

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Física “Gleb Wataghin”

Tese de Doutorado

Elétrons Interagentes em Bilhares Magnéticos

Luis Gregório G. de V. Dias da Silva

Orientador : Prof. Dr. Marcus A. M. de Aguiar

Co-orientadora : Profa. Dra. Kyoko Furuya

Suporte financeiro: **FAPESP**

18 de Fevereiro de 2002

Agradecimentos

Faço primeiramente um agradecimento especial a Mara P. Borges cujo apoio, paciência e carinho foram fundamentais para que o equilíbrio necessário para a conclusão deste trabalho fosse alcançado. Obrigado, do fundo do coração.

Agradeço também:

À minha família, pelo apoio importante, mesmo com os quilômetros que nos separaram durante boa parte do tempo.

Ao prof. Marcus Aguiar pela orientação durante todos esses anos. O exemplo dado como professor e pesquisador, tanto no aspecto técnico como nas questões éticas influenciou muito a minha formação como profissional em Física. À profa. Kyoko Furuya, pela co-orientação e apoio no ano de 2001.

Aos amigos que colaboraram diretamente com esse trabalho: Ricardo Doretto (pelas sugestões e retificações, especialmente durante a prévia da defesa), Eduardo Peres (por contribuições indispensáveis na parte computacional da apresentação), Alexandre Fontes (pelos segredos do Mathematica), Alexandre Ribeiro (pelos segredos do SlideTex), Jefferson Ortiz e Demétrio Antônio da Silva Filho (pelos segredos do Unix e da Internet, em suas mais variadas formas e pela companhia na terra do copo descartável).

Aos amigos que colaboraram com sua irreverência e amizade: Renato Ângelo (o herdeiro do Toroh), Fábio César Siqueira da Silva (Aaahhh, Mr. M!), Ary Perez Jr. (ah, o café do Ary!), Adilson Motter e Maurício Moraes de Lima Jr. (vidro ou plástico?), Rodrigo Gribel e à turma de 92 em geral. Priscilla Pessanha, Fabiana Crepaldi e Romarly Fernandes (quem canta...). Ao Coral Gilberto Mendes na figura do regente e amigo Paulo Rowlands e aos outros amigos que fazem parte dessa religião que é o canto coral.

Aos outros membros da Comissão Organizadora do I Encontro de Jovens Pesquisadores (Lázaro de Assis, Pedro Holanda, Cibelle Celestino, Luiz Vitor de Souza, Júlio Carvalho, Marta Dotto) pela oportunidade de tentar fazer alguma diferença.

Aos funcionários da Biblioteca e Secretarias do IFGW (Graduação, DFMC, Pós-Graduação) pela paciência e serviços prestados (a versão final sai daqui a pouco, Maria Ignez!).

Enfim, a todos os que convivi nestes anos todos de IFGW (lista grande demais para ser enumerada). Muito obrigado!

Resumo

Consideramos o problema de dois elétrons confinados em um Bilhar quadrado, interagindo por um potencial repulsivo de alcance finito do tipo Yukawa e sujeitos a um campo magnético ortogonal. Calculamos o espectro de energia do sistema para singletos e tripletos de spin em todas as classes de simetria como função da intensidade e alcance da interação e do campo magnético. Mostramos que a natureza de curto alcance da interação suprime a formação de estados fundamentais de “Molécula de Wigner” mesmo no limite fortemente interagente. A susceptibilidade magnética $\chi(B)$ apresenta picos paramagnéticos a baixas temperaturas devido a oscilações singleto-tripletto causadas por interação de troca. A posição, número e intensidade de tais picos depende do alcance e intensidade da interação. A contribuição da interação para a susceptibilidade a campo nulo apresenta fases paramagnéticas e diamagnéticas como função da temperatura.

Abstract

The problem of two electrons in a square billiard interacting via a finite-range repulsive Yukawa potential and subjected to a constant magnetic field is considered. We compute the energy spectrum for both singlet and triplet states, and for all symmetry classes, as a function of the strength and range of the interaction and of the magnetic field. We show that the short-range nature of the potential suppresses the formation of “Wigner molecule” states for the ground state, even in the strong interaction limit. The magnetic susceptibility $\chi(B)$ shows low-temperature paramagnetic peaks due to exchange induced singlet-triplet oscillations. The position, number and intensity of these peaks depend on the range and strength of the interaction. The contribution of the interaction to the zero-field susceptibility displays paramagnetic and diamagnetic phases as a function of T .

Conteúdo

1	Introdução	7
1.1	Susceptibilidade magnética orbital mesoscópica	8
1.1.1	Medição da susceptibilidade em um ensemble de bilhares mesoscópicos	8
1.1.2	Resultados semiclássicos para um gás de elétrons não-interagente	9
1.1.3	Magnetização induzida por efeitos de interação	12
1.2	Objetivos deste trabalho	14
2	Duas partículas em um Bilhar Quadrado	17
2.1	Uma partícula em um Bilhar Quadrado	17
2.1.1	Simetrias	18
2.1.2	Redução de simetrias	20
2.2	Duas partículas idênticas	24
3	O potencial de interação	27
3.1	Dois elétrons interagentes no Quadrado	27
3.1.1	Elementos de matriz	28
3.2	O cálculo de $\langle l_1 l_2 \hat{V} l'_1 l'_2 \rangle$	29
3.2.1	O caso $(\alpha_1 + \alpha_2), (\beta_1 + \beta_2) \neq 0$	33
3.2.2	O caso $(\alpha_1 + \alpha_2) = 0$ e/ou $(\beta_1 + \beta_2) = 0$	34
3.3	Níveis de Energia	35
3.4	Estatística de níveis	38
3.5	Configurações tipo <i>Molécula de Wigner</i>	39
3.5.1	Correlações espaciais	41
4	Efeitos de um campo magnético ortogonal	45
4.1	Hamiltoniano de uma partícula	45
4.1.1	Dinâmica Clássica	46
4.1.2	Elementos de Matriz de $\hat{H}^{(0)}(B)$	46
4.2	Duas partículas não interagentes	50

4.3	Campo e Interação	51
4.3.1	Níveis de Energia	53
4.3.2	Densidade eletrônica	55
5	Magnetização e Susceptibilidade	61
5.1	Definição termodinâmica	61
5.2	Susceptibilidade para o sistema de dois elétrons	62
5.3	Dependência com a temperatura	66
5.3.1	Influência de α	68
6	Conclusões	71
A	Conversão de Unidades	77
B	Blindagem exponencial em 3D	79
B.1	Aproximação de Thomas-Fermi	81

Capítulo 1

Introdução

Os avanços tecnológicos e instrumentais vistos na última década na área de nanoestruturas permitiram investigações experimentais diretas em dispositivos com tamanhos da ordem de centenas ou mesmo dezenas de nanômetros. Dentre esses avanços, podemos destacar o aprimoramento de técnicas de litografia em heteroestruturas semicondutoras, que permitiu um estudo direto das propriedades de sistemas do tipo “gás de elétrons em duas dimensões” (2DEG) e também de confinamentos desse gás em regiões do plano (“quantum dots”).

As escalas de comprimento e de energia envolvidas (o tamanho da amostra sendo muito maior que o comprimento de onda de Fermi do sistema, por exemplo) fazem com que seja possível a medição de flutuações em observáveis quânticos decorrentes da natureza da dinâmica clássica (integrável, mista ou caótica). Em particular, foram coletadas evidências experimentais do chamado “caos quântico”, ou seja, a presença de assinaturas de um comportamento clássico caótico em grandezas essencialmente quânticas.

Essas “assinaturas” estão presentes, por exemplo, em propriedades de *transporte* eletrônico em nanoestruturas [1]. Medidas das chamadas “Flutuações Universais de Condutância” em cavidades mesoscópicas de diferentes geometrias [2] sugerem uma correlação entre a presença de caos na dinâmica clássica e um acoplamento aleatório entre os canais de espalhamento quânticos [3]. Em outras montagens, utilizando pontos quânticos isolados em regime de Bloqueio de Coulomb, os resultados experimentais para a distribuição da altura dos picos de condutância [4] sugerem uma distribuição espacial randômica da função de onda, que estaria também associada ao fato de o movimento clássico ser caótico [5].

Outros experimentos investigaram propriedades *termodinâmicas* de sistemas mesoscópicos. Consideraremos a seguir, com um maior grau de detalhe, alguns resultados experimentais e teóricos para a susceptibilidade magnética

que serviram como motivação inicial para o desenvolvimento de nosso trabalho.

1.1 Susceptibilidade magnética orbital mesoscópica

1.1.1 Medição da susceptibilidade em um ensemble de bilhares mesoscópicos

Em um trabalho de 1993, Lévy e colaboradores mostram resultados experimentais para a susceptibilidade magnética orbital de um *ensemble* de bilhares mesoscópicos de geometria quadrada, inscritos em heteroestruturas bidimensionais de Ga-As [6].

As amostras consistiam de um arraço de aproximadamente 10^5 quadrados, isolados uns dos outros por “valas” de 150 nm de profundidade na camada de AlGaAs (cuja espessura é de 450 nm). Foram preparadas duas amostras. Nas duas, o lado de cada quadrado era, em média, de $4.5 \mu m$ sendo a dispersão em tamanho de 10% em uma delas (S1) e de 30% na outra (S2). A geometria dos quadrados pode ser aproximada por um bilhar de alguns microns de lado: o raio de curvatura das “quinas” era da ordem de $0.3 \mu m$ e a rugosidade das bordas da ordem de $0.05 \mu m$. As concentrações e mobilidades são, respectivamente $n_s = 10^{11} cm^{-2}$, $\mu = 2.5 \times 10^6$ (S1) e $n_s = 3 \times 10^{11} cm^{-2}$, $\mu = 10^6$ (S2). O livre caminho médio l dos elétrons era da ordem de $10 \mu m$ (S1) e $5 \mu m$ (S2) e os autores estimaram que o comprimento de coerência L_ϕ é tal que os elétrons sofram entre 3 e 10 colisões com as paredes antes que haja perda da coerência de fase. Nessas condições de livre caminho médio e comprimento de coerência “grandes”, o regime de mobilidade é dito *balístico* (em contraponto a um regime *difusivo*, quando a influência do espalhamento por impurezas não pode ser desprezada).

A magnetização e susceptibilidade foram medidas através de um DC SQUID. Foi medida a magnetização em resposta à aplicação de um campo magnético $H(t) = \bar{H} + h \sin \Omega t$. A magnetização terá componentes de Fourier que serão proporcionais a $\chi_1(\bar{H}) = \frac{\partial m}{\partial h}$, $\chi_2(\bar{H}) = \frac{\partial^2 m}{\partial h^2}$, etc. na forma:

$$m(H) = m_0(\bar{H}) + \chi_1(\bar{H})h \sin \Omega t - \frac{\chi_2(\bar{H})}{4}h^2 \cos \Omega t + \quad (1.1)$$

Variando-se $\bar{H}$ e h e medindo-se as componentes de Fourier da magnetização, têm-se valores experimentais para χ_1 e χ_2 em função de $\bar{H}$ e h a uma temperatura fixa. Essa medida direta inclui a magnetização induzida por

spin. No entanto, a contribuição de spin é suprimida no segundo harmônico em relação ao primeiro por um fator de ordem $(\frac{\mu h}{k_B T})^2 < 10^{-4}$, segundo os autores. Assim, pode-se isolar a contribuição orbital através da integração numérica de χ_2 e somando-se a contribuição a campo zero de χ_1 :

$$\chi_1^{\text{orb}} = \int_0^{\bar{H}} \chi_2(u) du + \chi_1(0) \quad (1.2)$$

Os resultados mostram que a susceptibilidade orbital a campo zero $\chi_1^{\text{orb}}(\bar{H} = 0)$ é paramagnética e superior à susceptibilidade de Landau por um fator $k_F L \approx 100$. Este resultado sugere que o confinamento eletrônico em um bilhar de lado L produz uma contribuição paramagnética à susceptibilidade orbital da ordem de $(k_F L)|\chi_L|$.

Um outro resultado importante é o comportamento da susceptibilidade com a temperatura. A magnitude absoluta de χ_1^{orb} decresce com T como uma lei de potência. Isso foi verificado ajustando os dados experimentais por uma “função tentativa” do tipo:

$$m(H) = \frac{\chi_0(T)H}{\left(1 + \left(\frac{\kappa(T)H}{H_0}\right)^2\right)^n} \quad (1.3)$$

onde $\chi_0(T)$, $\kappa(T)$ e n são parâmetros de ajuste. Verificou-se que $\chi_0(T)$ tem um comportamento bem descrito por uma função do tipo

$$\frac{\chi_0(T)}{\chi_0(0)} = 1 - \left(\frac{T}{T^*}\right)^\beta \quad (1.4)$$

com β entre 0.5 e 1.

1.1.2 Resultados semiclássicos para um gás de elétrons não-interagente

O experimento de Lévy e colaboradores motivou uma série de trabalhos teóricos [7, 8, 9] em susceptibilidade magnética de microestruturas balísticas que obtiveram um relativo sucesso na explicação do alto valor experimental de $\frac{\chi}{|\chi_L|}$ utilizando uma abordagem semi-clássica do problema de um gás de elétrons 2D não interagente.

No ensemble grand-canônico, a susceptibilidade magnética é obtida a partir do potencial termodinâmico $\Omega(\mu)$ e da densidade de estados $\rho(E)$ a partir das relações:

$$\begin{aligned} \chi &= -\frac{\partial^2 \Omega(\mu)}{\partial B^2} \\ \Omega(\mu) &= \int_0^\mu dE (E - \mu) \rho(E) \end{aligned} \quad (1.5)$$

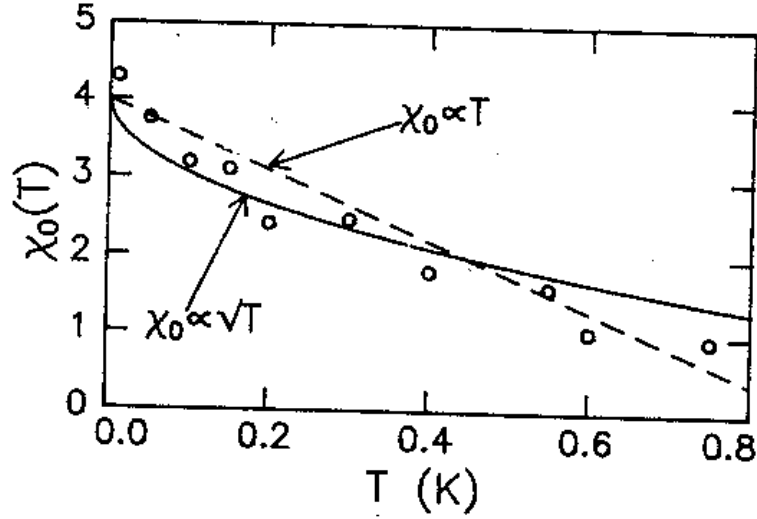


Figura 1.1: Resultados experimentais para $\chi_0(T)$ em função da temperatura mostrando um decaimento tipo Lei de Potência (de [6]). O intervalo de temperaturas equivale a cerca de 160 espaçamentos médios ($\Delta \approx 5\text{mK}$)

No limite semi-clássico, $\rho(E)$ pode ser escrita como a soma de uma termo médio suave $\bar{\rho}(E)$ (o chamado “termo de Weyl” ou “densidade de Thomas-Fermi”) e de um termo oscilante $\delta\rho(E)$, sendo este último dado em termos de órbitas periódicas clássicas via fórmula de Berry-Tabor [10] (se o sistema é classicamente integrável, com órbitas periódicas agrupadas em famílias) ou Gutzwiller [11] (se o sistema é classicamente caótico, com órbitas periódicas isoladas). Os trabalhos de Ullmo et al. [8] e Von Oppen [9] deduziram, de forma independente, fórmulas semi-clássicas para $\delta\chi$, a contribuição de $\delta\rho(E)$ para a susceptibilidade no caso específico do bilhar quadrado. Em outro trabalho, Prado e colaboradores obtém resultados semelhantes para potenciais suaves genéricos [7].

Nesses cálculos de $\delta\rho(E)$ são feitas algumas aproximações: (i) para baixos valores do campo magnético B (raios de cíclotron altos), escreve-se $\delta\rho(E)$ em termos das órbitas periódicas a $B = 0$ acrescidas de uma fase do tipo Aharonov-Bohm que dependerá essencialmente do fluxo magnético através da área envolta pela órbita. O paramagnetismo do sistema vem justamen-

te do sinal deste fluxo. (ii) são consideradas apenas órbitas “curtas”. As contribuições de órbitas “longas” (de comprimento maior que o comprimento térmico $L_T = \beta \hbar v_F$ ou o comprimento de coerência L_φ são desprezadas por serem exponencialmente suprimidas nas fórmulas semiclássicas.

A influência da fronteira e das órbitas na resposta paramagnética do sistema é ilustrada na figura 1.2. Classicamente, sem a presença da fronteira, as órbitas fechadas são circulares, com momento magnético paralelo ao campo (sistema diamagnético). A presença das paredes altera esse quadro, pois torna possível a existência de órbitas periódicas que tenham um momento magnético líquido *anti-paralelo* ao campo, gerando uma contribuição paramagnética à susceptibilidade.

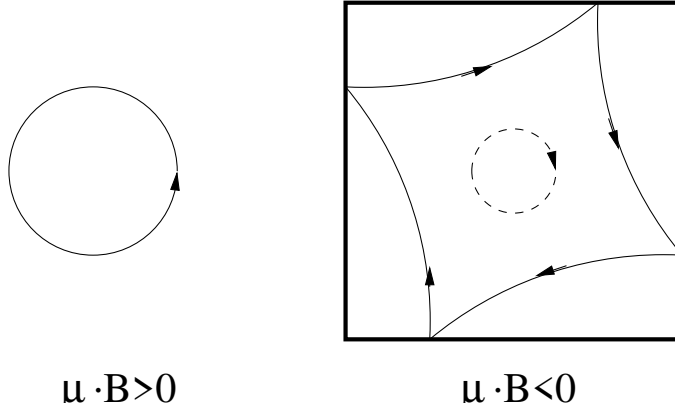


Figura 1.2: Ilustração da contribuição paramagnética das órbitas periódicas clássicas. Sem confinamento, o momento magnético da órbita é paralelo ao campo ($\vec{\mu} \cdot \vec{B} > 0$ à esquerda). A presença da fronteira do Bilhar permite que o momento magnético líquido seja *anti-paralelo* ao campo (dir.)

Nos trabalhos que trataram especificamente do Bilhar Quadrado, o resultado para $\delta\chi$ média no ensemble *canônico* (i.e., consideradas as correções à susceptibilidade grand-canônica devido ao fato de μ não ser constante) são da forma:

$$\frac{\langle \delta\chi(B=0) \rangle}{|\chi_L|} \propto (k_F L) \frac{T/T^*}{(\sinh T/T^*)^2} \quad (1.6)$$

onde T^* é uma escala típica de temperatura do sistema dada por $k_B T^* = \frac{\hbar v_F}{4\sqrt{2}\pi^2 L}$.

Esse resultado explica qualitativamente a proporcionalidade entre $\frac{\chi}{|\chi_L|}$ e $k_F L$ observada experimentalmente. No entanto, a susceptibilidade a campo

zero decai *exponencialmente* com a temperatura, o que não foi verificado na experiência.

1.1.3 Magnetização induzida por efeitos de interação

Os efeitos de interação eletrônica no cálculo da susceptibilidade semiclássica, desprezados nas análises anteriores, foram considerados no caso específico do Bilhar Quadrado por Ullmo, Baranger, Richter, Von Oppen e Jalabert em 1998 [12] e no caso geral de um gás de elétrons bidimensional por Von Oppen, Ullmo e Baranger em 2000 [13]. Nestes trabalhos, foi utilizado um tratamento perturbativo (RPA) no limite de altas densidades e a interação efetiva blindada foi considerada local, proporcional a uma delta de Dirac: $U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\lambda_0}{N(0)} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ ($N(0)$ é a densidade de estados e λ_0 é a constante de acoplamento). Com esse formato para a interação, fica possível escrever os propagadores partícula-partícula na série perturbativa em termos somente das funções de Green de partícula única. Para temperaturas finitas (β finito), o termo de primeira ordem no acoplamento fica na forma:

$$\Pi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(\omega_m) = \frac{1}{\beta N(0)} \sum_{\omega_n} \mathcal{G}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(\epsilon_n) \mathcal{G}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(\omega_m - \epsilon_n) \quad (1.7)$$

onde $\mathcal{G}_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ são as funções de Green térmicas (propagadores de partícula única entre $\mathbf{r}$ e $\mathbf{r}'$) e ω_m e ϵ_n são frequências de Matsubara bosônicas e fermiônicas respectivamente. A contribuição da interação para o potencial termodinâmico será [13]:

$$\Omega = \sum_n \Omega^{(n)} = -\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{(-\lambda_0)^n}{n} \sum_{\omega} \int d\mathbf{r}_1 \cdots d\mathbf{r}_n \Pi_{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}(\omega_m) \cdots \Pi_{\mathbf{r}_n \mathbf{r}_1}(\omega_m) \quad (1.8)$$

Em [12], os autores consideram contribuições de primeira ordem em λ_0 no caso de partículas confinadas em uma fronteira quadrada com um campo magnético B ortogonal. O termo de primeira ordem em (1.8) é:

$$\Omega^{(1)} = \frac{\lambda_0}{\beta} \sum_{\omega_m} \text{Tr} \{ \Pi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}(\omega_m) \} \quad (1.9)$$

No limite semiclássico ($k_F L \gg 1$) e para campos magnéticos fracos, é possível escrever as funções de Green de 1 partícula dentro do propagador $\Pi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$ em termos de órbitas clássicas unindo $\mathbf{r}$ e $\mathbf{r}'$. Como o cálculo de $\Omega^{(1)}$ envolve o traço de $\Pi_{\mathbf{r}\mathbf{r}'}$, as órbitas serão fechadas (não necessariamente periódicas) e emparelhadas de modo que duas condições sejam satisfeitas:

- (i) as fases dinâmicas das órbitas a campo nulo $\exp(iS_j(B=0)/\hbar)$ se cancelem pois, ao tomar-se o traço, os termos oscilantes interferem de modo a produzir contribuições em ordens maiores no “parâmetro semiclássico” $\frac{1}{k_F L}$.
- (ii) as fases tipo Aharonov-Bohm *não* se cancelem pois isso eliminaria a dependência em B .

Existem duas maneiras de fazer o emparelhamento de modo que (i) e (ii) sejam satisfeitas: emparelhar cada órbita com sua reversa temporal a campo nulo (o que os autores chamam de “canal diagonal”) ou emparelhar órbitas diferentes mas cujas ações $S_j(B=0)$ sejam iguais em módulo e com sinais diferentes (o “canal não-diagonal”). É importante salientar que este último modo de emparelhamento só é possível se as órbitas estiverem agrupadas em famílias, característica típica de sistemas classicamente integráveis. Já o canal diagonal (também chamado “Canal de Cooper” em analogia ao canal de espalhamento partícula-partícula em supercondutividade [14]) é genérico e presente também em sistemas classicamente caóticos.

No canal não-diagonal, a contribuição em primeira ordem à susceptibilidade é paramagnética e com o mesmo comportamento com a temperatura da susceptibilidade mesoscópica do caso não interagente. Já no canal de Cooper, é necessária uma renormalização da série perturbativa (a exemplo do que ocorre em supercondutividade [14]) pois termos de diferentes ordens em λ_0 são de mesma ordem em $\frac{1}{k_F L}$. O resultado final desse processo de renormalização (que essencialmente introduz uma constante de acoplamento renormalizada $\bar{\lambda}$) é que a contribuição do canal diagonal χ^D apresenta um mínimo e uma fase diamagnética em função da temperatura. No entanto, para T baixo, o decaimento é exponencial em ambos os casos.

Em [13], os autores tratam do caso geral de um gás de elétrons 2D semiclássico sem fronteira confinante. Nesta situação, só está presente o canal de Cooper e a contribuição da interação para a susceptibilidade orbital é de terceira ordem no acoplamento renormalizado $\bar{\lambda}$. Isso pode ser entendido com o argumento semiclássico de que, para encerrar uma área (e consequentemente permitir um fluxo magnético), a trajetória no “bulk” deve ter no mínimo três vértices (i.e. a partícula deve sofrer pelo menos três espalhamentos), o que origina uma contribuição de ordem $\bar{\lambda}^3$. Essa susceptibilidade induzida puramente por interação é *paramagnética* para interação repulsiva (no caso de interação atrativa em supercondutividade, Aslamazov e Larkin mostram que será diamagnética [14]) e domina frente à susceptibilidade de Landau para baixas temperaturas e baixos valores de campo magnético.

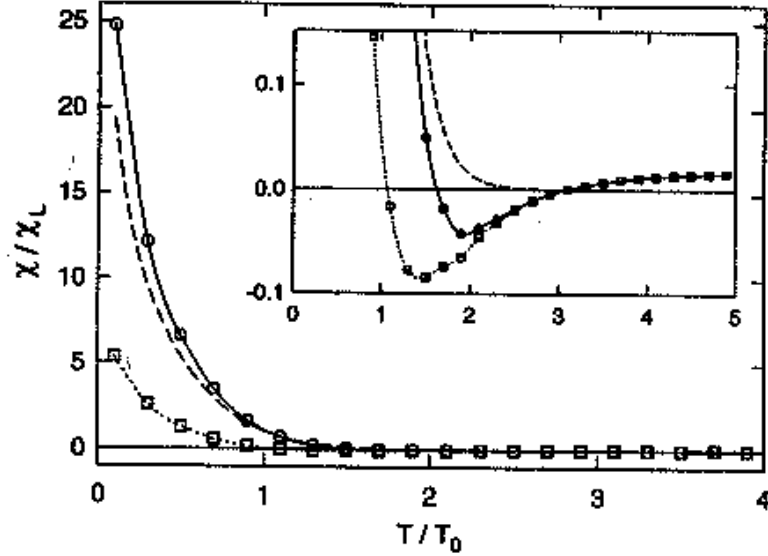


Figura 1.3: Gráfico de $\frac{\chi(T)}{|\chi_L|}$ em função da temperatura (de [12]). A linha tracejada corresponde ao Canal Não Diagonal (presente apenas em sistemas classicamente integráveis) e a pontilhada ao Canal de Cooper (presente em todos os sistemas). A linha contínua representa a soma dos dois canais.

1.2 Objetivos deste trabalho

Tendo em vista os resultados anteriores para a susceptibilidade semiclássica, o objetivo principal deste trabalho foi estudar da forma mais completa possível o sistema de dois elétrons interagentes confinados em um Bilhar Quadrado sob a ação de um campo magnético ortogonal e investigar os efeitos da interação na susceptibilidade magnética orbital.

A idéia é fazer um tratamento não perturbativo da interação eletrônica com a *diagonalização completa* do sistema com apenas duas partículas interagentes, em duas dimensões. O formato para a interação também seria de alcance curto porém finito, diferente da aproximação local utilizada em [12] (tipo delta de Dirac).

Escolhemos um potencial tipo Yukawa, cujo decaimento exponencial a distâncias longas modelaria os efeitos de *screening* em sistemas de muitos elétrons com um parâmetro de alcance bem definido. Além disso, tal for-

mato retém uma dependência em $\frac{1}{r}$ para distâncias curtas, evitando assim divergências no cálculo do elementos de matriz em duas dimensões, presentes quando a dependência é do tipo $(\frac{1}{r})^n$ ($n > 1$).

Podemos resumir da seguinte forma os pontos principais deste trabalho:

- (i) Obtenção do espectro e funções de onda do sistema como função da intensidade e alcance da interação e do campo magnético aplicado;
- (ii) Análise da contribuição da interação para a susceptibilidade do sistema de dois elétrons
- (iii) Análise dos efeitos do alcance da interação no espectro, autofunções e susceptibilidade

Durante o desenvolvimento do projeto, surgiram na literatura trabalhos sobre os efeitos de localização da densidade eletrônica (estados do tipo “Molécula de Wigner”) em sistemas de dois elétrons interagentes confinados em bilhares [15, 27]. A similaridade com nosso trabalho nos permitiu realizar estudos também nessa linha, o que levou a resultados bastante interessantes sobre os efeitos da natureza de curto alcance do potencial de Yukawa na formação ou supressão de moléculas de Wigner no bilhar quadrado. Consideramos também a influência do campo magnético nestas situações.

Capítulo 2

Duas partículas em um Bilhar Quadrado

Analisaremos a seguir o problema de duas partículas não interagentes confinadas em um Bilhar (fronteira rígida bidimensional) de geometria quadrada. Mostraremos a separação da base autoestados do problema em termos das simetrias e como podemos utilizá-la para a diagonalização do problema interagente.

2.1 Uma partícula em um Bilhar Quadrado

Considere o problema de uma partícula confinada no interior de um poço de potencial infinito com geometria quadrada, de lado L :

$$V_{\text{square}}(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L \\ \infty & \text{se } x < 0; x > L; y < 0; y > L \end{cases} \quad (2.1)$$

e com Hamiltoniano dado por

$$H^{(0)} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{\text{square}} \quad (2.2)$$

Sendo E_{tot} a energia da partícula, sua função de onda orbital obedecerá à equação de Schrödinger:

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{square}} \right) \phi(\mathbf{r}) = E_{\text{tot}} \phi(\mathbf{r}) \quad (2.3)$$

O potencial confina a partícula apenas no plano (x, y) . Assim, a função de onda total da partícula será escrita como o produto de uma onda plana na direção z e uma função $\varphi(x, y)$ não-nula no interior do poço quadrado:

$$\phi(\mathbf{r}) = \varphi(x, y) \frac{e^{ik_z z}}{2\pi} \quad (2.4)$$

e $\varphi(x, y)$ será solução de

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_{x,y}^2 + V_{\text{square}}(x, y) \right) \varphi(x, y) = E \varphi(x, y) \quad (2.5)$$

com condições de contorno:

$$\begin{cases} \varphi(0, y) = \varphi(L, y) = 0 \\ \varphi(x, 0) = \varphi(x, L) = 0 \end{cases} \quad (2.6)$$

que definem um problema de autovalores com um soluções senoidais do tipo:

$$\varphi_{mn}(x, y) = \left(\frac{2}{L} \right) \sin \frac{m\pi}{L} x \sin \frac{n\pi}{L} y \quad (2.7)$$

com auto-energias:

$$E_{mn} = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \pi^2 (m^2 + n^2) \quad (2.8)$$

A energia total da partícula, nesse caso, será dada por:

$$E_{\text{tot}} = E_{mn} + \frac{(\hbar k_z)^2}{2m} \quad (2.9)$$

As soluções (2.7) ainda valem se outras condições de contorno forem impostas na direção z . Um exemplo é o caso de confinamento em uma região de comprimento L_z . Teremos então $k_z = \frac{n_z \pi}{L_z}$ em (2.4) e a solução em z não mais será uma onda plana. Outro exemplo é o limite de confinamento em um ponto $z = z_0$ ($L_z \rightarrow 0$). A solução na direção z será uma Delta de Dirac centrada em z_0 ($\delta(z - z_0)$). No entanto, a forma geral de (2.4) e (2.7) se mantém.

2.1.1 Simetrias

O poço quadrado em 2D é invariante sob a ação de rotações e reflexões que compõem o grupo de simetria $\mathcal{C}_{4v}$, o chamado “grupo de simetria do quadrado”. Os elementos geradores desse grupo são a rotação de $\frac{\pi}{4}$ em relação à origem ($\hat{C}_4$) e a reflexão em relação a um plano vertical ($\hat{\sigma}_v$) (utilizamos aqui a notação $\hat{C}_n$ para rotações de $\frac{2\pi}{n}$ e σ para reflexões). Se temos um quadrado de lado L centrado em $x' = y' = 0$, podemos definir $\hat{C}_4$ e $\hat{\sigma}_v$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \text{Rotação } \hat{C}_4: & \quad (x', y') \rightarrow (-y', x') \\ \text{Reflexão } \hat{\sigma}_v: & \quad (x', y') \rightarrow (y', x') \end{aligned}$$

As composições possíveis de potências de $\hat{C}_4$ e $\hat{\sigma}_v$ geram o grupo $\mathcal{C}_{4v}$, incluída a operação identidade E ($E = \hat{C}_4^4 = \hat{\sigma}_v^2$). Os oito elementos do grupo (mostrados na figura 2.1) correspondem às oito operações de simetria que levam o quadrado “nele mesmo”:

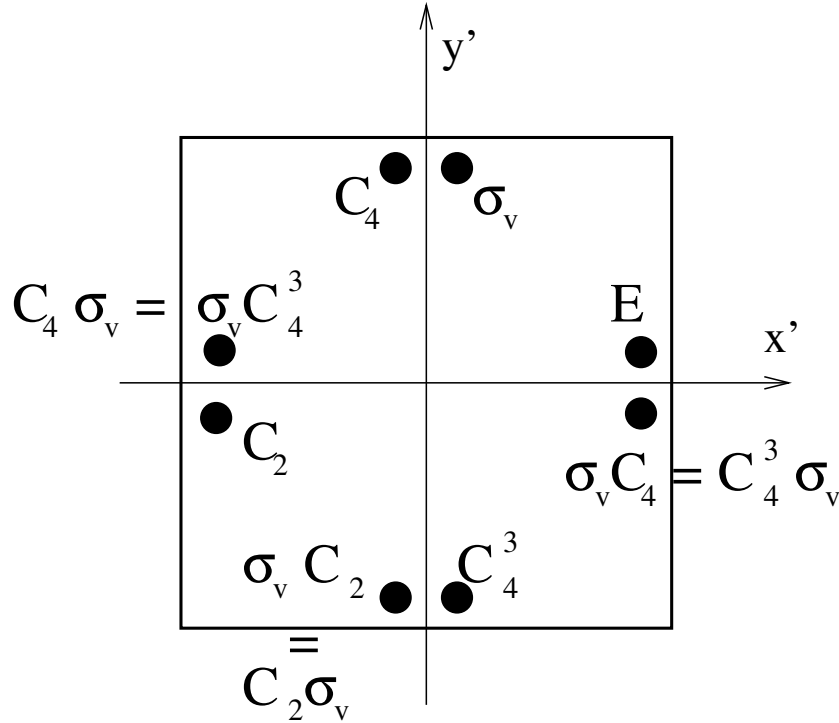


Figura 2.1: Elementos do Grupo $\mathcal{C}_{4v}$. Os pontos indicam a aplicação das respectivas operações de simetria no ponto logo acima do eixo x' no primeiro quadrante

O potencial de confinamento (2.1) (e conseqüentemente o Hamiltoniano $\hat{H}^{(0)}$ dado por (2.2)) são invariantes sob as oito operações de simetria de $\mathcal{C}_{4v}$. Desta forma, os níveis com energia E_{mn} (definida em (2.8)) são pelo menos oito vezes degenerados. Isso pois, dada uma operação de simetria $\hat{A}$ pertencente a $\mathcal{C}_{4v}$, a função $\hat{A}\varphi_{mn}$ será autofunção de $\hat{H}^{(0)}$ com energia E_{mn} .

Um detalhe importante é que as operações de simetria ficam mais simples em um sistema de coordenadas (x', y') cuja origem é o centro do quadrado. A forma (2.7) para as auto-funções tem o centro do quadrado em $x = y =$

$\frac{L}{2}$ de modo que, a princípio, seria desejável escrever φ_{mn} nas coordenadas $x' = x - \frac{L}{2}; y' = y - \frac{L}{2}$. No entanto, veremos que o fato de φ_{mn} ser periódica em x e y permite escrever $\hat{A}\varphi_{mn}$ em uma forma relativamente simples nas coordenadas (x, y) .

2.1.2 Redução de simetrias

A presença de um campo magnético $\vec{B}$ ortogonal ao plano do Biliar tem o efeito de quebra da simetria de reflexão em relação a um plano perpendicular e consequentemente na redução das simetrias do Hamiltoniano [16]. Com isso, o grupo do Hamiltoniano é reduzido para um subgrupo de $\mathcal{C}_{4v}$, o grupo $\mathcal{C}_4$ formado apenas pelas rotações $\hat{C}_4$, $\hat{C}_2$, $\hat{C}_4^3$ e pela identidade E . O grau de degenerescência dos auto-estados é reduzido de 8 para 4.

Como um campo magnético ortogonal será eventualmente incluído no sistema, escolhemos considerar explicitamente apenas as degenerescências devido a rotações nas auto-funções do caso $B = 0$. Em outras palavras, dizemos que um estado de energias E_{mn} pode ser escrito como uma combinação linear do tipo:

$$\psi_{mn} = \varphi_{mn} + \hat{C}_4\varphi_{mn} + \hat{C}_2\varphi_{mn} + \hat{C}_4^3\varphi_{mn} \quad (2.10)$$

ao invés de uma forma mais geral que envolva os outros elementos de $\mathcal{C}_{4v}$. O que ocorre é que teremos degenerescências “escondidas” que serão quebradas com a introdução do campo.

Para aplicarmos as rotações explicitamente em φ_{mn} , podemos transladar a origem do sistema de coordenadas para o centro de quadrado. Nesse sistema ($x' = x - \frac{L}{2}; y' = y - \frac{L}{2}$) $\varphi_{mn}(x, y)$ fica em uma forma menos compacta que a dada em (2.7):

$$\begin{aligned} \varphi_{mn}(x', y') &= \left(\frac{2}{L}\right) \left[\sin \frac{m\pi}{L} x' \cos \frac{m\pi}{2} + \cos \frac{m\pi}{L} x' \sin \frac{m\pi}{2} \right] \times \\ &\quad \left[\sin \frac{n\pi}{L} y' \cos \frac{n\pi}{2} + \cos \frac{n\pi}{L} y' \sin \frac{n\pi}{2} \right] \\ &\equiv \left(\frac{2}{L}\right) \mathcal{F}_m(x') \mathcal{F}_n(y') \end{aligned} \quad (2.11)$$

A aplicação de $\hat{C}_4$ em $\varphi_{mn}(x', y')$ fica:

$$\begin{aligned} \hat{C}_4\varphi_{mn}(x', y') &= \varphi_{mn}(-y', x') = \left(\frac{2}{L}\right) \mathcal{F}_m(-y') \mathcal{F}_n(x') \\ &= \left(\frac{2}{L}\right) \left[-\sin \left(\frac{m\pi y'}{L} - \frac{m\pi}{2} \right) \right] \mathcal{F}_n(x') \end{aligned} \quad (2.12)$$

Fazendo a transformação de coordenadas inversa, temos:

$$\begin{aligned}\hat{C}_4\varphi_{mn}(x, y) &= \left(\frac{2}{L}\right) \left[-\sin \frac{m\pi}{L}y \cos(m\pi) + \cos \frac{m\pi}{L}y \sin(m\pi) \right] \sin \frac{n\pi x}{L} \\ &= (-1)^{m+1}\varphi_{nm}(x, y)\end{aligned}\tag{2.13}$$

uma vez que $\cos(m\pi) = (-1)^m$ e $\sin(m\pi) = 0$.

Assim, é possível obter uma forma relativamente simples para $\hat{C}_4\varphi_{mn}$ nas coordenadas (x, y) , o que é desejável uma vez que a forma (2.7) é mais simples para o cálculo de elementos de matriz do que (2.11). As aplicações dos outros elementos de $\mathcal{C}_4$ ficam:

$$\begin{aligned}\hat{C}_2\varphi_{mn}(x, y) &= (-1)^{m+n}\varphi_{mn}(x, y) \\ \hat{C}_4^3\varphi_{mn}(x, y) &= (-1)^{n+1}\varphi_{nm}(x, y) \\ \hat{E}\varphi_{mn}(x, y) &= \varphi_{mn}(x, y)\end{aligned}\tag{2.14}$$

Dos resultados acima, vemos que as $\varphi_{mn}(x, y)$ não são, em geral, auto-funções dos operadores do grupo, em particular de $\hat{C}_4$. No entanto, podemos construir funções que sejam auto-estados tanto de $H^{(0)}$ como de $\hat{C}_4$, o gerador do grupo.

Suponhamos que uma ψ_{mn}^λ seja auto-estado de $H^{(0)} = H_x^{(0)} + H_y^{(0)}$ com energia E_{mn} e auto-função de $\hat{C}_4$ com auto-valor λ . Podemos mostrar que os valores possíveis para λ são ± 1 e $\pm i$. Isso pois:

$$\begin{aligned}\hat{C}_4\psi_{mn}^\lambda &= \lambda\psi_{mn}^\lambda \Rightarrow (\hat{C}_4)^4\psi_{mn}^\lambda = \lambda^4\psi_{mn}^\lambda \\ \psi_{mn}^\lambda &= \lambda^4\psi_{mn}^\lambda \Rightarrow \lambda^4 = 1\end{aligned}\tag{2.15}$$

uma vez que $(\hat{C}_4)^4 = E$.

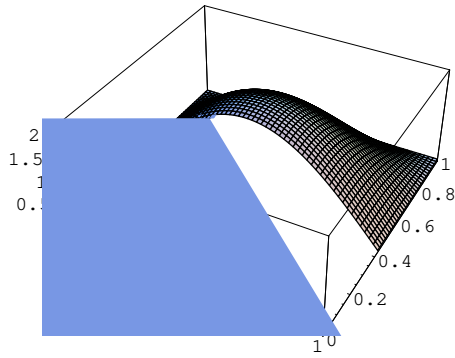
Assim, $\hat{H}^{(0)}$ e $\hat{C}_4$ formam um Conjunto Completo de Operadores Comutantes e o espectro fica separado em quatro *classes de simetria* em relação à aplicação de $\hat{C}_4$. Utilizando (2.13) podemos construir explicitamente os auto-estados ψ_{mn}^λ :

$$\begin{aligned}\psi_{mn}^{(+1)}(x, y) &= \begin{cases} \varphi_{mn}(x, y) & \text{se } n = m \text{ (ímpar)} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{mn}(x, y)(\pm)\varphi_{nm}(x, y)) & \text{se } n \neq m; +(-) \text{ se } n, m \text{ ímpar (par)} \end{cases} \\ \psi_{mn}^{(-1)}(x, y) &= \begin{cases} \varphi_{mn}(x, y) & \text{se } n = m \text{ (par)} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{mn}(x, y)(\mp)\varphi_{nm}(x, y)) & \text{se } n \neq m; -(+) \text{ se } n, m \text{ ímpar (par)} \end{cases} \\ \psi_{mn}^{(+i)}(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{mn}(x, y) \pm i\varphi_{nm}(x, y)) + (-) \text{ se } n, m \text{ ímpar (par)} \\ \psi_{mn}^{(-i)}(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_{mn}(x, y) \mp i\varphi_{nm}(x, y)) - (+) \text{ se } n, m \text{ ímpar (par)}\end{aligned}\tag{2.16}$$

ou, em uma forma compacta:

$$\psi_l^{(C)} = F_l^{(C)} \left(\varphi_l + S_l^{(C)} \varphi_{\bar{l}} \right) \quad (2.17)$$

onde l representa o índice (m, n) ($\bar{l} = (n, m)$), $F_l^{(C)}$ pode ser 1 ou $\frac{1}{\sqrt{2}}$ e $S_l^{(C)}$ pode ser $0; \pm 1; \pm i$ dependendo da classe de simetria (C) e de l (se (m, n) são pares/ímpares e se $m = n$ ou $m \neq n$). Mostramos alguns exemplos na figura 2.2:



	$\hat{E}$	$\hat{C}_4$	$\hat{C}_2$	$\hat{C}_4^3$
(+1)	1	1	1	1
(-1)	1	-1	1	-1
(+i)	1	+i	-1	-i
(-i)	1	-i	-1	+i

Tabela 2.1: Tabela de caracteres do Grupo $\mathcal{C}_4$

Os auto-estados (2.16) tem simetria bem definida em relação às operações de $\mathcal{C}_4$ mas, na sua construção, tivemos que distinguir os casos onde m e n são ambos pares ou ambos ímpares ou um par e o outro ímpar. Isso, em última análise, é um reflexo do fato de que $\mathcal{C}_4$ é menos simétrico que o grupo do Hamiltoniano sem campo, o $\mathcal{C}_{4v}$. Na verdade, as funções definidas por (2.16) podem ser separadas em auto-funções dos operadores de reflexão $\hat{\sigma}_v$ e $\hat{\sigma}'_v = \hat{C}_4 \hat{\sigma}_v$, pertencentes a $\mathcal{C}_{4v}$ mas não a $\mathcal{C}_4$.

Isso pode ser ilustrado pelo seguinte exemplo: tanto $\psi_{13}^{(+1)}$ como $\psi_{24}^{(+1)}$ são auto-funções do operador $\hat{C}_4$ com autovalor +1. No entanto, se aplicarmos uma reflexão $\hat{\sigma}_v$ que troca x por y (ou, equivalentemente, m por n) temos:

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}_v \psi_{13}^{(+1)} &\rightarrow \psi_{31}^{(+1)} = +\psi_{13}^{(+1)} \\ \hat{\sigma}_v \psi_{24}^{(+1)} &\rightarrow \psi_{42}^{(+1)} = -\psi_{24}^{(+1)}\end{aligned}\tag{2.18}$$

de modo que $\psi_{13}^{(+1)}$ e $\psi_{24}^{(+1)}$ também são auto-estados de $\hat{\sigma}_v$, mas com autovalores diferentes.

Mostramos a seguir a tabela de caracteres de $\mathcal{C}_{4v}$ com os auto-valores das funções $\psi_{mn}^{(C)}$ sob a aplicação dos elementos do grupo. A notação (2) indica que existem dois elementos do grupo com os mesmos caracteres, de modo que ambos pertencem à mesma *sub-classe* do grupo [16].

	$\hat{E}$	$\hat{C}_4(2)$	$\hat{C}_2$	$\hat{\sigma}_v(2)$	$\hat{\sigma}'_v(2)$	Função-base
A_1	1	1	1	1	1	(+1) mn ímpares
A_2	1	1	1	-1	-1	(+1) mn pares
B_1	1	-1	1	1	-1	(-1) mn ímpares
B_2	1	-1	1	-1	1	(-1) pares
E	2	0	-2	0	0	[(+i)+(-i)]

Tabela 2.2: Tabela de caracteres do Grupo $\mathcal{C}_{4v}$. As representações A_1, A_2, B_1 e B_2 são unidimensionais e correspondem a sub-divisões das classes (+1) e (-1) do grupo $\mathcal{C}_4$. A representação bi-dimensional E (real) corresponde a uma “soma” das representações conjugadas (+i) e (-i) (complexas)

2.2 Duas partículas idênticas

Se temos duas partículas idênticas (não interagentes) de massa m confinadas no interior do Biliar Quadrado, a Hamiltoniana será simplesmente:

$$H_{2p}^{(0)} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + V_{\text{square}}(\mathbf{r}_1) + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V_{\text{square}}(\mathbf{r}_2) \quad (2.19)$$

Os auto-estados de duas partículas de $H_{2p}^{(0)}$ podem ser construídos através da composição dos auto-estados de uma partícula:

$$\begin{aligned} |\varphi_{m_1 n_1 m_2 n_2} > &= |\varphi_{m_1 n_1} > \otimes |\varphi_{m_2 n_2} > \\ \hat{H}_{2p}^{(0)} |\varphi_{m_1 n_1 m_2 n_2} > &= (E_{m_1 n_1} + E_{m_2 n_2}) |\varphi_{m_1 n_1 m_2 n_2} > \end{aligned} \quad (2.20)$$

No entanto, a função de onda total de duas partículas deve ser totalmente simétrica (no caso de bósons) ou totalmente anti-simétrica (no caso de férmions) frente à permutação das duas partículas. Em particular, se temos dois elétrons confinados, a função de onda total será anti-simétrica e será um produto de uma parte orbital e de uma parte de spin:

$$\Psi(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) = \chi_{\text{spin}} \otimes \psi(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2) \quad (2.21)$$

A função de onda de spin pode ser simétrica ou antisimétrica frente à permutação dos dois elétrons. Como o autovalor de S^2 no caso do elétron é $\frac{3\hbar^2}{4}$, existem apenas dois autovalores possíveis para $\hat{S}_z$ ($\pm\frac{1}{2}$) e os estados de spin simétrico e antisimétrico são, respectivamente, um *triplete* e um *singlete* de spin:

$$\begin{array}{cc} \text{Tripleto} & \text{Singlete} \\ | \uparrow \uparrow > & \\ \frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow \downarrow > + | \downarrow \uparrow >) & \frac{1}{\sqrt{2}} (| \uparrow \downarrow > - | \downarrow \uparrow >) \\ | \downarrow \downarrow > & \end{array} \quad (2.22)$$

Assim, a função de onda orbital $\psi(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2)$ será necessariamente antisimétrica (A) se o sistema estiver no estado triplete de spin e simétrica (S) se o estado de spin for o singlete.

O grupo de simetria de $H_{2p}^{(0)}$ será dado pelo produto tensorial $\mathcal{C}_4 \otimes \mathcal{C}_4$ entre os grupos de simetria dos Hamiltonianos de uma partícula. Os elementos de $\mathcal{C}_4 \otimes \mathcal{C}_4$ serão por sua vez produtos tensoriais dos elementos de $\mathcal{C}_4$ ($E \otimes E, E \otimes C_4, C_4 \otimes C_4$ e etc.).

É possível classificar a função de duas partículas em classes de simetria frente à operação de $\mathcal{C}_4 \otimes \mathcal{C}_4$, de modo análogo ao que fizemos anteriormente. Considere dois operadores de uma partícula $\hat{A}_1$ e $\hat{A}_2$, pertencentes a $\mathcal{C}_4$ com respectivos autovalores λ_1 e λ_2 . Temos

$$\hat{A}_1 \otimes \hat{A}_2 |\psi_1 \psi_2\rangle = \hat{A}_1 |\psi_1\rangle \hat{A}_2 |\psi_2\rangle = \lambda_1 \lambda_2 |\psi_1 \psi_2\rangle \equiv \lambda_{12} |\psi_1 \psi_2\rangle \quad (2.23)$$

A classe de simetria da função de duas partículas será dada pelo “produto” das classes de simetria de uma partícula. Essa separação em classes dos auto-estados de duas partículas será importante no cálculo dos elementos de Matriz de potencial de interação, uma vez que o potencial não acopla as diferentes classes de simetria.

A “regra” para se obter a classe de simetria de duas partículas pode ser ilustrada pela seguinte tabela:

Classes de uma partícula	Classe de duas partículas	
$(+1)(+1), (-1)(-1), (+i)(-i)$	$\longrightarrow$	$(+1)$
$(+1)(-1), (+i)(+i), (-i)(-i)$	$\longrightarrow$	(-1)
$(+1)(+i), (-1)(-i)$	$\longrightarrow$	$(+i)$
$(+1)(-i), (-1)(+i)$	$\longrightarrow$	$(-i)$

(2.24)

Usando a notação introduzida em (2.17), podemos escrever um auto-estado geral de $H_{2p}^{(0)}$ na seguinte forma:

$$\psi_{l_1 l_2}^{S,A,(\text{Classe 1} \otimes \text{Classe 2})}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_{l_1}^{(\text{Classe 1})}(\vec{r}_1) \psi_{l_2}^{(\text{Classe 2})}(\vec{r}_2) \pm \psi_{l_1}^{(\text{Classe 1})}(\vec{r}_2) \psi_{l_2}^{(\text{Classe 2})}(\vec{r}_1) \right) \quad (2.25)$$

onde (S) e (A) indica um funções orbitais simétrica ou antisimétricas (estado de spin singleto ou tripleto, respectivamente).

Capítulo 3

O potencial de interação

Neste capítulo abordaremos os efeitos de interação entre os elétrons confinados no Bilhar Quadrado. Escolhemos um potencial do tipo “Yukawa”, exponencialmente suprimido para distâncias longas, de modo a levar em conta os efeitos de blindagem (“screening”) que limitam o alcance efetivo da interação em um gás de elétrons. Apresentaremos os cálculos da diagonalização do Hamiltoniano (2.19) acrescido de um termo de interação de duas partículas.

3.1 Dois elétrons interagentes no Quadrado

Consideramos o caso de dois elétrons confinados em um Bilhar Quadrado com uma interação repulsiva dada por um potencial de Yukawa:

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = V_0 \frac{e^{-\alpha|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (3.1)$$

onde V_0 e α são parâmetros de intensidade e de alcance. O sistema será então descrito pelo Hamiltoniano (2.19) acrescido de um termo de interação:

$$H_{2p} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m} + V_{\text{square}}(\mathbf{r}_1) + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + V_{\text{square}}(\mathbf{r}_2) + V_0 \frac{e^{-\alpha|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (3.2)$$

A motivação física para a escolha de um potencial de interação tipo Yukawa vem da blindagem exponencial do potencial de uma carga pontual em um meio carregado na aproximação de Thomas-Fermi em 3 dimensões. No apêndice B, mostramos a derivação deste resultado. No entanto, embora estejamos utilizando esse tipo de modelamento para a interação eletrônica blindada, é importante ressaltar que, estritamente falando, *não* estamos na aproximação de Thomas-Fermi. Ando et al. [18] mostram que a blindagem

de Thomas-Fermi em duas dimensões tem uma dependência com $\frac{1}{r^3}$ no limite assintótico de $r \rightarrow \infty$, uma queda mais lenta que uma exponencial pura.

Existem, no entanto, outras motivações que nos levaram a utilizar um potencial (3.1) em detrimento de outros tipo de blindagem (tais como uma potência de $\frac{1}{r}$ ou algo do tipo $\frac{1}{\sqrt{r^2+r_0^2}}$). Em primeiro lugar, o potencial de Yukawa tem um parâmetro de alcance bem definido, que nos permite um estudo mais objetivo dos efeitos do alcance da interação. Além disso, veremos que o formato exponencial traz vantagens técnicas no cálculo dos elementos de matriz na base de auto-funções do problema não interagente, evitando divergências em $r \rightarrow 0$ e permitindo um cálculo exato das integrais.

3.1.1 Elementos de matriz

Para diagonalizar o Hamiltoniano $\hat{H}_{2p}$ o método mais direto é calcular os elementos de Matriz do potencial em na base de auto-estados (2.25) de $\hat{H}_{2p}^{(0)}$:

$$V_{l_1 l_2 l'_1 l'_2} = \left\langle \psi_{l_1 l_2}^{S,A,(C_1 \otimes C_2)} | \hat{V} | \psi_{l'_1 l'_2}^{S,A,(C_1' \otimes C_2')} \right\rangle \quad (3.3)$$

onde $l_i \equiv (n_i, n_i)$ e (C_i) indicam os índices e a classe de simetria dos respectivos estados de uma partícula que compõem um estado de duas partículas simétrico (S) ou anti-simétrico (A).

Como as funções $\psi^{S,A}$ são simétricas ou anti-simétricas frente à troca das duas partículas, o elemento de matriz (3.3) terá um termo “direto” e um termo “de troca” diferentes entre si:

$$V_{l_1 l_2 l'_1 l'_2} = V_{l_1 l_2 l'_1 l'_2}^{\text{Direct}} \pm V_{l_1 l_2 l'_1 l'_2}^{\text{Exchange}} \quad (3.4)$$

onde

$$\begin{aligned} V_{l_1 l_2 l'_1 l'_2}^{\text{Direct}} &= \int \psi_{m_1 n_1}^{*(C_1)}(\vec{r}_1) \psi_{m_2 n_2}^{*(C_2)}(\vec{r}_2) V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \psi_{m'_1 n'_1}^{(C_1')}(\vec{r}_1) \psi_{m'_2 n'_2}^{(C_2')}(\vec{r}_2) d^2 \vec{r}_1 d^2 \vec{r}_2 \\ V_{l_1 l_2 l'_1 l'_2}^{\text{Exchange}} &= \int \psi_{m_1 n_1}^{*(C_1)}(\vec{r}_1) \psi_{m_2 n_2}^{*(C_2)}(\vec{r}_2) V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \psi_{m'_1 n'_1}^{(C_1')}(\vec{r}_2) \psi_{m'_2 n'_2}^{(C_2')}(\vec{r}_1) d^2 \vec{r}_1 d^2 \vec{r}_2 \end{aligned} \quad (3.5)$$

As expressões analíticas para os estados de uma partícula $\psi_{mn}^{(C)}$ em termos de funções senoidais são dadas em (2.16) e, em uma forma compacta, em (2.17). Usando a notação de (2.17), temos a seguinte expressão geral para os elementos de matriz do tipo (3.5):

$$\begin{aligned}
\langle \psi_1^A \psi_2^B | \hat{V} | \psi_1^C \psi_2^D \rangle &= F_1^{(A)} F_2^{(B)} F_3^{(C)} F_4^{(D)} \times \\
&\left((1 + S_1^{(A)} S_2^{(B)} S_{1'}^{(C)} S_{2'}^{(D)}) \langle l_1 l_2 | \hat{V} | l'_1 l'_2 \rangle + (S_1^{(A)*} S_2^{(B)*} S_{1'}^{(C)*} + S_{2'}^{(D)}) \langle l_1 l_2 | \hat{V} | l'_1 \bar{l}'_2 \rangle \right. \\
&+ (S_1^{(A)*} S_2^{(B)*} S_{2'}^{(D)*} + S_{1'}^{(C)}) \langle l_1 l_2 | \hat{V} | \bar{l}'_1 l'_2 \rangle + (S_1^{(A)*} S_{1'}^{(C)*} S_{2'}^{(D)*} + S_2^{(B)}) \langle l_1 \bar{l}_2 | \hat{V} | l'_1 l'_2 \rangle \\
&+ (S_2^{(B)*} S_{1'}^{(C)*} S_{2'}^{(D)*} + S_1^{(A)}) \langle \bar{l}_1 l_2 | \hat{V} | l'_1 l'_2 \rangle + (S_1^{(A)*} S_2^{(B)*} + S_{1'}^{(C)} S_{2'}^{(D)}) \langle l_1 l_2 | \hat{V} | \bar{l}'_1 \bar{l}'_2 \rangle \\
&\left. + (S_1^{(A)*} S_{1'}^{(C)*} + S_2^{(B)} S_{2'}^{(D)}) \langle l_1 \bar{l}_2 | \hat{V} | l'_1 \bar{l}'_2 \rangle + (S_2^{(B)*} S_{1'}^{(C)*} + S_1^{(A)} S_{2'}^{(D)}) \langle \bar{l}_1 l_2 | \hat{V} | l'_1 \bar{l}'_2 \rangle \right)
\end{aligned} \tag{3.6}$$

onde $\bar{l} \equiv (n, m)$ se $l = (m, n)$ e

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | l_1 l_2 \rangle &= \varphi_{m_1 n_1}(\mathbf{r}_1) \varphi_{m_2 n_2}(\mathbf{r}_2) \\
\varphi_{mn}(\mathbf{r}) &= \frac{2}{L} \sin \frac{m\pi x}{L} \sin \frac{n\pi y}{L}
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Desta forma, cada um dos termos $\langle l_1 l_2 | \hat{V} | l'_1 l'_2 \rangle$ é uma integral em um espaço de configurações de quatro dimensões na forma:

$$\begin{aligned}
\langle l_1 l_2 | \hat{V} | l'_1 l'_2 \rangle &= \int_{\text{Square}} \sin \frac{\pi m_1 x_1}{L} \sin \frac{\pi n_1 y_1}{L} \sin \frac{\pi m_2 x_2}{L} \sin \frac{\pi n_2 y_2}{L} \times \\
&V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \times \\
&\sin \frac{\pi m'_1 x_1}{L} \sin \frac{\pi n'_1 y_1}{L} \sin \frac{\pi m'_2 x_2}{L} \sin \frac{\pi n'_2 y_2}{L} d^2 \mathbf{r}_1 d^2 \mathbf{r}_2
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Vemos que o potencial $V(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2)$ acopla as coordenadas espaciais de modo que a integração de (3.8) não é trivial. É possível, no entanto, reduzir (3.8) a uma soma de integrais unidimensionais no ângulo relativo θ que, embora complicadas, podem ser calculadas numericamente. Tal procedimento será descrito em detalhe na próxima seção. Os resultados para a forma das integrais unidimensionais estão sumarizados nas equações (3.23), (3.25), (3.26) e (3.27).

3.2 O cálculo de $\langle l_1 l_2 | \hat{V} | l'_1 l'_2 \rangle$

Para calcularmos a integral (3.8), reescrevemos o integrando em coordenadas relativa e de centro-de-massa. Como $m_1 = m_2 \equiv 1$, temos:

$$\begin{cases} \vec{r} &= \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \\ \vec{R} &= \frac{1}{2}(\vec{R}_2 + \vec{R}_1) \end{cases} \tag{3.9}$$

O senos que aparecem em φ_{mn} pode ser escritos como uma soma de exponenciais complexas:

$$\begin{aligned}\sin \frac{m\pi x_i}{L} &= \sum_{\epsilon_i=-1}^1 \frac{\epsilon_i e^{i\epsilon_i \frac{m\pi x_i}{L}}}{2i} \\ \sin \frac{n\pi y_i}{L} &= \sum_{\eta_i=-1}^1 \frac{\eta_i e^{i\eta_i \frac{n\pi y_i}{L}}}{2i}\end{aligned}\quad (3.10)$$

e o integrando fica:

$$\begin{aligned}\sin \frac{\pi m_1 x_1}{L} \sin \frac{\pi n_1 y_1}{L} \sin \frac{\pi m_2 x_2}{L} \sin \frac{\pi n_2 y_2}{L} V(|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|) \sin \frac{\pi m'_1 x_1}{L} \sin \frac{\pi n'_1 y_1}{L} \sin \frac{\pi m'_2 x_2}{L} \sin \frac{\pi n'_2 y_2}{L} = \\ \sum_{\epsilon_i \eta_i} \frac{(\epsilon_1 \dots \epsilon_2)(\eta_1 \dots \eta_2)}{256} \left(e^{i(\alpha_1 + \alpha_2)X} e^{i(\beta_1 + \beta_2)Y} e^{i(\alpha_2 - \alpha_1)\frac{\pi}{2}} e^{i(\beta_2 - \beta_1)\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-\alpha r}}{r} \right)\end{aligned}\quad (3.11)$$

onde definimos

$$\begin{aligned}\alpha_1 &\equiv \frac{\pi m_1}{L} \epsilon_1 + \frac{\pi m'_1}{L} \epsilon'_1 \\ \alpha_2 &\equiv \frac{\pi m_2}{L} \epsilon_2 + \frac{\pi m'_2}{L} \epsilon'_2 \\ \beta_1 &\equiv \frac{\pi n_1}{L} \eta_1 + \frac{\pi n'_1}{L} \eta'_1 \\ \beta_2 &\equiv \frac{\pi n_2}{L} \eta_2 + \frac{\pi n'_2}{L} \eta'_2\end{aligned}\quad (3.12)$$

Podemos assim calcular as integrais nas coordenadas de centro de massa. No entanto, não há um desacoplamento total entre (X, Y) e (x, y) pois os limites de integração de (X, Y) dependem de (x, y) pelo fato de termos uma fronteira quadrada. Por simplicidade, tomaremos $L \equiv 1$ (ou, equivalentemente, introduzimos um escalonamento nas variáveis: $\frac{r_i}{L} \rightarrow r'_i$) no resto do desenvolvimento.

Os limites de integração no espaço de configurações ficam:

$$\int_0^1 dx_1 \int_0^1 dx_2 \rightarrow \left(\int_{-1}^0 dx \int_{-\frac{x}{2}}^{1+\frac{x}{2}} dX + \int_0^1 dx \int_{\frac{x}{2}}^{1-\frac{x}{2}} dX \right) \quad (3.13)$$

para as variáveis x e X (ilustrados na figura 3.1) e

$$\int_0^1 dy_1 \int_0^1 dy_2 \rightarrow \left(\int_{-1}^0 dy \int_{-\frac{y}{2}}^{1+\frac{y}{2}} dY + \int_0^1 dy \int_{\frac{y}{2}}^{1-\frac{y}{2}} dY \right) \quad (3.14)$$

para y e Y .

Isso nos leva a quatro regiões de integração no plano (x, y) (os quadrantes), representadas por $k = 1, 2, 3, 4$ na figura 3.2. Para cada k , temos uma integral do tipo:

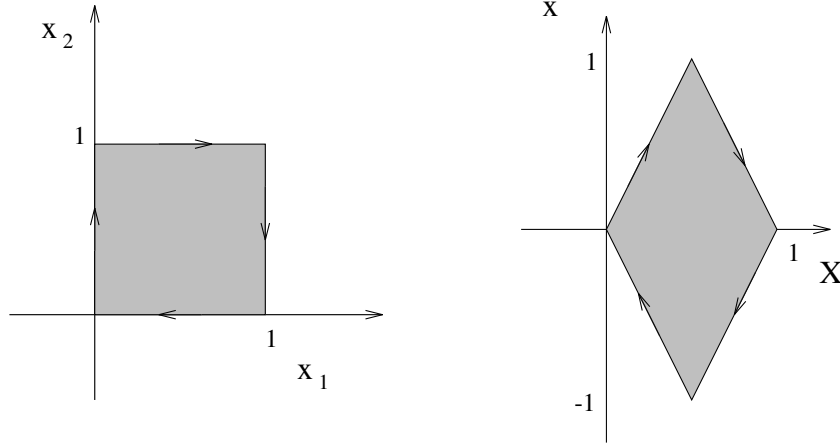


Figura 3.1: Transformação de Coordenadas: $(x_1, x_2) \rightarrow (x, X)$ mostrando os limites de integração

$$I_k = \sum_{\epsilon_i \eta_i} \frac{(\epsilon_1 \cdots \epsilon'_2)(\eta_1 \cdots \eta'_2)}{256} \left(\int dA_k e^{i(\alpha_1 + \alpha_2)X} e^{i(\beta_1 + \beta_2)Y} e^{i(\alpha_2 - \alpha_1)\frac{x}{2}} e^{i(\beta_2 - \beta_1)\frac{y}{2}} \frac{e^{-\alpha r}}{r} \right) \quad (3.15)$$

com $\int dA_k$ dado por

$$\int dA_k = \int_{x_0}^{x_1} dx \int_{y_0}^{y_1} dy \int_{\frac{a_0 x}{2}}^{\frac{-a_0 x}{2} + 1} dX \int_{\frac{c_0 y}{2}}^{\frac{-c_0 y}{2} + 1} dY \quad (3.16)$$

e os limites de integração dependem de k e estão listados na Tabela 3.1.

	x_0	x_1	y_0	y_1	a_0	c_0
$k = 1$	0	1	0	1	1	1
$k = 2$	-1	0	0	1	-1	1
$k = 3$	-1	0	-1	0	-1	-1
$k = 4$	0	1	-1	0	1	-1

Tabela 3.1: Limites de integração em cada quadrante k

A integral nas coordenadas de centro-de-massa nos leva a:

$$I_k = \sum_{\epsilon_i \eta_i} \frac{(\epsilon_1 \cdots \epsilon'_2)(\eta_1 \cdots \eta'_2)}{256} \left\{ \int_{x_0}^{x_1} \int_{y_0}^{y_1} f(x, y) \frac{e^{-\alpha \sqrt{x^2 + y^2}}}{\sqrt{x^2 + y^2}} dx dy \right\} \quad (3.17)$$

onde a forma exata de $f(x, y)$ depende do fato de $(\alpha_1 + \alpha_2)$ ou $(\beta_1 + \beta_2)$ serem iguais a zero ou não, o que é possível em alguns casos pela definição (3.12).

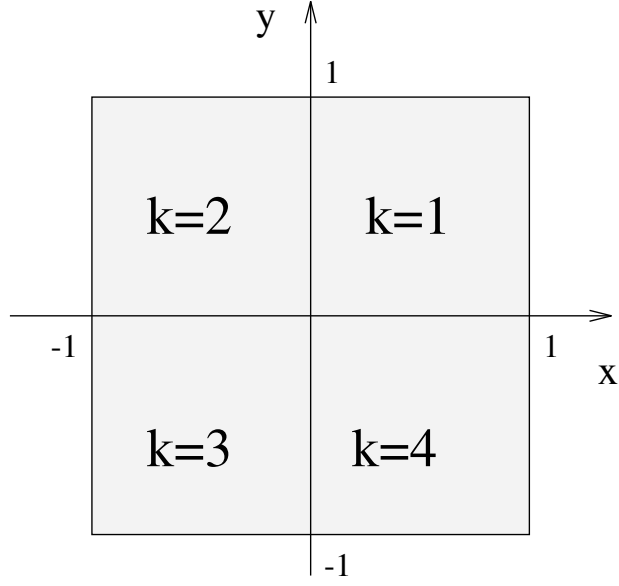


Figura 3.2: Limites de integração no plano de coordenadas relativas (x, y)

No entanto, $f(x, y)$ terá essencialmente uma dependência exponencial nas variáveis x and y .

Fazendo uma transformação $(x, y) \rightarrow (r, \theta)$ para coordenadas relativas polares, temos:

$$I_k = \sum_{\epsilon_i \eta_i} \frac{(\epsilon_1 \cdots \epsilon'_2)(\eta_1 \cdots \eta'_2)}{256} \left\{ \int_{\theta_0}^{\theta_1} \int_0^{r_1(\theta)} f(r, \theta) e^{-\alpha r} dr d\theta \right\} \quad (3.18)$$

e os limites de integração são dados na tabela 3.2.

A integral em r pode ser facilmente calculada uma vez que o integrando é essencialmente uma exponencial:

$$\int_0^{r_1(\theta)} f(r, \theta) e^{-\alpha r} dr = F_\alpha(\theta) \quad (3.19)$$

o que nos deixa com um conjunto de integrais unidimensionais no ângulo relativo θ :

$$I_k = \sum_{\epsilon_i \eta_i} \frac{(\epsilon_1 \cdots \epsilon'_2)(\eta_1 \cdots \eta'_2)}{256} \left\{ \int_{\theta_0}^{\theta_1} F_\alpha(\theta) d\theta \right\} \quad (3.20)$$

		$r_1(\theta)$
$k = 1$	$0 < \theta < \frac{\pi}{4}$	$\frac{1}{\cos \theta}$
	$\frac{\pi}{4} < \theta < \frac{\pi}{2}$	$\frac{1}{\sin \theta}$
$k = 2$	$\frac{\pi}{2} < \theta < \frac{3\pi}{4}$	$\frac{1}{\sin \theta}$
	$\frac{3\pi}{4} < \theta < \pi$	$\frac{-1}{\cos \theta}$
$k = 3$	$\pi < \theta < \frac{5\pi}{4}$	$\frac{-1}{\cos \theta}$
	$\frac{5\pi}{4} < \theta < \frac{3\pi}{2}$	$\frac{-1}{\sin \theta}$
$k = 4$	$\frac{3\pi}{2} < \theta < \frac{7\pi}{4}$	$\frac{-1}{\sin \theta}$
	$\frac{7\pi}{4} < \theta < 2\pi$	$\frac{1}{\cos \theta}$

Tabela 3.2:

onde a forma do integrando $F_\alpha(\theta)$ depende dos índices $l_1 l_2 l'_1 l'_2$. Apresentaremos a seguir os resultados para (3.20) para os casos de $(\alpha_1 + \alpha_2)$ e/ou $(\beta_1 + \beta_2)$ iguais ou não a zero.

3.2.1 O caso $(\alpha_1 + \alpha_2), (\beta_1 + \beta_2) \neq 0$

Para $(\alpha_1 + \alpha_2)$ e $(\beta_1 + \beta_2)$ não-nulos, temos:

$$f(x, y) = \frac{(-1)}{(\alpha_1 + \alpha_2)(\beta_1 + \beta_2)} \left[e^{i(\alpha_1 + \alpha_2)} e^{\frac{ix}{2} A_{a_0}(\alpha_1, \alpha_2)} - e^{\frac{-ix}{2} A_{a_0}(\alpha_2, \alpha_1)} \right] \times \quad (3.21)$$

$$\left[e^{i(\beta_1 + \beta_2)} e^{\frac{iy}{2} A_{c_0}(\beta_1, \beta_2)} - e^{\frac{-iy}{2} A_{c_0}(\beta_2, \beta_1)} \right]$$

onde

$$A_{a_0}(\alpha_1, \alpha_2) \equiv \alpha_2(1 - a_0) - \alpha_1(1 + a_0) \quad (3.22)$$

e x_0, x_1, y_0, y_1, a_0 e c_0 são dados pela Tabela 3.1.

Passando para coordenadas polares relativas, o cálculo de $F_\alpha(\theta)$ é direto, uma vez que a dependência de $f(r, \theta)$ com r é exponencial. O resultado é:

$$F_\alpha(\theta) = \frac{(-1)}{(\alpha_1 + \alpha_2)(\beta_1 + \beta_2)} \left[e^{(\alpha_1 + \alpha_2 + \beta_1 + \beta_2)} \frac{(e^{Z_a(\theta)r_1(\theta)} - 1)}{Z_a(\theta)} + \frac{(e^{Z_b(\theta)r_1(\theta)} - 1)}{Z_b(\theta)} \right. \quad (3.23)$$

$$\left. + e^{(\alpha_1 + \alpha_2)} \frac{(1 - e^{Z_c(\theta)r_1(\theta)})}{Z_c(\theta)} + e^{(\beta_1 + \beta_2)} \frac{(1 - e^{Z_d(\theta)r_1(\theta)})}{Z_d(\theta)} \right]$$

onde Z_a, Z_b, Z_c and Z_d são dados por:

$$\begin{aligned}
Z_a(\theta) &= -\alpha + \frac{i}{2} (A_{a_0}(\alpha_1, \alpha_2) \cos \theta + A_{c_0}(\beta_1, \beta_2) \sin \theta) \\
Z_b(\theta) &= -\alpha - \frac{i}{2} (A_{a_0}(\alpha_2, \alpha_1) \cos \theta + A_{c_0}(\beta_2, \beta_1) \sin \theta) \\
Z_c(\theta) &= -\alpha + \frac{i}{2} (A_{a_0}(\alpha_1, \alpha_2) \cos \theta - A_{c_0}(\beta_2, \beta_1) \sin \theta) \\
Z_d(\theta) &= -\alpha - \frac{i}{2} (A_{a_0}(\alpha_2, \alpha_1) \cos \theta - A_{c_0}(\beta_1, \beta_2) \sin \theta)
\end{aligned} \tag{3.24}$$

3.2.2 O caso $(\alpha_1 + \alpha_2) = 0$ e/ou $(\beta_1 + \beta_2) = 0$

Para os casos $(\alpha_1 + \alpha_2) = 0$ e/ou $(\beta_1 + \beta_2) = 0$ a dependência de $f(r, \theta)$ em r não mais será uma exponencial pura pois, ao realizarmos as integrais nas coordenadas de centro-de-massa, teremos termos com potências de r no integrando uma vez que alguma das exponenciais em (3.15) será igual a 1.

As expressões para $F_\alpha(\theta)$ para as três combinações possíveis de $(\alpha_1 + \alpha_2) = 0$ e/ou $(\beta_1 + \beta_2) = 0$ estão listadas a seguir:

- $(\alpha_1 + \alpha_2) = (\beta_1 + \beta_2) = 0$

$$\begin{aligned}
F_\alpha(\theta) &= \frac{(e^{z_a(\theta)r_1(\theta)} - 1)}{z_a(\theta)} - \frac{(a_0 \cos \theta + c_0 \sin \theta)}{z_a^2(\theta)} \left[(e^{z_a(\theta)r_1(\theta)} (z_a(\theta)r_1(\theta) - 1) + 1) \right] \\
&\quad + \frac{(a_0 c_0 \cos \theta \sin \theta)}{z_a^3(\theta)} [(e^{z_a r_1} (z_a^2 r_1^2 - 2z_a r_1 + 2) - 2)]
\end{aligned} \tag{3.25}$$

- $(\alpha_1 + \alpha_2) = 0$ e $(\beta_1 + \beta_2) \neq 0$

$$\begin{aligned}
F_\alpha(\theta) &= e^{(\beta_1 + \beta_2)} \frac{(e^{z_b(\theta)r_1(\theta)} - 1)}{z_b(\theta)} - \frac{(e^{z_c(\theta)r_1(\theta)} - 1)}{z_c(\theta)} - (a_0 \cos \theta) \times \\
&\quad \times \left[e^{(\beta_1 + \beta_2)} \frac{(e^{z_b(\theta)r_1(\theta)} (z_b(\theta)r_1(\theta) - 1) + 1)}{z_b^2(\theta)} - \frac{(e^{z_c(\theta)r_1(\theta)} (z_c(\theta)r_1(\theta) - 1) + 1)}{z_c^2(\theta)} \right]
\end{aligned} \tag{3.26}$$

- $(\alpha_1 + \alpha_2) \neq 0$ e $(\beta_1 + \beta_2) = 0$

$$\begin{aligned}
F_\alpha(\theta) &= e^{(\alpha_1 + \alpha_2)} \frac{(e^{z_d(\theta)r_1(\theta)} - 1)}{z_d(\theta)} - \frac{(e^{z_e(\theta)r_1(\theta)} - 1)}{z_e(\theta)} - (c_0 \sin \theta) \times \\
&\quad \times \left[e^{(\alpha_1 + \alpha_2)} \frac{(e^{z_d(\theta)r_1(\theta)} (z_d(\theta)r_1(\theta) - 1) + 1)}{z_d^2(\theta)} - \frac{(e^{z_e(\theta)r_1(\theta)} (z_e(\theta)r_1(\theta) - 1) + 1)}{z_e^2(\theta)} \right]
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Aqui a_0, c_0 e $r_1(\theta)$ são dadas pelas tabelas 3.1 e 3.2 e os $z_i(\theta)$, ($i = a, b, c, d, e$) são dados por:

$$\begin{aligned} z_a(\theta) &\equiv -\alpha + i(\alpha_2 \cos \theta + \beta_2 \sin \theta) \\ z_b(\theta) &\equiv -\alpha + i(\alpha_2 \cos \theta + \frac{1}{2}A_{c_0}(\beta_1, \beta_2) \sin \theta) \\ z_c(\theta) &\equiv -\alpha + i(\alpha_2 \cos \theta - \frac{1}{2}A_{c_0}(\beta_2, \beta_1) \sin \theta) \\ z_d(\theta) &\equiv -\alpha + i(\beta_2 \sin \theta + \frac{1}{2}A_{a_0}(\alpha_1, \alpha_2) \cos \theta) \\ z_e(\theta) &\equiv -\alpha + i(\beta_2 \sin \theta - \frac{1}{2}A_{a_0}(\alpha_2, \alpha_1) \cos \theta) \end{aligned} \quad (3.28)$$

No caso Coulombiano puro ($\alpha = 0$), a forma de $F_\alpha(\theta)$ é ligeiramente modificada pois, nesse caso, é possível que um ou mais dos $Z_i(\theta)$ das equações (3.23) ou dos $z_i(\theta)$ das equações (3.25), (3.26) e (3.27) sejam nulos. Quando isto ocorre, tem-se:

$$\begin{aligned} \int_0^{r_1(\theta)} e^{z_i r} dr &= \int_0^{r_1(\theta)} dr = r_1(\theta) \\ \int_0^{r_1(\theta)} e^{z_i r} r dr &= \int_0^{r_1(\theta)} r dr = \frac{r_1(\theta)^2}{2} \\ \int_0^{r_1(\theta)} e^{z_i r} r^2 dr &= \int_0^{r_1(\theta)} r^2 dr = \frac{r_1(\theta)^3}{3} \end{aligned} \quad (3.29)$$

Assim, se $\alpha = 0$, sempre que tivermos $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2, a_0$ e c_0 tais que algum dos z_i ou Z_i se anule, devemos então fazer as substituições adequadas nas equações (3.23), (3.25), (3.26) e (3.27):

$$\begin{aligned} \frac{(e^{z_i r_1} - 1)}{z_i} &\leftrightarrow r_1(\theta) \\ \frac{(e^{z_i r_1} (z_i r_1 - 1) + 1)}{z_i^2} &\leftrightarrow \frac{(r_1(\theta))^2}{2} \\ \frac{(e^{z_i r_1} (z_i^2 r_1^2 - 2 z_i r_1 + 2) - 2)}{z_i^3} &\leftrightarrow \frac{(r_1(\theta))^3}{3} \end{aligned} \quad (3.30)$$

As integrais em θ foram calculadas numericamente com o auxílio da subrotina **trapzd** em [19]. O parâmetro de convergência utilizado no cálculo da integral I no passo n foi $(I_{n+1} - I_n)/I_n < 10^{-6}$ com $n_{\max} = 20$. Cada elemento de matriz do potencial envolve uma média de 32 integrais em θ , o que faz com que o maior esforço computacional envolvido seja com o cálculo dos elementos de matriz e não com a diagonalização da matriz propriamente dita.

3.3 Níveis de Energia

Uma vez calculados os elementos de Matriz do potencial, foi obtido o espectro de níveis de duas partículas. Na figura 3.3 mostramos os primeiros 50 níveis de energia em função do parâmetro de intensidade V_0 para valores distintos do alcance α . Nas diagonalizações, utilizamos matrizes de cerca de 100×100 (~ 100 níveis por classe de simetria), totalizando algo em torno de 800 estados

de duas partículas (incluindo estados singlete e tripleto). As energias estão em unidades de $\pi^2 \hbar^2 / 2mL^2$.

Para $V_0 \neq 0$ temos várias quebras de degenerescência de níveis de energia. Essas quebras são essencialmente de dois tipos: quebra da degenerescência triplete e singlete e quebras de degenerescências nas classes de simetria orbital. Na figura, indicamos as diferentes classes de simetria tanto para estados do tipo singlete quanto para estados do tipo triplete:

As classes de simetria $(+i)$ e $(-i)$ são degeneradas entre si, mesmo para $V_0 \neq 0$. Isso ocorre pois os elementos de Matriz do potencial 3.3 são todos reais, em decorrência da simetria de reversão temporal do Hamiltoniano. Com essa simetria, temos

$$\langle \psi_1^{(+i)} | \hat{V} | \psi_2^{(+i)} \rangle = (\langle \psi_1^{(+i)} | \hat{V} | \psi_2^{(+i)} \rangle)^* = \langle \psi_1^{(-i)} | \hat{V} | \psi_2^{(-i)} \rangle \quad (3.31)$$

já que as classes $(+i)$ e $(-i)$ são conjugadas. A quebra da simetria de reversão temporal (mediante aplicação de um campo magnético, por exemplo) quebra essa degenerescência.

Nas ampliações da figura 3.3, mostramos a repulsão entre níveis de uma mesma classe de simetria. Vemos que aparecem também *cruzamentos* entre níveis de classes de simetria distintas bem como, embora em menor número, entre níveis da mesma classe de simetria. Os cruzamentos entre níveis de mesma simetria ocorrem pois nem todos os estados em uma determinada classe são acoplados pelo potencial. Isso porque as classes de simetria de duas partículas são as do grupo $\mathcal{C}_4 \otimes \mathcal{C}_4$. Porém, o grupo de simetria do problema sem campo magnético é maior que $\mathcal{C}_4 \otimes \mathcal{C}_4$ uma vez que o potencial não quebra totalmente as simetrias de reflexão. Na verdade, o potencial é invariante frente a operações de simetria que conservem $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$.

Como um exemplo, considere a reflexão $\sigma_v \cdot (x, y) = (y, x)$. A operação de duas partículas $\sigma_v^{(1)} \otimes \sigma_v^{(2)}$ deixa o potencial invariante:

$$\sigma_v^{(1)} \otimes \sigma_v^{(2)} V(r) = V(\sigma_v^{(1)} \otimes \sigma_v^{(2)} |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) = V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = V(r) \quad (3.32)$$

Outros exemplos são combinações de rotações e reflexões como $\sigma_v \otimes \hat{C}_4$, $\sigma_v \otimes \hat{C}_4^3$ que trocam as duas coordenadas das duas partículas. No entanto, uma combinação do tipo $\sigma_v \otimes \hat{C}_2$ não deixa $|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|$ invariante [$\hat{C}_2 \cdot (x, y) = (-x, -y)$]:

$$\begin{aligned} \sigma_v \otimes \hat{C}_2 |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| &= \sigma_v \otimes \hat{C}_2 \sqrt{(y_2 - y_1)^2 + (x_2 - x_1)^2} \\ &= \sqrt{(-y_2 - x_1)^2 + (-x_2 - y_1)^2} \neq |\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1| \end{aligned} \quad (3.33)$$

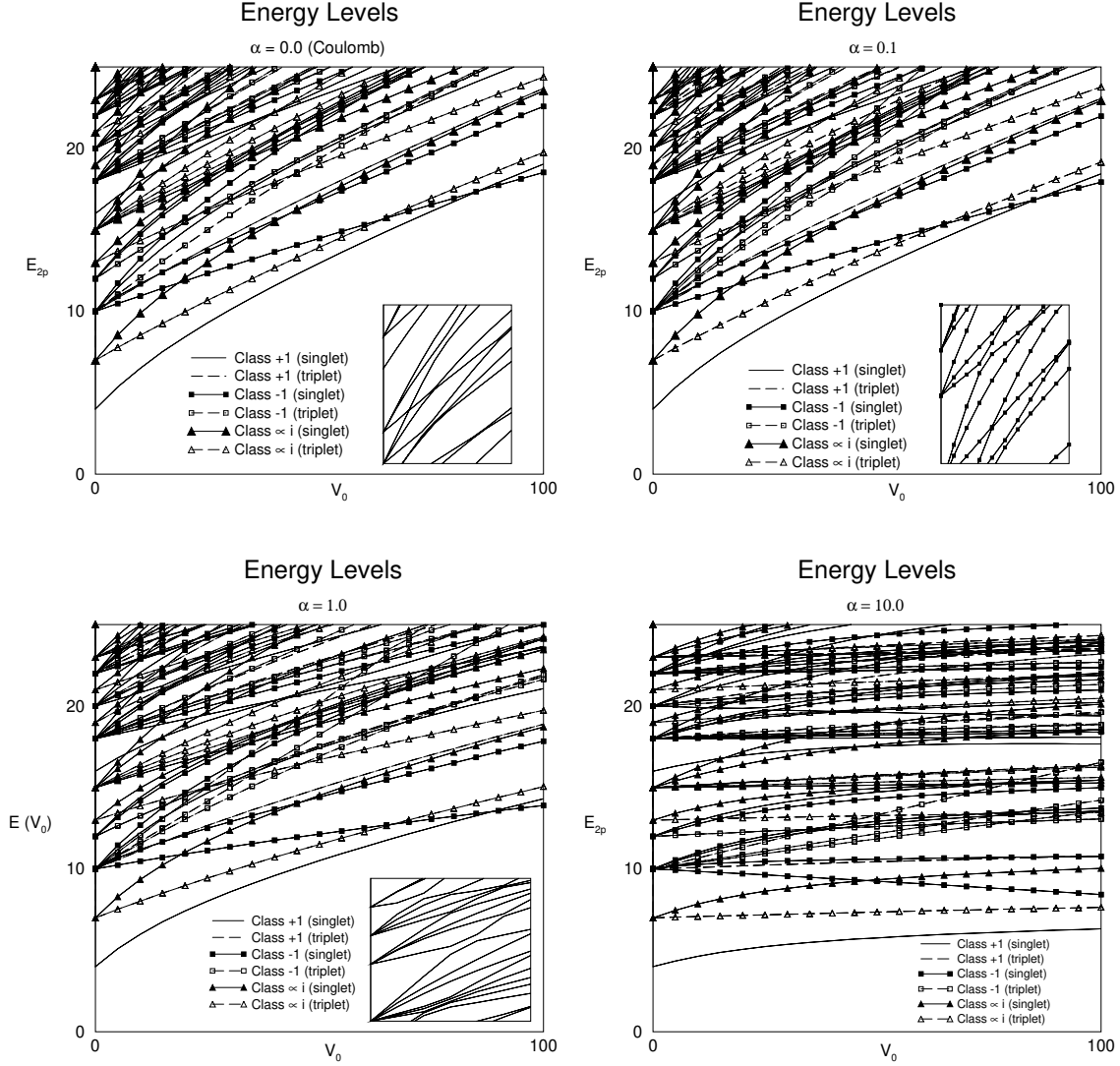


Figura 3.3: Níveis de energia como função de V_0 para diferentes valores de α . No alto à esquerda, temos $\alpha = 0$ (caso coulombiano puro) e, a seguir, $\alpha = 0.1$ (alto, à direita), $\alpha = 1$ e $\alpha = 10$ (em baixo, à esquerda e à direita respectivamente). No detalhe, é mostrada a repulsão de níveis nas classes (+1)-singleto e (-1)-singleto

Assim, o grupo de simetria que deixa $V(r)$ invariante é maior que $\mathcal{C}_4 \otimes \mathcal{C}_4$ mas menor que $\mathcal{C}_{4v} \otimes \mathcal{C}_{4v}$.

Em relação aos cruzamentos de níveis de classes diferentes, é esperado que isso ocorra uma vez que o potencial não acopla as classes. Em particular,

vemos que existe um cruzamento no estado fundamental, que passa de uma simetria orbital (+1) para (−1), mas ainda singleto, a partir de um certo valor de V_0 . No caso sem campo magnético, nossos resultados mostram que o estado fundamental é sempre um singleto de spin, independentemente de V_0 e α . É possível mostrar [17] que este é um resultado geral para sistemas de dois elétrons interagentes com energias cinética da forma:

$$E_c = \frac{-\hbar^2}{2m} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) \quad (3.34)$$

3.4 Estatística de níveis

Uma outra análise importante no caso do Bilhar Quadrado com interação é a estatística de espaçamento de níveis de seu espectro. De acordo com a conjectura de Bohigas-Giannotti-Schmidt [20], é esperado que assinaturas da dinâmica clássica (integrável ou não integrável) se manifestem na distribuição dos espaçamentos de níveis de energia $\Delta\epsilon_i = \frac{\epsilon_{i+1} - \epsilon_i}{\delta\epsilon_{\text{local}}}$.

Para sistemas classicamente integráveis, espera-se um maior número de níveis degenerados e a correspondente distribuição de espaçamentos obedece à uma distribuição tipo Poisson. Para sistemas mistos e caóticos, espera-se uma forte supressão das degenerescências e o aparecimento de repulsão de níveis (“avoided crossings”) no espectro. A distribuição resultante é similar à obtida para de ensembles de matrizes aleatórias e corresponde ao Ensemble Gaussiano Ortogonal (GOE) quando existe a simetria de reversão temporal (caso sem campo magnético) ou ao Ensemble Gaussiano Unitário se o sistema não tem simetria de reversão temporal. As expressões para as diferentes distribuições são apresentadas abaixo:

$$\begin{aligned} P(\Delta\epsilon) &= e^{-\Delta\epsilon} && \text{Poisson} \\ P(\Delta\epsilon) &= \frac{\pi}{2}(\Delta\epsilon)e^{-\frac{\pi}{4}(\Delta\epsilon)^2} && \text{GOE } (B = 0) \\ P(\Delta\epsilon) &= \frac{32}{\pi^2}(\Delta\epsilon)^2e^{-\frac{4}{\pi}(\Delta\epsilon)^2} && \text{GUE } (B \neq 0) \end{aligned} \quad (3.35)$$

A distribuição do espaçamento de níveis de um sistema de duas partículas confinadas em um bilhar unidimensional interagindo via um potencial tipo delta ou Coulombiano puro (limites assintóticos do potencial de Yukawa) foi estudada por Meza-Montes e Ulloa [21], em artigo de 1998. Os resultados mostram distribuições que são combinações de Poisson e GOE, em um regime típico de uma dinâmica clássica mista. No caso do potencial coulombiano

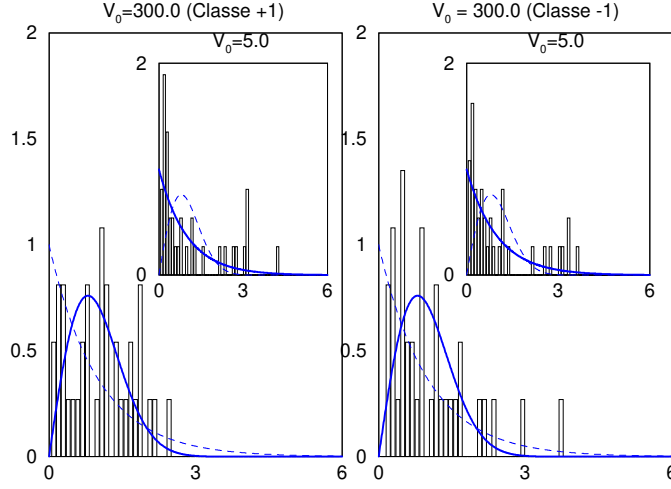


Figura 3.4: Estatística de níveis para diferentes valores de V_0 e $\alpha L = 1.0$. Nota-se que, para V_0 alto, a distribuição é uma combinação Poisson - GOE

puro, a componente GOE fica mais evidente à medida que a intensidade da interação aumenta.

Nossos resultados mostram algo parecido no caso do Bilhar Quadrado com interação. A estatística dos espaçamentos de níveis mostra um comportamento misto Poisson-GOE em função de V_0 . Como a Matriz Hamiltoniana é bloco diagonal, a estatística de níveis de classes diferentes não é correlacionada. Desta forma, as distribuições de espaçamentos para as diferentes classes são obtidas de forma independente, como diferentes realizações do sistema quântico.

Na figura 3.4 temos a distribuição de espaçamentos $P(\Delta\epsilon)$ em função de V_0 para $\alpha = 1.0$. Embora o número de níveis (da ordem de 100) não seja suficiente para termos uma boa aproximação contínua, nota-se uma clara diferença nas distribuições de espaçamentos entre os regimes de V_0 distintos. Para $V_0 = 5.0$, a distribuição tende a uma poissoniana para todos os valores de αL utilizados.

3.5 Configurações tipo *Molécula de Wigner*

Um efeito interessante induzido pela interação em sistemas confinados por fronteiras poligonais é a concentração da função de onda próximo às quinas do polígono no regime fortemente interagente, um estado denominado *Molécula*

de Wigner [15]. Este efeito foi estudado por Creffield e colaboradores no caso de dois elétrons com interação coulombiana em bilhares poligonais (o quadrado inclusive) [15].

Para melhor comparação de nossos resultados com os de [15], consideramos um potencial de Yukawa com um pré-fator de Coulomb em um meio com constante dielétrica ϵ_r :

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{e^{-\alpha r}}{r} \quad (3.36)$$

Com um potencial de interação do tipo (3.36), o lado L do Bilhar tem o papel do parâmetro de intensidade V_0 . Isso pode ser mostrado se deixamos explícito o lado L do Bilhar em nossos cálculos. Como a energia cinética (2.8) escala com $\frac{1}{L^2}$ e a interação coulombiana escala com $\frac{1}{L}$, a razão entre a energia potencial e a energia cinética aumenta à medida que L cresce.

Considere um elemento de matriz diagonal com o potencial acima, no estado $|\psi_{l_1 l_2}^{(C)}\rangle$. Re-escalando o elemento de Matriz do potencial, escrevendo-o em termos de variáveis adimensionais como $r' = \frac{r}{L}$ e $\alpha' = \alpha L$, podemos escrever $\langle \psi_{l_1 l_2}^{(C)} | \hat{H} | \psi_{l_1 l_2}^{(C)} \rangle$ na forma:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{l_1 l_2}^{(C)} | \hat{H} | \psi_{l_1 l_2}^{(C)} \rangle &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2} \{ (m_1^2 + n_1^2 + m_2^2 + n_2^2) \\ &\quad + L \times K_1 \times \langle \psi_{l_1 l_2}^{(C)} | \hat{V} | \psi_{l_1 l_2}^{(C)} \rangle \} \end{aligned} \quad (3.37)$$

onde K_1 é dado por

$$K_1 = 16 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2 \pi^2} \right) \quad (3.38)$$

com dimensão de (comprimento) $^{-1}$. Para $m^* = 0.067m_e$ e $\epsilon_r = 10.9$ (no caso de GaAs) temos $K_1 = 0.37544 \text{nm}^{-1}$. O elemento de matriz $\langle \psi_{l_1 l_2}^{(C)} | \hat{V} | \psi_{l_1 l_2}^{(C)} \rangle$ é exatamente o que calculamos na seção anterior (onde $L \equiv 1$) com o parâmetro de alcance dado por $\alpha' = \alpha L$.

A densidade eletrônica do estado fundamental $\rho_e(\mathbf{r}_1)$ é dada pela densidade de probabilidade do estado fundamental $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ integrada em $\mathbf{r}_2$:

$$\rho_e(\mathbf{r}_1) = \int d\mathbf{r}_2 |\Psi_0^{(C)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2 \quad (3.39)$$

onde (C) é a classe de simetria do estado fundamental.

No nosso caso, nós temos a expansão de $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ na base de auto-estados do caso não interagente:

$$\Psi_0^{(C)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum A_i \psi_i^{(C)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.40)$$

de modo que $\rho_e(\mathbf{r}_1)$ será dada por:

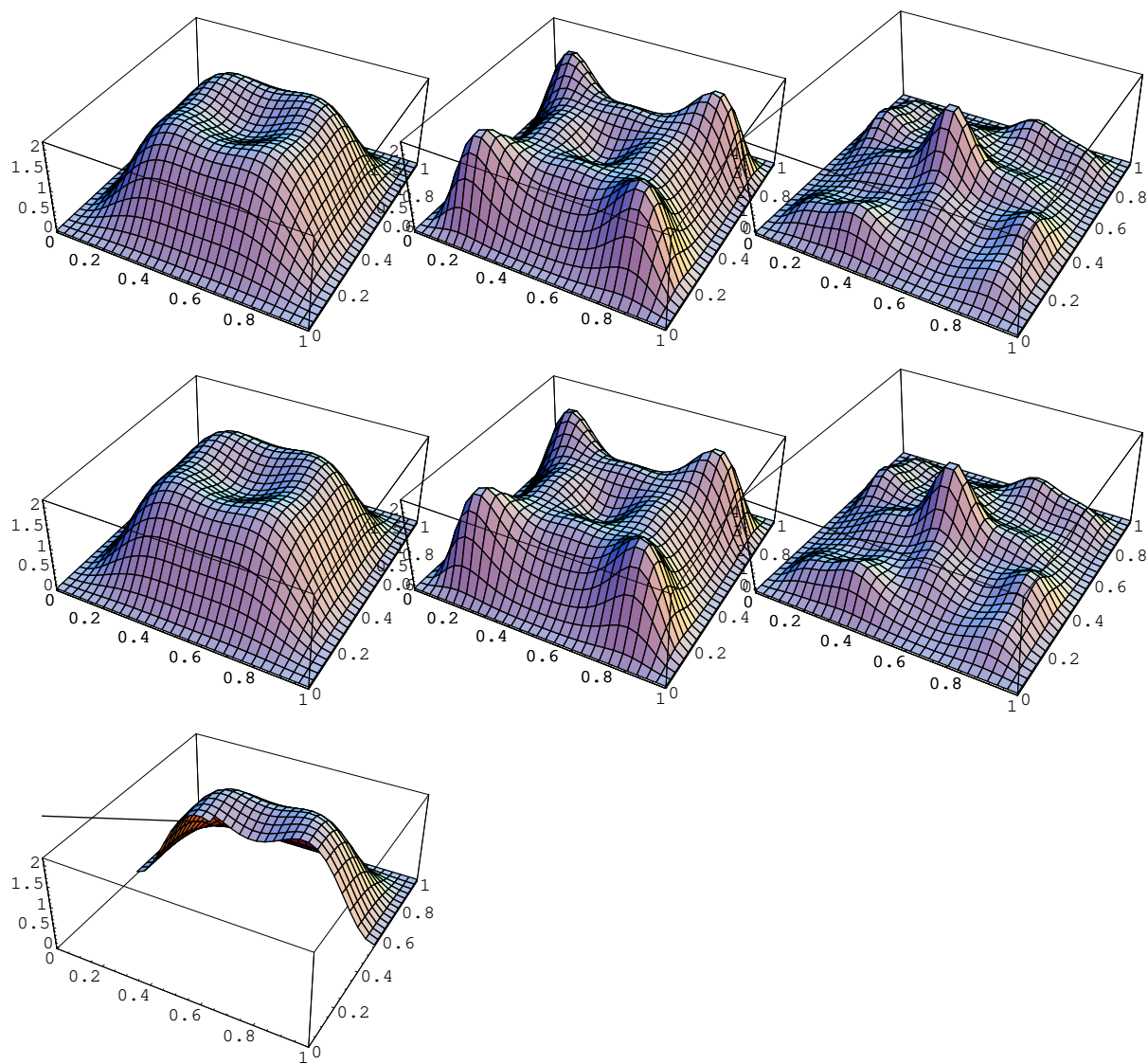
$$\rho_e(\mathbf{r}_1) = \sum_{ij} A_i^* A_j \int d\mathbf{r}_2 \left(\psi_i^{(C)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right)^* \psi_j^{(C)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (3.41)$$

Na figuras (3.5), mostramos o cálculo de $\rho_e(\vec{r}_1)$ para diferentes valores de L e do alcance α . Para um potencial coulombiano puro, têm-se um estado tipo Molécula de Wigner para $L \approx 800\text{nm}$ [15]. O alcance finito do potencial de interação tende a *suprimir* este estado, mesmo para valores de L elevados.

3.5.1 Correlações espaciais

Como vimos anteriormente, o estado fundamental para o caso sem campo magnético é sempre um singlete de spin, com uma função de onda orbital simetrizada. No caso particular do estado de Molécula de Wigner, essa simetrização se reflete na correlação espacial das duas partículas. Na figura 3.6, mostramos a densidade de probabilidade quando temos $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$. O resultado mostra picos de probabilidade nas mesmas posições dos picos de $\rho_e(\mathbf{r}_1)$, uma assinatura do natureza tipo singlete da função de onda..

No entanto, tais picos de probabilidade não significam necessariamente que ambas as partículas estarão sempre na mesma posição espacial. Na figura 3.7 (a), mostramos a densidade de probabilidade quando uma das partículas está em $\mathbf{r}_1 = (0.2, 0.2)$, posição de um dos picos de $\rho_e(\mathbf{r}_1)$. O resultado mostra que a outra partícula tem uma alta probabilidade de estar tanto em $\mathbf{r}_2 = (0.2, 0.2)$ como em $\mathbf{r}_2 = (0.8, 0.8)$, em uma combinação de estados mostrada esquematicamente na figura 3.7 (b).



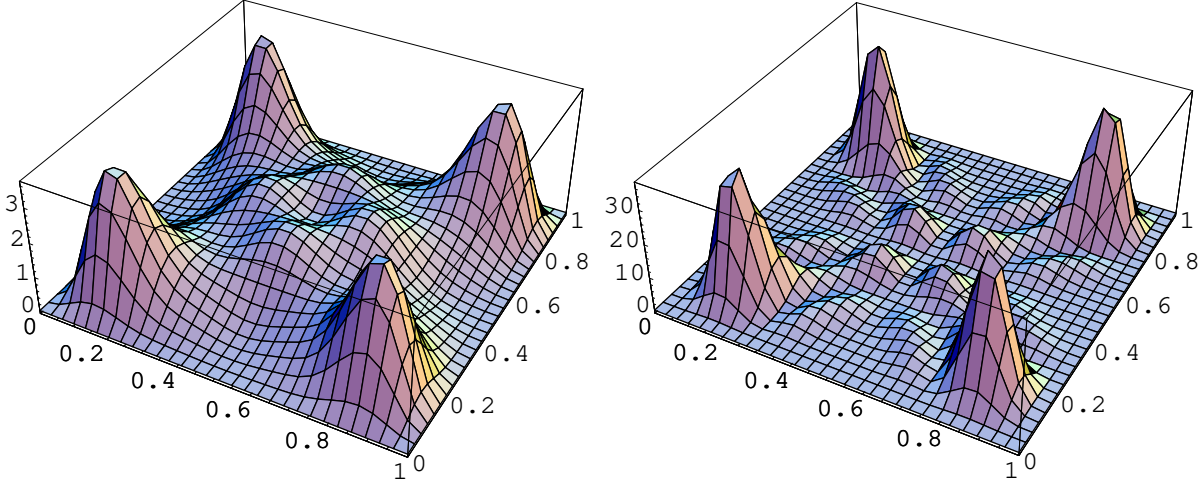


Figura 3.6: À esquerda: densidade eletrônica $\rho_e(\mathbf{r}_1)$ no regime de Molécula de Wigner ($\alpha^{-1} = L = 1\mu m$). À direita: cálculo da densidade de probabilidade no estado fundamental para $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$ ($|\Psi_0^{(C)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1)|^2$), mostrando uma correlação espacial do tipo singlete

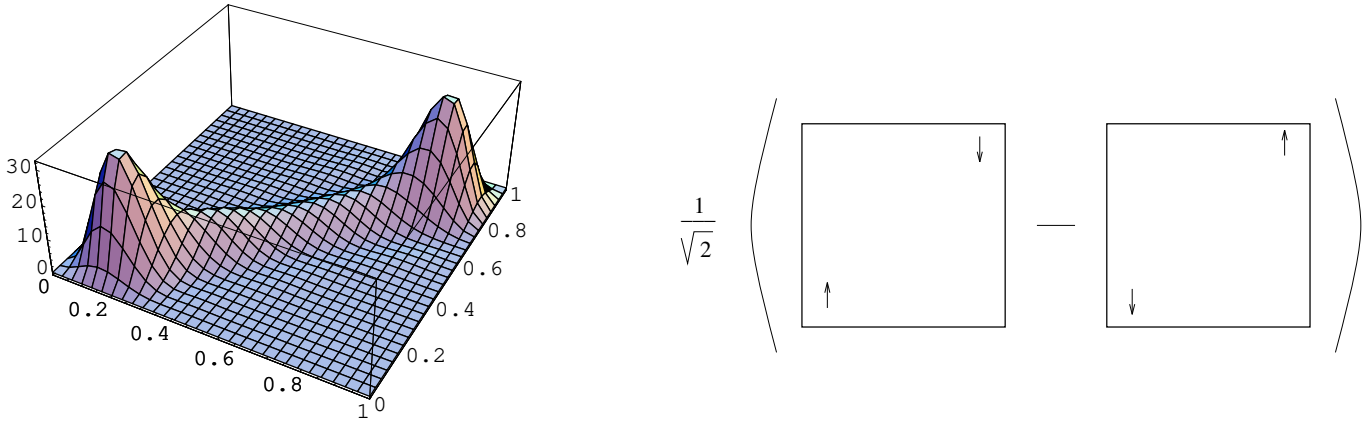


Figura 3.7: À esquerda: Função de onda no regime de Molécula de Wigner com uma das coordenadas em um dos picos de probabilidade ($|\Psi_0^{(C)}(\mathbf{r}_1 = (0.2, 0.2), \mathbf{r}_2)|^2$). O gráfico mostra uma correlação tipo singlete, com as partículas de spins opostos localizadas nas quinas opostas (figura à direita).

Capítulo 4

Efeitos de um campo magnético ortogonal

Consideramos a seguir os efeitos da aplicação de um campo magnético uniforme e constante, ortogonal ao plano do Bilhar. São mostradas as expressões para os elementos de matriz na base de auto-estados do problema “livre” (sem interação e sem campo) bem como os resultados para o espectro e auto-estados do Hamiltoniano interagente.

4.1 Hamiltoniano de uma partícula

O Hamiltoniano de uma partícula de carga $-e$ sob a ação de um campo magnético $\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$ é obtida fazendo-se uma translação $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}$ (em unidades SI) no momento $\mathbf{p}$. Se a partícula está confinada em um Bilhar Quadrado com potencial V_{square} dado por (2.1), o Hamiltoniano total fica:

$$\hat{H}^{(0)}(B) = \frac{1}{2m^*} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + V_{\text{square}} \quad (4.1)$$

onde m^* é a massa efetiva da partícula.

Tomando um sistema de coordenadas (x, y) com o origem no centro do quadrado (o que evidencia as simetrias de $\hat{H}^{(0)}(B)$) e escolhendo-se um gauge simétrico em x e y , o potencial vetor e o campo magnético são dados por:

$$\mathbf{A} = \frac{-By}{2}\hat{e}_x + \frac{Bx}{2}\hat{e}_y \Rightarrow \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} = B\hat{e}_z \quad (4.2)$$

onde B é a intensidade do campo. O Hamiltoniano assume a forma:

$$\hat{H}^{(0)}(B) = \frac{1}{2m*} \left[(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + eB(\hat{p}_x\hat{y} - \hat{p}_y\hat{x}) + e^2\frac{B^2}{4}(\hat{x}^2 + \hat{y}^2) \right] + V_{\text{square}}(\mathbf{r}) \quad (4.3)$$

e simétrico frente às rotações do grupo $\mathcal{C}_4$.

Notamos que os elementos de matriz de $\hat{H}^{(0)}(B)$ envolvem termos cruzados de momentos e coordenadas ($p_x y$ e $p_y x$), lineares em B . A presença destes termos cruzados é um reflexo da quebra da simetria de inversão temporal causada pelo campo magnético. Mostra-se facilmente que o Hamiltoniano (4.3) não fica invariante sob a transformação $(\hat{p}_x, \hat{p}_y) \rightarrow (-\hat{p}_x, -\hat{p}_y)$, que equivale a uma inversão temporal [16]. Para manter a invariância, é preciso aliar $(\hat{p}_x, \hat{p}_y) \rightarrow (-\hat{p}_x, -\hat{p}_y)$ à troca de sinal do campo $B \rightarrow -B$.

4.1.1 Dinâmica Clássica

Nós apresentamos o estudo da dinâmica clássica de (4.1) em trabalhos anteriores [22, 23]. Para $B = 0$, o bilhar quadrado é integrável, com famílias de órbitas periódicas rotuladas pelo ângulo de reflexão nas paredes, constante ao longo de todo o movimento. O efeito do campo magnético é a quebra da integrabilidade do sistema, com o aparecimento de ilhas regulares separadas por regiões de caos nos Mapas de Seção [23]. Isto ocorre pois as trajetórias clássicas regidas pelo Hamiltoniano (4.1) são segmentos de arco com raio R_c proporcional a $\frac{1}{B}$. Com isso, o ângulo de colisão com a fronteira não é preservado como no caso $B = 0$ (trajetórias retas) e o sistema perde uma de suas constantes de movimento.

Na figura 4.1, mostramos um mapa de seção e uma órbita periódica típica do sistema para $B \neq 0$. O mapa de seção reflete a dinâmica das colisões com a fronteira, utilizando coordenadas canônicas de Birkhoff: o cosseno do ângulo de colisão θ_c e a posição s_c no perímetro da fronteira onde ela ocorre.

4.1.2 Elementos de Matriz de $\hat{H}^{(0)}(B)$

Para o cálculo dos elementos de Matriz de (4.3), utilizamos a base de autofunções (2.7) do problema sem campo:

$$\langle \mathbf{r} | mn \rangle = \varphi_{mn}(x, y) = \left(\frac{2}{L} \right) \sin \frac{m\pi}{L} x \sin \frac{n\pi}{L} y \quad (4.4)$$

No entanto, como mencionamos na seção (2.1.1), as coordenadas (x, y) tem a origem do sistema em um dos cantos do quadrado e não em seu centro. Assim, é preciso fazer uma translação de coordenadas $(x, y) \rightarrow (x' - \frac{L}{2}, y' - \frac{L}{2})$

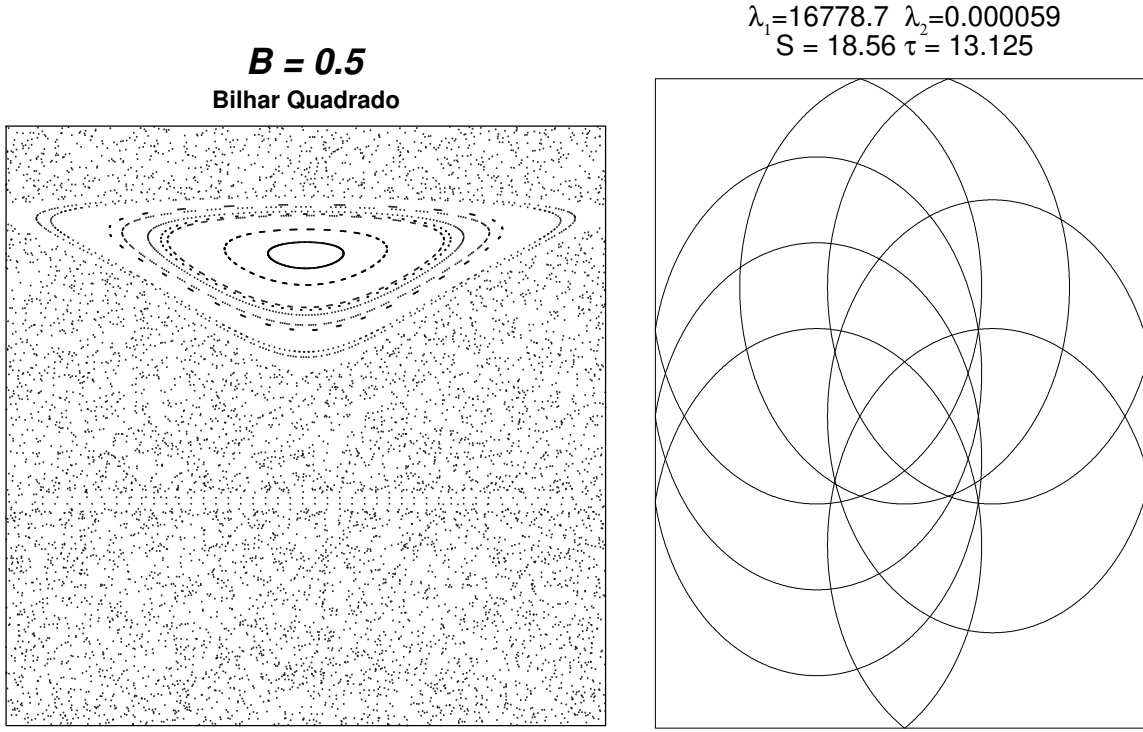


Figura 4.1: Mapa de Seção para o Bilhar Quadrado com $L = 1$ e $R_c = 2$ (esq.). Na figura à direita, temos uma órbita periódica instável para $R_c = \frac{1}{3}$. São indicados os autovalores $\lambda_{1(2)}$ da Matriz de Monodromia, a ação S e o comprimento τ (proporcional ao período) da órbita

no Hamiltoniano, que, na forma apresentada em (4.3), está escrito em um sistema cuja origem é o centro do quadrado. O resultado é a inclusão de termos adicionais proporcionais a B e B^2 :

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(0)}(B) = & \frac{1}{2m_*} \left[(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) + eB \left(\hat{p}_x \hat{y} - \hat{p}_y \hat{x} + \frac{L}{2} (\hat{p}_x - \hat{p}_y) \right) + \right. \\ & \left. + e^2 \frac{B^2}{4} \left(\hat{x}^2 + \hat{y}^2 - L(\hat{x} + \hat{y}) + \frac{L^2}{2} \right) \right] + V_{\text{square}}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Nessa base, o termo independente de B , proporcional a $(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2)$, será diagonal:

$$\langle mn | (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2) | m'n' \rangle = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (m^2 + n^2) \delta_{mm'} \delta_{nn'} \quad (4.6)$$

Para os termos lineares e quadráticos em B , os elementos de Matriz serão dados pelas integrais:

$$\begin{aligned}
\langle mn|\hat{x}|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) x \sin\left(\frac{m'\pi x}{L}\right) \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n'\pi y}{L}\right) \\
\langle mn|\hat{y}|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m'\pi x}{L}\right) \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) y \sin\left(\frac{n'\pi y}{L}\right) \\
\langle mn|\hat{p}_x|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{m'\pi x}{L}\right) \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n'\pi y}{L}\right) \\
\langle mn|\hat{p}_y|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m'\pi x}{L}\right) \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \sin\left(\frac{n'\pi y}{L}\right) \\
\langle mn|\hat{p}_x\hat{y}|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \sin\left(\frac{m'\pi x}{L}\right) \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) y \sin\left(\frac{n'\pi y}{L}\right) \\
\langle mn|\hat{p}_y\hat{x}|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) x \sin\left(\frac{m'\pi x}{L}\right) \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \sin\left(\frac{n'\pi y}{L}\right) \\
\langle mn|\hat{p}_y\hat{x}|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) x \sin\left(\frac{m'\pi x}{L}\right) \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \sin\left(\frac{n'\pi y}{L}\right) \\
\langle mn|\hat{x}^2|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) x^2 \sin\left(\frac{m'\pi x}{L}\right) \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n'\pi y}{L}\right) \\
\langle mn|\hat{y}^2|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \int_0^L \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{m'\pi x}{L}\right) \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi y}{L}\right) y^2 \sin\left(\frac{n'\pi y}{L}\right)
\end{aligned} \tag{4.7}$$

As integrais (4.7) podem ser resolvidas de forma analítica e os resultados são apresentados a seguir.

$$\langle mn|\hat{x}|m'n'\rangle = 2L \delta_{nn'} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{4} & \text{se } m = m' \\ 0 & \text{se } m \neq m' \text{ e ambos pares/ ímpares} \\ \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{1}{(m+m')^2} - \frac{1}{(m-m')^2} \right) & \text{se } m \neq m' \text{ e um for par o outro ímpar} \end{array} \right\} \tag{4.8}$$

$$\langle mn|\hat{y}|m'n'\rangle = 2L \delta_{mm'} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{4} & \text{se } n = n' \\ 0 & \text{se } n \neq n' \text{ e ambos pares/ ímpares} \\ \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{1}{(n+n')^2} - \frac{1}{(n-n')^2} \right) & \text{se } n \neq n' \text{ e um for par o outro ímpar} \end{array} \right\} \quad (4.9)$$

$$\begin{aligned} \langle mn|\hat{p}_x\hat{y}|m'n'\rangle &= \frac{4}{L^2} \times \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{se } m = m' \text{ ou } m, m' \text{ ambos pares/ímpares} \\ 2i\hbar \frac{mm'}{(m')^2 - m^2} & \text{se } m \neq m' \text{ e um for par e outro ímpar} \end{array} \right\} \times \\ &\quad \left\{ \begin{array}{ll} \frac{L^2}{4} & n = n' \\ 0 & n \neq n' \text{ } n, n' \text{ ambos pares/ímpares} \\ \frac{L^2}{\pi^2} \left[\frac{1}{(n+n')^2} - \frac{1}{(n-n')^2} \right] & n \neq n' \text{ e um deles par e o outro ímpar} \end{array} \right\} \quad (4.10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle mn|\hat{p}_y\hat{x}|m'n'\rangle &= \left\{ \begin{array}{ll} \frac{L^2}{4} & m = m' \\ 0 & m \neq m', m, m' \text{ ambos pares/ímpares} \\ \frac{L^2}{\pi^2} \left[\frac{1}{(m+m')^2} - \frac{1}{(m-m')^2} \right] & m \neq m' \text{ e um deles par e o outro ímpar} \end{array} \right\} \\ &\quad \times \left\{ \begin{array}{ll} 0 & \text{se } n = n' \text{ ou } n, n' \text{ ambos pares/ímpares} \\ 2i\hbar \frac{nn'}{(n')^2 - n^2} & \text{se } n \neq n' \text{ e um for par e outro ímpar} \end{array} \right\} \times \frac{4}{L^2} \quad (4.11) \end{aligned}$$

$$\langle mn|\hat{x}^2|m'n'\rangle = L^2 \delta_{nn'} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{2}{\pi^2} \left(\frac{(-1)^{m-m'}}{(m-m')^2} - \frac{(-1)^{m+m'}}{(m+m')^2} \right) & \text{se } m \neq m' \\ \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 m^2} \right) & \text{se } m = m' \end{array} \right\} \quad (4.12)$$

$$\langle mn|\hat{y}^2|m'n'\rangle = L^2 \delta_{mm'} \left\{ \begin{array}{ll} \frac{2}{\pi^2} \left(\frac{(-1)^{n-n'}}{(n-n')^2} - \frac{(-1)^{n+n'}}{(n+n')^2} \right) & \text{se } n \neq n' \\ \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right) & \text{se } n = n' \end{array} \right\} \quad (4.13)$$

A forma dos elementos de matriz acima, que dependem tanto do valor absoluto como da paridade de m e n , traz algumas consequências importantes. Dentre elas, podemos destacar o não acoplamento das classes de simetria

de uma partícula do grupo $\mathcal{C}_4$, apresentadas no capítulo anterior, e também a quebra da degenerescência entre as classes $(+i)$ e $(-i)$. Essa quebra de degenerescência se deve ao termo linear em B em (4.3) e, em última análise, à quebra da simetria de inversão temporal.

4.2 Duas partículas não interagentes

Se temos duas partículas não interagentes no Bilhar, podemos construir sua função de onda simetrizada (estado de spin singleto) ou anti-simetrizada (triplete), conforme mostrado na seção 2.2:

$$|\psi_{l_1}^{(C_1)} \psi_{l_2}^{(C_2)} S, A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\psi_{l_1}^{(C_1)} \psi_{l_2}^{(C_2)}\rangle \pm |\psi_{l_2}^{(C_2)} \psi_{l_1}^{(C_1)}\rangle \right) \quad (4.14)$$

O Hamiltoniano não-interagente fica:

$$\hat{H}_{2p}^{(0)}(B) = \frac{1}{2m} \left[(\mathbf{p}_1 + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_1))^2 + (\mathbf{p}_2 + e\mathbf{A}(\mathbf{r}_2))^2 \right] + V_{\text{square}}(\mathbf{r}_1) + V_{\text{square}}(\mathbf{r}_2) \quad (4.15)$$

Na base não-simetrizada, os elementos de matriz de (4.15) serão dados por uma composição de elementos de Matriz de uma partícula:

$$\begin{aligned} < \psi_{l_1}^{(C_1)} \psi_{l_2}^{(C_2)} | \hat{H}^{(0)}(B) | \psi_{l_1'}^{(C_1')} \psi_{l_2'}^{(C_2')} > = \\ & \left(< \psi_{l_1}^{(C_1)} | \hat{H}_1^{(0)}(B) | \psi_{l_1'}^{(C_1')} > \delta_{l_2 l_2'} + < \psi_{l_2}^{(C_2)} | \hat{H}_2^{(0)}(B) | \psi_{l_2'}^{(C_2')} > \delta_{l_1 l_1'} \right) \delta_{(C_1)(C_1')} \delta_{(C_2)(C_2')} \end{aligned} \quad (4.16)$$

onde utilizamos a notação introduzida em (2.17) para os estados de uma partícula

$$|\psi_l^{(C)}\rangle = F_l^{(C)} \left(|l\rangle + S_l^{(C)} |\bar{l}\rangle \right) \quad (4.17)$$

e ainda $|l\rangle \equiv |mn\rangle$; $|\bar{l}\rangle \equiv |nm\rangle$.

Vemos que só são acoplados pelo campo estados que tenham as mesmas classes de uma partícula. Desta forma, nem todos os elementos de matriz entre estados na mesma classe de simetria de duas partículas serão diferentes de zero, pois é possível que estados com diferentes classes de simetria de uma partícula estejam na mesma classe de simetria de *duas* partículas.

Como exemplo, considere os estados de duas partículas $|(+1)(-1)\rangle$ e $|(+i)(+i)\rangle$. Conforme vimos na seção 2.2, ambos os estados pertencem à

classe de duas partículas (-1) . No entanto, $\langle (+1)(-1)|\hat{H}_{2p}^{(0)}(B)|(+i)(+i)\rangle = 0$ pois $\delta_{(+1)(+i)} = \delta_{(-1)(+i)} = 0$.

Na notação de (2.17), os elementos de matriz de uma partícula são dados por:

$$\begin{aligned} \langle \psi_l^{(C)} | \hat{H}^{(0)}(B) | \psi_{l'}^{(C)} \rangle = \\ F_l^{(C)} F_{l'}^{(C)} \left(\langle l | \hat{H}^{(0)}(B) | l' \rangle + S_{l'}^{(C)} \langle l | \hat{H}^{(0)}(B) | \bar{l}' \rangle + \right. \\ \left. + S_l^{(C)} \langle \bar{l} | \hat{H}^{(0)}(B) | l' \rangle + S_l^{(C)} S_{l'}^{(C)} \langle \bar{l} | \hat{H}^{(0)}(B) | \bar{l}' \rangle \right) \end{aligned} \quad (4.18)$$

Nas figuras 4.2 e 4.3, mostramos os níveis de energia não interagentes (separados em classes de simetria) como função do campo magnético para $L = 200nm$ e $L = 800nm$. Neste caso, os estados tipo tripleto e singleto são degenerados entre si, como mostrado na figura 4.2. No entanto, vemos que alguns estados são singletos de spin “puros” (o estado fundamental, por exemplo). Isso ocorre quando, para $B = 0$, o estado de duas partículas é construído colocando-se cada elétron no mesmo estado orbital de partícula única, suprimindo uma combinação orbital anti-simétrica (estado de spin tripleto) na função de onda total. Vemos ainda a quebra de degenerescência entre as classes de simetria $(+i)$ e $(-i)$, conforme discutido anteriormente.

Para altos valores de B , os níveis de energia se acumulam nos níveis de Landau do sistema, dados por

$$E_n^{\text{Landau}} = (n + 1)\hbar\omega_c \quad \omega_c = \frac{eB}{m^*} \quad (4.19)$$

e que variam linearmente com o campo B .

Para uma melhor comparação com os resultados publicados anteriormente [24, 25, 26, 27], escolhemos expressar a energia em meV e o campo magnético em Tesla (T). Utilizamos também a massa de quasi-partícula e , no caso interagente (seção 4.3), a constante dielétrica do GaAs ($m^* = 0.067m_e$ e $\epsilon_r = 10.9$). Em termos do comprimento magnético $l_m = \sqrt{\hbar/eB}$, a variação do campo corresponde a $\infty > l_m > 0.14L$. No apêndice A estão resumidos os fatores de conversão e unidades para energia e campo magnético.

4.3 Campo e Interação

Quando é introduzido potencial de interação eletrônica na forma (3.1), o Hamiltoniano do sistema fica:

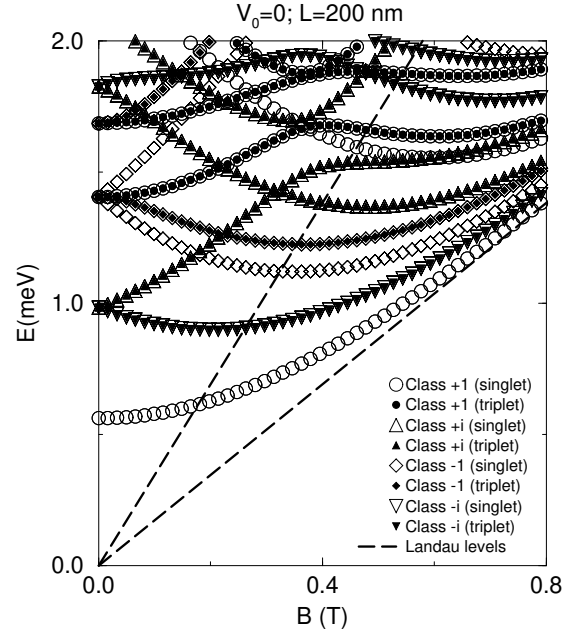


Figura 4.2: Níveis de energia em função de B para um dot de $L = 200\text{nm}$ sem interação. São mostradas os estados tipo singleto e tripleto, degenerados no caso não interagente. As retas tracejadas mostram os dois primeiros níveis de Landau ($E_0 = \hbar\omega_c$ e $E_1 = 2\hbar\omega_c$)

$$H_{2p}(B) = H_1^{(0)}(B) + H_2^{(0)}(B) + V_0 \frac{e^{-\alpha|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (4.20)$$

Podemos também utilizar o potencial na forma (3.36), com o pré-fator coulombiano $\frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}$:

$$H_{2p}(B) = H_1^{(0)}(B) + H_2^{(0)}(B) + \frac{1}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \frac{e^{-\alpha|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \quad (4.21)$$

Neste caso, como na seção 3.5, o tamanho L do lado do quadrado define o parâmetro de intensidade da interação.

Com os resultados do capítulo anterior e da seção 4.1.2, podemos diagonalizar (4.20) na base de estados $|\psi_{l_1}^{(C_1)} \psi_{l_2}^{(C_2)} s, A\rangle$ (definida na seção 2.2). Teremos assim o espectro de duas partículas do problema como função do campo magnético B .

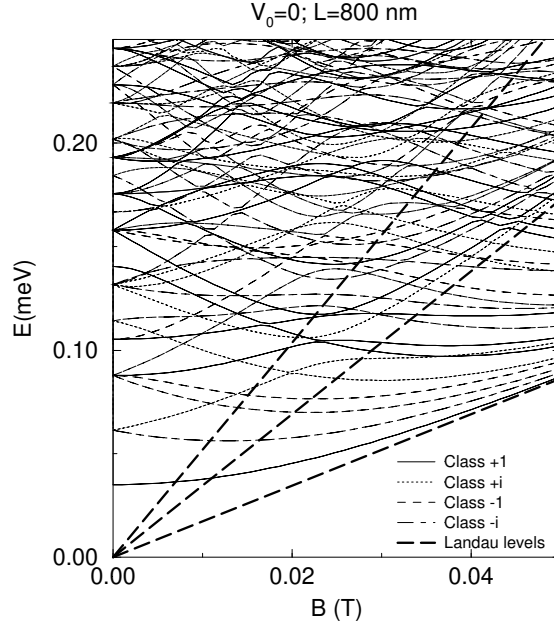


Figura 4.3: Níveis de energia em função de B para um dot de $L = 800\text{nm}$. A retas tracejadas mostram os 3 primeiros níveis de Landau.

4.3.1 Níveis de Energia

Nas figuras que seguem, mostramos os níveis de energia em função do campo B para pontos quânticos com diferentes valores de L .

Mostramos inicialmente o caso $L = 200\text{nm}$, que corresponde a $V_0 = 75.088$. Vemos que, para um alcance de 10 vezes o tamanho do quadrado ($\alpha^{-1} = 2\mu\text{m}$; $\alpha L = 0.1$), o espectro se aproxima bastante do caso coulombiano puro (no alto, à esquerda). À medida que o alcance diminui, notamos uma redução gradual nas energias dos estados e nos “gaps” entre os níveis nos “avoided crossings”. Observamos também mudanças na ordem dos estados excitados e um cruzamento singleto-triplete no estado fundamental para $B \sim 0.2 - 0.3T$.

Essas oscilações singleto-triplete em foram anteriormente estudadas em sistemas de dois elétrons interagentes confinados em 2D [24, 25, 26, 27]. Em [24, 25], o potencial confinante é parabólico do tipo $V(r) = \frac{\mu}{2}\omega_0^2 r^2$. Já em [26, 27] temos um potencial confinante com simetria quadrada, respectivamente um poço finito e um Bilhar. Em particular, o sistema tratado por Creffield e colaboradores [27] corresponde ao nosso limite $\alpha = 0$. Nesse trabalho, os estados de mais baixa energia são obtidos resolvendo-se nume-

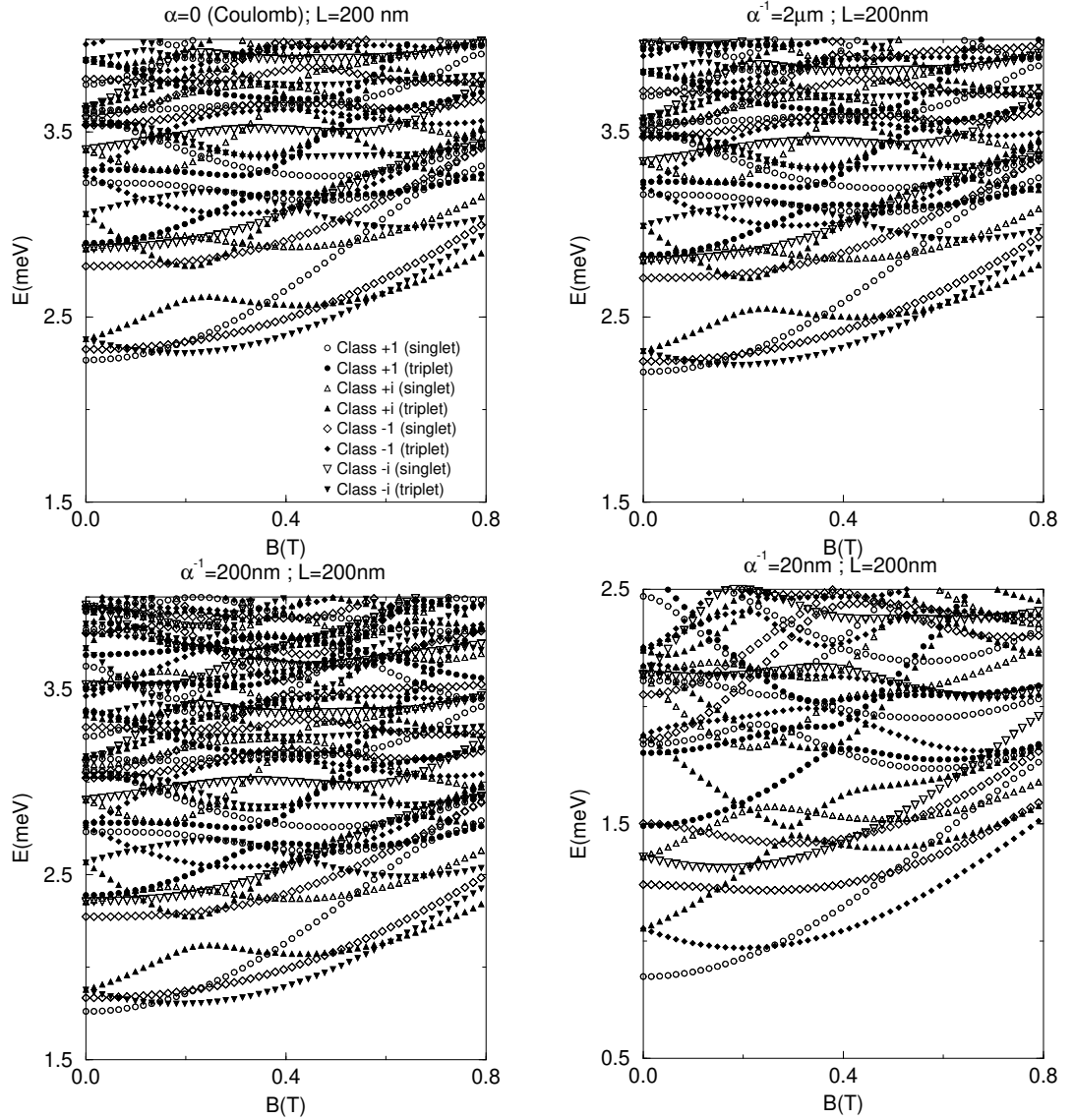


Figura 4.4: Níveis de energia em função de B para $L = 200nm$ e diferentes valores do alcance α^{-1} (De cima para baixo e da esquerda para a dir. temos $\alpha L = 0, 0.1, 1$ e 10).

ricamente a equação de Schrödinger na forma diferencial e são observadas várias oscilações singleto-triplet em função do campo para $L = 800nm$.

Algumas evidências experimentais apontam para transições singleto-triplet induzidas por interação eletrônica. Em medidas de “single-electron capaci-

tance spectroscopy”, Ashoori e colaboradores [28, 29] mediram a energia de adição de um elétron em um quantum-dot de GaAs inicialmente com N elétrons ($N < 35$). Com $N = 1$ e para baixos valores de campo, o segundo elétron forma um singlete de spin com o primeiro, ocupando o mesmo estado de partícula única com spin oposto. No entanto, o estado de duas partículas passa a ser um tripleto (com os elétrons ocupando estados de partícula única diferentes) para campos magnéticos da ordem de $B = 1.5T$. Tais valores de campo são muito menores que os valores típicos de transição singlete-triplete por efeito Zeeman (que, em GaAs, ocorrem a $B \sim 25T$). Uma explicação possível para o efeito [24] é que a repulsão eletrônica seja efetivamente maior à medida que B cresça e passe a favorecer que o segundo elétron ocupe um estado de partícula única excitado, formando um tripleto de spin.

Como utilizamos uma base de auto-funções do problema sem interação, é de se esperar que o cálculo dos estados excitados tenha limitações no regime fortemente interagente e com campos magnéticos altos. De fato, constatamos isso considerando $L = 800nm$ e comparando com os resultados para $\alpha = 0.0$ em [27]. Nossos resultados para o caso coulombiano puro (expressos na figura 4.5) divergem do calculado por Creffield e colaboradores para campos altos, embora apresentem uma concordância qualitativa para $B \sim 0$. Em particular, obtemos o mesmo “gap” entre 0.34 e 0.38 meV para $B = 0$ e notamos um comportamento oscilatório dos primeiros estados do tipo tripleto.

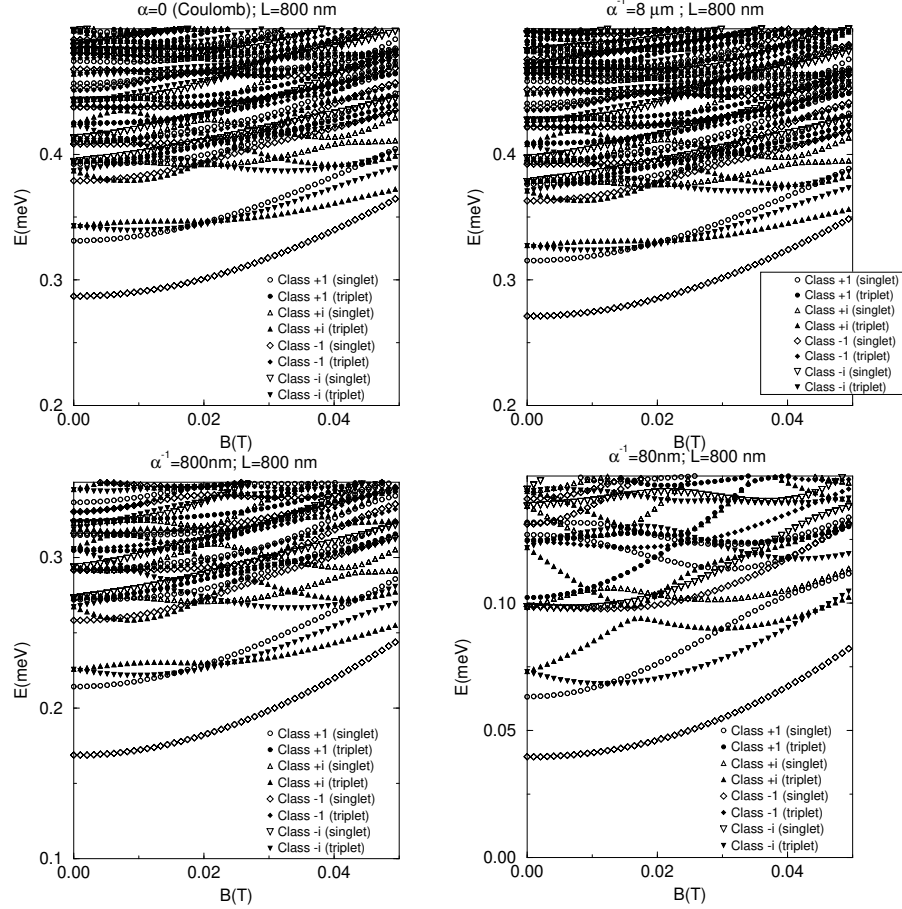
O potencial de interação tem um efeito de potencializar a repulsão de níveis em função de B uma vez que os acoplamentos não-diagonais entre os estados crescem. Isso está exemplificado na figura 4.6 onde temos os níveis da classe $(+1)$ -singlete em função de B para diferentes intensidades da interação.

4.3.2 Densidade eletrônica

A estrutura de densidade eletrônica do sistema interagente se modifica conforme variamos o campo magnético. As figuras 4.7 e 4.8 mostram a densidade eletrônica $\rho_e(\mathbf{r})$ e a densidade de probabilidade com uma das coordenadas fixas $|\Psi^{(C)}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r})|^2$. Utilizamos $L = 800nm$, $\alpha = 0$ e dois valores de campo: $B = 0$ e $B = 0.05T$.

Na primeira figura, mostramos a evolução do estado fundamental (Classe (-1) -singlete) em função do campo. Para $B = 0$, $\rho_e(\mathbf{r})$ apresenta picos próximos às quinas (aproximadamente em $\mathbf{r}_0 = (0.2L, 0.2L)$) característicos do estado molécula de Wigner. A densidade de probabilidade $|\Psi_0^{(-1),S}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2$ com $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_0$ mostra uma correlação do tipo singlete, similar à mostrada na seção 3.5.1. Para $B = 0.05T$, a densidade eletrônica se modifica, com uma menor definição dos picos.

Já na fig. 4.8 mostramos o primeiro estado da classe $(+i)$ -tripleto que,


 Figura 4.5: Espectro para $L = 800$ nm em função do campo.

para $B = 0.05T$, corresponde ao primeiro estado excitado. Notamos também o aparecimento de picos de probabilidade próximo às quinas e essa estrutura é pouco modificada pelo campo magnético. No entanto, a correlação espacial mostrada por $|\Psi_0^{(+i),T}(\mathbf{r}_0 = (0.2, 0.2), \mathbf{r})|^2$ é do tipo tripleto. Nesse caso, o módulo quadrado da função de onda orbital é nula para $\mathbf{r}_2 = \mathbf{r}_1$ e temos um único pico, localizado na diagonal oposta devido à interação repulsiva.

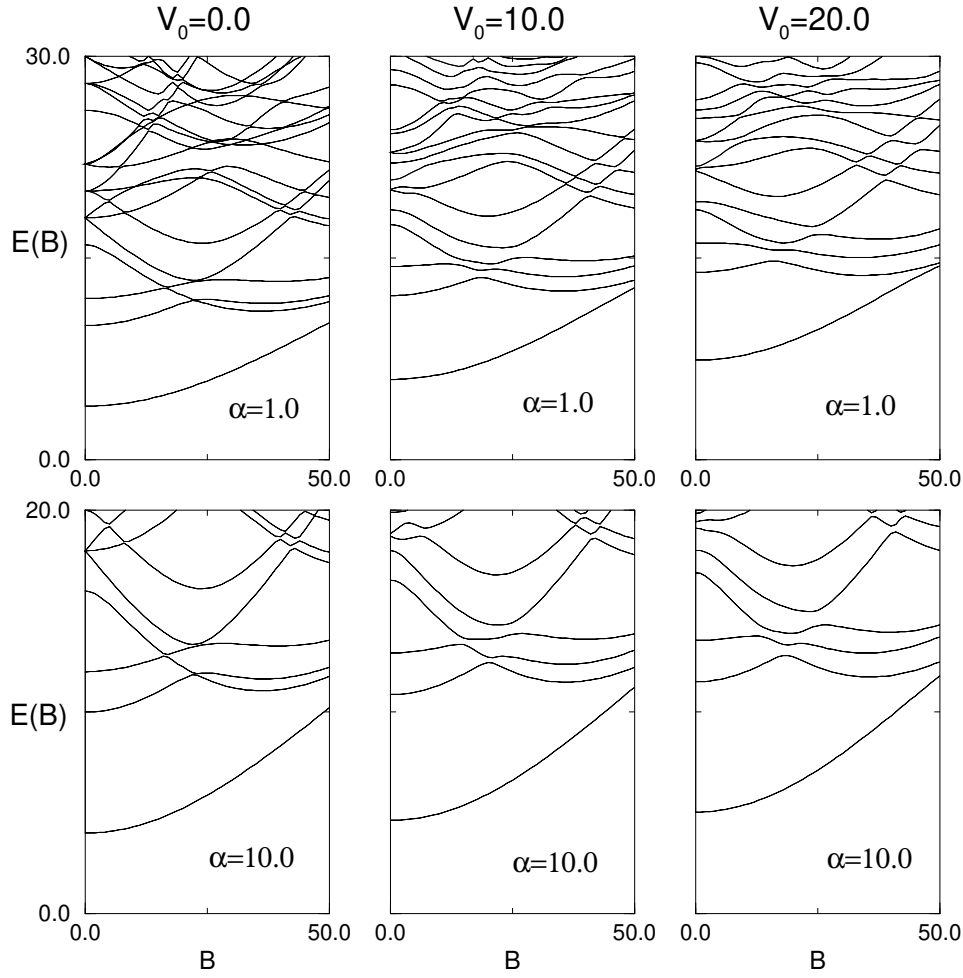


Figura 4.6: Níveis de energia da classe (+1) (singleto) em função do campo para diferentes valores de α ($\alpha L = 1$ acima e $\alpha L = 10$ abaixo) e V_0 (energia e campo em unidades arbitrárias). Nota-se que a interação tende a potencializar a repulsão de níveis em função de B

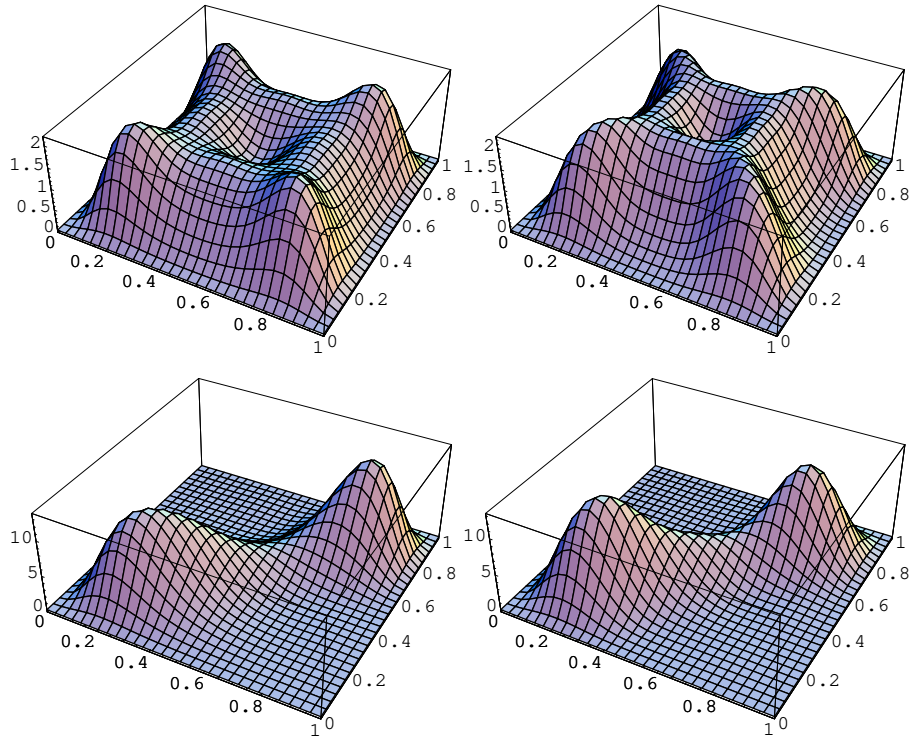


Figura 4.7: Alto: densidade eletrônica no estado fundamental $\rho_e(\mathbf{r}_1)$ para $L = 800\text{nm}$ e campos $B = 0$ (esq.) e $B = 0.05T$ (dir). Abaixo: densidade de probabilidade $|\Psi_0^{(-1),S}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2$ para estes parâmetros com uma das coordenadas em um dos máximos de probabilidade de ρ_e . O aparecimento de dois picos na digonal é consequência da simetria da função de onda orbital frente à troca das partículas (correlação tipo singleto)

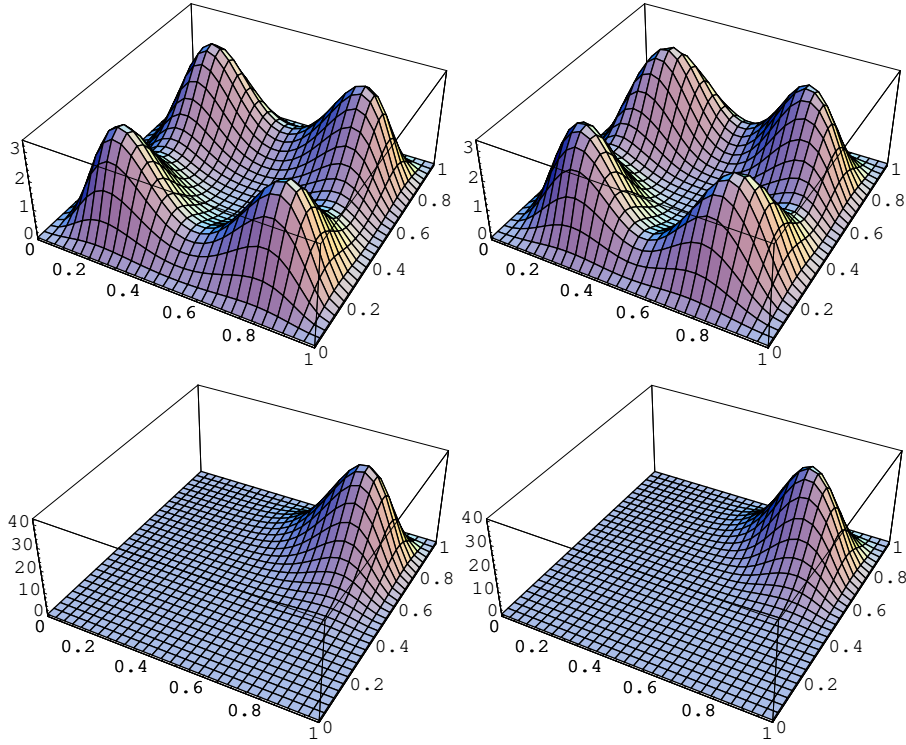


Figura 4.8: Alto: densidade eletrônica do primeiro estado da classe $(+i)$ -triplete para $L = 800\text{nm}$ e campos $B = 0$ (esq.) e $B = 0.05T$ (dir). Abaixo: Função de onda para estes parâmetros com uma das coordenadas em um dos máximos de probabilidade de ρ_e ($|\Psi_0^{(+i),T}(\mathbf{r}_1 = (0.2, 0.2), \mathbf{r}_2)|^2$), mostrando uma correlação espacial do tipo triplete, com $\Psi_0^{(+i),T}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) = 0$

Capítulo 5

Magnetização e Susceptibilidade

Uma vez calculados o elementos de Matriz e o espectro, passamos à análise da magnetização orbital do sistema de dois elétrons com interação. Nesta seção, apresentamos os cálculos da magnetização $m(B, T)$ e da susceptibilidade magnética $\chi(B, T)$, considerando também a dependência desta última com a temperatura.

O estudo da influência da interação no comportamento de $\chi(B, T)$ foi um dos objetivos iniciais deste trabalho e mostraremos, nesse capítulo, os resultados para o problema de dois elétrons. Embora tenhamos a restrição $N = 2$ (longe, portanto, do limite de muitos corpos $N \rightarrow \infty$), estamos interessados em ver que tipo de mudança qualitativa a interação introduz em relação ao caso não interagente, como, por exemplo, as flutuações a baixas temperaturas causadas por oscilações singlete-triplete, discutidas na seção 5.2.

5.1 Definição termodinâmica

A magnetização $m(B)$ de um sistema de volume V e temperatura T é dada em termos da energia livre de Helmholtz $F(T, B, V) = U - TS$ [17]:

$$m(B) = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial B} \quad (5.1)$$

Em um sistema 2D de área A , temos:

$$m(B) = -\frac{1}{A} \frac{\partial F}{\partial B} \quad (5.2)$$

Usando a função de partição $Z(B, T) = \text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}$ ($\beta \equiv 1/k_B T$), a magnetização pode ser calculada a partir de uma soma das derivadas dos níveis de energia em relação ao campo magnético B :

$$m(B) = \frac{1}{\beta A} \frac{\sum_n \frac{dE_n(B)}{dB} e^{-\beta E_n(B)}}{\sum_n e^{-\beta E_n(B)}} = \frac{1}{\beta A} \frac{\partial \log Z(B, T)}{\partial B} \quad (5.3)$$

A susceptibilidade magnética é definida como a derivada de $m(B)$ em relação ao campo:

$$\chi(B) = \frac{dm(B)}{dB} \quad (5.4)$$

ou, em termos de $Z(B, A)$:

$$\chi(B) = \frac{1}{\beta A} \frac{\partial^2 \log Z(B, T)}{\partial B^2} \quad (5.5)$$

Usando (5.5) podemos calcular $\chi(B)$ a partir do espectro de energia do sistema, através de $Z(B) = \sum_n e^{-\beta E_n(B)}$.

5.2 Susceptibilidade para o sistema de dois elétrons

Utilizamos as relações (5.3) e (5.5) para calcular numericamente a magnetização e susceptibilidade magnética no caso de dois elétrons interagentes no Biliar Quadrado com $A = L^2$. Estudamos dois limites do potencial de interação $e^{-\alpha r}/r$: o caso coulombiano puro ($\alpha = 0$, alcance infinito) e o caso de curto alcance ($\alpha^{-1} = L/10$). A função de partição foi obtida a partir dos 200 primeiros níveis de energia de duas partículas e a derivação numérica em relação a B foi feita com um passo de $\Delta B/B_{\text{max}} = 0.006$.

Nas figuras 5.1 e 5.2 mostramos os níveis de energia e a magnetização $m(B)$ para $\alpha = 0$ e $\alpha^{-1} = L/10$ respectivamente. As temperaturas estão representadas em termos do espaçamento médio de níveis Δ .

Nos dois casos, a magnetização é negativa e cresce em módulo conforme o campo aumenta. No entanto, temos flutuações a baixas temperaturas nas regiões de cruzamentos singleto-triplete no estado fundamental, ausentes no caso não-interagente.

Essas flutuações ocorrem pois, na região do cruzamento, a energia do estado fundamental E_0 muda abruptamente em função do campo, sendo $\frac{dE_0}{dB}$ descontínua. Isso implica em uma descontinuidade em $m(B)$ para $T = 0$ ou em uma mudança abrupta para baixas temperaturas, quando a contribuição

de $\frac{dE_0}{dB}$ é dominante. Para temperaturas mais altas, a contribuição de $\frac{dE_0}{dB}$ tende a ser compensada por $\frac{dE_1}{dB} \approx -\frac{dE_0}{dB}$ e o efeito é suprimido. O comportamento mostrado em 5.1 se mantém para o caso de alcances longos ($\alpha^{-1} \geq L$), uma vez que, para esses valores de α , o espectro pouco se altera em relação ao caso $\alpha = 0$.

Mesmo em sistemas não confinados, o acoplamento do campo com o movimento orbital dos elétrons produz uma susceptibilidade diamagnética não nula, denominada *susceptibilidade de Landau* χ_L , com magnitude absoluta $1/3$ menor que a susceptibilidade paramagnética de spin (susceptibilidade de Pauli)¹. Para elétrons livres, o resultado para χ_L fica [17, 30]:

$$\chi_L = -\frac{\mu_B^2 \langle g(\varepsilon) \rangle}{3} \quad (5.6)$$

onde $\mu_B = e\hbar/2m_e c$ é o magneton de Bohr (em unidades gaussianas) e $\langle g(\varepsilon) \rangle$ é a densidade média de estados por unidade de área. No caso de bilhares, $\langle g(\varepsilon) \rangle$ corresponde ao termo de Weyl na densidade de estados e depende essencialmente da área A do bilhar e da massa m da partícula:

$$\langle g(\varepsilon) \rangle = \frac{mA}{\pi\hbar^2} \quad (5.7)$$

Assim, a susceptibilidade de Landau para bilhares depende apenas da massa ($m = m_e$, no caso) e de constantes fundamentais [8]:

$$\chi_L = -\frac{e^2}{12\pi mc^2} \quad (\text{unidades gaussianas}) \quad (5.8)$$

e, em unidades gaussianas, tem dimensão de comprimento.

A figura 5.3 mostra a susceptibilidade magnética para o sistemas de dois elétrons interagentes normalizada pela susceptibilidade de Landau (5.8) em função do campo. No caso não-interagente ($V_0 = 0.0$), a susceptibilidade $\chi^{(0)}$ é sempre negativa e $|\chi^{(0)}| \leq |\chi_L|$ (vide inset). Para $V_0 \neq 0$, $\chi(B)$ é, na média, diamagnética mas com picos paramagnéticos com magnitude da ordem de $1 - 2.5|\chi_L|$ a baixas temperaturas.

Esses picos são causados pelos cruzamentos singleto-triplete no estado fundamental descritos acima e são fortemente suprimidos a altas temperaturas. No caso coulombiano puro com $V_0 = 100$, temos dois cruzamentos no espectro (fig. 5.1, no alto) e vemos uma estrutura de dois picos em $\chi(B)$

¹No caso de semicondutores dopados, onde a massa efetiva m^* do elétron é, em geral, menor que m_e , a susceptibilidade orbital pode dominar sobre a susceptibilidade de spin. Isso porque a susceptibilidade de spin (dependente da densidade de níveis) é reduzida por um fator (m^*/m_e) enquanto que $|\chi_L|$, que depende do acoplamento orbital com o campo, *aumenta* por um fator (m_e/m^*) de modo que $|\chi_L|/|\chi_{\text{Pauli}}| \sim (m_e/m^*)^2$ [17].

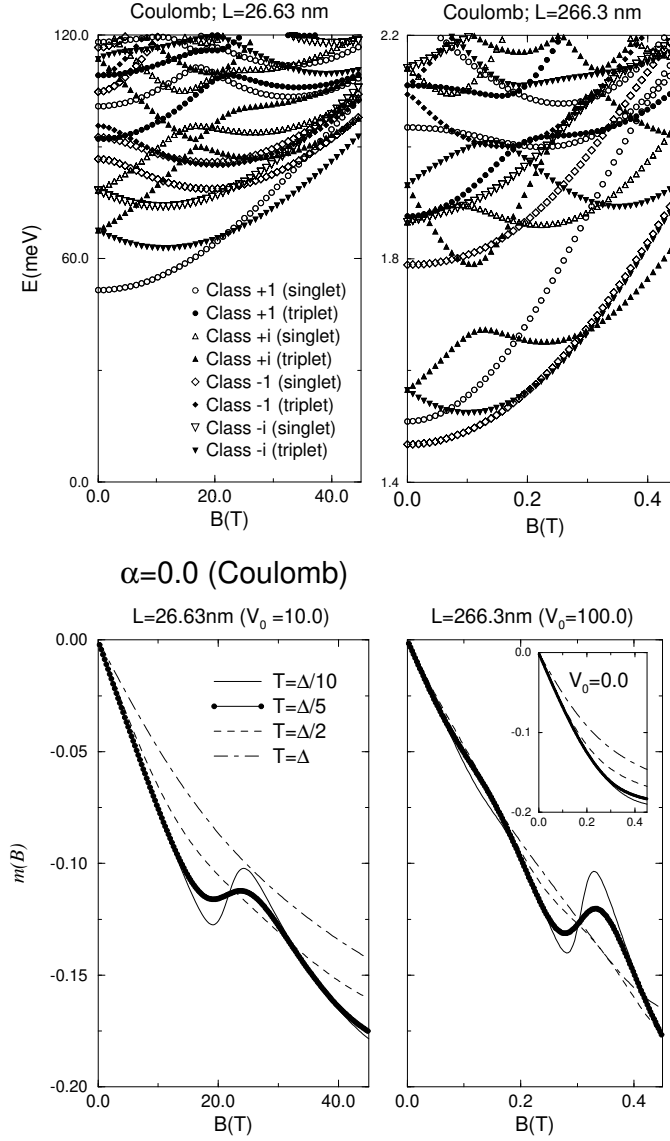


Figura 5.1: Níveis de energia em função de B com $V_0 = 10$ ($L = 26.63$ nm) e $V_0 = 100$ ($L = 266.3$ nm) e potencial coulombiano puro. As curvas de magnetização (abaixo, em unidades arbitrárias) apresentam oscilações a baixas temperaturas devido aos cruzamentos singleto-triplete no estado fundamental. As oscilações desaparecem no caso não-interagente (detalhe). As temperaturas estão em unidades do espaçamento médio Δ (temos $\Delta \approx 92^\circ K$ para $L = 26.63$ nm e $\Delta \approx 0.92^\circ K$ para $L = 266.3$ nm).

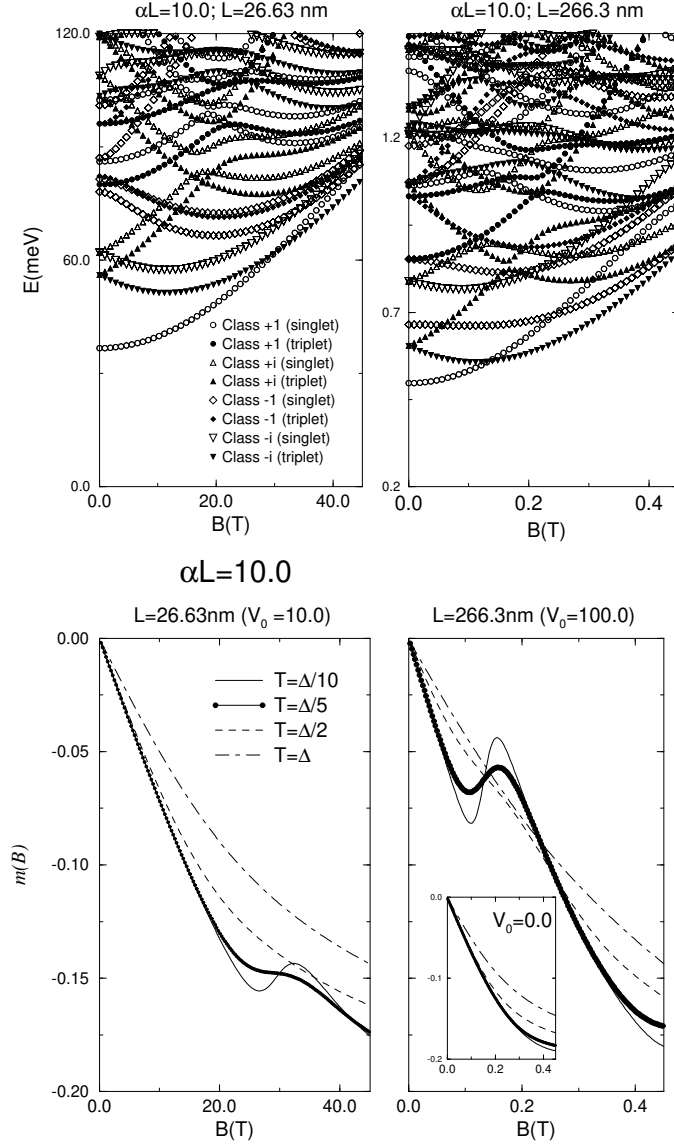


Figura 5.2: Níveis de energia e curvas de magnetização para $V_0 = 10$ ($L = 26.63$ nm) e $V_0 = 100$ ($L = 266.3$ nm) e alcance $\alpha^{-1} = L/10$. Os cruzamentos singlete-triplete ocorrem para valores de B diferentes do caso coulombiano puro (longo alcance).

(fig. 5.3 ao alto à direita). O primeiro cruzamento é menos abrupto, “suavizando” a descontinuidade em $\frac{dE_0}{dB}$, de modo que altura do primeiro pico fica mais atenuada. Para $\alpha^{-1} = L/10$ temos apenas um pico de altura $\sim 2.5|\chi_L|$

para $V_0 = 100$ e $T = \Delta/10$.

Na fig. 5.4, mostramos a susceptibilidade induzida por interação ($\chi^{\text{int}} = \chi - \chi^{(0)}$). Existe um comportamento bastante oscilatório de χ^{int} em função de B e em função da temperatura T , com picos paramagnéticos da ordem de $1 - 3.5|\chi_L|$.

5.3 Dependência com a temperatura

Por fim, analisamos a variação da susceptibilidade a campo zero com a temperatura. Na figura 5.5, mostramos o módulo da susceptibilidade total $|\chi_{(B=0)}|$ ($\chi_{(B=0)} < 0$) em função de T para diferentes valores de V_0 . Na ausência de interação, $|\chi(B=0)|$ decai suavemente com T . À medida que a interação aumenta, temos flutuações nesse comportamento. Essas flutuações são mais evidentes no caso coulombiano puro (embora também estejam presentes para $\alpha^{-1} = L/10$), com oscilações e “platôs” na região de $T \lesssim \Delta$. Para $T > \Delta$, o decaimento de $|\chi_{(B=0)}(T)|$ é uniforme.

Para identificar a influência da interação no comportamento de $\chi_{(B=0)}(T)$ consideramos apenas a susceptibilidade induzida por interação (χ^{int}) a campo nulo (figura 5.6). Neste caso, $\chi_{B=0}^{\text{int}}(T)$ apresenta fases diamagnéticas e paramagnéticas à medida que T varia.

O comportamento geral mostra, inicialmente, uma fase diamagnética para $T < \Delta$. Porém, isso não ocorre para $\alpha = 0$ e $V_0 = 100.0$, onde temos uma pequena oscilação para baixas temperaturas. Acreditamos que essa oscilação se deva ao acúmulo de estados próximos ao estado fundamental e abaixo do gap de $\sim 0.3\text{meV}$ no espectro (figura 5.1). Estes estados tendem a contribuir com um peso parecido para baixas temperaturas mas suas curvaturas em função de B têm sinais diferentes, o que leva a contribuições diferentes para $\chi_{(B=0)}(T)$.

Temos, a seguir, uma fase diamagnética, com um mínimo de $\chi_{B=0}^{\text{int}}(T)$ em $T \sim 2.5\Delta$. No caso de alcance curto e $V_0 = 20$, esse mínimo diamagnético é seguido de uma fase paramagnética para $T \sim 4\Delta$. Tal comportamento é qualitativamente similar ao observado por Ullmo, Baranger et. al. [12] (vide figura 1.3) em uma análise perturbativa (RPA) de um gás de elétrons com interação tipo Delta. No entanto, nossos resultados mostram uma variação em χ^{int} cerca de uma ordem de grandeza menor para interação fraca. Além disso, nossos resultados mostram uma outra fase diamagnética para $T \rightarrow 0$, o que não ocorre em [12].

No caso coulombiano puro (longo alcance), essa fase paramagnética a altas temperaturas é menos evidente, mesmo para V_0 pequeno. Além disso, as amplitudes de oscilação de $\chi_{B=0}^{\text{int}}(T)$ são bem maiores que no caso de curto alcance.

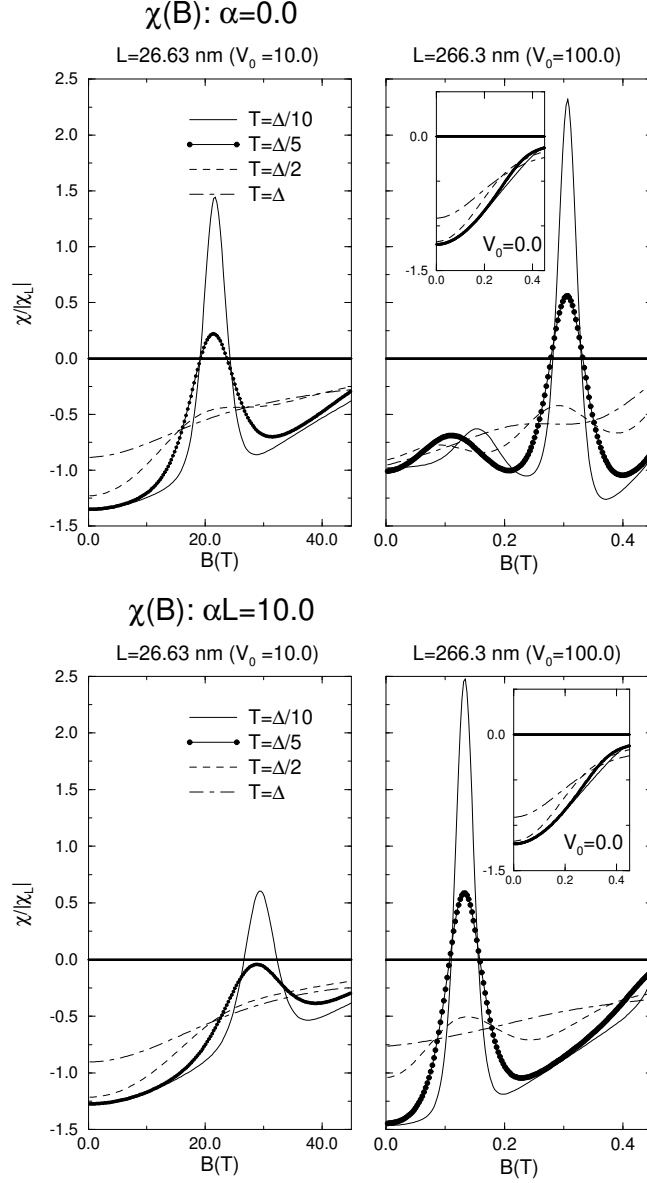


Figura 5.3: Curvas de susceptibilidade magnética em função do campo B para $V_0 = 10$ ($L = 26.63\text{nm}$) e $V_0 = 100$ ($L = 266.3\text{nm}$) no caso coulombiano puro ($\alpha = 0$, acima) e $\alpha^{-1} = L/10$ (abaixo). A susceptibilidade é dada em unidades da susceptibilidade de Landau ($|\chi_L| = e^2/12\pi mc^2$). Para $V_0 = 0$, o sistema é sempre diamagnético ($\chi^{(0)} < 0$, no detalhe). Picos paramagnéticos da ordem de $1.5|\chi_L|$ aparecem nos pontos de cruzamento singlete-triplete.

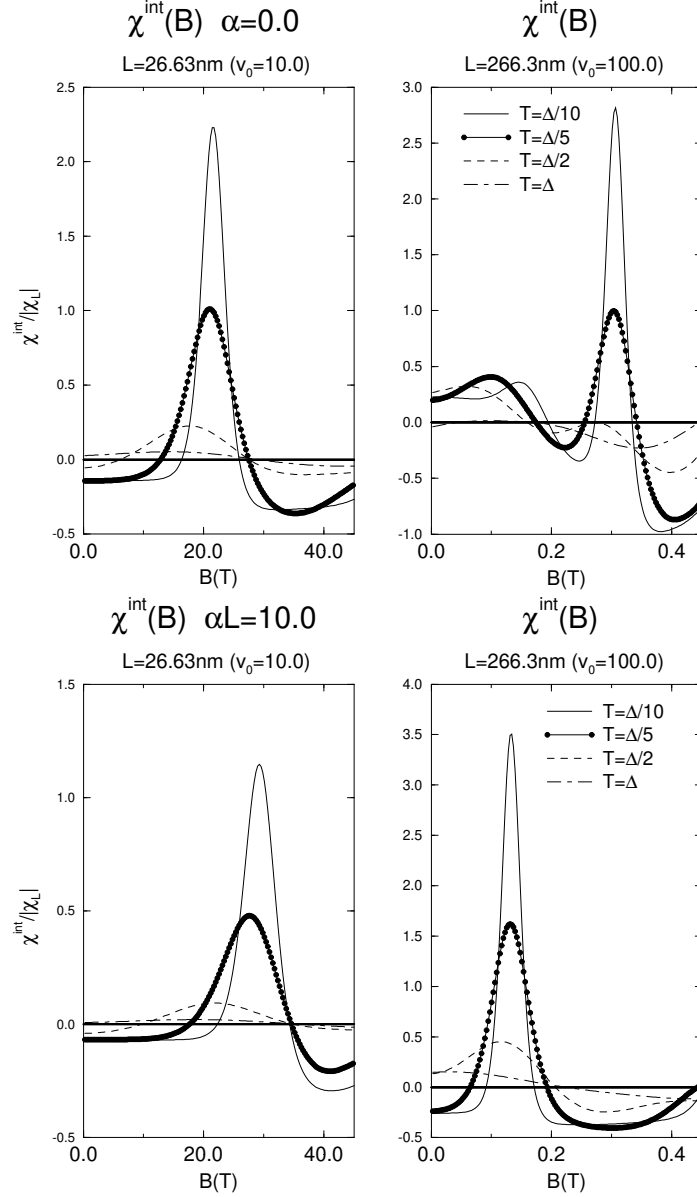


Figura 5.4: Susceptibilidade induzida por interação ($\chi^{\text{int}} = \chi - \chi^{(0)}$) em função de B e com $T = \Delta/10, \Delta/5, \Delta/2$ e Δ , para o caso coulombiano puro ($\alpha = 0$, acima) e $\alpha^{-1} = L/10$ (abaixo).

5.3.1 Influência de α

As mudanças no número, posição e altura dos picos paramagnéticos, apresentadas na seção anterior, juntamente com as modificações no comportamento

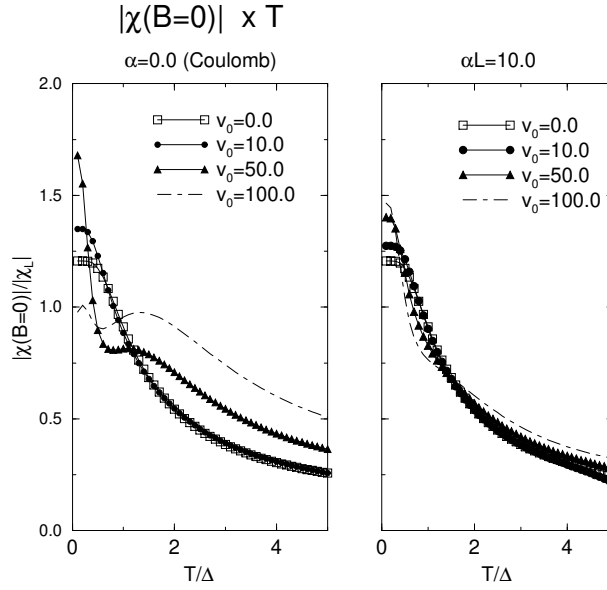


Figura 5.5: Comportamento de $|\chi_{(B=0)}|$ em função da temperatura.

de $\chi_{B=0}^{\text{int}}(T)$ em função da temperatura caracterizam uma influência do alcance da interação na susceptibilidade magnética.

Essa dependência de $\chi(B, T)$ em relação ao alcance é uma consequência direta do fato que o espectro de energia se modifica quando α muda, como vimos nos capítulos anteriores. Isso indica que mesmo as propriedades termodinâmicas se alteram conforme varia a configuração espacial da interação.

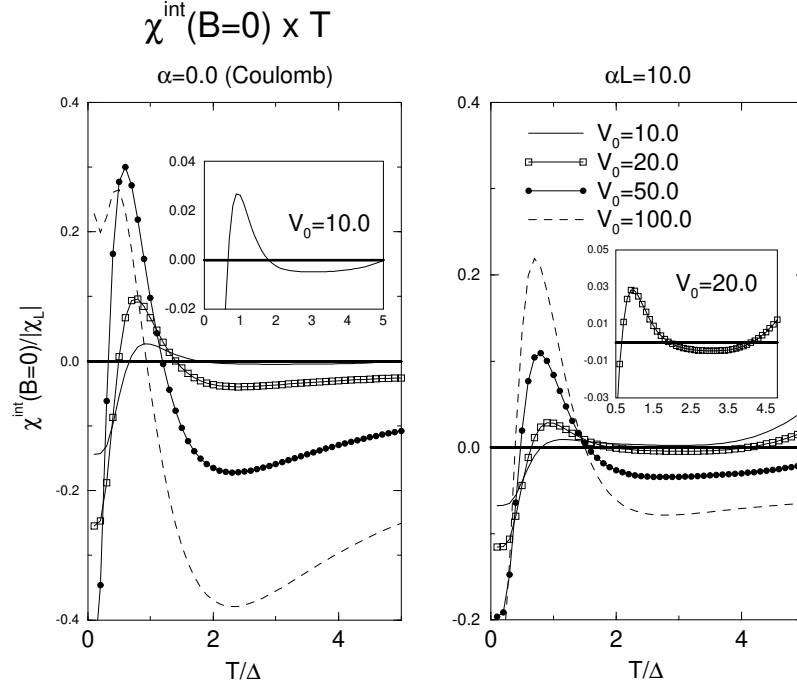


Figura 5.6: Comportamento de $\chi^{\text{int}}_{B=0}(T)$ para o caso coulombiano puro (esq.) e $\alpha^{-1} = L/10$ (dir.). Em função da temperatura, têm-se, em geral, uma fase inicial diamagnética ($T \lesssim \Delta$) seguida por um máximo paramagnético e um mínimo diamagnético. No detalhe, uma ampliação do caso fracamente interagente

Capítulo 6

Conclusões

Este trabalho de doutorado foi motivado em grande parte pelo experimento de Lévy et al. [6] onde foram medidas as propriedades magnéticas de um gás de elétrons bi-dimensional, com confinamento em uma fronteira quadrada. Embora o modelo de elétrons independentes tenha conseguido explicar grande parte dos resultados experimentais, é possível que a interação eletrônica residual tenha um papel importante, em particular no tocante ao comportamento da susceptibilidade com a temperatura [12].

Nos preocupamos aqui em entender a influência da interação eletrônica no caso mais simples possível. Conseguimos diagonalizar de forma exata o problema de dois elétrons confinados em um Bilhar (poço bi-dimensional infinito) de geometria quadrada e interagindo via um potencial repulsivo tipo Yukawa, com supressão exponencial para longas distâncias. Utilizamos a base de auto-estados do problema não-interagente, reescrita para levar em conta as simetrias rotacionais do problema de forma explícita, separando os estados em *classes* de simetria. O cálculo dos elementos de Matriz do potencial, que envolve inicialmente integrais em quatro dimensões, foi reduzido a integrais unidimensionais no ângulo relativo θ , possíveis de serem feitas numericamente.

Os resultados para o espectro de energia mostram que o campo magnético B e o potencial de interação quebram degenerescências nos níveis de duas partículas. Dentro de uma mesma classe de simetria, observa-se a repulsão de níveis de energia (“avoided crossings”) tanto em função do parâmetro de intensidade do potencial como em função do campo magnético. Este efeito é interpretado como uma assinatura da natureza clássica não-integrável do sistema e decorre da quebra de algumas simetrias espaciais do grupo $\mathcal{C}_{4v}$, presentes apenas no caso livre. Observa-se também, no caso interagente, a quebra da degenerescência de estados com configurações de spin distintas, por efeito da interação “de troca”. Em particular, ocorrem cruzamentos de

níveis de classes singleto-triplete para $B \neq 0$ no estado fundamental do caso interagente, já observados anteriormente [24, 25, 26, 27].

Mostramos também que o alcance da interação eletrônica tem um papel importante na supressão da formação de estados do tipo “Molécula de Wigner”, caracterizados por picos na densidade eletrônica próximos às quinas da fronteira, no regime fortemente interagente e a campo nulo [15]. Nossos resultados mostram que tais estados tendem a ficar descaracterizados no caso de uma interação de curto alcance. Além disso, para $B = 0$, a correlação espacial orbital do estado fundamental é sempre do tipo singleto. No entanto, para $B \neq 0$, é possível uma correlação espacial do tipo triplete, onde a parte orbital da função de onda de duas partículas $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ é nula para $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2$.

Concluimos também que a interação modifica o comportamento das propriedades magnéticas orbitais do sistema de dois elétrons. No caso não-interagente, o sistema é sempre diamagnético, com uma susceptibilidade magnética $\chi(B, T)$ da ordem da susceptibilidade de Landau ($\chi_L = e^2/12\pi mc^2$). No que se refere à componente de $\chi(B, T)$ induzida pela interação ($\chi^{\text{int}}(B, T)$), observam-se picos paramagnéticos em função do campo de amplitude de até $3.5\chi_L$ para temperaturas menores que o espaçamento médio Δ , ocasionados por cruzamentos singleto-triplete no estado fundamental.

No caso da susceptibilidade a campo nulo $\chi(B = 0, T)$, o efeito da interação é introduzir oscilações e “platôs” para $T \lesssim \Delta$. Observa-se que $\chi^{\text{int}}(B = 0, T)$ apresenta fases diamagnéticas e paramagnéticas em função da temperatura que, para interação fraca e alcance curto, tendem a concordar qualitativamente com os resultados de teoria de perturbação apresentados em [12].

É difícil especular se nossos resultados apontam para uma explicação do comportamento de $\chi(B = 0, T)$ medido por Lévy. Os resultados da figura 5.5 mostram que $\chi(B = 0, T)$ é sensível à interação e os “platôs” a baixas temperaturas e interação forte tendem a indicar uma queda mais lenta em função de T . No entanto, cálculos com mais elétrons seriam necessários para indicar se essa tendência se confirma ou não.

Desta forma, uma continuação possível para este trabalho seria o tratamento de um sistema N partículas interagentes confinadas no Bilhar em 2D. O cálculo do estado fundamental de tal sistema poderia ser feito de forma auto-consistente (via métodos de Hartree-Fock, por exemplo). É de se esperar que, conforme N cresça, o número de oscilações (“cruzamentos”) no estado fundamental aumente e que tenhamos uma contribuição paramagnética crescente para a susceptibilidade média $\langle \chi(B, T) \rangle$.

Bibliografia

- [1] L.P. Kowenhoven, C.M. Marcus, P.L. McEuen, S. Tarucha. R.M. Westervelt e N.S. Wingreen in *Mesoscopic Electron Transport*, editado por L.L. Sohn, L.P. Kowenhoven e G. Schön (Kluwer, Netherlands, 1997), p. 105
- [2] C.M. Marcus, A.J. Rimberg, R.M. Westervelt, P.F. Hopkins, A.C. Gossard *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992) 506; I.H. Chan, R.M. Clarke, C.M. Marcus, K. Campman and A.C. Gossard *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 3876; Para um review sobre resultados experimentais: S. Washburn and R.A. Webb *Rep. Prog. Phys.* **55** (1993) 1311;
- [3] K. Efetov *Supersymmetry in Disorder and Chaos* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997); B.L. Altshuler and B.D. Simons in *Mesoscopic Quantum Physics* editado por E. Akkermans, G. Montambaux, J.L. Pichard e Zinn-Justin (Elsevier, Amsterdam, 1995)
- [4] A.M. Chang, H.U. Baranger, L.N. Pfeiffer, K.W. West, T.Y. Chang *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 1695; J.A. Folk, S.R. Patel, S. Godijn, A.G. Huibers, S. Cronenwett, C.M. Marcus, K. Chapman, A.C. Gossard *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996) 1699;
- [5] R.A. Jalabert, A.D. Stone, Y. Alhassid, *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 3468;
- [6] L.P. Lévy, D.H. Reich, L. Pfeiffer and K. West, *Physica B* **189** (1993) 204
- [7] S.D. Prado, M.A.M. de Aguiar, J.P. Keating e R. Eglydio de Carvalho, *J. Phys. A* **27** (1994) 6091
- [8] D. Ullmo, K. Richter and R. Jalabert, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 383
- [9] F. Von Oppen *Phys. Rev. B* **50** (1994) 17 151
- [10] M.V. Berry, M. Tabor, *J. Phys. A* **10**, 371 (1977)

- [11] Por exemplo em M. Gutzwiller, in *Chaos and Quantum Physics*, editado por M.J. Giannoni, A. Voros e J. Zinn-Justin (Elsevier, Amsterdam, 1991) p. 201
- [12] D. Ullmo, H. U. Baranger. K. Richter. F von Oppen, R. A. Jalabert *Phys. rev. Lett.* **80** (1998) 895
- [13] F. Von Oppen, D. Ullmo, H.U. Baranger *Phys. Rev. B* **62** (2000) 1935
- [14] L.G. Aslamazov, A.I. Larkin *Sov. Phys. JETP* **40**, 321 (1975)
- [15] C.E. Creffield, W. Häusler , J.H. Jefferson, S. Sarkar *Phys. Rev. B*, **59** (1999) 10719-10724
- [16] M. Hammermesh, *Group Theory and its application to physical problems*, Dover, 1989
- [17] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin *Solid State Physics* (Saunders College, 1976)
- [18] T.Ando, A.B. Fowler, F. Stern *Rev. Mod. Phys.* **54** 437 (1982)
- [19] W.H. Press et. al. *Numerical Recipes in Fortran 77*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1986)
- [20] O. Bohigas, M.J. Giannoni, C. Schmidt, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984) 1
- [21] L. Meza-Montes, S.E. Ulloa *Physica B* **249-251** (1998) 224-227
- [22] L.G.G.V. Dias da Silva, *Órbitas Periódicas e suas Bifurcações em Bifurcações Magnéticos*, Tese de Mestrado, Unicamp, 1997
- [23] L.G.G.V. Dias da Silva, M.A.M. de Aguiar, *Eur. Phys. J. B* **16** (2000) 719-728
- [24] M. Wagner, U.Merkt, A.V. Chaplik *Phys. Rev. B* **45** (1992) 1951
- [25] F.M. Peeters, V.A. Schweigert *Phys. Rev. B* **53** (1996) 1468
- [26] R. Ugajin, *Phys. Rev. B* **53** (1996) 6963
- [27] C.E. Creffield, J.H. Jefferson, S. Sarkar, D.L.J. Tipton *Phys. Rev. B*, **62** (2000) 7249-7256
- [28] R.C. Ashoori, H.L. Stormer, J.S. Weiner, L.N. Pfeiffer, K.W. Baldwin, K.W. West *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 3088

- [29] R.C. Ashoori, H.L. Stormer, J.S. Weiner, L.N. Pfeiffer, S.J. Pearton, K.W. Baldwin, K.W. West *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 613
- [30] R.E. Peierls, *Quantum Theory of Solids* (Oxford, 1955) p. 144-149
- [31] J. Yang, M. Heiblum, D. Sprinzak, D. Mahalu, H. Shtrikman *Science*, **290** 779 (27 oct.2000); R. Schuster, E. Buks, M.Heiblum, D. Mahalu, V. Umansky, H. Shtrikman *Nature* **385** (1997) 417-420; A. Yacoby , M. Heiblum, M. Mahalu, H. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 4047-4050;
- [32] Para um review, vide K.A. Matveev in *Quantum Mesoscopic Phenomena and Mesoscopic Devices in Microelectronics* Edited by I.O. Kulik - Kluwer Academic Publishers - NATO Sceince series (2000) p. 129
- [33] R. Baltin, Y. Gefen, *Phys. Rev. Lett.* **83** (1999) 5094-5097;
- [34] R. Baltin, Y. Gefen, G. Hackenbroich, H.A. Weindenmüller *Eur. Phys. J. B* **10**(1999) 119-129 ; Y. Oreg, Y. Gefen *Phys. Rev. B* **55** (1997) 13 736 ;
- [35] L.I. Glazman in *Quantum Mesoscopic Phenomena and Mesoscopic Devices in Microelectronics* Edited by I.O. Kulik - Kluwer Academic Publishers - NATO Sceince series (2000) p. 105

Apêndice A

Conversão de Unidades

Neste apêndice mostramos os fatores de conversão para expressarmos a energia em milielétron-volts (meV) e campo magnético em Tesla (T). Também mostramos a conversão do campo em tesla para unidades de comprimento magnético l_m .

A energia cinética de uma partícula de massa m^* confinada em um bilhar de lado L é dada por (2.8):

$$E_{mn} = \left(\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2} \right) (m^2 + n^2) \quad (\text{A.1})$$

Utilizando:

$$\begin{aligned} \hbar &= 1.0546 \times 10^{-34} \text{ J.s} \\ m_e &= 9.11 \times 10^{-31} \text{ kg} \\ m^* &= 0.067m_e \text{ (para o GaAs)} \\ e &= 1.6021 \times 10^{-19} \text{ Coulomb} \\ 1\text{eV} &= 1.6021 \times 10^{-19} \text{ J} \\ 1\text{m} &= 10^{-9} \text{ nm} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

temos a energia E_{mn} em meV com L em nanômetros:

$$E_{mn} = \frac{(5.61 \times 10^3)}{L_{(\text{nm})}^2} (m^2 + n^2) \text{ meV} \quad (\text{A.3})$$

A unidade do campo magnético no sistema MKS (Tesla) corresponde a (massa)(carga⁻¹)(tempo⁻¹) de modo que

$$\frac{1}{2m^*} \left(\mathbf{P}_x - eB_{(T)}x \right)^2 \quad (\text{A.4})$$

tenha dimensões de energia. Em nossas diagonalizações, expressamos o campo em termos do parâmetro adimensional $B = eB_{(T)}L^2/\hbar$ e o variamos de 0

a 50. Para converter esse B adimensional em Tesla (com um dado L), temos a seguinte relação:

$$B_{(T)} = \frac{(659.0625)}{L_{(\text{nm})}^2} \quad (\text{A.5})$$

Podemos expressar também o campo em termos do comprimento magnético $l_m = \sqrt{\hbar/eB}$. Temos:

$$l_m = \sqrt{\frac{\hbar}{eB_{(T)}}} \approx (25.66) \sqrt{\frac{1}{B_{(T)}}} \text{ (nm)} \quad (\text{A.6})$$

ou, em termos do $B = eB_{(T)}L^2/\hbar$ (adimensional), temos

$$l_m = \sqrt{\frac{1}{B}}L \quad (\text{A.7})$$

Para $B = 50$ (o valor máximo do campo em todos os gráficos do cap. 4), temos $l_m = 0.14L$, ou seja, um comprimento magnético da ordem de $L/7$.

No caso da conversão $V_0 \leftrightarrow L$, temos, de (3.38):

$$V_0 = 16 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2\pi^2} \right) L = (0.37544)L_{(\text{nm})} \quad (\text{A.8})$$

utilizando $(4\pi\epsilon_0)^{-1} \cong 9 \times 10^9$ e $\epsilon_r = 10.9$ (para o GaAs).

Apêndice B

Blindagem exponencial em 3D

A interação eletrônica efetiva em um sistema realista (um metal ou em semicondutor, por exemplo) em geral não tem a forma coulombiana típica de longo alcance $\frac{Qq}{r^2}$. Fatores tais como efeitos de bordas, efeitos de “cargas-imagem”, presença de impurezas, dipolos elétron-buraco, presença de caroços positivamente carregados, dentre outros, contribuem de diferentes maneiras para deformações no potencial eletrostático do sistema.

Essa blindagem (ou “screening”) do potencial é um efeito de grande importância em sistemas de muitos elétrons pois suprime as correlações de longas distâncias, permitindo, em muitos casos, um tratamento perturbativo da interação eletrônica. Desta forma, ficam mais claras as razões do relativo sucesso do modelo de elétrons livres como primeira aproximação de sistemas reais [17].

Para ter uma melhor idéia de como se manifesta esse screening, farei aqui uma recapitulação da derivação apresentada no capítulo 32 do livro de Ashcroft e Mermin [17], evidenciando algumas passagens suprimidas originalmente. Também veremos a aproximação de Thomas-Fermi de *screening* leva a um potencial Coulombiano blindado com uma forma tipo Yukawa em 3 dimensões.

Consideremos um sistema em 3 dimensões com uma certa distribuição de carga $\rho^{(0)}(\vec{r})$ e um potencial eletrostático $\phi^{(0)}(\vec{r})$. A esse sistema, adicionamos uma distribuição de carga externa $\rho^{\text{ext}}(\vec{r})$ que gera um potencial elétrico $\phi^{\text{ext}}(\vec{r})$ dado pela equação de Poisson:

$$\nabla^2 \phi^{\text{ext}}(\vec{r}) = -4\pi \rho^{\text{ext}}(\vec{r}) \quad (\text{B.1})$$

O potencial total do sistema terá contribuições tanto da densidade externa quanto por $\rho^{\text{ind}}(\vec{r})$, a densidade eletrônica modificada pela presença da nova distribuição de carga:

$$\nabla^2 \phi(\vec{r}) = -4\pi \rho(\vec{r}) = -4\pi(\rho^{\text{ext}}(\vec{r}) + \rho^{\text{ind}}(\vec{r})) \quad (\text{B.2})$$

A situação é bem semelhante ao caso de cargas livres em um meio dielétrico polarizado onde as “cargas livres” induzem o deslocamento elétrico $\vec{D}$ e a “carga total” induz o campo elétrico $\vec{E}$. Uma aproximação comum nesse caso é assumir uma proporcionalidade entre $\vec{D}$ e $\vec{E}$ através da constante dielétrica ε . Assim, podemos supor também uma relação linear entre $\phi(\vec{r})$ e $\phi^{\text{ext}}(\vec{r})$ na forma:

$$\phi^{\text{ext}}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \varepsilon(\vec{r} - \vec{r}') \phi(\vec{r}') \quad (\text{B.3})$$

Tomando a transformada de Fourier dos potenciais, temos:

$$\phi^{\text{ext}}(\vec{q}) = \varepsilon(\vec{q}) \phi(\vec{q}) \quad (\text{B.4})$$

onde

$$\begin{aligned} \varepsilon(\vec{q}) &= \int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \varepsilon(\vec{r}) \\ \phi(\vec{q}) &= \int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi(\vec{r}) \\ \phi(\vec{r}) &= \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi(\vec{q}) \\ \phi^{\text{ext}}(\vec{q}) &= \int d\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi^{\text{ext}}(\vec{r}) \\ \phi^{\text{ext}}(\vec{r}) &= \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi^{\text{ext}}(\vec{q}) \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Voltando às equações de Poisson (B.1) e (B.2), temos:

$$\nabla^2 \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi(\vec{q}) = -4\pi \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} (\rho^{\text{ext}}(\vec{q}) + \rho^{\text{ind}}(\vec{q})) \quad (\text{B.6})$$

Usando a identidade:

$$\nabla^2 e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} = -q^2 e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (\text{B.7})$$

temos um sistema de duas equações acopladas:

$$\begin{cases} q^2 \phi(\vec{q}) &= 4\pi(\rho^{\text{ext}}(\vec{q}) + \rho^{\text{ind}}(\vec{q})) \\ q^2 \phi^{\text{ext}}(\vec{q}) &= 4\pi \rho^{\text{ext}}(\vec{q}) \end{cases} \quad (\text{B.8})$$

Uma outra aproximação possível (e válida no regime de potenciais eletrostáticos “fracos”) é a de que a densidade de carga induzida $\rho^{\text{ind}}(\vec{q})$ esteja linearmente relacionada ao potencial total na forma $\rho^{\text{ind}}(\vec{q}) = \chi(\vec{q}) \phi(\vec{q})$. Essa aproximação indica que a ação da densidade de carga externa foi “polarizar” o meio, induzindo um rearranjo de cargas linear com o potencial. Tal aproximação não é válida, portanto, no regime de campos fortes.

Com isso, substituindo (B.4) em (B.8) e utilizando esta última aproximação, temos

$$q^2(\phi(\vec{q}) - \varepsilon(\vec{q})\phi(\vec{q})) = 4\pi\chi(\vec{q})\phi(\vec{q}) \quad (\text{B.9})$$

e a relação entre $\varepsilon(\vec{q})$ e $\chi(\vec{q})$ será

$$\varepsilon(\vec{q}) = 1 - \frac{4\pi}{q^2}\chi(\vec{q}) \quad (\text{B.10})$$

B.1 Aproximação de Thomas-Fermi

Na aproximação de Thomas-Fermi, assumimos que $\phi(\vec{r})$ varia muito lentamente com $\vec{r}$ (regime de altos comprimentos de onda) de modo que as soluções da equação de Schrödinger para os elétrons não sejam muito diferentes da solução livre. Em particular, assume-se que o potencial elétrico apenas desloque a energia livre:

$$E(\vec{k}) = \frac{\hbar k^2}{2m} - e\phi(\vec{r}) \quad (\text{B.11})$$

Naturalmente a relação (B.11) só faz sentido para pacotes de onda, onde podemos, num certo sentido, associar à partícula uma posição $\vec{r}$ e um momento $\vec{k}$ (dentro de suas respectivas incertezas). Como os elétrons estão muito próximos da energia de Fermi, a incerteza na posição será da ordem de $\frac{1}{k_F}$, o que introduz uma escala para a variação espacial do potencial.

Se (B.11) for uma aproximação válida, podemos ter uma estimativa da densidade eletrônica $n(\vec{r})$ a uma temperatura T :

$$n(\vec{r}) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar k^2}{2m} - e\phi(\vec{r}) - \mu)} + 1} \quad (\text{B.12})$$

Comparando com a densidade livre, vemos que, nessa aproximação, a ação do potencial equivale a um deslocamento no potencial químico μ . A densidade de carga induzida no gás será a diferença entre as densidades eletrônicas multiplicada por e :

$$\rho^{\text{ind}}(\vec{r}) = -e(n(\mu + e\phi, \vec{r}) - n^{(0)}(\mu, \vec{r})) \quad (\text{B.13})$$

e, se $\phi(\vec{r}) \ll \mu$, temos uma relação linear entre a densidade induzida e $\phi(\vec{r})$:

$$\rho^{\text{ind}}(\vec{r}) \approx -e \frac{\partial n^{(0)}}{\partial \mu} \phi(\vec{r}) = \chi^{\text{TF}} \phi(\vec{r}) \quad (\text{B.14})$$

Utilizando (B.10), deduzimos o formato da constante dielétrica na aproximação de Thomas-Fermi.

$$\varepsilon^{\text{TF}}(\vec{q}) = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \frac{\partial n^{(0)}}{\partial \mu} \equiv 1 + \frac{k_0^2}{q^2} \quad (\text{B.15})$$

onde

$$k_0^2 \equiv 4\pi e^2 \frac{\partial n^{(0)}}{\partial \mu} \quad (\text{B.16})$$

O potencial blindado será dado então por

$$\phi^{\text{TF}}(\vec{q}) = \frac{\phi^{\text{ext}}(\vec{q})}{\varepsilon^{\text{TF}}(\vec{q})} = \frac{1}{1 + \frac{k_0^2}{q^2}} \phi^{\text{ext}}(\vec{q}) \quad (\text{B.17})$$

Um exemplo ilustrativo é o caso de uma carga pontual Q inserida no gás de elétrons. O campo $\phi^{\text{ext}}(\vec{q})$ será Coulombiano puro ($\frac{4\pi Q}{q^2}$) e podemos fazer o cálculo exato do potencial blindado na aproximação de Thomas-Fermi. De (B.17), temos:

$$\phi^{\text{TF}}(\vec{q}) = \frac{1}{1 + \frac{k_0^2}{q^2}} \phi^{\text{ext}}(\vec{q}) = \frac{4\pi Q}{k_0^2 + q^2} \quad (\text{B.18})$$

A transformada de Fourier pode ser feita de forma exata via método de resíduos e o resultado é um potencial de Yukawa:

$$\phi^{\text{TF}}(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^3} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \phi^{\text{TF}}(\vec{q}) = Q \frac{e^{-k_0 r}}{r} \quad (\text{B.19})$$

Na aproximação de Thomas-Fermi, o alcance do potencial é dado por (B.16) e depende da densidade eletrônica não interagente

$$n^{(0)}(\vec{r}) = \int \frac{dk}{(2\pi)^3} \frac{1}{e^{\beta(\frac{\hbar k^2}{2m} - \mu)} + 1} \quad (\text{B.20})$$

Este resultado evidencia a origem física da aproximação de blindagem exponencial da interação eletrônica. De (B.16), vemos que a presença de um gás de elétrons com densidade $n^{(0)}(\mathbf{r})$ entre cargas pontuais externas introduz um alcance finito na interação efetiva, exponencialmente suprimida a longas distâncias.