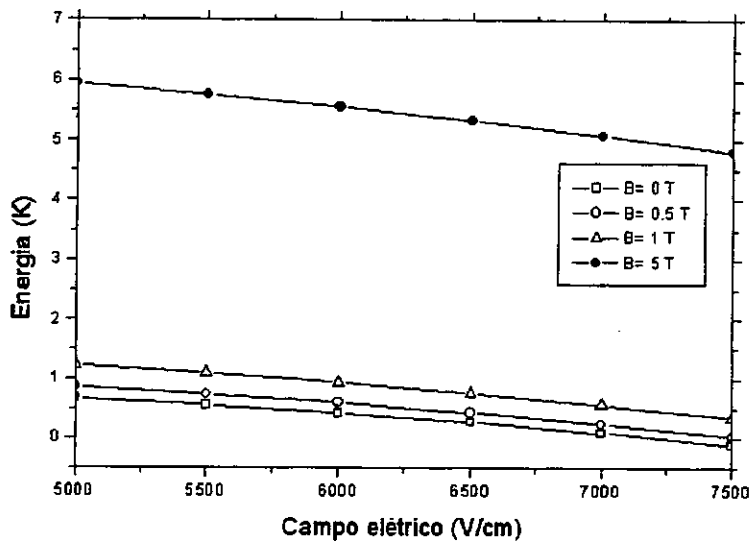


Fig. 4.21 Energia do estado excitado (0,1) do polaron em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

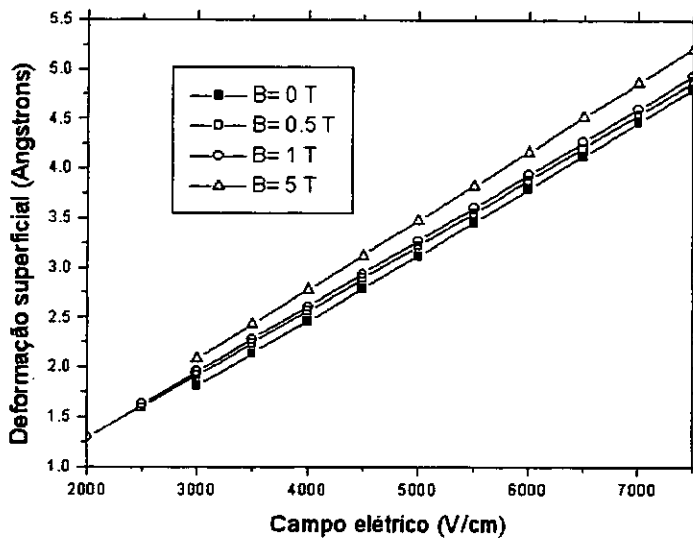


Fig. 4.22 Deformação superficial do polaron na superfície de hélio em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

Fazendo campo magnético igual a zero no limite $L_F \ll L_0$, obtemos $\Delta_{xe} \simeq 1.2264L_F$ e $\Delta_{ye} \simeq 1.4989L_F$. Supondo $\Delta_{xe} \simeq \alpha_e L_F$ e $\Delta_{ye} \simeq \eta_e L_F$, portanto $\alpha_e \simeq 1.2264$ e $\eta_e \simeq 1.4989$. No limite $L_F \gg L_0$ obtemos $\Delta_{xe} \simeq L_F/\sqrt{2}$, $\Delta_{ye} \simeq L_0$. Com campo magnético no limite

$L_F \ll L_H$, obtemos os mesmos resultados encontrados sem a aplicação do campo magnético, no limite $L_F \ll L_0$. No limite $L_F \gg L_H$, obtemos $\Delta_{xe} = \Delta_{ye} \simeq L_H$.

Comparando os resultados obtidos pelos sistemas de Eqs.(4.68) e (4.70) nos limites $L_F \ll L_0$ e $L_F \ll L_H$, percebemos que $\alpha_e = \alpha_w/\sqrt{2} \simeq 1.2264$ e $\eta_e = \eta_w/\sqrt{2} \simeq 1.4989$.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\alpha^4} - \frac{2}{\alpha(\alpha + \eta)} \left[1 - \frac{\eta(3\alpha + \eta)}{4(\alpha + \eta)^2} \right] - \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} &= 0; \\ \frac{3}{\eta^4} - \frac{2}{\eta(\alpha + \eta)} \left[1 + \frac{\alpha(3\alpha + \eta)}{4(\alpha + \eta)^2} \right] - 3\frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} - 3\frac{A}{E_{\perp}^3} &= 0. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Os valores dos parâmetros obtidos neste sistema são bem próximos dos valores obtidos pelos sistemas de Eqs.(4.63) como mostram os resultados nas Figs.(4.23) e (4.24).

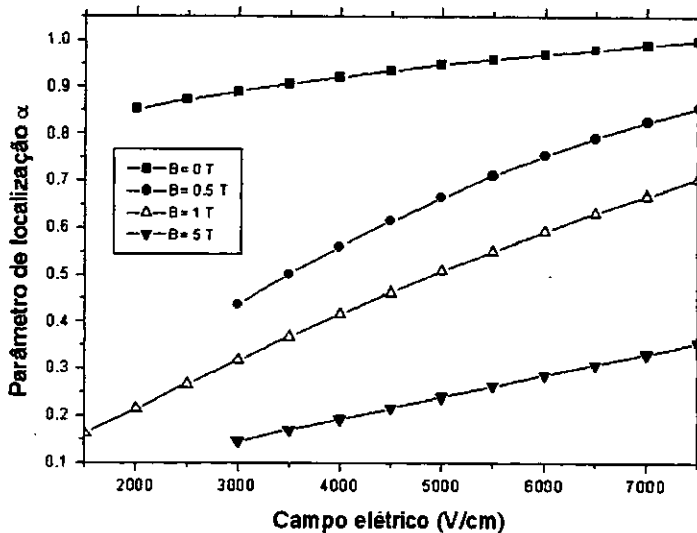


Fig. 4.23 Parâmetro de localização do elétron na superfície de hélio, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

A energia no estado excitado Ψ_{01} é plotada na Fig.(4.25) observamos que o elétron apresenta estado ligado no poço do “dimple” apenas a partir de 5000 V/cm.

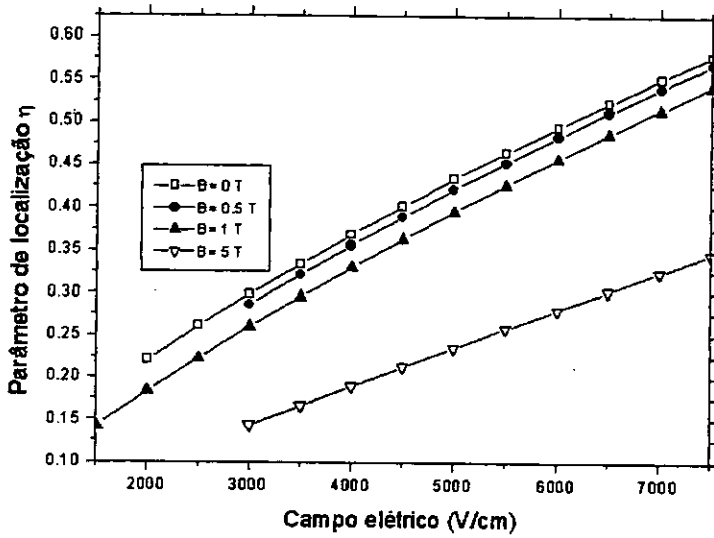


Fig. 4.24 Parâmetro de localização do elétron na superfície de hélio, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

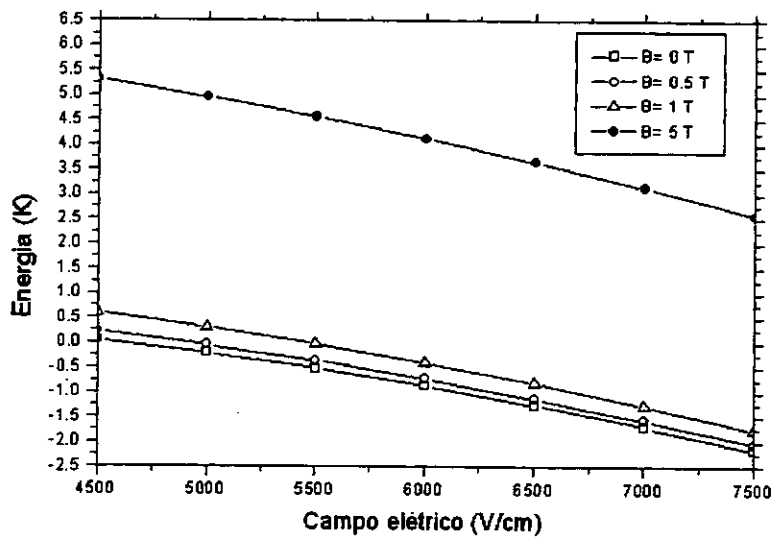


Fig. 4.25 Energia do estado excitado (0,1) do elétron em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

A deformação da superfície de hélio como função de campo elétrico é mostrada na Fig.(4.26).

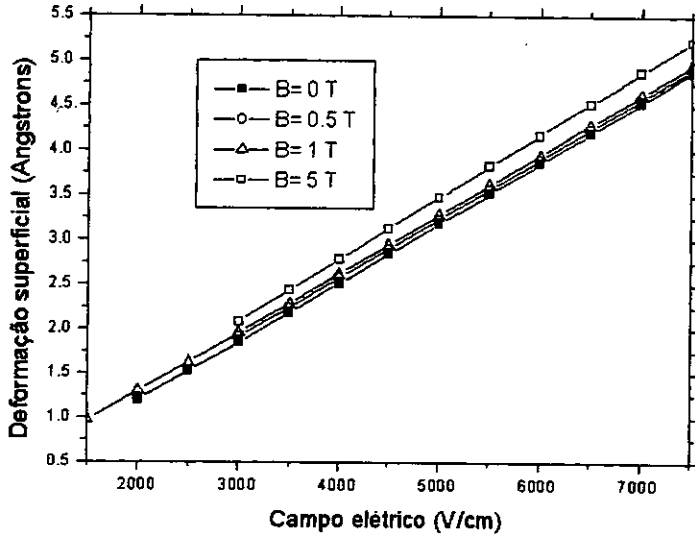


Fig. 4.26 Deformação superficial do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

Repetimos o processo para o estado Ψ_{10} usando as condições, $\frac{\partial W_{10}}{\partial \Xi_x} = 0$ e $\frac{\partial W_{10}}{\partial \Xi_y} = 0$. Neste caso obtemos as seguintes equações:

$$\begin{aligned} \frac{3}{\Xi_x^4} - \frac{1}{L_F^2 \Xi_x (\Xi_x + \Xi_y)} \left[1 + \frac{\Xi_y (\Xi_x + 3\Xi_y)}{4(\Xi_x + \Xi_y)^2} \right] - \frac{3}{L_H^4} &= 0; \\ \frac{1}{\Xi_y^4} - \frac{1}{L_F^2 \Xi_y (\Xi_x + \Xi_y)} \left[1 - \frac{\Xi_x (\Xi_x + 3\Xi_y)}{4(\Xi_x + \Xi_y)^2} \right] - \frac{1}{L_H^4} - \frac{1}{L_0^4} &= 0. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Fazendo o campo magnético igual a zero no limite $L_F \ll L_0$, obtemos $\Xi_{xw} \simeq 2.1199 L_F$ e $\Xi_{yw} \simeq 1.7344 L_F$. Supondo $\Xi_{xw} = \zeta_w L_F$ e $\Xi_{yw} = \mu_w L_F$, portanto $\zeta_w \simeq 2.1199$ e $\mu_w \simeq 1.7344$. No limite $L_F \gg L_0$, obtemos $\Xi_{xw} \simeq \sqrt{3} L_F$, $\Xi_{yw} \simeq L_0$. Com a aplicação do campo magnético no limite $L_F \ll L_H$, obtemos os mesmos resultados sem a aplicação do campo no limite $L_F \ll L_0$. No limite $L_F \gg L_H$, temos que $\Xi_{xw} = \Xi_{yw} \simeq L_H$.

$$\frac{3}{\zeta^4} - \frac{1}{\zeta(\zeta + \mu)} \left[1 + \frac{\mu(\zeta + 3\mu)}{4(\zeta + \mu)^2} \right] - 3 \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} = 0;$$

$$\frac{1}{\mu^4} - \frac{1}{\mu(\zeta + \mu)} \left[1 - \frac{\zeta(\zeta + 3\mu)}{4(\zeta + \mu)^2} \right] - \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} - \frac{A}{E_{\perp}^3} = 0. \quad (4.73)$$

Novamente, resolvendo numericamente este sistema de Eqs.(4.73) obtivemos os resultados apresentados nas Figs.(4.27) e (4.28).

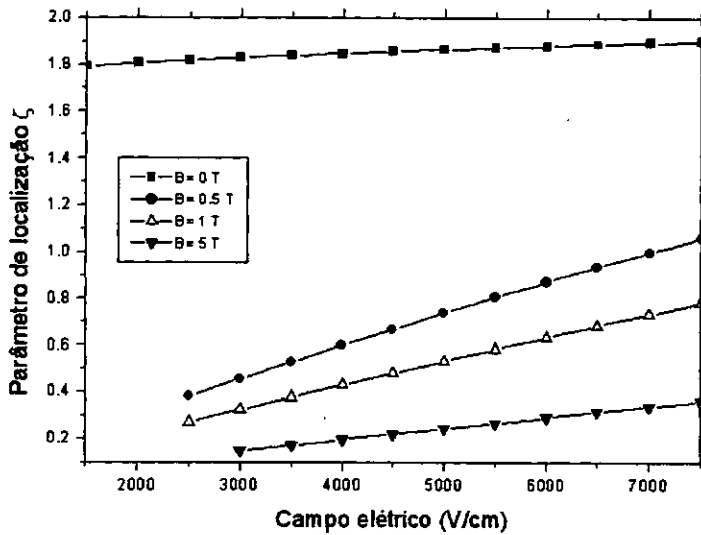


Fig. 4.27 Parâmetro de localização do polaron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

Com os parâmetros ζ e μ calculamos a energia do polaron para este estado e os resultados estão na Fig.(4.29), percebemos que este estado excitado é obtido a partir de 4000 V/cm para $B = 0$.

A deformação da superfície é mostrada na Fig.(4.30).

Mínimizando a energia do elétron, $\frac{\partial E_{10}}{\partial \Xi_x} = \frac{\partial E_{10}}{\partial \Xi_y} = 0$ obtemos o sistema de equações abaixo:

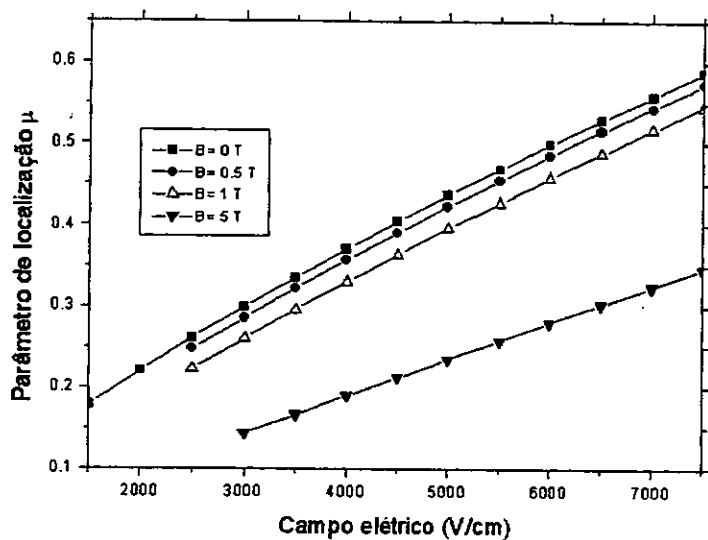


Fig. 4.28 Parâmetro de localização do polaron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

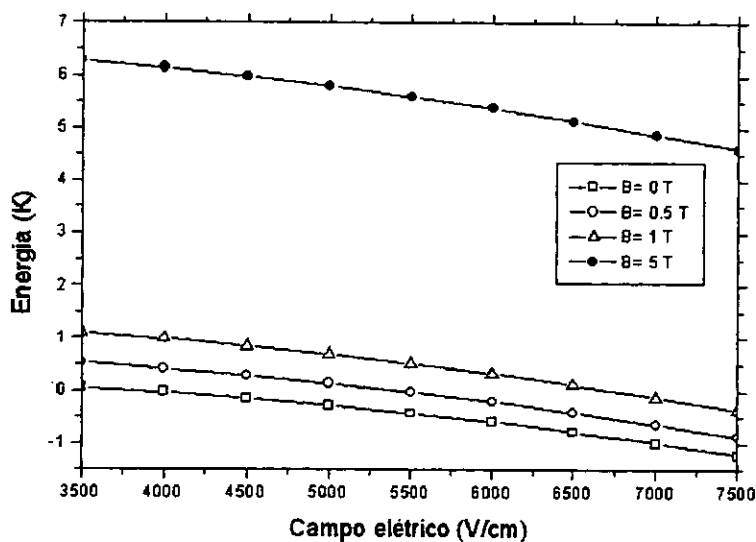


Fig. 4.29 Energia do estado excitado (1,0) do polaron em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

$$\frac{3}{\Xi_x^4} - \frac{2}{L_F^2 \Xi_x (\Xi_x + \Xi_y)} \left[1 + \frac{\Xi_y (\Xi_x + 3\Xi_y)}{4(\Xi_x + \Xi_y)^2} \right] - \frac{3}{L_H^4} = 0;$$

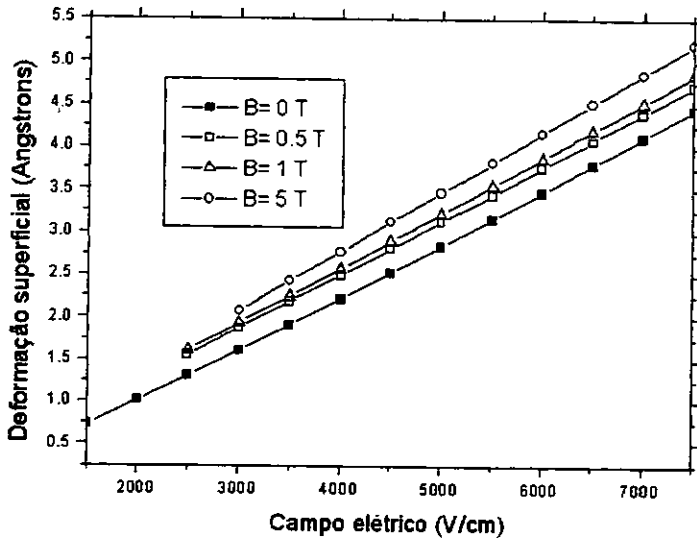


Fig. 4.30 Energia do estado excitado (1,0) do polaron em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético pelo método variacional aplicado a energia do polaron.

$$\frac{1}{\Xi_y^4} - \frac{2}{L_F^2 \Xi_y (\Xi_x + \Xi_y)} \left[1 - \frac{\Xi_x (\Xi_x + 3\Xi_y)}{4(\Xi_x + \Xi_y)^2} \right] - \frac{1}{L_H^4} - \frac{1}{L_0^4} = 0. \quad (4.74)$$

Os valores limites dos parâmetros podem ser obtidos como anteriormente. Fazendo o campo magnético igual a zero no limite $L_F \ll L_0$, obtemos $\Xi_{xe} \simeq 1.4989 L_F$ e $\Xi_{ye} \simeq 1.2264 L_F$. Portanto $\zeta_e \simeq 1.4989$ e $\mu_e \simeq 1.2264$. No limite $L_F \gg L_0$, obtemos $\Xi_{xe} \simeq \sqrt{\frac{3}{2}} L_F$, $\Xi_{ye} \simeq L_0$. Com a aplicação do campo magnético no limite $L_F \ll L_H$, obtemos os mesmos resultados sem a aplicação do campo magnético no limite $L_F \ll L_0$. No limite $L_F \gg L_H$, obtemos $\Xi_{xe} = \Xi_{ye} \simeq L_H$.

Comparando os resultados dos parâmetros de localização das Eqs. (4.72) e (4.74) obtemos

$$\zeta_e = \zeta_w / \sqrt{2} \simeq 1.4989; \mu_e = \mu_w / \sqrt{2} \simeq 1.2264. \quad (4.75)$$

$$\frac{3}{\zeta^4} - \frac{2}{\zeta(\zeta + \mu)} \left[1 + \frac{\mu(\zeta + 3\mu)}{4(\zeta + \mu)^2} \right] - 3 \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} = 0;$$

$$\frac{1}{\mu^4} - \frac{2}{\mu(\zeta + \mu)} \left[1 - \frac{\zeta(\zeta + 3\mu)}{4(\zeta + \mu)^2} \right] - \frac{B^2 K}{E_{\perp}^4} - \frac{A}{E_{\perp}^3} = 0. \quad (4.76)$$

Os resultados para os parâmetros de localização, deformação da superfície e energia para o estado Ψ_{10} estão apresentados nas Figs.(4.31), (4.32), (4.33) e (4.34).

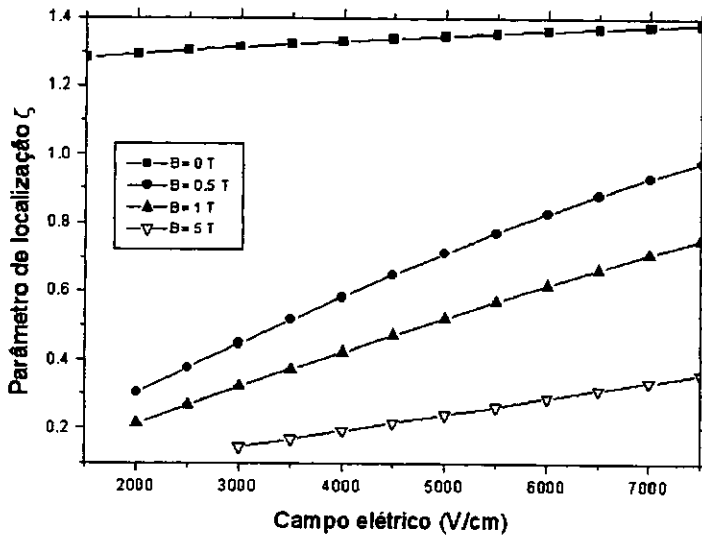


Fig. 4.31 Parâmetro de localização do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

Comparando os resultados das energias obtidas para o elétron no estado Ψ_{00} através da AH e o método variacional observamos que os resultados são bem compatíveis como mostra a tabela (4.77).

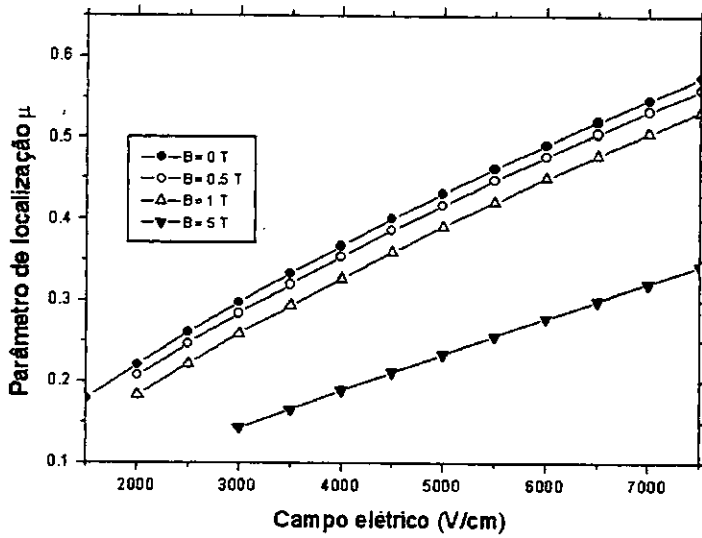


Fig. 4.32 Parâmetro de localização do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, para vários valores de campo magnético obtido pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

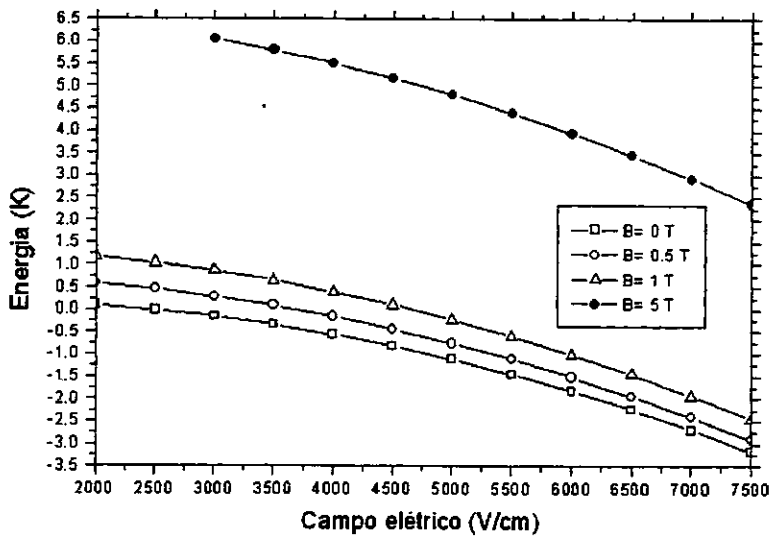


Fig. 4.33 Energia do estado excitado (1,0) do elétron em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

$E_{00}(\text{K})$	$E(\text{V/cm})$	$E_{AH}^{00}(\text{K})$	$E(\text{V/cm})$
-0.05299	2500	-0.060497	2500
-0.21013	3000	-0.220949	3000
-0.40805	3500	-0.422763	3500
-0.64655	4000	-0.665771	4000

(4.77)

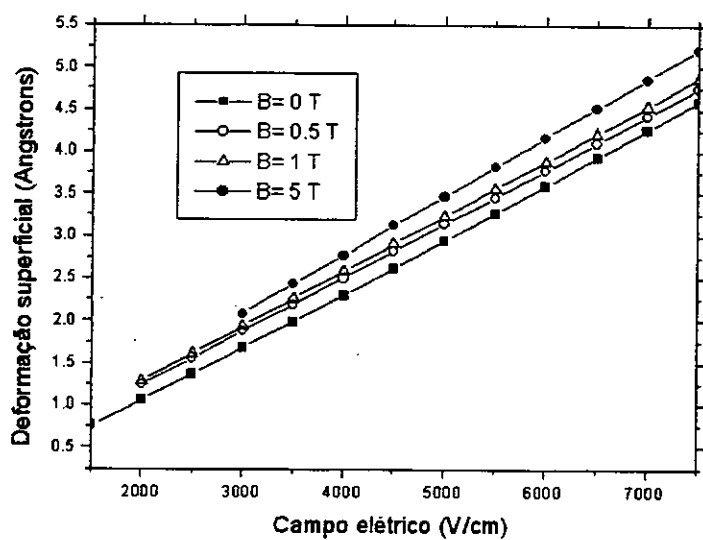


Fig. 4.34 Deformação superficial do elétron na superfície de hélio em função do campo elétrico, obtido para vários valores de campo magnético pelo método variacional aplicado a energia do elétron.

Capítulo 5

CONCLUSÕES

Neste trabalho, investigamos as propriedades do estado polarônico em canais quase-unidimensionais na superfície de hélio líquido. O polaron, neste sistema, é descrito pelo acoplamento do elétron à sua auto-deformação superficial diferentemente do polaron proposto por Landau que atribuía ao acoplamento do elétron com a polarização auto-induzida em cristais.

As propriedades do polaron foram obtidas através da solução de duas equações fundamentais: a equação de Schrödinger do elétron superficial que contém um potencial de confinamento lateral e um termo que depende da deformação superficial, causada por um campo elétrico efetivo que o pressiona contra a superfície; e a equação de equilíbrio mecânico que relaciona a deformação com a pressão eletrônica, que é por sua vez proporcional ao quadrado da função de onda eletrônica. O sistema de equações diferenciais é não linear e deve ser resolvido autoconsistentemente. Usamos, dois métodos para resolvê-las. O primeiro, consistiu na expansão da deformação superficial até segunda ordem, em torno da origem, para valores da posição menores do que um dado comprimento de localização. Chamamos esta aproximação de aproximação harmônica. O outro método consistiu em usar uma função de onda tentativa, escolhida como a do oscilador harmônico bidimensional e minimizar a energia total de modo a determinar o parâmetro de localização. Obtivemos então os parâmetros de localização ao longo das duas direções do plano dos elétrons. A partir daí, foi possível calcular o perfil da deformação superficial e as energias do elétron sujeito à depressão superficial e do polaron, em função do campo elétrico e campo magnético aplicados na direção perpendicular à superfície.

Nossos cálculos em ambos os métodos apresentaram resultados para as energias do estado fundamental bastante semelhantes. Quanto aos estados excitados, mostramos que a aproxi-

mação harmônica só pode ser aplicada em determinados regimes. Pudemos concluir que o método variacional apresenta resultados confiáveis em todo o intervalo de parâmetros.

Determinamos os valores mínimos de campo elétrico para a existência de estados ligados, obtendo para o estado fundamental campos da ordem de 2500 V/cm e 4000 V/cm, para a energia do elétron e do polaron, respectivamente. Para o estado Ψ_{01} encontramos estados ligados para campos da ordem de 5000 V/cm e 7500 V/cm, para a energia do elétron e do polaron, respectivamente. Para o estado Ψ_{10} encontramos estados ligados para campos da ordem de 2500 V/cm e 4000 V/cm, para a energia do elétron e do polaron.

Analizamos o efeito do campo magnético sobre o estado polarônico, mostrando que não interfere no perfil da deformação, modificando apenas o movimento orbital do elétron dentro do "dimple", bem como discutimos o seu papel de tender delocalizar o elétron e por conseguinte evitar a formação do estado polarônico a altos campos.

Nossa esperança é que os resultados deste trabalho possam motivar pesquisadores a investigar experimentalmente a formação do estado polarônico em canais quase-unidimensionais de elétrons na superfície de hélio líquido, uma vez que sua existência já foi comprovada experimentalmente para elétrons superficiais sem confinamento lateral e que recentes trabalhos apontaram a exequibilidade do confinamento lateral por meios estruturais ou eletrostáticos.

Apêndice

Aqui nós vamos descrever o procedimento dos cálculos da integral na Eq.(4.16) no limite de

$k_c^2(l_x^2 + l_y^2) \ll 1$. A integral

$$G_w = -\frac{(eE_\perp)^2}{8\pi^2\sigma} \int dk_x \int dk_y \frac{\exp[-(k_x^2 l_x^2 + k_y^2 l_y^2)/2]}{k_x^2 + k_y^2 + k_c^2}, \quad (\text{A.1})$$

pode ser calculada depois da mudança de coordenadas $\{k, \theta\}$ com $k_x = k \cos \theta$; $k_y = k \sin \theta$.

Levando em conta a identidade

$$\frac{k_x^2 l_x^2 + k_y^2 l_y^2}{2} = \frac{k^2 (l_x^2 + l_y^2)}{4} + \frac{k^2 (l_x^2 - l_y^2)}{4} \cos 2\theta$$

nós podemos reescrever a Eq.(A.1) como

$$G_w = -\frac{(eE_\perp)^2}{8\pi^2\sigma} \int_0^\infty \frac{k dk}{k^2 + k_c^2} \exp\left[-\frac{k^2 (l_x^2 + l_y^2)}{4}\right] \int_0^{2\pi} d\theta \exp\left[-\frac{k^2 (l_x^2 - l_y^2)}{4} \cos 2\theta\right] \cos 2\theta. \quad (\text{A.2})$$

Introduzindo uma variável nova $t = k^2(l_x^2 + l_y^2)/4$ na Eq.(A.2) obtemos

$$G_w = -\frac{(eE_\perp)^2}{8\pi\sigma} F_w \quad (\text{A.3})$$

tal que

$$F_w = \int_0^\infty \frac{e^{-t} I_0(\beta t) dt}{t + \alpha}$$

e

$$\alpha = \frac{k_c(l_x^2 + l_y^2)}{4}; \beta = \frac{l_x^2 - l_y^2}{l_x^2 + l_y^2};$$

$I_0(\beta t)$ é a função modificada de Bessel. A integral na Eq.(A.3) pode ser calculada pela expansão da função de Bessel em séries:

$$F_w = -e^\alpha \text{Ei}(-\alpha) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\beta/2)^{2n}}{(n!)^2} \int \frac{t^{2n} e^{-t}}{t + \alpha} dt \quad (\text{A.4})$$

sendo $\text{Ei}(-\alpha)$ a função exponencial-integral. As integrais na soma da Eq.(A.4) podem ser calculadas exatamente. Contudo nós podemos usando a condição $\alpha \ll 1$ desconsiderar α no denominador do integrando na Eq.(A.4). Como resultado chegamos a seguinte expressão para F_w :

$$F_w \simeq -\text{Ei}(-\alpha) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(2n-1)!}{(n!)^2} \left(\frac{\beta}{2}\right)^{2n} \simeq \ln \frac{1}{\alpha\gamma} + \ln \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (\text{A.4})$$

Substituindo os valores de α e β na Eq.(A.5) chegamos a expressão final

$$G_w = -\frac{(eE_1)^2}{4\pi\sigma} \ln \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\gamma}k_c(l_x + l_y)} \quad (\text{A.6})$$

que explicam os resultados da Eq.(4.21).

Os resultados das Eqs.(4.23)-(4.24), (4.44)-(4.47), (4.50)-(4.52), e (4.53)-(4.55) podem ser obtidos do mesmo modo. Se os integrandos contiver potências extras de k^2 em comparação com a Eq.(A.2), isto é contiver k^3 ou k^5 , os cálculos são simplificados significativamente porque

em tais casos a potência adicional de t aparece no nominador do integrando na Eq.(A.3). Isto permiti com que descosideremos α no denominador e com isso chegamos as integrais do tipo

$$\int_0^{\infty} t^{\lambda} e^{-t} I_{\nu}(\beta t) dt.$$

Durante todos os cálculos realizados no presente trabalho ν assumiu os seguintes valores 0, 1 e

2.

Referências Bibliográficas

- [1] T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 537 (1982); M. J. Kelly and R. J. Nicholas, *Rep. Progr. Phys.* **48**, 1699 (1985); G. Bastard, J. A. Brum, and R. Ferreira, in *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (Academic Press, New York, 1991), Vol. **44**, p. 229.
- [2] M. W. Cole, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 451 (1974); C. C. Grimes, *Surf. Sci.* **73**, 379 (1978); Yu. P. Monarkha and V. B. Shikin, *Sov. J. Low Temp. Phys.* **8**, 279 (1982); F. I. B. Williams, *Surf. Sci.* **113**, 371 (1982); N. Studart and O. Hipólito, *Rev. Bras. Fis.* **16**, 194 (1986); P. Leiderer, *J. Low Temp. Phys.* **87**, 247 (1982).
- [3] *Two-Dimensional Electron on helium and other Cryogenic Substrates*, edited by E. Y. Andrei, Klumer, Dordrecht (1997).
- [4] C. C. Grimes and G. Adams, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 795 (1979); *Surf. Sci.* **98**, 1 (1980).
- [5] W. T. Sommer, thesis, Stanford University (1964) (unpublished).
- [6] M. W. Cole e M. H. Cohen, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 1238 (1969).
- [7] V. B. Shikin, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **58**, 1140 (1970) [*Sov. Phys. JETP* **31**, 936 (1970)].
- [8] D. O. Edwards and W. F. Saam, in *Progress in Low Temperature Physics*, Vol. VII A, edited by D. F. Brewer, North-Holland Publ. Co, p. 283 (1978).
- [9] E. Y. Andrei, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1449 (1984).
- [10] V. B. Shikin, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **60**, 713 (1971) [*Sov. Phys. JETP* **33**, 387 (1971)].
- [11] L. P. Landau, *Phys. Zeitschrift Sowjetunion.* **3**, 664 (1933).
- [12] V.B. Shikin and Yu. P. Monarkha, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **65**, 751 (1973) [*Sov. Phys. JETP* **38**, 373 (1973)].
- [13] Yu. P. Monarkha, *Fiz. Nisk. Temp.* **1**, 526 (1975) [*Sov. J. Low Temp. Phys.* **1**, 258 (1975)].
- [14] L. Sander, *Phys. Rev. B* **11**, 4350 (1975).

- [15] A. Cheng and P. M. Platzman, *Solid State Commun.* **25**, 813 (1978).
- [16] G. E. Marques and N. Studart, *Phys. Rev. B* **39**, 4133 (1989).
- [17] V. B. Shikin and P. Leiderer, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **32**, 439 (1980) [*JETP Lett.* **32**, 416 (1980)].
- [18] V. B. Shikin and P. Leiderer, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **81**, 184 (1981) [*Sov. Phys. JETP* **54**, 92 (1981)].
- [19] V. B. Shikin and E. Lebedeva, *Z. für Physik B* **98**, 331 (1995).
- [20] G. A. Farias and F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **55**, 3763 (1997).
- [21] G. A. Farias, O. Hipólito, and N. Studart, *Cien. Cult. Suppl.* **37**, 260 (1980). See *Atomindex* **12**, 6199 (1981)
- [22] O. Hipólito, G. A. Farias and N. Studart, *Surf. Sci.* **113**, 394 (1982).
- [23] S. A. Jackson and P. M. Platzman, *Phys. Rev. B* **24**, 499 (1981).
- [24] S. A. Jackson and P. M. Platzman, *Phys. Rev. B* **25**, 4886 (1982).
- [25] A. V. Chaplik, *JETP Lett.* **31**, 252 (1980).
- [26] D. Marty, *J. Phys. C.* **19**, 6097 (1986).
- [27] A. M. C. Valkering, R. W. van der Heijen, *Phys. B* **249-251**, 652 (1998).
- [28] R. J. F. van Haren, G. Acres, P. Fozooni, A. Kristensen, M. J. Lea, P.J. Richardson, A. M. C. Valkering and R. W. van der Heijen, *Phys. B* **249-251**, 656 (1998).
- [29] G. L. Ginsburg and Yu. P. Monarkha, *Sov. J. Low Temp. Phys.* **4**, 580 (1978).
- [30] A. P. Volodin and V. S. Edel'man, *JETP Lett.* **37**, 7 (1983).
- [31] Yu. Z. Kovdrya, F. F. Mende, and V. A. Nikolaenko, *Sov. J. Low Temp. Phys.* **10**, 589 (1984).
- [32] Yu. Z. Kovdrya and Yu. P. Monarkha, *Sov. J. Low Temp. Phys.* **12**, 571 (1986).
- [33] Yu. Z. Kovdrya and V. A. Nikolaenko, *Sov. J. Low Temp. Phys.* **18**, 894 (1992).
- [34] O. I. Kirichek, Yu. P. Monarkha, Yu. Z. Kovdrya, and V. N. Grigor'ev, *Sov. J. Temp. Phys.* **19**, 323 (1993).

- [35] H. Yayama and A. Yomokiyo, Czech. J. Phys. **46**, Suppl. S1 353 (1996).
- [36] S. S. Sokolov e N. Studart, Phys. Rev. B **51**, 2640 (1995).
- [37] J. M. Villas-Bôas, Master Dissertation, UFSCar (1998); J. M. Villas-Bôas, S. S. Sokolov and N. Studart, to be published.
- [38] S. S. Sokolov, G. Q. Hai, e N. Studart, Phys. Rev. B **51**, 5977 (1995); *ibid.* **52**, 15509 (1995); *ibid.* Low Temp. Phys. **23**, 487 (1997).
- [39] S. S. Sokolov and N. Studart, Phys. Rev. B **57**, 704R (1998).
- [40] N. Studart e S. S. Sokolov, in *Two-Dimensional Electron Systems on Helium and other Cryogenic Substrates*, edited by E. Y. Andrei, Kluwer, Dordrecht (1997), p.245.
- [41] Yu. Z. Kovdrya, V. A. Nikolaenko and P. K. H. Sommerfeld, Czech. J. Phys. **46**, Suppl. S1, 347, (1996).
- [42] V. A. Nikolaenko, Yu. Z. Kovdrya, H. Yayama and A. Yomokiyo, Low Temp. Phys. **23**, 482 (1997).
- [43] Yu. Z. Kovdrya, V. A. Nikolaenko, H. Yayama, A. Yomokiyo, O. I. Kirichek and I. B. Berkutov, J. Low Temp. Phys. **110**, 191 (1998).
- [44] O. Tress, Yu. P. Monarkha, F. C. Penning, H. Bluysen e P. Wyder, Phys. Rev. Lett. **77**, 2511 (1996).
- [45] *Nanostructures Physics and Fabrication*, edited by M. A. Reed and W. P. Kirk (Academic Press, San Diego, 1989); C. W. J. Beenaker and H. van Houten, in *Solid State Physics*, edited by H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (Academic Press, New York, 1991), **44**, p.114 .
- [46] A. P. Volodin, V. S. Edel'man, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **37**, 8 (1982) [JETP Lett. **37**, 7 (1982)].
- [47] V. A. Nikolaenko and Yu. Z. Kovdrya, Low Temp. Phys. **23** (5-6) (1997).

