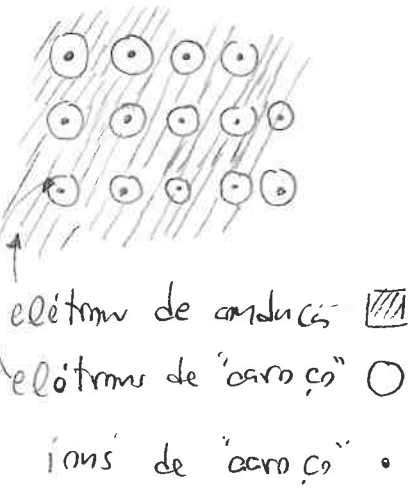


O gás de elétrons

(1)



O gás de elétrons, (juntamente com o oscilador harmônico quântico) é um modelo paradigmático em Física, particularmente Física da Matéria Condensada.

Comecemos nossa discussão com o Hamiltoniano da "Teoria de Tudo" (Laughlin, Pines)

$$H = (T_{ion} + V_{ion-ion}) + (T_{el} + V_{el-el}) + V_{el-ion}$$

$$T_{ion} + V_{ion-ion} = \int d\vec{R} \Psi_{ion}^\dagger(\vec{R}) \left(\frac{-\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \right) \Psi_{ion}(\vec{R}) \\ + \frac{1}{2} \int d\vec{R}_1 d\vec{R}_2 \Psi_{ion}^\dagger(\vec{R}_1) \Psi_{ion}^\dagger(\vec{R}_2) \frac{ze^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} \Psi_{ion}(\vec{R}_2) \Psi_{ion}(\vec{R}_1)$$

$$T_{el} + V_{el-el} = \int d\vec{r} \Psi_0^\dagger(\vec{r}) \left(\frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla_r^2 \right) \Psi_0(\vec{r}) \\ + \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \Psi_{\sigma_1}^\dagger(\vec{r}_1) \Psi_{\sigma_2}^\dagger(\vec{r}_2) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \Psi_{\sigma_2}(\vec{r}_2) \Psi_{\sigma_1}(\vec{r}_1)$$

$$V_{el-ion} = - \sum_I \int d\vec{r} d\vec{R} \Psi_0^\dagger(\vec{r}) \Psi_{ion}^\dagger(\vec{R}) \frac{ze^2}{|\vec{r} - \vec{R}|} \Psi_{ion}(\vec{R}) \Psi_0(\vec{r})$$

Conforme argumento de Laughlin + Pines, o Hamiltoniano acima tem muita informação. Podemos fazer algumas aproximações razoáveis em alguns limites para descrever, por exemplo, o comportamento de metais.

Metais \rightarrow propriedades van do elétrons de condução

Primeira aproximação: íons ^{de carga} formam um potencial periódico $V(\vec{r})$

"quase estáticos" a baixas temperaturas. Consideraram os efeitos de vibrações desse "cárdes de molas" mais à frente (fônons).

Segunda aproximação: "Modelo de jellium" \rightarrow íons (cargas) discretos podem ser aproximados por um fluido contínuo, positivamente carregado e homogêneo: um "jellium".

A primeira aproximação é bastante comum em Matéria Condensada e leva a uma descrição das funções de onda em termos do "Teorema de Bloch" para potenciais periódicos na forma:

$$V(\vec{r} + \vec{R}) = V(\vec{r}) \Leftrightarrow V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G} \in \text{Recipros}} V_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}, \quad \vec{G} \cdot \vec{R} = 2\pi n$$

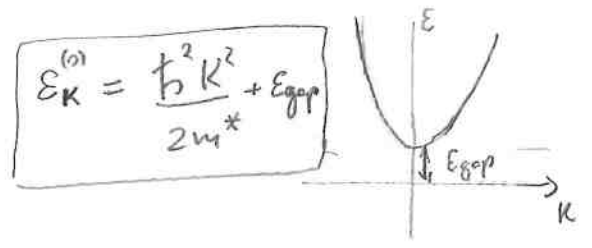
$$\Rightarrow H_{\text{Bloch}} \Psi_{n\vec{k}\sigma}(\vec{r}) = E_{n\vec{k}} \Psi_{n\vec{k}\sigma}(\vec{r}) \quad \text{onde} \quad \Psi_{n\vec{k}\sigma}(\vec{r}) = U_{n\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \chi_{\sigma}$$

$\Psi_{n\vec{k}\sigma}$:

- $\vec{k} \in$ Primeira Zona de Brillouin (PZB)
- $n \rightarrow$ índice de banda
- $U_{n\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = U_{n\vec{k}}(\vec{r})$

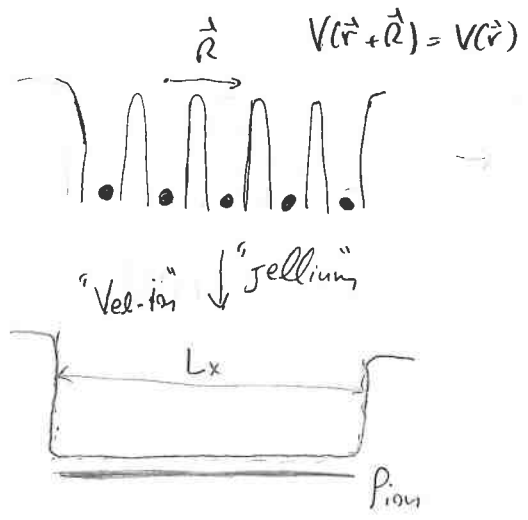
Uma terceira aproximação nos permite aproximar $\Psi_{n\vec{k}\sigma}$ por ondas planas e todo o efeito do potencial periódico dos íons é codificado em uma massa efetiva para o elétron: (modelo de massa efetiva)

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi_{n\vec{k}\sigma} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \chi_{\sigma} \\ m \rightarrow m^* \\ \vec{k} \rightarrow \text{sem restrições} \end{array} \right.$$



O modelo de jellium também leva também a onda plana, uma descrição similar ao modelo de massa efetiva no seguinte sentido:

considerando a densidade iônica como sendo uniforme e constante, $+ZeP_{ion}$ produzindo um potencial efetivo atrativo constante em um volume $V_{el} = L_x L_y L_z$,



esse potencial efetivamente elimina as inhomogeneidades da parte eletrônica, tornando o sistema neutro em termos de carga: 0 .

$$\begin{cases} V_{ion-ion} + V_{ee-ion} \rightarrow V_{ee-jellium} (< 0) \\ V_{ee-el} \rightarrow -V_{ee-jellium} \text{ (neutro devido à blindagem)} \end{cases}$$

$\Rightarrow H_{jellium} = T_{el}$ em um volume $V_{el} = L_x L_y L_z$.

$\Rightarrow H_{jellium} \Psi_{k\sigma}(\vec{r}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Psi_{k\sigma}(\vec{r}) ; \Rightarrow \Psi_{k\sigma}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V_{el}}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \chi_{\sigma}$
(funções de onda)

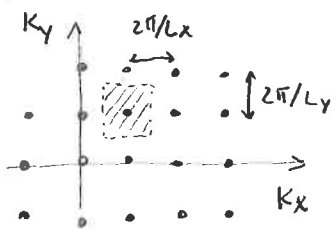
Escrevendo em 2° quantização:

$$H_{jellium} = \sum_{\vec{k}} \int d\vec{r} \Psi_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 \right) \Psi_{\vec{k}\sigma}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}\sigma} \epsilon_k C_{\vec{k}\sigma}^{\dagger} C_{\vec{k}\sigma}$$

onde $\Psi_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \Psi_{\vec{k}\sigma}^*(\vec{r}) C_{\vec{k}\sigma}^{\dagger}$ é o operador de campo e $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Se $V_{el} = L_x L_y L_z$ então $k_{x(y,z)} = \frac{2\pi}{L_{x(y,z)}} n_{x(y,z)}$ com $n_{x(y,z)} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

estão em valores quantizados. O "volume k " de um ponto deriv é:



$$V_k^{point} = \frac{2\pi}{L_x} \frac{2\pi}{L_y} \frac{2\pi}{L_z} = \frac{(2\pi)^3}{V_{el}} \Rightarrow \frac{d^3k}{V_k^{into}} = \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \cdot V_{el}$$

Logo: $N_{pts} = \sum_K = \int \frac{d^3k}{V_k^{po}} = V_{el} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$ $\frac{1}{V_{el}} \sum_K \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$

Qual será então o estado (fundamental) de N elétrons de Hélio? Como o sistema é não-interagente, esse estado será claramente escrito como um produto (anti-simetrizado) de estados de partícula única $|k, \sigma\rangle$ tal que $\langle \vec{r} | k, \sigma \rangle = \psi_{k\sigma}(\vec{r})$.

Na representação de número de ocupação, serão ocupados os N estados de energia ϵ_k mais baixa, sendo que $|k \uparrow\rangle$ e $|k \downarrow\rangle$ tem a mesma energia (gás degenerado): Supondo N par

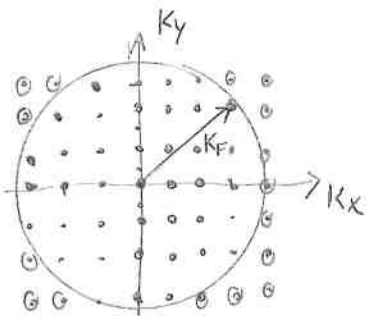
$$|GS\rangle_N = |n_{k_1 \uparrow} = 1, n_{k_1 \downarrow} = 1, n_{k_2 \uparrow} = 1, n_{k_2 \downarrow} = 1 \dots n_{k_{N/2} \uparrow} = 1, n_{k_{N/2} \downarrow} = 1, n_{k_{N/2+1}} = 0 \dots\rangle$$

onde $\epsilon_{k_1} < \epsilon_{k_2} < \epsilon_{k_3} \dots < \epsilon_{k_{N/2}} \equiv \epsilon_F$ ← energia de Fermi

Em termos de operadores de criação fermiônicos:

$$|GS\rangle_N = c_{k_{N/2} \uparrow}^\dagger c_{k_{N/2} \downarrow}^\dagger \dots c_{k_2 \uparrow}^\dagger c_{k_2 \downarrow}^\dagger c_{k_1 \uparrow}^\dagger c_{k_1 \downarrow}^\dagger |0\rangle$$

O vetor \vec{k} relativo ao último estado ocupado no estado fundamental é denominado vetor de onda de Fermi \vec{k}_F e o conjunto de



pontos (k_x, k_y, k_z) tais que

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = |\vec{k}|^2 = k_F^2$$

define a superfície de Fermi.

(no caso de Hélio, é uma esfera)

O volume V_{k_F} envolto pela superfície de Fermi é proporcional ao número de estados ocupados = $N/2$ (cada estado comporta duas partículas)

sendo: $\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \Rightarrow k_F = \frac{\sqrt{2m \epsilon_F}}{\hbar}$

(3D) $V_{k_F} = \frac{4}{3} \pi k_F^3 = \frac{N}{2} V_k^{part} = \frac{N}{2} \frac{(2\pi)^3}{Vol}$

$$\left. \begin{array}{l} k_F^3 = 3\pi^2 \left(\frac{N}{Vol} \right) \equiv 3\pi^2 n \\ \text{(densidade)} \\ \text{ou} \\ \epsilon_F = \left[\frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} \right] n^{2/3} \end{array} \right\}$$

A relação entre a energia de Fermi E_F e o outro importante parâmetro físico, a densidade $n = \frac{N}{Vol}$ do gás é um dos principais resultados da teoria do gás de elétrons.

Podemos obter esse resultado a partir do operador $\hat{N}_{k\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$:

$$N = \langle GS | \hat{N} | GS \rangle = \langle GS | \sum_{\sigma k} \hat{N}_{k\sigma} | GS \rangle = \left(\frac{1}{Vol} \sum_k \rightarrow \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \right) =$$

$$= \sum_{\sigma} \frac{Vol}{(2\pi)^3} \int d^3k \underbrace{\langle GS | \hat{N}_{k\sigma} | GS \rangle}_{\Theta(k_F - |k|)} = \frac{2 Vol}{(2\pi)^3} \underbrace{\int_0^{k_F} \int_0^{\pi/2\pi} \int_0^{2\pi} d\psi \sin\theta d\theta}_{\frac{4\pi k_F^3}{3}} k^2 dk$$

(indep de σ)

$$\Rightarrow \frac{N}{Vol} = \sum_{\sigma} \frac{4\pi}{8\pi^3} k_F^3 \Rightarrow \underline{\underline{k_F^3 = 3\pi^2 n}}$$

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Calculamos também a energia do estado fundamental:

$$E^{(0)} = \langle GS | H_{el\text{el}} | GS \rangle = \langle GS | \sum_{k\sigma} E_k \hat{N}_{k\sigma} | GS \rangle = \sum_{\sigma} \frac{Vol}{(2\pi)^3} \int d^3k E_k \Theta(k_F - |k|)$$

$$= \frac{2 Vol}{(2\pi)^3} \cdot \left(\frac{\hbar^2}{2m} \right) \cdot \int_0^{k_F} \int_0^{\pi/2\pi} \int_0^{2\pi} d\psi \sin\theta d\theta \cdot \int_0^{k_F} k^2 \cdot k^2 dk = \frac{Vol}{8\pi^3} \cdot \left[\frac{\hbar^2}{2m} \cdot k_F^2 \cdot \frac{k_F^3}{5} \right]$$

$$E^{(0)} = \frac{Vol}{\pi^2} E_F \cdot \frac{3\pi^2 n}{5} = \frac{3}{5} N E_F$$

é a energia no estado fundamental do gás de elétrons

Valores típicos para metais (cobre) (1 meV = 11.6 K)

$$\left\{ \begin{array}{l} E_F = 7.03 \text{ eV} \approx 81600 \text{ K}/k_B \quad (\text{típico} \sim 10 \text{ eV ou } 100 \text{ mil Kelvin}) \\ \lambda_F = \frac{2\pi}{k_F} = 0.46 \text{ nm} = 4.6 \text{ \AA} \quad (\text{típico } 1 \text{ \AA} \rightarrow \text{DIFÍCIL DE CONFIRMAR!!}) \\ v_F = \frac{\hbar k_F}{m} = 1.57 \times 10^6 \text{ m/s} = 0.005 c \end{array} \right.$$

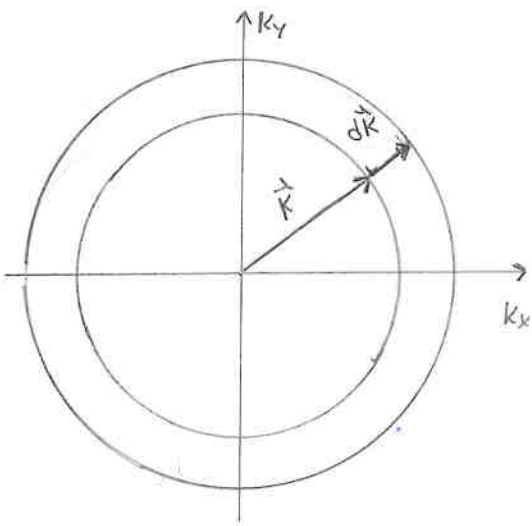
Densidade de Estados

(6)

A densidade de estados é uma das principais características de um sistema quântico de muitos corpos. No caso do gás de elétrons não interagente, pode ser obtida analiticamente. É definida como $\rho_0(\epsilon) = \frac{dN_{st}}{d\epsilon}$

onde $\Delta N_{st}(\epsilon) = \rho_0(\epsilon) \Delta \epsilon$ é o número de estados com energia entre ϵ e $\epsilon + \Delta \epsilon$.

No caso do gás de elétrons $\Delta N_{st}(\epsilon)$ está diretamente ligado ao número de partículas com energias entre ϵ e $\epsilon + \Delta \epsilon$. Equivalentemente, será igual ao número de estados contido no volume no espaço k entre \vec{k} e $\vec{k} + d\vec{k}$



$$\Delta N_k = \frac{2 \Delta V_k}{V_k^{est}} = \frac{8\pi k^2 dk}{(2\pi)^3 / Vol} = \frac{Vol}{\pi^2} k^2 dk \quad (3D)$$

Para encontrar $\Delta N_{st}(\epsilon)$, usamos: $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\Rightarrow k = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \epsilon^{1/2} ; d\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m} 2k dk = \frac{\hbar^2}{m} k dk$$

Logo $k^2 dk = k \cdot k dk = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cdot \frac{m}{\hbar} \epsilon^{1/2} d\epsilon = \frac{1}{2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \epsilon^{1/2} d\epsilon$

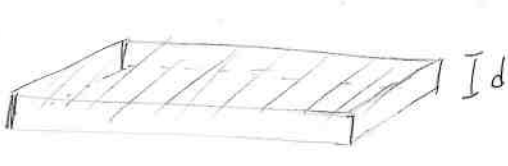
Assim: $\Delta N_{st}(\epsilon) = \frac{Vol}{2\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \epsilon^{1/2} d\epsilon \Rightarrow \rho_0(\epsilon) = \frac{Vol}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} \epsilon^{1/2}$ (3D)
 $\epsilon < \epsilon_F$

A densidade de estados é muito útil para se passar de uma integral de momento para uma integral em energia. Note que, em energia, temos:

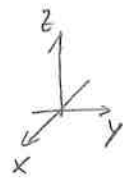
$$N = \int_0^{\epsilon_F} \rho_0(\epsilon) d\epsilon ; E^{(0)} = \int_0^{\epsilon_F} \epsilon \rho_0(\epsilon) d\epsilon$$

Gás de elétrons em 2D

O "gás de elétrons em 2D" (2DEG) é um sistema bem conhecido e relativamente fácil de ser realizado experimentalmente (tipicamente em interfaces de heteroestruturas semicondutoras). Do ponto de vista da teoria, o 2DEG tem várias características interessantes.



Os elétrons são confinados em uma direção (z) e "livres" nas outras duas, de modo que sua função de onda fica:



2DEG

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi_{\vec{k}, i}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\vec{k}_\parallel \cdot \vec{r}} \phi_n(z) \chi_i \\ E_{\vec{k}, i} &= \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m} + E_i = \underline{E_{\vec{k}}^{2D}} + E_i \end{aligned} \right. \quad \left\{ \begin{aligned} \vec{k} &= (k_x, k_y) \\ \vec{r} &= (x, y) \end{aligned} \right.$$

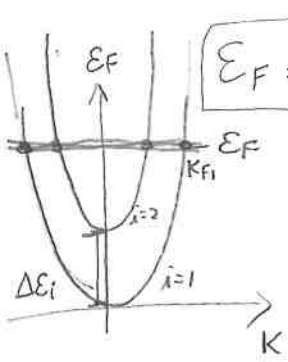


A densidade de estados se modifica pois a dimensionalidade muda

$$\Delta N_k^{2D} = \frac{2 \Delta A_k}{A_{\text{total}}} = \frac{2 \cdot 2\pi k dk}{(2\pi)^2/A} = \frac{A 4\pi}{4\pi^2} \cdot \frac{m}{\hbar^2} \cdot dE^{2D} \quad \left(E^{2D} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Rightarrow dE^{2D} = \frac{\hbar^2 k dk}{m} \right)$$

$$\Rightarrow \Delta N_{\text{est}}^{2D}(E) = \frac{Am}{\pi \hbar^2} dE \Rightarrow \rho_0^{2D}(E) = \text{cte} = \frac{Am}{\pi \hbar^2} \quad \text{para os estados } k. \quad (\text{dados } n)$$

No entanto, a energia de Fermi vai envolver os estados confinados também: $(E_F^{2DEG} \ll E_F^{\text{Metal}} \Rightarrow E_F^{2DEG} \approx 10 \text{ meV})$



$$E_F = \frac{\hbar^2 k_{Fi}^2}{2m} + E_{iF}$$

onde i_F determina o índice de sub-banda,

ou seja, para cada subbanda $i \rightarrow i+1$ um "novo" contínuo de estados fica "disponível" para ser preenchido.

$$\rho_0(E) = \frac{Am}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^{i_F} H(E - E_i)$$

$H(E - E_i) \rightarrow$ função de Heaviside ("escada")

Densidade de estados em 1D e 0D

Sistemas eletrônicos unidimensionais também são possíveis de serem realizados experimentalmente. Os exemplos mais comuns são nanotubos de carbono e "fios" quânticos (além de estados de borda em sistemas Hall). No entanto, a descrição correta desses sistemas envolve, em geral, um modelamento além do "gás de elétrons em 1D". As razões são várias, desde efeitos de superfície (estados quirais em nanotubos) até efeitos mais expressivos da interação elétron-elétron em 1D ("blindagem" menos efetiva, líquido de Luttinger).

De qualquer modo, é um exercício didático interessante derivar a densidade de estados do "1DEG". A função de onda fica escrita como:

$$\Psi_{k,n,l}(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx} \cdot \Psi_{nl}(y,z) \chi_s; \quad E_{k,n,l} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_n + E_l$$

para a densidade de estados no contínuo: $\Delta N_k^{1D} = 2 \frac{\Delta L_k}{L^{1D}} = 2 \cdot \frac{dk}{(2\pi)/L} = \frac{L}{\pi} dk$

$dE = \frac{\hbar^2}{m} k dk \Rightarrow dk = \frac{m}{\hbar^2} \frac{dE}{k} = \frac{m}{\hbar^2} \frac{dE}{\sqrt{2mE}}$

$k = \sqrt{2mE}$

$\Delta N_{1D}(E) = \frac{L}{\pi \hbar} \left(\frac{m}{2}\right)^{1/2} E^{-1/2} dE$

ou seja $\rho_0^{1D}(E) = \frac{L}{\pi \hbar} \left(\frac{m}{2}\right)^{1/2} E^{-1/2} \Rightarrow \rho_0(E) = \frac{L}{\pi \hbar} \left(\frac{m}{2}\right)^{1/2} \sum_{n,l} \frac{H(E-E_n) H(E-E_l)}{E^{1/2}}$

