

**Sistema bicamada: Formação  
e condensação de Bose-Einstein  
de éxcitons indiretos**

*Tathiana Moreira D. R. Cotta*

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

# SISTEMA BICAMADA: FORMAÇÃO E CONDENSAÇÃO DE BOSE-EINSTEIN DE ÉXCITONS INDIRETOS

por

Tathiana Moreira Diniz Ribeiro Cotta

Departamento de Física

UFMG

Tese apresentada ao colegiado do curso de Doutorado em Física da Universidade Federal de Minas Gerais em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do grau de Doutor em Ciências Físicas.



Belo Horizonte, MG, Brasil

Julho, 2008

© *Todos os direitos autorais reservados.*

*De ontem em diante serei o que sou no instante agora  
Onde ontem, hoje e amanhã são a mesma coisa  
Sem a idéia ilusória de que o dia, a noite e a madrugada são coisas distintas  
Separadas pelo canto de um galo velho  
(...)*

*A cena repete a cena se inverte  
enchendo a minha alma d'aquilo que outrora eu deixei de acreditar  
metade de mim agora é assim  
de um lado a poesia o verbo a saudade  
do outro a luta, a força e a coragem pra chegar no fim  
e o fim é belo incerto... depende de como você vê o novo, o credo, a fé que  
você deposita em você e só  
(...)*

*Minha fé deu nó  
(...)*

*Temos acorrentados nossos motivos de sobra pra relaxarmos  
e acomodarmos com a vida que levamos agora...  
(...)*

*Fragmentos das músicas da trupe O Teatro Mágico*

*Dedico este trabalho a minha vó Enny*

## Agradecimentos

Gostaria de agradecer de todo coração às pessoas que foram vitais para a realização deste trabalho:

- Minha querida orientadora Maria Carolina Nemes por ter me dado forças nos momentos mais difíceis da minha vida, por toda a sua paciência e amizade.
- Ao professor Giancarlo que se deslocava com muito boa vontade do CEFET até a UFMG para discutirmos o trabalho, por ter sido um amigo e me emprestado seus ouvidos muitas e muitas vezes.
- Ao amigo Erlon por tudo que fez por mim, por todo seu empenho, por seu grande coração generoso e amigo.
- Ao professor José Geraldo que sempre esteve distosto a ajudar em tudo que fosse necessário e também por todas as vezes em que se deslocou do CEFET até a UFMG para discutirmos o trabalho.
- Ao professor Piza que sempre nos recebeu muito bem na USP, por todas as discussões ricas e deliciosas que nos proporcionou, por todas as idéias maravilhosas que foram fundamentais para o desenvolvimento deste trabalho.

Gostaria também de agradecer a todos os meus amigos e familiares que sempre estiveram presentes na minha vida e sempre me incentivaram a seguir adiante:

- Meu marido, Eduardo, que nunca me deixa desistir
- Minha irmã, Pâmella, que sempre me ouve e me incentiva
- Minha Mãe por sempre me apoiar
- Minha querida tia Olga que sempre pergunta como anda meu trabalho
- Minha grande amiga Beth que é meu anjo da guarda

---

---

## RESUMO:

---

Nessa contribuição, estudamos os chamados éxcitons indiretos em sistemas de dois poços quânticos, chamados sistemas bicamada. A primeira parte é dedicada ao estudo da formação dos éxcitons de forma esquemática. Para tanto, modelamos a criação de bósons a partir da aniquilação de pares de férmions. Esse modelo apresenta uma transição de fase que argumentamos representar uma transição entre estados com tunelamento de elétrons entre as camadas e o estado de muitos corpos onde não há tunelamento. Esse estado de muitos corpos é justamente o estado em que é possível a formação de condensado no sistema bicamada e é comumente chamado de estado incompressível. Dada a simplicidade e integrabilidade do modelo é possível estabelecer uma correspondência um a um por exemplo entre as órbitas periódicas clássicas e o espectro quântico. Além disso a transição de fase no limite clássico está ligada ao aparecimento de uma “separatriz”, que divide o espaço de fase de forma que ele, a partir dali, conterá dois tipos de órbitas, não apenas órbitas fechadas.

Na segunda parte estudamos as condições microscópicas para uma possível condensação de Bose-Einstein dos éxcitons indiretos através de um estado de muitos corpos que propomos para o sistema. A condição ideal para a formação de condensado se dá quando o fator de forma da interação Coulombiana é aproximado por uma função delta, pois assim os elementos fora da diagonal de longo alcance (off-diagonal long range order - ODLRO) da função de correlação exciton-exciton tende para uma constante no limite termodinâmico. Porém, como a interação de Coulomb é de longo alcance, a transferência de momento não pode ser considerada nula, isso nos obriga a considerar que cada elétron interage, não só com o buraco localizado logo abaixo dele no poço adjacente, mas também com os buracos vizinhos. Com isso, vemos que o mesmo critério leva a função ODLRO a zero inviabilizando a formação do condensado, mesmo se consideramos a largura desses éxcitons muito pequena.

---

---

# ABSTRACT:

---

In the present contribution, we have studied the so called indirect excitons in bilayer systems. We separate this work into two parts, in the first we propose a schematic model to study the formation of excitons from electron - hole pairs and in the second we study microscopic conditions for the formation of a Bose Einstein condensate from excitons.

The proposed schematic model exhibits a phase transition which is signaled both in the quantum and classical versions of the model. In this work we show that not only the quantum ground state but also higher energy states, up to the energy of the corresponding classical separatrix orbit, “sense” the transition. We also show two types of one-to-one correspondences in this system: On the one hand, between the changes in the degree of entanglement for these low-lying quantum states and the changes in the density of energy levels; on the other hand, between the variation in the expected number of excitons for a given quantum state and the behavior of the corresponding classical orbit.

In the second part, we have studied microscopic conditions for the occurrence of the condensation. We use the coulomb interaction and an educated guess for the ground state for excitons in the bilayer. The interaction induces the formation of excitons as electron-hole pairs. We show that the ideal condition to condensate formation occurs when the momentum difference in the electron and hole which form the exciton is zero. In this situation, the off-diagonal long-range order (ODLRO) terms of the exciton-exciton correlation function goes to a constant in the thermodynamic limit. If the momentum difference is not zero, so the ODLRO terms go to zero and we have, according to this criterium, no exciton condensation.

---

---

# ÍNDICE

---

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>O Sistema bicamada</b>	<b>3</b>
2.1	Níveis de Landau . . . . .	3
2.2	Éxcitons indiretos em sistemas bicamada . . . . .	6
2.3	Sistema bicamada no formalismo de pseudo-spin . . . . .	7
2.4	Estados com $\nu_{Tot} = 1$ . . . . .	9
2.5	Evidências experimentais . . . . .	11
2.5.1	Coerência entre as camadas . . . . .	11
2.5.2	Estado coletivo com $\nu_{Tot} = 1$ . . . . .	12
2.5.3	Formação dos éxcitons indiretos . . . . .	14
<b>3</b>	<b>Ferramentas úteis a este projeto</b>	<b>16</b>
3.1	Segunda quantização e mecânica quântica de muitos corpos . . . . .	16
3.1.1	Operadores de campo . . . . .	16
3.1.2	Equação de Schrödinger na segunda quantização . . . . .	17
3.1.3	Gás de elétrons degenerados . . . . .	21
3.2	Condensado de Bose-Einstein . . . . .	26
3.2.1	Condensado atômico . . . . .	26
3.2.2	Aproximação de campo médio gaussiana . . . . .	27
3.3	Transição de fase . . . . .	30
3.4	Emaranhamento e entropia linear . . . . .	32

---

<b>4</b>	<b>Modelo esquemático para formação de bósons no sistema bicamada</b>	<b>34</b>
4.1	Modelo para criação de bósons a partir de pares de férmions . . . . .	34
4.1.1	Hamiltoniano quântico . . . . .	34
4.1.2	Limite semiclássico . . . . .	37
4.2	Resultados . . . . .	40
4.3	Conclusão . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Condensação de Bose-Einstein dos éxcitons indiretos</b>	<b>48</b>
5.1	Elemento de matriz coulombiano . . . . .	48
5.2	Estado fundamental e função de correlação entre éxcitons . . . . .	52
5.3	Conclusão . . . . .	57
	<b>Apêndice</b>	<b>57</b>
	<b>A Efeito Hall Quântico</b>	<b>58</b>
	<b>B Princípio fundamental da contagem</b>	<b>63</b>
	<b>C Discriminante e a classificação dos pontos críticos</b>	<b>66</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>67</b>

---



---

## LISTA DE FIGURAS

---

2.1	Esquemática da transformação partícula-buraco em sistemas bicamada.	7
2.2	Resistividade longitudinal para duas amostras semelhantes onde uma apresenta o estado $\nu_{Tot} = 1$ e a outra não. . . . .	11
2.3	Diagrama de fase para ocorrência do estado Hall quântico com $\nu_{Tot} = 1$ . . .	12
2.4	Experimento de tunelamento para o sistema bicamada que será modelado no capítulo 4 . . . . .	13
2.5	Medidas das resistividades longitudinal e Hall que comprovam a formação dos éxcitons indiretos no sistema bicamada . . . . .	15
3.1	Solução gráfica da equação 3.46 . . . . .	29
3.2	Solução gráfica da equação 3.42 com $\gamma < 0$ . . . . .	30
3.3	Estados fundamental e primeiro excitado da energia como função da constante de acoplamento, $k$ , próximo a um comportamento crítico. . . . .	31
4.1	Espectro de energia para o Hamiltoniano que modela a formação de bósons a partir de pares de férmions, utilizando um total de 1600 férmions. $k$ é o índice que rotula os autoestados, $\eta = \frac{8}{gn^{3/2}}$ é um fator de escala. Os valores de $\delta/g$ variam de 0 a 100 de 10 em 10 como indicado. Detalhe mostra o ponto que inflexão ainda existente para $\delta/g = 50$ e sua ausência para $\delta/g = 60$ . . . . .	36
4.2	Espectro de energia para $H'$ utilizando $n = 1600$ e $\eta = \frac{8}{gn^{3/2}}$ . Os valores de $\delta/g$ variam de 0 a 100 de 10 em 10 como indicado. Detalhe mostra o ponto que inflexão ainda existente para $\delta/g = 50$ e sua ausência para $\delta/g = 60$ . .	37
4.3	Superfícies da Hamiltoniana clássica $h = 2g'\sqrt{1 - J_z}(1 + J_z)\cos\varphi + \delta'(1 + J_z)$ . Temos em (a) $\delta'/g' = 0$ , em (b) $\delta'/g' = 1,0$ , em (c) $\delta'/g' = 2,5$ e em (d) $\delta'/g' = 3,0$ . . . . .	40
4.4	Espaço de fase clássico correspondente às superfícies da figura 4.3. As órbitas destacadas em vermelho são as separatrizes para cada valor de $\delta'/g'$	41

4.5	(a) Espectro de energia da figura 4.1. (b) Energia em função de $\delta/g$ para estados entre $k = 0$ e $k = 800$ variando de 100 em 100 como indicado na figura. Note que a energia para o estado $k = 0$ se anula após a transição . . . . .	41
4.6	(a) Entropia linear, $\Delta = 1 - Tr\rho_f^2$ , representada pelos quadrinhos pretos e diferença na energia, $\Delta E_k = E_{k+1} - E_k$ , bolinhas vermelhas. (b) Número médio de bósons no sistema. Todas as curvas se referem ao estado fundamental do sistema . . . . .	42
4.7	Entropia linear, $\Delta = 1 - Tr\rho_f^2$ , representada pelos quadrinhos pretos e diferença na energia, $\Delta E_k = E_{k+1} - E_k$ , bolinhas vermelhas, para (a) $k = 01$ , (b) $k = 04$ , (c) $k = 09$ e (d) $k = 18$ . . . . .	43
4.8	Entropia linear, $\Delta = 1 - Tr\rho_f^2$ , representada pelos quadrinhos pretos, diferença na energia, $\Delta E_k = E_{k+1} - E_k$ , bolinha vermelhas e número médio de bósons representado pelas estrelinhas verdes. Em (a) e (b) $k = 300$ , em (c) e (d) $k = 400$ , em (e) e (f) $k = 500$ e finalmente em (g) e (h) $k = 600$ . . . . .	44
4.9	Energia em função de $\delta/g$ considerando bósons interagentes, $H^\ddagger$ , e utilizando $\alpha/g$ igual a 0,001 em (a), 0,01 em (b), 0,1 em (c) e 1 em (d). ( $n = 1600$ ) . . . . .	45
5.1	Gráfico de $F_p$ normalizado em função de $lp$ para diferentes valores de $d/l$ . Note que a largura a meia altura é da ordem 0,01. . . . .	52
A.1	Placa condutora sob ação de um campo magnético, $\mathbf{B}_z$ , e densidade de corrente, $\mathbf{i}_x$ , perpendiculares entre si, dando origem a um campo elétrico, $E_y$ . A diferença de potencial entre as bordas, carregadas positiva e negativamente, é chamada voltagem Hall. . . . .	58
A.2	Componentes da resistividade, $R_{xx}$ e $R_{xy}$ , medidas em uma heterojunção de GaAs-GaAlAs mantida a 0,3K de temperatura e densidade eletrônica $n = 4,2 \times 10^{11} cm^{-2}$ [53]. . . . .	60
A.3	Representação dos níveis de Landau para os casos: (a) níveis localizados, representados por funções $\delta$ e exatamente separados pelo fator de $1/2 \hbar\omega_c$ ; (b) banda de estados estendidos quase degenerados, com a energia de Fermi entre a primeira e a segunda banda; (c) bandas de estados estendidos, com nível de Fermi localizado em cima da segunda banda. [49] . . . . .	61
A.4	Resistividade diagonal, $\rho_{xy}$ , medida em uma amostra mantida a 0,4K de temperatura e densidade eletrônica $n = 1,12 \times 10^{11} cm^{-2}$ . Para campos maiores que 14T, os dados foram divididos por um fator de 2,5. [54] . . . . .	62

# Introdução

---

Um éxciton é um estado ligado entre um elétron e um buraco em sistemas semicondutores, e isso se dá através da interação de Coulomb. Os buracos, por sua vez, são estados eletrônicos desocupados simulados por partículas de carga positiva de mesma magnitude da carga eletrônica. Existem vários sistemas interessantes onde esse comportamento está presente [1–6]. Como elétrons e buracos possuem cada um spin  $1/2$ , esperamos que os éxcitons apresentem comportamento de bósons, e existem indicações experimentais para este comportamento. Sendo bósons, é natural pensar que em algum sistema será possível encontrar condensados de Bose-Einstein (BEC) de éxcitons. A condensação de éxcitons foi proposta pela primeira vez em 1962 [2, 7], mas sofreu críticas ferrenhas de céticos que não acreditavam ser possível ocorrer de fato uma condensação em sistemas excitônicos. Porém, existem hoje muitos experimentos mostrando evidências de sua condensação [8, 9]. Até 1967, todos os estudos eram propostos considerando os éxcitons como bósons verdadeiros, mas eles não obedecem exatamente a estatística de Bose. Quem primeiro propôs estudá-los através de seus componentes (elétrons e buracos) foram Keldysh e Kozlov [10]. Um dos grandes desafios de estudar BEC dos éxcitons é escrever sua função de onda em termos de componentes fermiônicas, mas que, ainda assim, reconhecidamente descreva o comportamento bosônico. A função de onda precisa, então, conter coerência de fase macroscópica, pois isso é uma consequência importante das interações entre os bósons.

Sistemas muito interessantes e extremamente ricos de efeitos físicos, dentre os quais podemos estudar éxcitons, são aqueles formados por dois poços quânticos submetidos a fortes campos magnéticos. Esses sistemas têm sido estudados desde 1981 e são um pouco melhores para o estudo dos éxcitons do que as microcavidades. Isso se dá porque um éxciton em um semicondutor consiste em um elétron ligado a um buraco onde, na maior parte dos casos, o elétron está na banda de condução e o buraco na banda de valência. Nesse caso, os éxcitons são opticamente gerados, criando elétrons e buracos em números iguais que decaem rapidamente via emissão de luz. O curto tempo de vida deles é um grande empecilho para o estudo de BEC em semicondutores. Por outro lado, em sistemas bicamada, a grande separação entre elétrons e buracos reduz a taxa na qual eles se recombinam com fótons [11, 12].

Neste trabalho pretendemos contribuir para a questão, ainda em aberto, referente à formação de condensados de éxcitons indiretos que são formados em sistema bicamada. Em particular, nos chamou a atenção um trabalho [11] publicado na Nature em 2004 no qual os autores, Eisenstein e MacDonald, descrevem um sistema de dois poços quânticos. O sistema estudado por eles apresenta evidências experimentais de condensação de éxcitons. Com base nesse trabalho, nós nos propomos estudar como este comportamento se manifesta nestes sistemas.

Primeiramente, com o intuito de investigar a transição de fase elétron-buraco para éxcitons de forma simples, mas sem deixar de ser realista, propusemos um modelo esquemático no qual a aniquilação de um par partícula-buraco produz um bóson, onde o parâmetro responsável por essa interação será igualmente responsável pela transição de fase. Estudamos o espectro do modelo e pudemos determinar a mudança qualitativa no comportamento de correlações do estado fundamental como função do parâmetro de acoplamento. Para isso utilizamos uma ferramenta que quantifica o emaranhamento dos dois subsistemas (bósons e férmions), e que tem sido muito utilizada também em informação quântica: a entropia linear. A entropia de von-Neuman (ou qualquer outra função convexa) também poderia ser usada, mas a entropia linear é simples de calcular e por isso será utilizada neste trabalho. Além da mudança radical nas correlações do estado fundamental como função do acoplamento, observamos que todo o espectro parece sinalizar a transição de fase. Isso foi feito de várias formas como será mostrado em detalhes no capítulo 4. Essas alterações espectrais têm o seu análogo clássico direto, e ao estabelecê-lo, observamos que existem dois tipos de órbitas no espaço de fase e em particular uma separatriz que as divide. Esse comportamento é gerado variando o parâmetro de acoplamento que provoca a transição entre bósons e férmions. A energia da separatriz corresponde quanticamente a um estado de energia nula e há um acúmulo de níveis notável em sua proximidade. Esta parte do trabalho, que consiste da modelagem do experimento de tunelamento realizado na referência [11], bem como a possível formação de bósons encontra-se no capítulo 4.

A seguir, passamos a explorar os aspectos de muitos corpos mais realísticos do problema. A partir da interação coulombiana e um “Ansatz” para o estado fundamental da função de onda de muitos corpos, estudamos se as condições ODLRO se aplicam (ODLRO que do inglês significa *off-diagonal long-rang order* é a condição para existência de condensado mais aceita atualmente, mais detalhes na seção 3.2.2). Encontramos condições ideais para a formação de um condensado, i. e., a transferência de momento, proporcionada pela interação coulombiana, seja o mais próximo possível de uma função delta centrada no zero. No entanto, mostramos que a conhecida natureza de longo alcance dessa interação pode prejudicar a formação do condensado. Estudamos quão sérios são os prejuízos para a formação do condensado, introduzidos pela largura em momento transferido associada a interação de Coulomb, mediante o critério ODLRO no capítulo 5.

# O Sistema bicamada

---

Nesse capítulo fazemos uma revisão a respeito do sistema bicamada. Para tanto, na seção 2.1 vamos fazer uma revisão sobre os níveis de Landau, na seção 2.2 fazemos uma breve descrição do sistema e dos éxcitons indiretos. Na seção seguinte, 2.3, fazemos uma analogia de pseudo-spin para o sistema. Na seqüência discutimos como conseguir que o sistema possua meio preenchimento dos níveis de Landau em cada camada, resultando no fator de preenchimento  $\nu_{tot} = 1$ . E por fim mostramos evidências experimentais para a coerência entre as camadas, a presença do estado coletivo e formação dos éxcitons indiretos.

## 2.1 Níveis de Landau

Para conseguir o estado no qual é possível haver condensação de éxcitons no sistema bicamada, é necessária a aplicação de campos magnéticos muito fortes. Por isso, precisamos, inicialmente, entender como este campo afeta o sistema, e para este propósito, começaremos estudando os níveis de Landau, que são formados devido ao campo aplicado. Assim, o hamiltoniano de uma partícula movendo-se em um campo magnético,  $\vec{B}$ , homogêneo e constante aplicado na direção de  $z$  como

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 - \mu \vec{s} \cdot \vec{B} \quad (2.1)$$

onde  $\vec{p}$  é o momento da partícula,  $\vec{A}$  o potencial vetor e  $\vec{s}$  o operador de spin. As constantes  $m$ ,  $e$ ,  $c$  e  $\mu$  são, respectivamente, a massa e a carga da partícula, a velocidade da luz e o momento magnético. No calibre de Landau o potencial vetor é escrito como  $\vec{A} = -B_0 y \hat{i}$  e reescrevendo a hamiltoniana, (2.1), temos:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p}_x + \frac{e}{c} B_0 y \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - \mu B_0 \hat{s}_z \quad (2.2)$$

onde foi utilizado o fato de que  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$  e, portanto,  $\vec{p}$  comuta com  $\vec{A}$ .

Nota-se que  $\hat{s}_z$  comuta com  $\hat{\mathbf{H}}$  e seu coeficiente em (2.2) é uma constante (independente das coordenadas). Com isso sabemos que, como  $\hat{s}_z$  é conservado, a função de onda é separável em um produto de duas funções, uma de coordenadas e outra de spin. Mas a função de spin é dada simplesmente pelos valores de  $\hat{s}_z$ , que são  $\sigma = -s, \dots, s$ . Podemos notar ainda que as coordenadas  $x$  e  $z$  não aparecem explicitamente em (2.2) e, portanto, os operadores  $\hat{p}_x$  e  $\hat{p}_z$  também comutam com  $\hat{\mathbf{H}}$  ( $\hat{p}_x$  e  $\hat{p}_z$  são conservados). Com isso podemos escrever a função de onda das coordenadas,  $\varphi$ , apenas como:

$$\varphi(x, y, z) = e^{(i/\hbar)(p_x x + p_z z)} \chi(y). \quad (2.3)$$

Calculando a equação de Schrödinger,  $\hat{\mathbf{H}}\varphi = E\varphi$ , e isolando a parte em  $\chi(y)$  temos:

$$\left[ \frac{m}{2} \omega_c^2 (y - y_0)^2 - \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - \mu_s B_0 \sigma \right] \chi(y) = E \chi(y) \quad (2.4)$$

onde

$$y_0 = -l^2 k, \quad (2.5)$$

$$\omega_c = \frac{eB_0}{mc} \quad (2.6)$$

é a frequência cyclotron,

$$l = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB_0}} \quad (2.7)$$

é o comprimento magnético e  $k = p_x/\hbar$ . A equação (2.4) é formalmente idêntica à equação de Schrödinger para um oscilador harmônico linear com frequência  $\omega_c$  em torno do ponto  $-l^2 k$ . Com isso, pode-se concluir que a constante  $E - \frac{p_z^2}{2m} + \mu B_0 \sigma$  assume os valores  $(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c$ , onde  $n$  é um número inteiro. Assim, obtemos a seguinte expressão para os valores de energia de uma partícula em um campo magnético uniforme na direção de  $z$ :

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c - \mu B_0 \sigma + \frac{p_z^2}{2m}. \quad (2.8)$$

E as funções de onda correspondentes, a menos da constante de normalização,  $\aleph$ , são dadas por:

$$\varphi_{n,k}(x, y, z) = \aleph e^{ikx} e^{ip_z z} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2l^2}} h_n[(y-y_0)/l] \quad (2.9)$$

onde  $h_n$  são os polinômios de Hermite. Cada conjunto dos  $\varphi_{n,k}(x, y, z)$  para um determinado  $n$  é chamado de nível degenerado de Landau [13]. No plano  $x-y$ , temos a energia dada pelos dois primeiros termos de (2.8) e as funções de onda correspondentes são dadas pela equação (2.9) a menos, é claro, de  $e^{ip_z z}$ . Considerando que o comprimento do sistema na direção  $x$  é  $L_x$ , o nível de Landau normalizado correspondente à energia mais baixa ( $n = 0$ ) pode ser escrito como

$$\varphi_{0,k}(x, y) \equiv \varphi_k(x, y) = \frac{1}{(lL_x\sqrt{\pi})^{\frac{1}{2}}} e^{ikx} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2l^2}}, \quad (2.10)$$

Uma vez que a energia não depende de  $k$  (ou seja, de  $p_x$ ), o qual assume uma seqüência contínua de valores, os níveis de energia são continuamente degenerados. No entanto, o grau de degenerescência torna-se finito se o movimento no plano  $x-y$  é restrito a uma área finita  $S = L_x L_y$ , ainda que ela seja muito grande. Os valores possíveis de  $p_x$  tornam-se discretos mas, ainda assim, para cada nível de Landau conseguimos um vasto número de orbitais degenerados. O número de valores possíveis de  $p_x$  em um intervalo  $\Delta p_x$  será  $(L_x/h)\Delta p_x$ . Todos os valores de  $p_x$  acessíveis são tais que o centro da órbita que o elétron descreve está dentro de  $S$ , negligenciando o raio do círculo em comparação com o tamanho de  $L_y$  e  $\Delta p_x = eB_0 L_y/c$ . Assim o número total de estados acessíveis é dado por  $eB_0 S/hc$ .

Um poço quântico pode confinar elétrons em planos de duas dimensões e, aplicando um campo magnético, podemos utilizar os resultados acima para estudá-los. Nessa situação, um parâmetro importante para o estudo de elétrons nos níveis de Landau é o fator de preenchimento,  $\nu$ , que é definido como a razão entre o número de estados ocupados e o número total de estados existentes. Alternativamente, podemos definir uma densidade de estados como  $\eta = (\text{número de estados})/S$  e redefinindo o fator de preenchimento em termos dessas densidades temos que  $\nu = \eta/\eta_{Tot}$ . E, pela discussão anterior, conhecemos a densidade total de estados que é dada por  $\eta_{Tot} = eB_0/hc$ , então podemos escrever o fator de preenchimento como

$$\nu = \frac{h}{eB_0} \eta.$$

Um fato curioso é que  $\nu$  não pode assumir quaisquer valores indistintamente, seus valores possíveis são governados pelo efeito Hall quântico (Apêndice A). Além de  $\nu$  possuir uma dependência explícita com do campo aplicado, também dependerá de qual sistema estamos estudando, se é um sistema mono-camada, ou um bicamada, ou se possui mais poços quânticos no sistema.

## 2.2 Éxcitons indiretos em sistemas bicamada

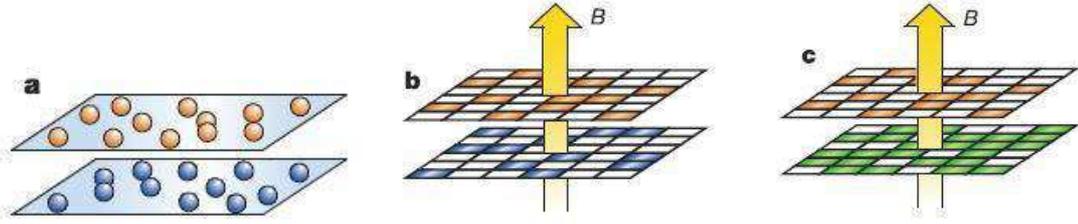
Um sistema bicamada, SBC, é aquele composto por dois poços quânticos paralelos, contendo, em cada camada, um gás de elétrons bidimensional, como está esquematizado na figura 2.1a. Ao ser aplicado um campo magnético forte ( $B \sim 5 T$ ), perpendicularmente ao plano dos poços na amostra, os elétrons passam a ocupar os níveis de Landau, como dito anteriormente. Desse modo, cada nível contém um grande número de orbitais degenerados representados na figura 2.1b por quadradinhos. No esquema, os quadradinhos coloridos representam orbitais ocupados e os brancos, desocupados. Nessa situação, podemos estudar o sistema através dos pares de Cooper, mas existe um artifício matemático que nos permite ver as coisas de outra forma. Suponha que tenhamos um estado de  $n_e$  elétrons representado por  $|n_e\rangle$ , suponha também que tenhamos os operadores usuais de criação,  $a_k^\dagger$ , e aniquilação,  $a_k$ , de elétrons em um estado  $k$ , de modo que  $\sum_k a_k^\dagger a_k |n_e\rangle = n_e |n_e\rangle$ . Por outro lado, é possível definir operadores para os estados desocupados da seguinte forma  $\bar{a}_k^\dagger = a_k$  e  $\bar{a}_k = a_k^\dagger$  de tal maneira que

$$\sum_k \bar{a}_k^\dagger \bar{a}_k |n_e\rangle = \sum_k (1 - a_k^\dagger a_k) |n_e\rangle = (\Omega - n_e) |n_e\rangle$$

onde  $\Omega$  é o número total de estados no sistema e  $\Omega - n_e$  é o número de estados desocupados, que chamamos de  $n_b$ . Desse modo, os estados desocupados podem ser tratados como partículas de carga positiva denominadas buracos. Esse procedimento é matematicamente exato [14] e recebe o nome de transformação partícula-buraco. Fazer essa transformação em um dos poços no SBC facilita o entendimento do estudo de BEC, isso porque os bósons formados por partícula-buraco são mais fáceis de entender e trabalhar do que os pares de Cooper. Esta transformação está esquematizada na figura 2.1c. Note que a transformação foi feita na camada de baixo (em 2.1c) e, por isso, os quadradinhos que eram brancos na parte **b** da figura 2.1 tornaram-se verdes na parte **c**, representando os buracos, e os orbitais eletrônicos ocupados (quadradinhos azuis em **b**) passam a representar orbitais de buraco desocupados (quadradinhos brancos da camada de baixo em **c**). A interação dos elétrons (em níveis não transformados) com os buracos é então atrativa. Assim, os elétrons de um poço tendem a se ligar aos buracos do poço adjacente e a este estado ligado damos o nome de éxciton indireto [11].

Quando o poço sofre uma transformação partícula-buraco, seu fator de preenchimento muda de  $\nu$  para  $1 - \nu$ . E no caso em que o sistema possui mais de uma camada, definimos então o fator de preenchimento total como  $\nu_{Tot} \equiv \sum_i \nu_i$  onde  $i$  é o índice que rotula cada uma das camadas, transformadas ou não. Nesse trabalho vamos nos restringir apenas a sistemas com  $\nu_{Tot} = 1$ . A obtenção deste estado não é trivial e será discutida em mais detalhes na seção 2.4.

Em sistemas com um único poço, os valores inteiros de  $\nu$  representam estados onde a interação entre as partículas não é muito importante e podemos considerá-las não-interagentes. Mas em SBC tanto efeitos de uma partícula quanto o regime de muitos



**Figura 2.1:** Em **a** temos uma representação esquemática dos dois gases de elétrons bidimensionais, um em cada poço. Em **b** é aplicado um campo magnético forte  $B$  perpendicular ao plano dos poços. Os quadradinhos representam os orbitais de algum nível de Landau, onde os quadradinhos coloridos representam orbitais ocupados e os brancos desocupados. A parte **c** esquematiza a transformação partícula-buraco onde os quadradinhos vermelhos e verde são elétrons e buracos, respectivamente, e os brancos são orbitais desocupados de elétrons no poço ou de buracos [11].

corpos podem ser estudados com  $\nu_{Tot}$  inteiro, ou seja,  $\nu_i$  semi-inteiro em cada camada. No sistema mono-camada, estados com fator de preenchimento que possuem denominador par são muito difíceis de serem observados e, mais ainda, de serem explicados; já em sistemas de dois poços eles são experimentalmente robustos e teoricamente bem entendidos. Com um poço apenas, a repulsão de Coulomb entre cada par de elétrons só depende da distância entre eles no plano 2D. Para sistemas de dois poços isto obviamente não é verdade; a separação física das camadas faz com que as interações entre partículas em poços diferentes sejam mais fracas que as interações entre partículas dentro do mesmo poço. Essa assimetria é a principal razão para estados de  $\nu_i = 1/2$  serem encontrados em sistemas com dupla camada (mais detalhes na seção 2.4). A segunda diferença crítica entre os dois sistemas é a existência de tunelamento entre os poços no SBC. Porém, em amostras onde a barreira é estreita mas muito alta, o tunelamento pode não ser importante, enquanto que os efeitos da interação de Coulomb entre as partículas em diferentes camadas são essenciais [15–17].

## 2.3 Sistema bicamada no formalismo de pseudo-spin

Considerando que os poços são idênticos, e que os elétrons do sistema estejam ocupando apenas o mais baixo dos níveis de Landau, podemos utilizar o formalismo de pseudo-spin, PS, para descrever o sistema. A idéia é que cada elétron pode estar em um dos poços, o de cima ou o de baixo, e nos referimos a estes dois estados como PS para cima,  $\varrho_{\uparrow}$ , ou para baixo,  $\varrho_{\downarrow}$ , respectivamente. A componente  $z$  da densidade de PS

$$S^z(\vec{r}) = \frac{1}{2} \left[ \varrho_{\uparrow}^{\dagger}(\vec{r})\varrho_{\uparrow}(\vec{r}) - \varrho_{\downarrow}^{\dagger}(\vec{r})\varrho_{\downarrow}(\vec{r}) \right] \quad (2.11)$$

representa a diferença na densidade de carga local entre os poços. As componentes  $x$  e  $y$  do PS podem ser combinadas para formar operadores de tunelamento

$$S^+(\vec{r}) = [S^-(\vec{r})]^\dagger = \frac{1}{2} \varrho_\uparrow^\dagger(\vec{r}) \varrho_\downarrow(\vec{r}). \quad (2.12)$$

As forças de Coulomb são explicitamente dependentes do PS, já que as interações entre elétrons dentro de cada poço e em os poços diferentes não são iguais. Seja  $V_\kappa^1$  a transformada de Fourier com respeito às coordenadas planares,  $(x, y)$ , do potencial de interação entre um par de elétrons no mesmo poço e seja  $V_\kappa^2$  a transformada de Fourier para um par de elétrons em poços diferentes. Se desprezarmos a espessura finita de cada poço, temos que

$$V_\kappa^1 = 2\pi e^2 / \varepsilon q \quad \text{e} \quad V_\kappa^2 = e^{-qd} V_\kappa^1 \quad (2.13)$$

onde  $d$  é a separação entre as camadas [18]. A parte da Hamiltoniana de interação que depende do PS pode ser escrita como

$$V = 2 \sum_{\kappa} V_\kappa^z S_\kappa^z S_{-\kappa}^z. \quad (2.14)$$

onde  $\vec{\kappa}$  representa o vetor de onda,  $\vec{S}_\kappa$  a transformada de Fourier da densidade de spin e  $V_\kappa^z \equiv \frac{1}{2}(V_\kappa^1 - V_\kappa^2)$ . Como  $V_\kappa^1 > V_\kappa^2$ , então  $V_\kappa^z$  é sempre positivo. Se a orientação do spin move para fora deste plano tal que  $\langle S^z \rangle \neq 0$ , a energia aumenta, logo a equação 2.14  $V$  faz com que o sistema mantenha os spins no plano  $xy$  [19]. Por causa disso, a simetria de PS na Hamiltoniana é reduzida de  $SU(2)$  para  $U(1)$ . Além disso, ela aumenta as flutuações quânticas no sistema. Então o spin total não é mais um bom número quântico. Entretanto, para pequenas separações entre os poços, esperamos que as flutuações quânticas sejam pequenas. Com uma separação muito grande, podemos esperar que as flutuações sejam dominantes e desacoplem os dois poços.

Na ausência do termo de quebra de simetria ( $d = 0$ ), o estado fundamental exato para  $\nu = 1$  é bem conhecido, já que ele é simplesmente um nível de Landau de pseudo-spin completamente ocupado. Como uma primeira aproximação para  $d$  finito, podemos assumir que os autoestados permanecem exatamente os mesmos, mas uma mudança na energia levanta a degenerescência entre os estados do nível de Landau, favorecendo aqueles com  $S^z \sim 0$ . Isto é, podemos assumir que o vetor de PS seja ainda completamente polarizado e sem flutuações, mas agora se localiza no plano  $xy$ . Considere um exemplo específico do estado que tem seus pseudospins orientados na direção de  $\hat{x}$ , tal que ele seja um autoestado de  $S^x$  total

$$|\Psi\rangle = \prod_k \frac{1}{2} (a_{k\uparrow}^\dagger + a_{k\downarrow}^\dagger) |0\rangle, \quad (2.15)$$

onde  $k$  é o índice dos orbitais no nível de Landau mais baixo,  $a_{k\uparrow}^\dagger$  ( $a_{k\downarrow}^\dagger$ ) cria um elétron na

camada de cima (baixo) e  $|0\rangle$  é o vácuo eletrônico. Construído dessa forma, este estado tem todos os orbitais preenchidos e por isto  $\nu_{Tot} = 1$ . Na presença de tunelamento, este é o estado fundamental exato do sistema não-interagente [12]. Isso porque, nessa situação o número de elétrons em cada poço é incerto, e este é um estado coerente com incerteza em  $S^z$ , já que cada elétron está em uma combinação linear de PS para cima e para baixo. Mas o que queremos argumentar é que ele também deve ser uma boa aproximação para o estado fundamental do sistema **na ausência de tunelamento**, isso porque ele tem uma energia de Coulomb favorável [12]. Então, estamos assumindo que o sistema espontaneamente quebra a simetria U(1) associada com a conservação da diferença de carga dos poços. Isso ocorre espontaneamente devido a efeitos de interação pois, assim, não existe a necessidade de tunelamento entre elétrons nos poços. A energia do elétron, porém, não pode ser sensível à fase relativa entre os dois poços, então, terá energia igualmente boa, qualquer estado coerente da forma

$$|\Psi\rangle = \prod_k \frac{1}{2}(c_{k\uparrow}^\dagger + e^{i\gamma}c_{k\downarrow}^\dagger)|0\rangle. \quad (2.16)$$

Esse é o estado de superposição corresponde ao PS localizado no plano  $xy$ , inclinado por um ângulo  $\gamma$  com o eixo  $x$ .

No estado fundamental do sistema com pequena separação entre os poços, a fase  $\gamma$  é arbitrária, mas é a mesma para todos os elétrons [3]. O sistema é então completamente pseudo-spin polarizado. Existe uma completa incerteza em identificar em qual poço o elétron se encontra. Para ver isso, imagine que duas partículas se aproximam uma da outra, na ausência de tunelamento. Elas estão em uma superposição linear dos estados de cada poço. Se essa superposição é caracterizada pela mesma fase, a função de onda é simétrica sob troca do PS. Então a função de onda espacial é antisimétrica e deve anular-se com a aproximação das duas partículas. Isto minimiza a energia de Coulomb e faz com que cada elétron evite ao máximo seus vizinhos em ambos os poços, caindo em um estado incompressível. Nestas condições, podemos imaginar que, se as camadas estão no estado de meio preenchimento, a configuração mostrada na figura 2.1b apresentará quadrinhos brancos e coloridos alternados como em um tabuleiro de xadrez, de modo que os quadrinhos vermelhos a camada de cima estejam localizados sobre dos quadrinhos brancos da camada de baixo.

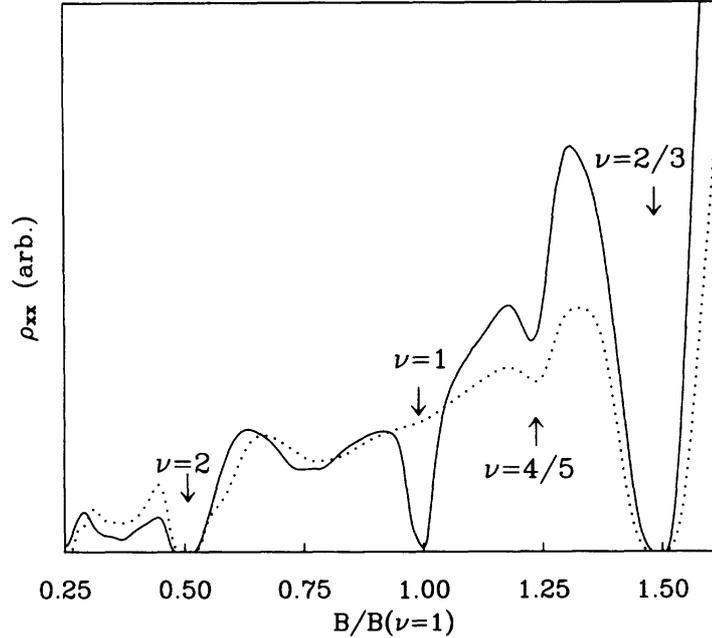
## 2.4 Estados com $\nu_{Tot} = 1$

O estado em que estamos interessados neste trabalho é aquele que possui  $\nu_{Tot} = 1$ , devido ao meio preenchimento em cada poço. Contudo, existe outra forma de se obter este estado além do meio preenchimento. Isto se dá quando o tunelamento torna-se relevante, mas os efeitos da interação de Coulomb entre os poços tornam-se pouco importantes. Nesse caso, os estados do sistema tornam-se uma combinação simétrica ou antisimétrica (equação (2.16)) com uma energia de *gap*,  $\Delta_{SAS}$ , entre eles. Esta energia depende da

altura e da largura da barreira de separação. A existência dessa nova energia de *gap* afeta profundamente o espectro dos estados quânticos observados. Na situação de campo magnético forte a separação dos níveis de Landau é maior que  $\Delta_{SAS}$ , então o nível mais baixo do sistema fica sendo composto por apenas estados simétricos [12]. Nesse caso, o estado com  $\nu_{Tot} = 1$  é aquele no qual todos os estados simétricos estão ocupados.

Se, por outro lado, a barreira é muito fina mas muito alta, o tunelamento pode ser pouco importante, enquanto os efeitos de Coulomb são essenciais, criando as condições necessárias para a ocorrência do meio preenchimento em cada poço. Mas este estado depende criticamente de um delicado balanço entre as interações eletrônicas na mesma camada e as interações de camadas diferentes. Esse balanço é convenientemente parametrizado pela razão  $d/l$ , onde  $d$  é a distância de separação das camadas e  $l$  o comprimento magnético (equação (2.7)). Dado que, para um certo valor de  $B$ ,  $l$  é proporcional a separação média entre os elétrons da mesma camada,  $d/l$  é proporcional à razão entre as energias de interação de Coulomb dos elétrons, no mesmo poço e em poços diferentes. Essa razão precisa ser da ordem de 1 para que o estado de nosso interesse seja estável [12]. Nessas condições, os elétrons são forçados a evitar seus vizinhos em ambas as camadas. Esse fato é que induz a um estado com meio preenchimento em cada poço, fazendo com que  $\nu_{Tot} = 1$ . A delicadeza deste estado se encontra exemplificada na figura 2.2, que ilustra os dados da resistividade de duas amostras com duplo poço quântico diferindo apenas na concentração de cargas e na largura da barreira. Ambas mostram claramente estados com  $\nu_{Tot} = 2; 2/3$  e evidência do estado  $\nu_{Tot} = 4/5$ . Entretanto, para  $\nu_{Tot} = 1$  as duas curvas diferem drasticamente; a amostra com densidade mais baixa e barreira mais fina (linha contínua da figura) exhibe claramente a presença do estado com  $\nu_{Tot} = 1$ , enquanto a outra (linha pontilhada) não apresenta este estado. Mas como a barreira afeta tanto a probabilidade de tunelamento quanto as correlações da interação de Coulomb, e a concentração de cargas controla apenas a dinâmica em cada poço, não é óbvio, a princípio, que o estado  $\nu_{Tot} = 1$  esteja presente em uma amostra e não esteja na outra.

Para determinar como se dá essa diferença tão pronunciada entre as amostras apresentadas, e realmente esclarecer a diferença entre os regimes de tunelamento e de efeitos de muitos corpos em estados com  $\nu_{Tot} = 1$ , consideremos o diagrama de fase [12, 20] mostrado na figura 2.3. O eixo horizontal reflete a força do tunelamento que é proporcional a  $\Delta_{SAS}$  e inversamente proporcional à energia de Coulomb,  $e^2/\epsilon l$ . No eixo vertical temos a separação entre os centros dos poços, normalizada pelo comprimento magnético. Nota-se que o efeito Hall Quântico (QHE na figura) é destruído com o crescimento da separação entre os poços quando o tunelamento é mantido constante, ou seja, medidas da resistividade longitudinal não mais apresentam o comportamento característico mostrado na figura 2.2. A linha tracejada no diagrama de fase da figura 2.3 mostra a localização estimada da fronteira entre a existência do regime Hall e a não existência deste regime. Se  $d/l$  é grande o suficiente, o *gap* de tunelamento é destruído e com isto o efeito Hall quântico. Mas, este fato é insuficiente para explicar o motivo da fronteira entre as fases



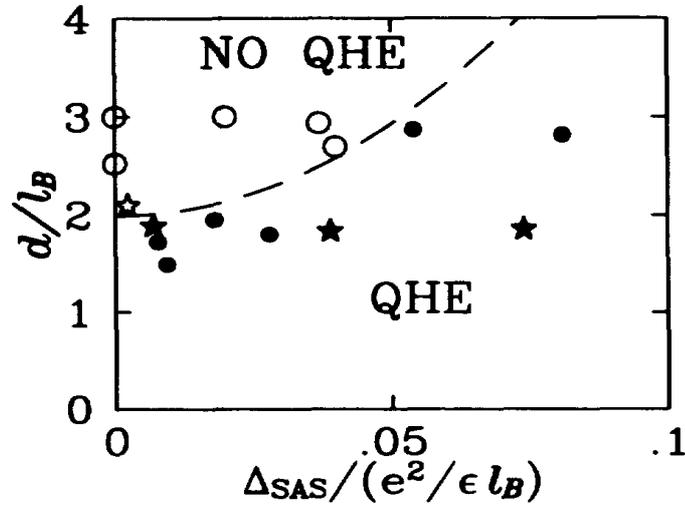
**Figura 2.2:** Resistividade longitudinal,  $\rho_{xx}$ , a 0,3 K de temperatura versus  $B$  (normalizado pelo campo necessário para produzir o estado com  $\nu = 1$ ) para duas amostras iguais exceto pela largura da barreira e densidade de carga. A curva pontilhada corresponde a amostra com  $d = 40 \text{ \AA}$  e  $\eta = 1,45 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  e a curva contínua  $d = 30 \text{ \AA}$  e  $\eta = 1,26 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  [20].

interceptar o eixo vertical em um valor não nulo de  $d/l$ . Por outro lado, isto é uma evidência convincente de que o estado com  $\nu_{Tot} = 1$  existe no limite de tunelamento zero, como previsto teoricamente na referência [15]. Nesse caso, a ocorrência da transição de fase com o crescimento de  $d/l$  é inteiramente devido a efeitos da interação de Coulomb [16, 18, 21]. Mas, conforme sugere a distribuição dos pontos na figura, a mudança entre os regimes deve ocorrer continuamente, não existindo uma fronteira clara entre estes comportamentos.

## 2.5 Evidências experimentais

### 2.5.1 Coerência entre as camadas

Ainda na figura 2.3, podemos argumentar, sob algumas indicações experimentais, que o poço duplo com  $\nu_{Tot} = 1$  pode mostrar ordem de fase de pseudo-spin coerente sobre grandes comprimentos de escala, e exibir excitações que são de natureza altamente coletivas. Considere primeiramente o limite de forte tunelamento e o espaçamento entre as camadas extremamente pequeno. Nesse caso, cada elétron está em um estado simétrico do SBC. O sistema é completamente PS-polarizado ao longo da direção  $\hat{x}$  (equação 2.15), e o gap de excitação é justamente  $\Delta_{SAS}$ , se ignoramos as interações entre os elétrons [3]. Podemos esperar um aumento no *gap* pela adição do termo de interação de Coulomb. Se o tunelamento é removido, o estado Hall quântico sobrevive simplesmente por causa da



**Figura 2.3:** Diagrama de fase em condições de campo para ocorrência do estado com  $\nu_{Tot} = 1$ . Os símbolos sólidos representam amostras em regime Hall quântico e os abertos, amostras fora deste regime. As estrelinhas representam as amostras utilizadas na figura 2.2 [20].

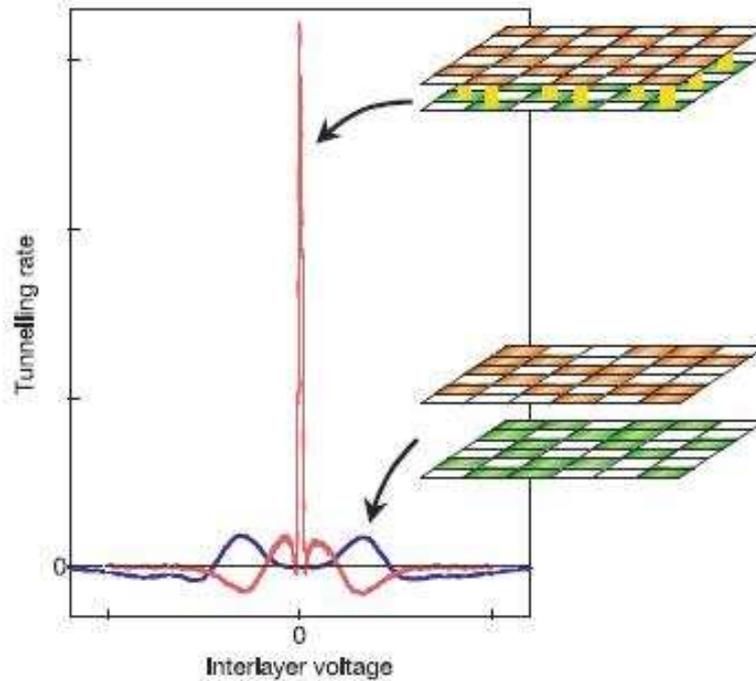
energia de troca manter paralelos os PS de elétrons adjacentes. O estado fundamental com  $\nu_{Tot} = 1$  permanece completamente pseudo-spin polarizado, e o gap de ativação é a energia de troca. O ponto crucial aqui é que a rede de polarização pode apontar em qualquer direção no espaço 3D de PS. Nesse limite, é indiferente para o sistema se todos os elétrons estão no estado simétrico ou se estão em um estado do tipo da equação (2.16), pois o estado fundamental é altamente degenerado. O tunelamento quebra a simetria e força todos os PS a se alinharem ao longo de  $\hat{x}$ , e aumenta a energia de gap. Isto é completamente consistente com a observação experimental de que o estado com  $\nu_{Tot} = 1$  evolui continuamente de estados puramente coletivos para estados de uma partícula [15].

Outra indicação a respeito da natureza do ordenamento coerente é o fato de que o estado Hall quântico com  $\nu_{Tot} = 1$  pode sobreviver a um desbalanço finito na densidade de carga dos poços [22]. Cargas desbalanceadas podem ser controladas aplicando-se uma barreira de voltagem, a qual transfere cargas de um poço para outro, mantendo a densidade de cargas no sistema constante. Em muitos casos, o desbalanceamento nos poços destrói imediatamente o estado Hall quântico. Para  $\nu_{Tot} = 1$  isto não acontece e demonstra a robustez da coêrencia de fase entre os poços.

### 2.5.2 Estado coletivo com $\nu_{Tot} = 1$

Evidências da formação do estado coletivo no sistema bicamada com  $\nu_{Tot} = 1$ , podem ser vistas em medidas de tunelamento, como as mostradas na figura 2.3. No caso dessa figura, as amostras diferem entre si apenas pela densidade de cargas e pela separação entre as camadas. Mas, é interessante saber se a supressão do tunelamento está presente quando a densidade de cargas é a mesma e as amostras são idênticas, exceto pela separação  $d$ . Na referência [11], estas medidas são feitas para duas amostras nestas condições. A

figura 2.4 mostra o gráfico da referência citada. O traço em vermelho dessa figura mostra uma grande taxa de tunelamento que ocorre quando a barreira de separação é pequena, e o traço azul mostra que o tunelamento cai a zero quando as camadas estão devidamente separadas por uma distância crítica discutida na seção 2.4. O forte pico de tunelamento sugere que os elétrons estão fortemente correlacionados com seus vizinhos em ambos os poços.



**Figura 2.4:** Condutância de tunelamento  $dI/dV \times$  voltagem entre as camadas  $V$  em  $T = 10\text{mK}$  em um sistema bicamada. O traço vermelho se refere a uma separação pequena entre as camadas e o traço azul a uma separação um pouco maior [11].

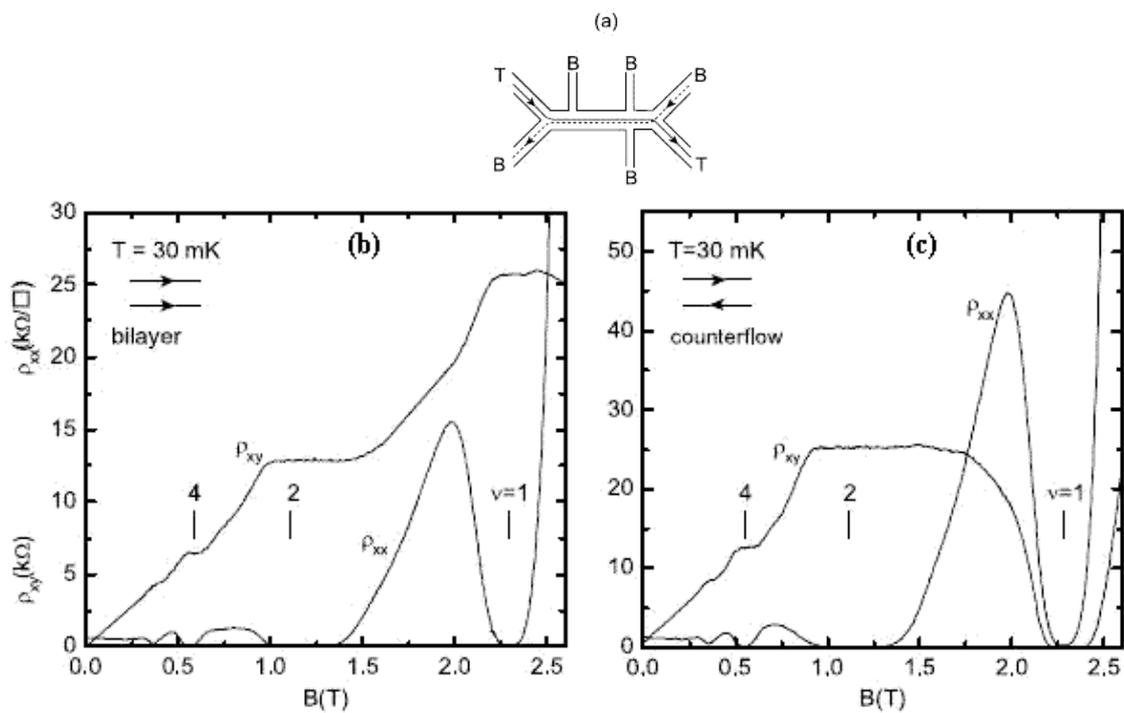
Os autores da referência [11] concluem que os elétrons se encontram em um estado coletivo no qual elétrons em uma camada estão sempre posicionados sobre os buracos da outra camada, ou seja, eles estão no estado incompressível. Esse estado é extremamente sensível a mudanças na temperatura e no campo, de modo que pequenas alterações destroem o pico. A supressão do tunelamento também pode ser explicada em termos das correlações, pois cada elétron tenta evitar ao máximo seus vizinhos em ambas as camadas, e com isso quando um elétron tenta mudar de camada, ele é fortemente reprimido. Isso porque, uma entrada maciça de elétrons em uma das camadas produziria um estado altamente excitado, o que não é possível em baixas voltagens (energias). Com a grande repulsão entre os elétrons vizinhos, o estado de menor energia deve ser o estado incompressível. Os autores entendem essa mudança drástica de comportamento neste estado como uma transição de fase, em termos da distância entre as camadas, entre o estado de tunelamento e o estado coletivo. Isso porque, o estado incompressível favorece tanto o

tunelamento quanto a formação dos éxcitons indiretos. Na referência [11], existe ainda o argumento de que o estado coletivo deve apresentar condensação de Bose-Einstein, pois possuem todos os ingredientes necessários para isso, tais como a coerência, as correlações, além do fato óbvio dos éxcitons serem bósons.

### 2.5.3 Formação dos éxcitons indiretos

Se faz necessário encontrar evidências experimentais da formação dos éxcitons antes de podemos pensar em sua condensação. Mas se os éxcitons são formados de pares elétron-buraco, então eles possuem carga nula; essa seria a grande dificuldade de medir correntes formadas por eles. Porém, se essa corrente existe então temos elétrons na camada de cima e buracos na camada de baixo fluindo na mesma direção. Mas uma corrente de buracos é exatamente igual a uma corrente de elétrons fluindo na direção oposta! Nesta situação, ocorrerá a formação de éxcitons somente se a resistividade Hall cair a zero juntamente com a resistividade longitudinal, e é exatamente isso que foi medido nas referências [4, 5].

Para saber se a resistência Hall também desaparece quando a corrente está contrafluindo nos poços, foram realizadas medidas de magnetotransporte em um sistema bicamada de GaAs. As camadas são independentemente conectadas em várias geometrias diferentes para a injeção de corrente e detecção de voltagem [4, 5], como mostra a figura 2.5(a). A parte (c) da figura mostra medidas da resistividade longitudinal,  $\rho_{xx}$ , e Hall,  $\rho_{xy}$ , em contra-fluxo de corrente. Os dados mostram que para estados com  $\nu_{Tot} = 1$  nessa condição, ambas as resistividades realmente desaparecem. Esse desaparecimento de  $\rho_{xy}$  é particularmente notável, desde que isto prova diretamente que a corrente é transportada por cargas neutras, isto é, pares de elétrons e buracos em poços opostos. Um par elétron-buraco movendo-se em alguma direção cria correntes iguais em sentidos opostos uma em cada poço. Assim podemos concluir que o sistema com  $\nu_{Tot} = 1$  com coerência de fase possui éxcitons indiretos, formados pelo par elétron-buraco.



**Figura 2.5:** Esboço da amostra utilizada na ref [5] em (a). Medidas da resistividade longitudinal,  $\rho_{xx}$ , e Hall,  $\rho_{xy}$ , em função do campo magnético perpendicular no sistema bicamada com correntes no mesmo sentido, (b), e em contrafluxo, (c) [5].

---

# Ferramentas úteis a este projeto

---

Este capítulo é dedicado a uma revisão da mecânica quântica de sistemas de muitos corpos necessária para o estudo de condensados, além de algumas ferramentas para identificação de transição de fase. Na primeira seção discutimos rapidamente sobre a segunda quantização, suas implicações e também fazemos uma revisão sobre gás de elétrons degenerados. Na seção 3.2 é feita uma revisão da condensação de Bose-Einstein, que foi baseada nas notas de aula do professor A. F. R. de Toledo Piza apresentados no curso de verão do Instituto de Física da USP em 2002. Essas notas estão disponíveis no endereço [http://fma.if.usp.br/~piza/notas\\_de\\_aula/BEC02.pdf](http://fma.if.usp.br/~piza/notas_de_aula/BEC02.pdf) em sua home page. Na subseção ?? incluímos um exemplo de aplicação para um sistema de microcavidades onde os parâmetros utilizados foram obtidos experimentalmente. Na seção 3.3, falamos sobre como identificar uma transição de fase através do espectro de energia do sistema. E finalmente na última seção, apresentamos a relação entre entropia linear e emaranhamento, que será usada no capítulo 4 para o estudo da criação de bósons a partir de férmions.

## 3.1 Segunda quantização e mecânica quântica de muitos corpos

### 3.1.1 Operadores de campo

Problemas de muitos corpos são sempre complicados ao entendimento. Por isso, muitas vezes, é interessante fazer uma descrição do sistema em termos do produto dos espaços de cada partícula individual. Para isso, podemos descrever o sistema utilizando o espaço de Hilbert, no qual podemos definir operadores de campos quantizados. Esses operadores são definidos da seguinte forma [23]

$$\psi(\vec{r}) \equiv \sum_k \varphi_k(\vec{r}) a_k \quad (3.1)$$

$$\psi^\dagger(\vec{r}) \equiv \sum_k \varphi_k^*(\vec{r}) a_k^\dagger \quad (3.2)$$

onde  $a_k^\dagger$  ( $a_k$ ) são os operadores usuais de criação (aniquilação) de partículas, bósons ou férmions, no espaço de Fock.  $\{\varphi_k(\vec{r})\}$  é um conjunto ortogonal e completo de funções de onda de uma partícula e a soma se dá sobre todos os números quânticos de cada uma, obedecendo as relações

$$\int \varphi_k^*(\vec{r})\varphi_l(\vec{r})d^3r = \delta_{k,l} \quad (3.3)$$

$$\sum_k \varphi_k^*(\vec{r})\varphi_k(\vec{s}) = \delta(\vec{r} - \vec{s}). \quad (3.4)$$

Os operadores de campo seguem relações de comutação ou anticomutação dependendo se são referentes a bósons ou a férmions, ou seja,

$$\begin{aligned} [\psi_m(\vec{r}), \psi_l^\dagger(\vec{s})]_{\pm} &= \delta_{m,l}\delta(\vec{r} - \vec{s}) \\ [\psi_m(\vec{r}), \psi_l(\vec{s})]_{\pm} &= [\psi_m^\dagger(\vec{r}), \psi_l^\dagger(\vec{s})]_{\pm} = 0 \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde os sinal positivo se refere à relação de anticomutação para férmions e o sinal negativo à relação de comutação para bósons. Com isso podemos construir os operadores de número que tomam a seguinte forma

$$N = \sum_m N_m \quad \text{onde} \quad N_m = \int \psi_m^\dagger(\vec{r})\psi_m(\vec{r})d^3r \quad \text{ou} \quad N_m = \sum_k a_{mk}^\dagger a_{mk}. \quad (3.6)$$

### 3.1.2 Equação de Schrödinger na segunda quantização

Com os operadores criação e aniquilação de partículas, podemos reescrever a equação de Schrödinger na segunda quantização [24]. Para isso considere o Hamiltoniano para um caso geral de  $n$  partículas

$$H = \sum_{i=1}^n T(\vec{R}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^n V(\vec{R}_i, \vec{R}_j) \quad (3.7)$$

sendo  $T$  a energia cinética,  $V$  a energia potencial de interação entre cada duas partículas e  $\vec{R}_i$  contém o vetor coordenada da partícula  $i$ ,  $\vec{r}_i$ , e também variáveis discretas tais como a componente  $z$  do spin da partícula. O fator  $\frac{1}{2}$  no termo do potencial é devido ao fato de que a somatória leva em conta termos do tipo  $\vec{R}_i\vec{R}_j$  e  $\vec{R}_j\vec{R}_i$  que na verdade são iguais.

Seja  $\Phi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_n, t)$  a função de onda do conjunto das  $n$  partículas. No espaço de Hilbert, podemos escrever essa função como uma expansão dependente do tempo em um conjunto completo de funções de onda de uma única partícula de modo que

$$\Phi(\vec{R}_1, \vec{R}_2, \dots, \vec{R}_n, t) = \sum_{E'_1 \dots E'_n} c(E'_1 \dots E'_n, t) \varphi_{E'_1}(\vec{R}_1) \dots \varphi_{E'_n}(\vec{R}_n), \quad (3.8)$$

onde  $E'_i$  representa um conjunto completo de números quânticos da partícula  $i$ ,  $\varphi_{E'_i}(\vec{R}_i)$  a função de onda da partícula e os coeficientes  $c(E'_1 \dots E'_n, t)$  concentram toda a parte temporal da função de onda. Se inserimos (3.8) na equação de Schrödinger,  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi = H\Phi$ , multiplicamos por  $\varphi_{E_1}^\dagger(\vec{R}_1) \dots \varphi_{E_n}^\dagger(\vec{R}_n)$ , com  $\{E_1 \dots E_n\}$  sendo um conjunto de números quânticos fixo para todas as partículas, e integramos sobre todas as coordenadas apropriadas (inclusive somando sobre as variáveis discretas), temos que

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c(E_1 \dots E_n, t) &= \sum_{i=1}^n \sum_{E_\varepsilon} \int c(E_1 \dots E_{i-1} E_\varepsilon E_{i+1} \dots E_n, t) \varphi_{E_i}^\dagger(\vec{R}_i) T(\vec{R}_i) \varphi_{E_\varepsilon}(\vec{R}_i) d\vec{R}_i + \\ &\frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1} \sum_{E_\varepsilon E_{\varepsilon'}} \int \int c(E_1 \dots E_{i-1} E_\varepsilon E_{i+1} \dots E_{j-1} E_{\varepsilon'} E_{j+1} \dots E_n, t) \times \\ &\varphi_{E_i}^\dagger(\vec{R}_i) \varphi_{E_j}^\dagger(\vec{R}_j) V(\vec{R}_i, \vec{R}_j) \varphi_{E_\varepsilon}(\vec{R}_i) \varphi_{E_{\varepsilon'}}(\vec{R}_j) d\vec{R}_i d\vec{R}_j. \end{aligned} \quad (3.9)$$

O operador energia cinética,  $T(\vec{R}_i)$ , pode mudar somente os números quânticos da  $i$ -ésima partícula, pois todas as funções de onda são ortogonais. O conjunto  $\varepsilon$  permite que os números quânticos da partícula  $i$  variem sobre todos os valores possíveis. Com a energia potencial de interação temos uma situação semelhante, mas agora duas partículas que podem ter seus números quânticos alterados, já que o potencial age nas partículas duas a duas. Se existe um número infinito de conjuntos de números quânticos,  $\varepsilon$ , então existe também um número infinito de equações diferenciais acopladas em (3.9).

A estatística obedecida pelas partículas pode ser incluída nos coeficientes, através da troca dos números quânticos de duas partículas, ou seja,

$$\Psi(\dots \vec{R}_k, \dots, \vec{R}_m, \dots) = \pm \Psi(\dots, \vec{R}_m, \dots, \vec{R}_k, \dots) \rightarrow c(\dots, E_i, \dots, E_j, \dots, t) = \pm c(\dots, E_j, \dots, E_i, \dots, t)$$

onde o sinal de menos se refere a férmions e o sinal de mais a bósons. Queremos utilizar esse resultado para estudar singularidades na energia potencial de interação em um gás de elétrons degenerados (próxima seção) e utilizar o resultado no capítulo 5, e por isso vamos nos limitar aqui ao caso de nosso interesse, os férmions, mas essa discussão detalhada pode ser encontrada na referência [24] também para o caso dos bósons. A anti-simetria dos férmions é imposta pelo princípio de exclusão de Pauli, que nos diz que o número de ocupação de cada estado deve ser 0 ou 1. Então, podemos definir um novo coeficiente,  $\bar{c}$ , em termos destes números de ocupação  $n_i$  de modo que

$$\bar{c}(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t) \equiv c(\dots E_i < E_j < E_k \dots, t), \quad (3.10)$$

com os números quânticos ordenados de forma crescente. A condição de normalização das funções de onda implica que

$$\sum_{E_1 \dots E_n} |c(E_1 \dots E_n, t)|^2 = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_\infty} n! |\bar{c}(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t)|^2 = 1, \quad (3.11)$$

onde o termo  $n!$  se refere a todas as maneiras possíveis de ocupar  $i$  estados com  $n_i$  partículas (vide apêndice B), obedecendo a condição de que  $n_i = 0$  ou  $1$  e que  $n = \sum_{i=1}^{\infty} n_i$ . Podemos escrever isso de uma maneira mais elegante definindo um outro coeficiente tal que

$$f(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t) \equiv (-1)^\beta (n!)^{\frac{1}{2}} \bar{c}(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t), \quad (3.12)$$

sendo  $(-1)^\beta$  um fator de fase e a condição de normalização dada por

$$\sum_{n_1, n_2, \dots, n_\infty} |f(n_1, n_2, \dots, n_\infty, t)|^2 = 1. \quad (3.13)$$

Com isso, podemos definir a função de onda em termos dos estados de número de ocupação como

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots, n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty, t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle, \quad (3.14)$$

onde o estado de número de ocupação é definido como  $|n_1, \dots, n_\infty\rangle \equiv (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots (a_\infty^\dagger)^{n_\infty} |0\rangle$ , sabendo que os operadores  $a_i^\dagger$  e  $a_i$  obedecem as relações de anticomutação

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{i,j} \quad \text{e} \quad \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = \{a_i, a_j\} = 0. \quad (3.15)$$

Podemos, agora, calcular o fator de fase através da atuação de  $a_s$  e  $a_s^\dagger$ , no estado de número. E assim, obtemos

$$a_s |n_1, \dots, n_\infty\rangle = (-1)^{\beta_s} (a_1^\dagger)^{n_1} \dots a_s (a_s^\dagger)^{n_s} \dots (a_\infty^\dagger)^{n_\infty} |0\rangle, \quad (3.16)$$

onde

$$\beta_s = n_1 + n_2 + \dots + n_{s-1},$$

pois  $a_s$  pode se mover livremente entre os operadores  $a_i^\dagger$  apenas acumulando fase. A partir daqui temos duas situações distintas:  $n_s = 0$  ou  $n_s = 1$ . Se  $n_s = 0$  então  $a_s$  pode chegar até  $|0\rangle$  apenas acumulando fase e o resultado se anula (pois  $a_s|0\rangle = 0$ ). Considerando que  $n_s = 1$ , teremos

$$\begin{aligned} a_s|n_1, \dots, n_s = 1, \dots, n_\infty\rangle &= (-1)^{\beta_s}|n_1, \dots, n_s = 0, \dots, n_\infty\rangle - (-1)^{\beta_s}(a_1^\dagger)^{n_1} \dots (a_s^\dagger)a_s \dots (a_\infty^\dagger)^{n_\infty}|0\rangle \\ &= (-1)^{\beta_s}|n_1, \dots, n_s = 0, \dots, n_\infty\rangle. \end{aligned} \quad (3.17)$$

A atuação do operador  $a_i^\dagger$  nos fornece uma expressão semelhante. Então, generalizando, temos que

$$\begin{aligned} a_s|\dots, n_s, \dots\rangle &= \begin{cases} (-1)^{\beta_s}(n_s)^{1/2}|\dots, n_s = 0, \dots\rangle & \text{se } n_s = 1 \\ 0 & \text{se } n_s = 0 \end{cases} \\ a_s^\dagger|\dots, n_s, \dots\rangle &= \begin{cases} (-1)^{\beta_s}(n_s + 1)^{1/2}|\dots, n_s = 1, \dots\rangle & \text{se } n_s = 0 \\ 0 & \text{se } n_s = 1 \end{cases} \\ a_s^\dagger a_s|\dots, n_s, \dots\rangle &= n_s|\dots, n_s, \dots\rangle \quad \text{se } n_s = 0, 1. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Com isso, podemos voltar a equação (3.9), escrevê-la em termos dos estados de número e dos operadores criação e aniquilação, além de verificar o efeito da fase. Para isso, considere inicialmente o termo da energia cinética de (3.9) dado por

$$\sum_{i=1}^n \sum_{E_\varepsilon} c(E'_1 \dots E_{i-1} E_\varepsilon E_{i+1} \dots E'_n, t) \langle E_i | T(\vec{R}_i) | E_\varepsilon \rangle$$

onde  $\varphi_{E_i}^\dagger(\vec{R}_i) \equiv \langle E_i |$  e  $\varphi_{E_\varepsilon}(\vec{R}_i) \equiv |E_\varepsilon\rangle$ . Para escrever esse resultado em termos dos coeficientes  $f$  (da equação (3.12)), precisamos ordenar cada conjunto de números quânticos  $E_i$  simultaneamente em ambos os lados da equação (3.9). O fator de fase se cancela até quando chegamos no conjunto  $E_\varepsilon$ , pois ele aparece do lado direito mas não do lado esquerdo. Então, se estamos movendo o conjunto  $E_\varepsilon$  para seu lugar na forma ordenada, temos que levar em conta o fator de fase a partir deste ponto. Supondo que o lugar de  $E_\varepsilon$  seja o  $k$ -ésimo da lista, temos

$$\begin{aligned} &(-1)^{n_{E_{\varepsilon+1}} + n_{E_{\varepsilon+2}} + \dots + n_{E_{k-1}}} \quad \text{se } E_\varepsilon < E_k \\ &(-1)^{n_{E_{k+1}} + n_{E_{k+2}} + \dots + n_{E_{\varepsilon-1}}} \quad \text{se } E_\varepsilon > E_k. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Escrevendo então a energia cinética da equação (3.9) em termos do número de partículas  $n_i$ , encontramos que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \sum_{n'_1, \dots, n'_\infty} \sum_{i < j} \langle i|T|j\rangle f(\dots, n'_i, \dots, n'_j, \dots, t) (n'_i + 1)^{\frac{1}{2}} (n'_j)^{\frac{1}{2}} \delta_{n'_i, 0} \delta_{n'_j, 1} \times \\ (-1)^{n'_{i+1} + n'_{i+2} + \dots + n'_{j-1}} |\dots, n'_{i+1}, \dots, n'_{j-1} \dots\rangle + \dots \quad (3.20)$$

Note que, aqui o fator de fase pode ser escrito na forma  $(-1)^{\beta_j - \beta_i - n'_i}$ , mas este termo só existe se  $n'_i = 0$  e  $n'_j = 1$ , então este fator será apenas  $(-1)^{\beta_j - \beta_i}$ . Ainda podemos ver que é possível escrever essa equação em termos dos operadores  $a_i^\dagger$  e  $a_j$  da seguinte forma

$$(n'_i + 1)^{\frac{1}{2}} (n'_j)^{\frac{1}{2}} \delta_{n'_i, 0} \delta_{n'_j, 1} (-1)^{n'_{i+1} + n'_{i+2} + \dots + n'_{j-1}} |\dots, n'_{i+1}, \dots, n'_{j-1} \dots\rangle \rightarrow a_i^\dagger a_j |n_1, \dots, n_\infty\rangle. \quad (3.21)$$

É possível fazer um tratamento análogo para o potencial de interação levando-se em conta dois conjuntos de números quânticos como  $E_\varepsilon$  e  $E_{\varepsilon'}$ . Com isso, a equação de Schödinger na segunda quantização será dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \left( \sum_{i,j} a_i^\dagger \langle i|T|j\rangle a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} a_i^\dagger a_j^\dagger \langle ij|V|kl\rangle a_l a_k \right) |\Psi(t)\rangle. \quad (3.22)$$

Essa descrição é completamente análoga à formulação na primeira quantização, mas aqui a estatística das partículas já está sendo levada em conta através dos operadores  $a_i^\dagger$  e  $a_j$ .

### 3.1.3 Gás de elétrons degenerados

Considere um gás de elétrons interagentes localizado em um meio positivo de modo que o sistema como um todo seja neutro. Em sistemas reais, como metais ou plasmas, as cargas positivas estão localizadas em “caroços” iônicos, cujo movimento dinâmico deve ser incluído nos cálculos. Porém, os íons positivos são muito mais pesados que os elétrons, e por isso é uma boa aproximação negligenciar seu movimento. Em comparação, assumir que o meio é uniforme é mais grave, e por essa razão, esse modelo promove apenas explicações qualitativas a respeito de metais reais. Se estamos interessados nas propriedades do meio em três dimensões, então é conveniente colocar o sistema em uma caixa cúbica de lado  $L$  e tomar o limite  $L \rightarrow \infty$  no final dos cálculos. Em um meio infinito e uniforme, todas as propriedades físicas devem ser invariantes sob translação espacial. Isso sugere o uso de condições periódicas de contorno na função de onda da partícula, a qual será estados de ondas planas

$$\psi_{\vec{k}, \lambda}(\vec{x}) = v^{-\frac{1}{2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \eta_\lambda.$$

Aqui  $v \equiv L^3$  é o volume da caixa e  $\eta_\lambda$  são as duas funções de spin ao longo do eixo  $z$ , onde  $\uparrow$  ( $\downarrow$ ) representam spin para cima (baixo) tal que

$$\eta_\uparrow = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \eta_\downarrow = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

As condições periódicas de contorno determinam os seguintes números de onda permitidos

$$k_i = \frac{2\pi j_i}{L}, \quad i = x, y, z, \quad j_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

A hamiltoniana total pode ser escrita como a soma de três termos como

$$H = H_{el} + H_m + H_{el+m} \quad (3.23)$$

onde

$$H_{el} = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} e^2 \sum_{i \neq j}^n \frac{e^{-\mu|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (3.24)$$

$$H_m = \frac{1}{2} e^2 \int \int d^3x d^3x' \frac{\mathbf{n}(\vec{x}) \mathbf{n}(\vec{x}') e^{-\mu|\vec{x} - \vec{x}'|}}{|\vec{x} - \vec{x}'|} \quad (3.25)$$

$$H_{el+m} = -e^2 \sum_{i=1}^n \int d^3x \frac{\mathbf{n}(\vec{x}) e^{-\mu|\vec{x} - \vec{r}_i|}}{|\vec{x} - \vec{r}_i|} \quad (3.26)$$

são, respectivamente, as hamiltonianas para os elétrons, para o meio e para a interação entre elétrons e o meio.  $\mathbf{n}(\vec{x})$  é a densidade de partículas no meio e termo de convergência  $e^{-\mu|\vec{x} - \vec{x}'|}$  foi introduzido para tornar a integração finita e posteriormente será tomado o limite de  $\mu \rightarrow 0$ . Por causa da conhecida natureza de longo alcance da interação de Coulomb, os três termos de  $H$  divergem no limite termodinâmico, com  $n \rightarrow \infty$  e  $v \rightarrow \infty$ , mantendo  $\mathbf{n} = n/v$  constante. A presença do fator de convergência assegura que as expressões sejam matematicamente bem definidas em cada passo do cálculo e permite fazer um cancelamento explícito. Como estamos interessados nas propriedades de volume do meio neutro, então esse procedimento nos permite tomar primeiro o limite  $L \rightarrow \infty$  e posteriormente  $\mu \rightarrow 0$ . Equivalentemente, podemos assumir que  $\mu^{-2} \ll L$  em cada passo do cálculo. Isso nos permite deslocar a origem de integração após correções de superfície as quais serão negligenciadas nesse limite.

Na equação (3.23), as únicas variáveis dinâmicas são aquelas referentes aos elétrons, porque o meio positivo é inerte. Então, para uma densidade uniforme,  $\mathbf{n}(\vec{x}) = n/v$ , a equação (3.25) pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
H_m &= \frac{1}{2}e^2 \left(\frac{n}{v}\right)^2 \int \int d^3x d^3x' \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|} \\
&= \frac{1}{2}e^2 \left(\frac{n}{v}\right)^2 \int d^3x \int d^3z \frac{e^{-\mu z}}{z} \\
&= \frac{1}{2}e^2 \frac{n^2}{v} \frac{4\pi}{\mu^2},
\end{aligned} \tag{3.27}$$

onde foi usada a invariância translacional para mudar os limite de integração na segunda linha. A quantidade  $H_m/n$  diverge no limite de  $\mu \rightarrow 0$ , por causa do longo alcance da interação, permitindo a cada elemento de carga interagir com todos os demais. A princípio,  $H_{el+m}$  é um operador de uma partícula pois atua em cada elétron por vez, e utilizando o mesmo raciocínio anterior, podemos escrever a equação (3.26) como

$$\begin{aligned}
H_{el+m} &= -e^2 \sum_{i=1}^n \frac{n}{v} \int d^3x \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{r}_i|}}{|\vec{x}-\vec{r}_i|} \\
&= -e^2 \sum_{i=1}^n \frac{n}{v} \int d^3z \frac{e^{-\mu z}}{z} \\
&= -e^2 \frac{n^2}{v} \frac{4\pi}{\mu^2}.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Então, a hamiltoniana total, equação (3.23), se reduz a

$$H = -\frac{1}{2}e^2 \frac{n^2}{v} \frac{4\pi}{\mu^2} + H_{el}. \tag{3.29}$$

Por outro lado, reescrevendo a equação (3.24) na segunda quantização, o termo da energia cinética requer o elemento de matriz

$$\begin{aligned}
\langle \vec{k}_1 \lambda_1 | T | \vec{k}_2 \lambda_2 \rangle &= (2mv)^{-1} \int d^3x e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \eta_{\lambda_1}^\dagger (-\hbar^2 \nabla^2) e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}} \eta_{\lambda_2} \\
&= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2mv} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \int d^3x e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{x}} \\
&= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2}.
\end{aligned} \tag{3.30}$$

No último passo foi utilizada a definição usual do delta de Kronecker

$$\int d^3x e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{x}} = v \delta_{\vec{k}_1 \vec{k}_2}.$$

Com isso, podemos escrever o operador energia cinética como sendo uma somatória sobre cada modo do operador número multiplicado pelo valor da energia correspondente, ou seja,

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} a_{\vec{k}\lambda}^\dagger a_{\vec{k}\lambda}. \quad (3.31)$$

A energia potencial não é tão simples assim, os elementos de matriz são dados por

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1 \lambda_1, \vec{k}_2 \lambda_2 | \bar{V} | \vec{k}_3 \lambda_3, \vec{k}_4 \lambda_4 \rangle &= \frac{e^2}{v^2} \int \int d^3 x_1 d^3 x_2 e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1} \eta_{\lambda_1}^\dagger(1) e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2} \eta_{\lambda_2}^\dagger(2) \\ &\times \frac{e^{-\mu|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{x}_1} \eta_{\lambda_3}(1) e^{i\vec{k}_4 \cdot \vec{x}_2} \eta_{\lambda_4}(2) \end{aligned} \quad (3.32)$$

substituindo  $\vec{x} = \vec{x}_2$  e  $\vec{y} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2$  em (3.32) temos

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1 \lambda_1, \vec{k}_2 \lambda_2 | \bar{V} | \vec{k}_3 \lambda_3, \vec{k}_4 \lambda_4 \rangle &= \frac{e^2}{v^2} \int d^3 x e^{-i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) \cdot \vec{x}} \int d^3 y e^{i(\vec{k}_3 - \vec{k}_1) \cdot \vec{y}} \frac{e^{-\mu y}}{y} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\lambda_3 \lambda_4} \\ &= \frac{e^2}{v^2} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\lambda_3 \lambda_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \frac{4\pi}{(\vec{k}_3 - \vec{k}_1)^2 + \mu^2}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

Com isso podemos escrever o operador energia potencial na forma

$$\hat{V} = \frac{e^2}{v} \sum_{\vec{k}_1 \lambda_1} \sum_{\vec{k}_2 \lambda_2} \sum_{\vec{k}_3 \lambda_3} \sum_{\vec{k}_4 \lambda_4} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\lambda_3 \lambda_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \frac{4\pi}{(\vec{k}_3 - \vec{k}_1)^2 + \mu^2} a_{\vec{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{\vec{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{\vec{k}_4 \lambda_4} a_{\vec{k}_3 \lambda_3} \quad (3.34)$$

Utilizando os resultados para os operadores energia cinética, (3.31), e para energia potencial, (3.34), a equação (3.29) pode então ser reescrita como

$$\begin{aligned} H &= -\frac{e^2}{2} \frac{4\pi}{\mu^2} \frac{n^2}{v} + \sum_{\vec{k}\lambda} \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} a_{\vec{k}\lambda}^\dagger a_{\vec{k}\lambda} + \frac{e^2}{v} \sum_{\vec{k}_1 \lambda_1} \sum_{\vec{k}_2 \lambda_2} \sum_{\vec{k}_3 \lambda_3} \sum_{\vec{k}_4 \lambda_4} \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\lambda_3 \lambda_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \\ &\times \frac{4\pi}{(\vec{k}_3 - \vec{k}_1)^2 + \mu^2} a_{\vec{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{\vec{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{\vec{k}_4 \lambda_4} a_{\vec{k}_3 \lambda_3}. \end{aligned} \quad (3.35)$$

O termo  $\delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4}$  representa a conservação de momento em um sistema uniforme. Como

o problema é eletricamente neutro, é possível eliminar  $\mu$  do hamiltoniano. A conservação de momento limita a somatória sobre  $\{\vec{k}_i\}$  par três variáveis independentes ao invés de quatro. Fazendo a seguinte mudança de variáveis

$$\begin{aligned}\vec{k}_1 &= \vec{k} + \vec{q} & \vec{k}_3 &= \vec{k} \\ \vec{k}_2 &= \vec{p} - \vec{q} & \vec{k}_4 &= \vec{p}\end{aligned}$$

garantimos que  $\vec{k}_1 + \vec{k}_2 = \vec{k}_3 + \vec{k}_4$ , e ainda identificamos o momento transferido como  $\hbar\vec{q} = \hbar(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)$  na interação de duas partículas. Com essa mudança e resolvendo os deltas em  $\lambda_i$ , o último termo da equação (3.35) torna-se

$$\frac{e^2}{2v} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\vec{k}+\vec{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1}.$$

É conveniente separar esse termo em dois, para  $\vec{q} = 0$  e para  $\vec{q} \neq 0$  respectivamente, como

$$\frac{e^2}{2v} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{\mu^2} a_{\vec{k}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1} + \frac{e^2}{2v} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{p} \\ \vec{q} \neq 0}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\vec{k}+\vec{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1}. \quad (3.36)$$

Podemos utilizar as relações de anticomutação (3.15) e a definição do operador número (3.6) para escrever o termo em  $\vec{q} = 0$  como

$$\frac{4\pi}{\mu^2} \frac{e^2}{2v} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{k}, \lambda_1} (a_{\vec{p}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} - \delta_{\vec{k}\vec{p}} \delta_{\lambda_1 \lambda_2}) = \frac{4\pi}{\mu^2} \frac{e^2}{2v} (N^2 - N).$$

Mas como os estados do sistema possuem o número de partículas fixo, podemos substituir o operador  $N$  por seu valor  $n$  e assim essa contribuição se torna um número

$$\frac{e^2}{2} \frac{4\pi}{\mu^2} \frac{n^2}{v} - \frac{e^2}{2} \frac{4\pi}{\mu^2} \frac{n}{v}. \quad (3.37)$$

Note que substituindo o expressão acima, (3.37), na equação (3.35) temos o cancelamento de seu primeiro termo. E a energia por partícula,  $\frac{e^2}{2} \frac{4\pi}{\mu^2} \frac{1}{v}$ , vai a zero no limite de  $L \rightarrow \infty$  e  $\mu \rightarrow 0$ , (sempre mantendo  $1/\mu \ll L$ ). Com isso, a divergência se cancela refletindo a neutralidade do sistema e, não esquecendo o termo em (3.31), o operador hamiltoniano, (3.35), pode ser finalmente escrito como

$$H = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger a_{\vec{k}, \lambda} + \frac{e^2}{2v} \sum_{\substack{\vec{k}, \vec{p} \\ \vec{q} \neq 0}} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a_{\vec{k}+\vec{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1}. \quad (3.38)$$

Dessa forma, podemos retirar as divergências dos cálculos simplesmente utilizando  $q \neq 0$  no potencial de Coulomb, já que o termo em  $q = 0$  se cancela.

## 3.2 Condensado de Bose-Einstein

### 3.2.1 Condensado atômico

Como vimos anteriormente, o Hamiltoniano que descreve um sistema de  $n$  partículas interagentes pode ser escrito como a soma da energia cinética das partículas e a energia potencial. A energia potencial, por sua vez, pode ser escrita em termos da soma da energia de interação entre as partículas e a energia de um potencial externo. Se estamos interessados em estudar condensados de Bose-Einstein, esse potencial externo deve ser tal que confine as partículas, e para isso, normalmente, é usado o potencial de oscilador harmônico. Já as interações entre as partículas requerem uma atenção especial.

Podemos considerar que as partículas em um condensado interagem de forma elástica, pois o sistema tem que ser submetido a temperaturas extremamente baixas. Além disso, o sistema deve ser diluído a tal ponto que podemos garantir que a probabilidade de três bósons interagirem seja mínima. O fato de apenas duas partículas interagirem de forma elástica fornece estabilidade ao condensado. O processo de colisão fica insensível às particularidades da interação entre os bósons quando a energia cinética é muito pequena. Se, além disso, a energia da interação é suficientemente pequena a ponto do comprimento de onda de De Broglie ser muito maior que o alcance das interações, então, a seção de choque se torna independente do ângulo de espalhamento e podemos escrevê-la em termos de um único parâmetro  $d\sigma/d\Omega = a^2$ . Integrando sobre todos os ângulos, a seção de choque total será dada por  $\sigma = 4\pi a^2$ . Com isso, se a interação for modificada de modo que o valor de  $a$  seja preservado essa modificação se torna irrelevante. Esse parâmetro dependerá apenas da energia disponível para as colisões, e será chamado de *comprimento de espalhamento* no limite em que a energia disponível se anula. Note que existe uma ambiguidade no sinal do comprimento de espalhamento, pois  $\pm a$  fornecem a mesma seção de choque. O sinal está relacionado com o fato do potencial de interação entre os bósons ser atrativo ou repulsivo. Para simplificar, podemos dizer que se  $a < 0$  a interação é atrativa, e repulsiva se  $a > 0$ .

Considerando tudo isso, o potencial de interação poderia ser dado por uma equação do tipo

$$v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \left[ \frac{1}{\pi^{3/2}\beta^3} e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\beta^2}} \right] \quad (3.39)$$

onde  $m$  é a massa da partícula,  $a$  é o comprimento de espalhamento e  $\beta$  é a largura da gaussiana entre colchetes. Essa função pode ser escolhida arbitrariamente desde que seja

normalizada e obedeça à condição de que seu alcance (neste caso  $\beta$ ) seja muito menor que o comprimento de onda de De Broglie envolvido. Essa condição pode ser garantida fazendo  $\beta \rightarrow 0$  mantendo a condição de normalização. Isso obriga os bósons a interagirem entre si somente quando estiverem no mesmo ponto. Desse modo, podemos representar o potencial de interação com uma função delta de Dirac no lugar da gaussiana

$$v(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (3.40)$$

mantendo o requisito que  $a$  negativo fornece um potencial atrativo e se  $a$  positivo ele é repulsivo. Mas a interação introduz correlações entre as partículas, e isso traz complicações consideráveis ao problema que se torna intratável mesmo diante de aproximações.

### 3.2.2 Aproximação de campo médio gaussiana

Existe, porém, um tipo de aproximação que ignora os efeitos das correlações sem, contudo, ignorar as interações em si. Esse artifício é conhecido como aproximação de campo médio e consiste em considerar apenas o efeito médio das interações entre as partículas. Para isto, é usual utilizar um potencial adicional ao qual todos os bósons estão sujeitos. Mas esse potencial se torna auto-consistente à medida em que ele depende do estado das partículas, que por sua vez depende dele. Essa aproximação é boa no sentido de que, no caso de condensados atômicos rarefeitos, a temperatura de transição para o estado condensado calculada têm uma grande concordância com a medida experimental.

Como foi dito inicialmente, a energia do sistema de partículas poderá ser dada pela soma das energias cinética dos bósons, potencial da armadilha e potencial média de interação. Como todos os  $n$  bósons no estado de menor energia podem ser descritos pela mesma função de onda,  $\varphi(\vec{r})$ , temos

$$E = \frac{n}{2m} \int \varphi^*(\vec{r}) \left( \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \right)^2 \varphi(\vec{r}) d^3r + n \int \varphi^*(\vec{r}) V_0(\vec{r}) \varphi(\vec{r}) d^3r \quad (3.41)$$

$$+ \frac{n}{2} \int \varphi^*(\vec{r}) \left[ (n-1) \int \varphi^*(\vec{r}') v(\vec{r}, \vec{r}') \varphi(\vec{r}') d^3r' \right] \varphi(\vec{r}) d^3r$$

onde  $\hbar\vec{\nabla}/i$  é o momento de um bóson e  $V_0(\vec{r})$  é o potencial da armadilha. O fator entre colchetes do ultimo termo é uma média do potencial de interação,  $v(\vec{r}, \vec{r}')$  (dado na equação (3.40)), entre todos os outros  $n-1$  bósons para todo  $\vec{r}'$ . O fator  $1/2$  neste termo garante que os pares de partículas não serão contados duas vezes. Multiplicar por  $n$  cada um dos termos garante que cada bóson contribua com o mesmo peso para a energia total do sistema. O problema agora fica restrito a encontrar qual função de onda,  $\varphi(\vec{r})$ , que minimiza a energia. Como a linearidade das equações foi perdida neste tratamento, então o problema de encontrar  $\varphi(\vec{r})$  se torna o de resolver equações diferenciais não lineares.

Uma boa aproximação para o problema variacional é utilizar uma gaussiana de largura  $\beta$  como sendo a função de onda do sistema

$$\varphi(\vec{r}) \rightarrow \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}\beta}\right)^{3/2} e^{-\frac{r^2}{2\beta^2}}.$$

Assim, podemos transformar o problema de encontrar uma função que minimiza  $E$  para simplesmente encontrar um parâmetro,  $\beta$ , que minimiza  $E$ . Representando o potencial da armadilha pelo do o oscilador harmônico de frequência  $\omega$ ,  $V_0(\vec{r}) \rightarrow m\omega^2 r^2/2$ , obtemos o seguinte valor para a energia

$$E(\beta) = n\hbar\omega \left[ \frac{3}{4} \left( \frac{b^2}{\beta^2} + \frac{\beta^2}{b^2} \right) + \frac{(n-1)a}{\sqrt{2\pi}b} \frac{b^3}{\beta^3} \right], \quad (3.42)$$

onde  $b = \sqrt{\hbar/m\omega}$ . Podemos definir

$$x \equiv \frac{\beta}{b}, \quad \gamma \equiv \frac{(n-1)a}{\sqrt{2\pi}b} \quad \text{e} \quad \epsilon \equiv \frac{E(\beta)}{n\hbar\omega}, \quad (3.43)$$

a fim de fazermos com que a equação (3.42) fique em termos adimensionais, e com isso obtemos

$$\epsilon(x) = \frac{3}{4} \left( \frac{1}{x^2} + x^2 \right) + \gamma \frac{1}{x^3}. \quad (3.44)$$

Agora, podemos tomar a derivada com respeito a  $x$  e igualar a zero para obtermos a expressão

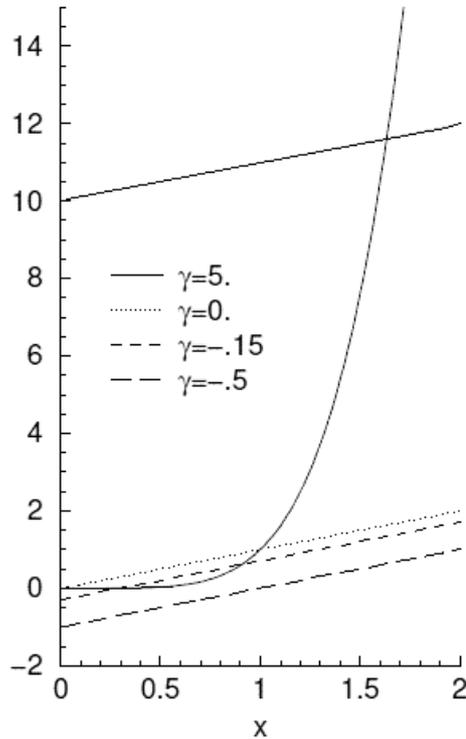
$$\frac{1}{2x^3} + \frac{\gamma}{x^4} = \frac{x}{2} \quad (3.45)$$

ou, simplesmente,

$$x + 2\gamma = x^5, \quad (3.46)$$

com a condição de que  $x \neq 0$ . A solução gráfica dessa equação pode ser visualizada na figura 3.1. As retas são as soluções da parte esquerda da equação (3.46) e a curva é uma parábola de quinto grau, que é a solução do lado direito. Note da definição de  $\gamma$ , na equação (3.43), que quando o comprimento de espalhamento é positivo então  $\gamma > 0$ , e vice-versa. A solução com  $\gamma = 0$  (gás ideal) intercepta a parábola em  $x = 0$  e em  $x = 1$  (lembrando que a solução para  $x = 0$  não é legítima). Com  $\gamma > 0$ , teremos sempre uma solução real em  $x > 1$ . Esta solução corresponde a um mínimo de  $\epsilon(x)$ , porque

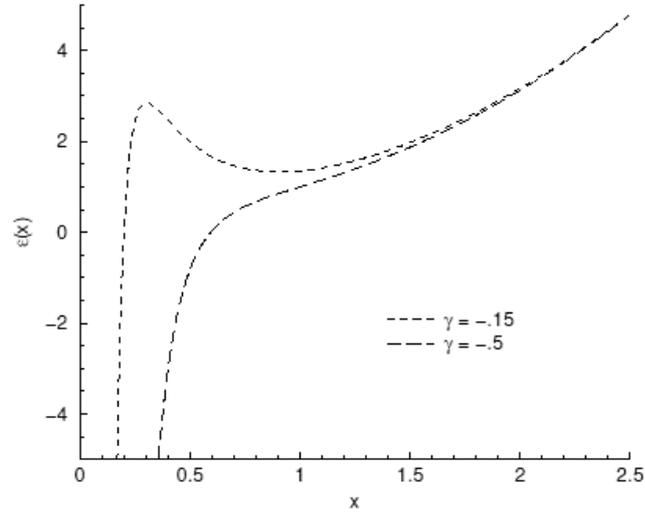
$\epsilon(x > 0) > 0$  sempre, e quando  $x \rightarrow \infty$   $\epsilon(x) \rightarrow \infty$  mas quando  $x \rightarrow 0$ , da equação (3.45) sabemos que  $\epsilon(x) \rightarrow \infty$  também. O significado de  $x > 1$  é que  $\beta > b$ , isto é, a função gaussiana que minimiza a energia é mais larga que a do estado fundamental da armadilha. Já para  $\gamma < 0$ , existem duas soluções reais se  $\gamma = -0,15$  e para  $\gamma = -0,5$  não existe mais solução alguma. No caso em que existe solução para  $\gamma < 0$  teremos duas raízes com  $0 < x < 1$ . Veja o gráfico de  $\epsilon(x)$ , nessa situação na figura 3.2. No primeiro ponto onde a reta corta a parábola corresponderá a um máximo, e o segundo a um mínimo quando  $\gamma = -0,15$ . O máximo e o mínimo vão se aproximando até desaparecerem completamente e  $\epsilon(x)$  passa a crescer monotonicamente.



**Figura 3.1:** Solução gráfica da equação 3.46

Com essa análise, podemos concluir que condensados formados por bósons interagentes são mais estáveis quando essa interação é repulsiva, e adquirem dimensões maiores que a do estado fundamental da armadilha. Quando a interação é atrativa a energia diminui a medida que o condensado se torna mais denso, pois  $\epsilon(x) \rightarrow -\infty$  quando  $x \rightarrow 0$ . O sistema pode vir a sofrer um colapso atrativo quando se torna demasiadamente denso. Porém, para valores de  $\gamma$  não muito negativos,  $\epsilon(x)$  tem um mínimo em  $x < 1$  e um máximo próximo de  $x = 0$  onde o condensado possui uma metaestabilidade. Se  $\gamma$  ficar muito negativo a barreira desaparece e o condensado sofre o colapso atrativo.

Assim, para que um sistema de bósons condense, é necessário que a largura da função de onda de cada partícula seja maior que a largura do estado fundamental da



**Figura 3.2:** Solução gráfica da equação 3.42 com  $\gamma < 0$

armadilha. Então, para saber se um determinado sistema apresenta condensado de Bose-Einstein, devemos calcular os termos de longo alcance fora da diagonal [25] (off-diagonal long-range order - ODLRO) da matrix densidade de um corpo  $\langle \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}') \rangle$  tomando o limite de grandes separações  $|\vec{r} - \vec{r}'|$ . Se  $\langle \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}') \rangle = 0$ , então podemos concluir que as partículas estão localizadas, e são descritas por uma função de onda concentrada em  $\vec{r}'$ , o que entra em desacordo com a condição da largura da função de onda da partícula ser maior do que a largura do estado fundamental da armadilha. Por outro lado, se  $\langle \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}') \rangle$  possui um resultado finito no limite de grandes separações, então podemos concluir que estamos na condição desejada para a formação de condensado.

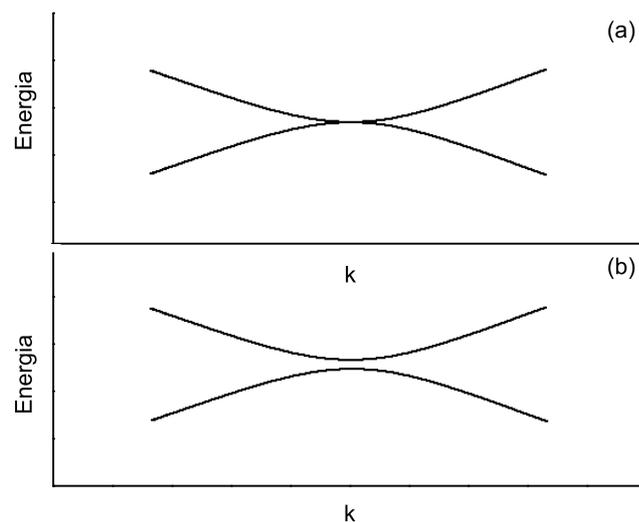
### 3.3 Transição de fase

Talvez, ao ouvirmos falar em transição de fase, a primeira coisa que venha em mente sejam mesmo as mudanças de estados físicos da matéria, provavelmente por estarem presentes em nosso dia-a-dia. Quando a água se transforma em gelo, por exemplo, temos uma transição de fase térmica, que classicamente podemos explicar através de um arranjo cristalino que minimiza a energia de interação intermolecular. No zero absoluto todas as moléculas de água estão ocupando os sítios da rede em pleno repouso. Porém, essa visão é incompatível com a mecânica quântica, pois viola o princípio de incerteza de Heisenberg. Isso porque, se conhecemos a posição exata das moléculas na rede cristalina, então os momentos são completamente desconhecidos, logo não poderiam estar em repouso. Deste modo, não podemos considerar esse estado como sendo o fundamental, pois a incerteza na energia cinética das moléculas adicionaria ao sistema um grande valor energético.

Para descobrir qual é o estado quântico fundamental do sistema, precisamos otimizar o delicado balanço entre as energias potencial e cinética, sem esquecer o princípio de incerteza. Esse balanço implica que a  $0^\circ K$  mais de uma fase é possível, pelo menos

a princípio, e cada qual estaria separada uma da outra por uma transição de fase quântica [27]. A grande diferença entre os formalismos clássico e quântico está no fato de que as flutuações clássicas aparecem da maximização da entropia em temperaturas maiores que o zero absoluto, enquanto as quânticas são governadas pelo princípio de incerteza. Então, podemos dizer que as transições de fase clássicas ocorrem quando o sistema passa a ocupar um estado abaixo da temperatura crítica caracterizado por uma ordem macroscópica. Transições quânticas ocorrem no zero absoluto, e são introduzidas pela mudança de um parâmetro externo ou constante de acoplamento e são dadas por flutuações quânticas [28]. Em sistemas com quebra espontânea de alguma simetria no estado ordenado (como no caso do sistema bicamada que vimos no seção 2.3) este parâmetro nos mostra o acontecimento com uma mudança de valor [29].

Uma maneira factível de verificar a existência de transição de fase é fazer um mapeamento do espectro de energia, a temperatura nula, em função de um parâmetro de acoplamento de interesse,  $k$  [27]. É possível identificar com isso, não só a existência de transições de fase, mas também a qual tipo pertence. Como mostra a figura 3.3, próximo a um comportamento crítico temos duas possibilidades para haver transição de fase, em (a) existe um cruzamento entre o nível fundamental e o primeiro excitado, já em (b) acontece apenas uma aproximação desses níveis. Quando existe cruzamento entre os níveis de energia, então existe uma transição de fase de primeira ordem, pois, existe uma descontinuidade na derivada  $\frac{\partial E}{\partial k}$ . A aproximação dos níveis, sem um cruzamento efetivo, indica uma transição de fase contínua, ou de segunda ordem, já que  $\frac{\partial E}{\partial k}$  não apresenta nenhuma descontinuidade.



**Figura 3.3:** Estados fundamental e primeiro excitado da energia como função da constante de acoplamento,  $k$ , próximo a um comportamento crítico para os casos de: (a) cruzamento entre os níveis e (b) aproximação entre os níveis [27].

O cruzamento entre os níveis acontece caso o hamiltoniano possa ser escrito na forma

$$H(k) = H_0 + kH_1,$$

onde  $H_0$  e  $H_1$  são independentes de  $k$  e  $[H_0, H_1] = 0$ . Nesse caso, como  $H_0$  e  $H_1$  podem ser diagonalizados separadamente, então as autofunções de  $H(k)$  serão independentes de  $k$ , mas os autovalores não. É isso que promove a existência do cruzamento entre os níveis, criando um ponto de não-analiticidade na derivada da energia. O quase cruzamento dos níveis indica um aumento mais suave na densidade de níveis em torno dessa região, o que pode ser entendido como uma transição contínua. Note que, nesse procedimento não necessariamente é tomado o limite termodinâmico para conseguir uma transição de fase. A não-analiticidade neste caso ocorre não porque o número de partículas vai para o infinito, mas porque  $\frac{1}{k_B T} \rightarrow \infty$ , já que as transições de fase quânticas ocorrem somente em zero de temperatura [27]. Como todos os experimentos são necessariamente realizados a uma temperatura não nula, ainda que muito pequena, a tarefa central da teoria de transições de fase é descrever em  $T > 0$  as conseqüências das singularidades de propriedades físicas em  $T = 0$ .

### 3.4 Emaranhamento e entropia linear

Em um sistema de muitos corpos, a existência de uma transição de fase quântica influencia fortemente o comportamento do sistema próximo ao ponto crítico, através do desenvolvimento de correlações de longo alcance [30]. A propriedade responsável pelas correlações de longo alcance é o emaranhamento, e os estados do sistema são fortemente emaranhados no ponto crítico. O emaranhamento pode ser considerado uma propriedade de sistemas quânticos compostos, ou seja, possui mais de um subsistema. Mas isso não quer dizer que um único átomo não possa estar emaranhado consigo mesmo, pois o emaranhamento pode se dar entre seus graus de liberdade, como por exemplo, entre seu momento e spin, através de interações com um campo magnético.

Seja o operador densidade,  $\rho$ , que descreve um sistema de interesse. Podemos, então, considerar este sistema como sendo composto por duas partes 1 e 2, tal que,  $\rho^i = Tr^j \rho$  será o operador densidade reduzida<sup>1</sup> para cada uma de suas partes, onde  $i, j = 1, 2$  e  $Tr^j$  significa traço parcial com respeito a componente  $j$  [31]. Se o operador densidade do sistema pode ser escrito na forma  $\rho = \rho^1 \otimes \rho^2$  então dizemos que  $\rho$  é separável. Se isso não for possível então dizemos que  $\rho$  é emaranhado. Existem muitos critérios para saber se um estado é ou não emaranhado e muitos deles podem ser encontrado na referência [32].

Uma das maneiras do emaranhamento se manifestar em um sistema puro é em termos da perda de pureza de suas partes. Mas, como essa perda de pureza é comumente

<sup>1</sup>Esta representação é obtida considerando  $\rho$  puro, mas pela linearidade do traço podemos generalizar para estados não puros.

associada a entropia, podemos nos valer disso para quantificar o emaranhamento do sistema [33]. É comum encontrarmos na literatura a entropia de von Neumann [32] como o quantificador mais usado. Nesse trabalho, entretanto, escolhemos utilizar a entropia linear [34]

$$\Delta = 1 - \text{Tr}_j[\rho_j^2(0)] \quad (3.47)$$

onde  $j = 1, 2$  rotula as partes do sistema. Para o caso do modelo que propomos no capítulo 4, a entropia linear será muito fácil de ser calculada e esse foi o principal motivo da escolha.

# Modelo esquemático para formação de bósons no sistema bicamada

---

Esse capítulo é dedicado ao estudo do modelo que propomos para a formação dos éxcitons indiretos. Na primeira seção apresentamos o modelo e encontramos seu análogo clássico. Na seção 4.2, apresentamos nossos resultados e na seção seguinte as conclusões dessa parte de nosso trabalho.

## 4.1 Modelo para criação de bósons a partir de pares de férmions

### 4.1.1 Hamiltoniano quântico

Considere um sistema bicamada sob ação de um campo magnético forte, de modo que o sistema esteja na condição de meio preenchimento do nível de Landau mais baixo, como descrito no Capítulo 2. O Hamiltoniano que descreve a formação de bóson às custas de pares de férmions nessa situação pode ser escrito como

$$\mathbf{H} = \omega_f \sum_{i,k} a_{ik}^\dagger a_{ik} + \omega_b b^\dagger b + g \sum_k \left( a_{1k}^\dagger a_{2k}^\dagger b + b^\dagger a_{2k} a_{1k} \right) \quad (4.1)$$

sendo  $a^\dagger$  ( $b^\dagger$ ) o operador criação de férmions (bósons),  $a$  ( $b$ ) o operador aniquilação de férmions (bósons),  $g$  o parâmetro de acoplamento,  $\omega_f$  a energia de um par de férmions e  $\omega_b$  de um bóson.  $k$  é o índice que rotula os estados degenerados do nível de Landau,  $\sum_{i,k} a_{ik}^\dagger a_{ik}$  conta o número de férmions não ligados em ambas as camadas,  $i = 1, 2$ , e  $b^\dagger b$  conta o número total de bósons. O termo  $b^\dagger a_{2k} a_{1k}$  descreve a formação de um bóson com a destruição de um par de férmions e seu adjunto descreve a situação inversa, a soma desses termos sobre todos os estados ocupados fornece a mudança total na energia devido à formação (e/ou destruição) de pares de férmions. O operador número total de férmions

do sistema pode ser escrito como

$$N \equiv \sum_{i,k} a_{ik}^\dagger a_{ik}^\dagger + 2b^\dagger b.$$

Definido deste modo,  $N$  é uma constante, e podemos utiliza-la para simplificar a equação (4.1). Substituindo o operador número de férmions por  $N - 2b^\dagger b$ , redefinindo o zero de energia de modo que a constante  $\omega_f N$  desapareça e definindo  $\omega_b - 2\omega_f \equiv \delta$ , obtemos

$$H = \delta b^\dagger b + g \sum_k \left( a_{1k}^\dagger a_{2k}^\dagger b + b^\dagger a_{2k} a_{1k} \right). \quad (4.2)$$

Podemos escrever uma base para  $H$ , tal que  $|n_f\rangle \otimes |n_b\rangle = |n_f, (n - n_f)/2\rangle$ , com  $|n_b\rangle$  sendo os autoestados do operador número de bósons definidos por

$$b^\dagger b |n_b\rangle = n_b |n_b\rangle; \quad \langle n_b | n'_b \rangle = \delta_{n_b, n'_b} \quad (4.3)$$

onde  $n_b$  é o número de bósons presentes no sistema.  $|n_f\rangle$  é o estado com  $n_f$  férmions, que pode ser escrito como

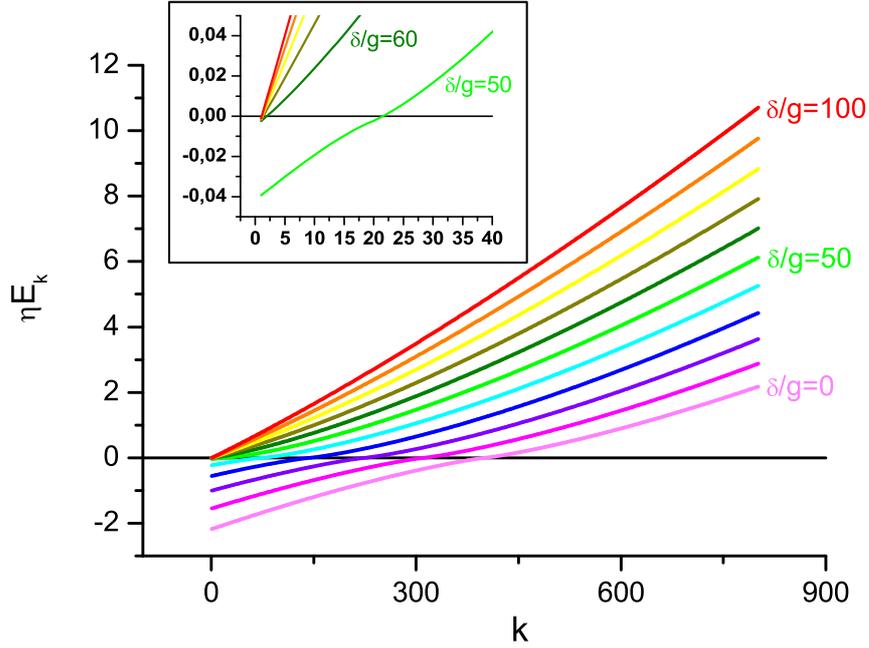
$$|n_f\rangle = \sqrt{\frac{\left(\frac{n-n_f}{2}\right)!}{\left(\frac{n}{2}\right)! \left(\frac{n_f}{2}\right)!}} \left( \sum_\alpha a_{1\alpha}^\dagger a_{2\alpha}^\dagger \right)^{\frac{n_f}{2}} |0\rangle; \quad \langle n_f | n'_f \rangle = \delta_{n_f, n'_f} \quad (4.4)$$

sendo  $n$  o número total de férmions (auto-valor do operador  $N$ ). O fator de normalização de  $|n_f\rangle$  foi obtido por argumentos combinatórios (vide apêndice B). Através de uma álgebra simples, podemos encontrar como o operador  $\sum_k a_{1k}^\dagger a_{2k}^\dagger$  atua em  $|n_f\rangle$ , obtendo

$$\sum_k a_{1k}^\dagger a_{2k}^\dagger |n_f\rangle = \sqrt{\left(\frac{n_f+2}{2}\right) \left(\frac{n-n_f}{2}\right)} |n_f+2\rangle. \quad (4.5)$$

Diagonalizamos o Hamiltoniano para um total de 1600 férmions, mas para ser possível uma comparação com o limite clássico que será feito na seção 4.2,  $H$  foi escalado por um fator de  $\eta = \frac{8}{gn^{3/2}}$ . No espectro de  $H$  mostrado na figura 4.1, podemos notar a existência de um ponto de inflexão para certos valores de  $\delta/g$ , que desaparece exatamente em  $\sqrt{8n}/2$ , no caso  $n = 1600$  e com isso  $\delta/g \approx 56,6$ . Adiante veremos como relacionar este ponto a uma transição de fase.

Os sinais de  $g$  e de  $\delta$  em  $H$  se referem à natureza dos bósons criados. Se estamos considerando que no sistema existem elétrons e buracos, então o potencial entre eles é atrativo, tornando  $g < 0$ , e a energia de ligação é negativa, resultado em  $\delta < 0$ . Por outro lado, se existem apenas elétrons, ocorre a situação inversa e então  $g > 0$  e  $\delta > 0$  (como

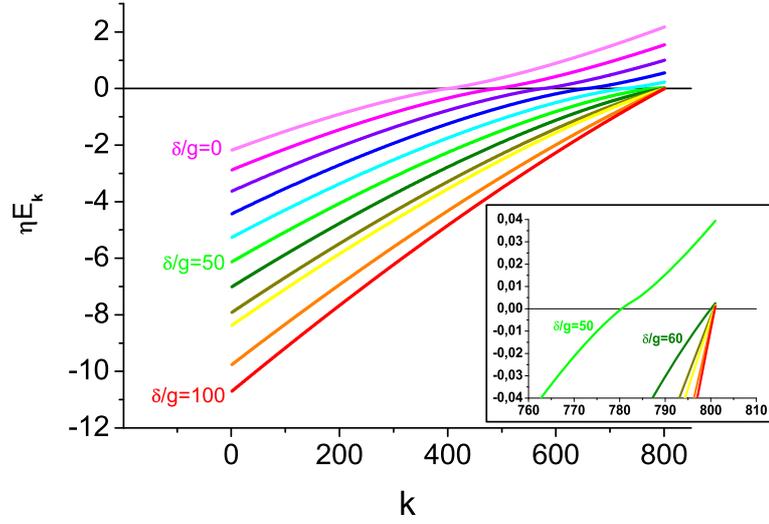


**Figura 4.1:** Espectro de energia para o Hamiltoniano que modela a formação de bósons a partir de pares de férmions, utilizando um total de 1600 férmions.  $k$  é o índice que rotula os autoestados,  $\eta = \frac{8}{gn^{3/2}}$  é um fator de escala. Os valores de  $\delta/g$  variam de 0 a 100 de 10 em 10 como indicado. Detalhe mostra o ponto que inflexão ainda existente para  $\delta/g = 50$  e sua ausência para  $\delta/g = 60$

no caso dos pares de Cooper). Como os dois sistemas são completamente equivalentes, a escolha do sinal não pode trazer mudanças físicas ao estudo. De fato, ir de  $g$  para  $-g$  não altera em nada a energia do sistema. Por outro lado, o sinal de  $\delta$  inverte o espectro da energia. Para ver isso, considere o Hamiltoniano

$$H' = -\frac{\delta}{g}b^\dagger b + \sum_k \left( a_{1k}^\dagger a_{2k}^\dagger b + b^\dagger a_{2k} a_{1k} \right).$$

O espectro de  $H'$  está mostrado na figura 4.2, e comparando com a figura 4.1, podemos ver que o comportamento do último estado excitado de  $H'$  é exatamente o mesmo do estado fundamental de  $H$ . Isso se dá porque estes estados são exatamente os mesmos. Esta equivalência vale para todo o espectro de  $H$  e de  $H'$  mantendo-se a regra: o primeiro estado excitado de  $H$  será igual ao penúltimo de  $H'$ , e assim por diante. Logo, os estados são todos correspondentes e isto mais uma vez não traz nada de novo. Então, podemos pensar que o modelo representa bem o sistema, no sentido de que apresenta a equivalência entre os sistemas elétron-elétron e elétron-buraco, como mencionado na seção 2.2.



**Figura 4.2:** Espectro de energia para  $H'$  utilizando  $n = 1600$  e  $\eta = \frac{8}{gn^{3/2}}$ . Os valores de  $\delta/g$  variam de 0 a 100 de 10 em 10 como indicado. Detalhe mostra o ponto que inflexão ainda existente para  $\delta/g = 50$  e sua ausência para  $\delta/g = 60$

#### 4.1.2 Limite semiclássico

Para tomarmos o limite clássico do Hamiltoniano dado na equação (4.2), consideremos os valores de  $n_b = 0, 1, 2, \dots, \frac{n}{2}$  e de  $n_f = n, n-2, \dots, 4, 2, 0$ . Note que existem  $\frac{n}{2} + 1$  estados possíveis para  $n_b$ ; portanto, podemos escrevê-lo na forma  $2j+1$  onde  $j = \frac{n}{4}$ . Então, se definimos  $j_z \equiv -\frac{n}{4}, -\frac{n}{4} + 1, \dots, \frac{n}{4} - 1, \frac{n}{4}$ , também teremos  $\frac{n}{2} + 1$  estados possíveis. Com isso, podemos escrever a base de H, definida anteriormente, como

$$\left| n_f, n_b = \frac{n - n_f}{2} \right\rangle \rightarrow \left| j = \frac{n}{4}, j_z = n_b - \frac{n}{4} \right\rangle.$$

Agora podemos definir os operadores

$$\mathbf{J} \equiv \frac{1}{4}N$$

$$\mathbf{J}_z \equiv b^\dagger b - \frac{1}{4}N$$

de tal modo que

$$\mathbf{J}|j = \frac{n}{4}, j_z = n_f - \frac{n}{4}\rangle \equiv j|j = \frac{n}{4}, j_z = n_f - \frac{n}{4}\rangle$$

$$\mathbf{J}_z|j = \frac{n}{4}, j_z = n_f - \frac{n}{4}\rangle \equiv j_z|j = \frac{n}{4}, j_z = n_f - \frac{n}{4}\rangle.$$

Assim, a partir da definição  $\mathbf{J}_\pm|j, j_z\rangle \equiv \sqrt{j(j+1) - j_z(j_z \pm 1)}|j, j_z \pm 1\rangle$ , podemos calcular os operadores  $\mathbf{J}_+$  e  $\mathbf{J}_-$  e encontramos

$$\mathbf{J}_+ = \frac{1}{\sqrt{b^\dagger b}} \sum_k a_{1k} a_{2k} b^\dagger \quad \text{e} \quad \mathbf{J}_- = \sum_k a_{1k}^\dagger a_{2k}^\dagger b \frac{1}{\sqrt{b^\dagger b}}.$$

Esses operadores seguem as relações de comutação de momento angular e, por isso, essa é uma base quase-spin. Substituindo os operadores  $\mathbf{J}_z$  e  $\mathbf{J}_\pm$  na equação (4.2), encontramos o seguinte Hamiltoniano

$$H = g \left( \mathbf{J}_- \sqrt{\mathbf{J}_z + j} + \sqrt{\mathbf{J}_z + j} \mathbf{J}_+ \right) + \delta (\mathbf{J}_z + j) \quad (4.6)$$

onde foi usado o valor do operador  $\mathbf{J}$  em seu lugar, já que os auto-estados do Hamiltoniano conservam o número de partículas.

Para obter a Hamiltoniana clássica, existe um procedimento que, basicamente, consiste em definir novos operadores quânticos da forma

$$J_z \equiv \frac{\mathbf{J}_z}{\sqrt{j(j+1)}} \quad \text{e} \quad J_\pm \equiv \frac{\mathbf{J}_\pm}{\sqrt{j(j+1)}}, \quad (4.7)$$

e posteriormente escrever o Hamiltoniano quântico em termos deles. Assim, a equação (4.6) pode ser escrita como

$$H = g \left[ \sqrt{j(j+1)} \right]^{3/2} \left( J_- \sqrt{J_z + j} + \sqrt{J_z + j} J_+ \right) + \delta \sqrt{j(j+1)} (J_z + j). \quad (4.8)$$

O limite clássico [39] dos operadores da equação (4.7) será obtido fazendo  $j \rightarrow \infty$ , pois as relações de comutação passam a ser equivalentes aos colchetes de Poisson, ou seja

$$[J_k, J_l] = i\epsilon^{klm} \frac{J_m}{\sqrt{j(j+1)}} = 0 \quad \text{se } j \rightarrow \infty,$$

logo

$$\lim_{j \rightarrow \infty} [J_k, J_l] \equiv \{J_k, J_l\}.$$

Com isso podemos considerar  $J_k$  como variáveis clássicas. Note que tomar o limite  $j \rightarrow \infty$  é exatamente equivalente a tomar o limite de  $n \rightarrow \infty$  já que  $n = 4j$ . Então no limite termodinâmico, devemos fazer tanto  $n \rightarrow \infty$  como  $V \rightarrow \infty$  de tal maneira que a densidade,  $\mathbf{n} = n/V$ , permaneça constante. Nesse limite podemos definir os seguintes parâmetros clássicos:

$$g' \equiv g \left[ \sqrt{j(j+1)} \right]^{3/2} \rightarrow g j^{3/2} = g \frac{n^{3/2}}{8} = \frac{gV\sqrt{n}}{8} \mathbf{n}$$

$$\delta' \equiv \delta \sqrt{j(j+1)} \rightarrow \delta j = \frac{\delta n}{4} = \frac{\delta V}{4} \mathbf{n}.$$

Lembrando que  $J_\pm = J_x \pm iJ_y$  e substituindo  $g'$  e  $\delta'$  na equação (4.8), temos que a hamiltoniana clássica,  $h = H/\mathbf{n}$ , pode ser escrita na forma

$$h = g'2J_x\sqrt{J_z+1} + \delta'(J_z+1). \quad (4.9)$$

Aqui foi usado que  $\sqrt{J_z+1}J_+ = J_+\sqrt{J_z+1}$ , pois agora temos uma função clássica. Considerando que  $\vec{J} \equiv (J_x, J_y, J_z)$  é um vetor unitário, em coordenadas esféricas, temos que

$$J_x = \text{sen}\theta\cos\varphi, \quad J_y = \text{sen}\theta\text{sen}\varphi, \quad J_z = \cos\theta.$$

Assim,  $\text{sen}\theta = \sqrt{1 - \cos^2\theta} = \sqrt{1 - J_z^2}$ , e com isso temos que  $j_x = \sqrt{1 - J_z^2}\cos\varphi$ . Substituindo em (4.9), encontramos

$$h = 2g'\sqrt{1 - J_z}(1 + J_z)\cos\varphi + \delta'(1 + J_z) \quad (4.10)$$

sendo que  $\varphi$  é a variável conjugada a  $J_z$ .

Calculando as equações de movimento  $-\dot{J}_z = \partial h / \partial \varphi$  e  $\dot{\varphi} = \partial h / \partial J_z$ , obtivemos-se:

$$-\dot{J}_z = 2g'\sqrt{1 - J_z}(1 + J_z)\text{sen}\varphi \quad (4.11)$$

$$\dot{\varphi} = -g'\cos\varphi \left[ \frac{1 - 3J_z}{\sqrt{1 - J_z}} \right] - \delta'. \quad (4.12)$$

E encontramos três pontos críticos fazendo  $\dot{J}_z = \dot{\varphi} = 0$ ; através do discriminante podemos identificá-los como

1-) Ponto de sela

$$(\varphi, J_z) = \left( \arccos\left(\frac{-1}{\sqrt{8}}\frac{\delta'}{g'}\right), -1 \right) \quad (4.13)$$

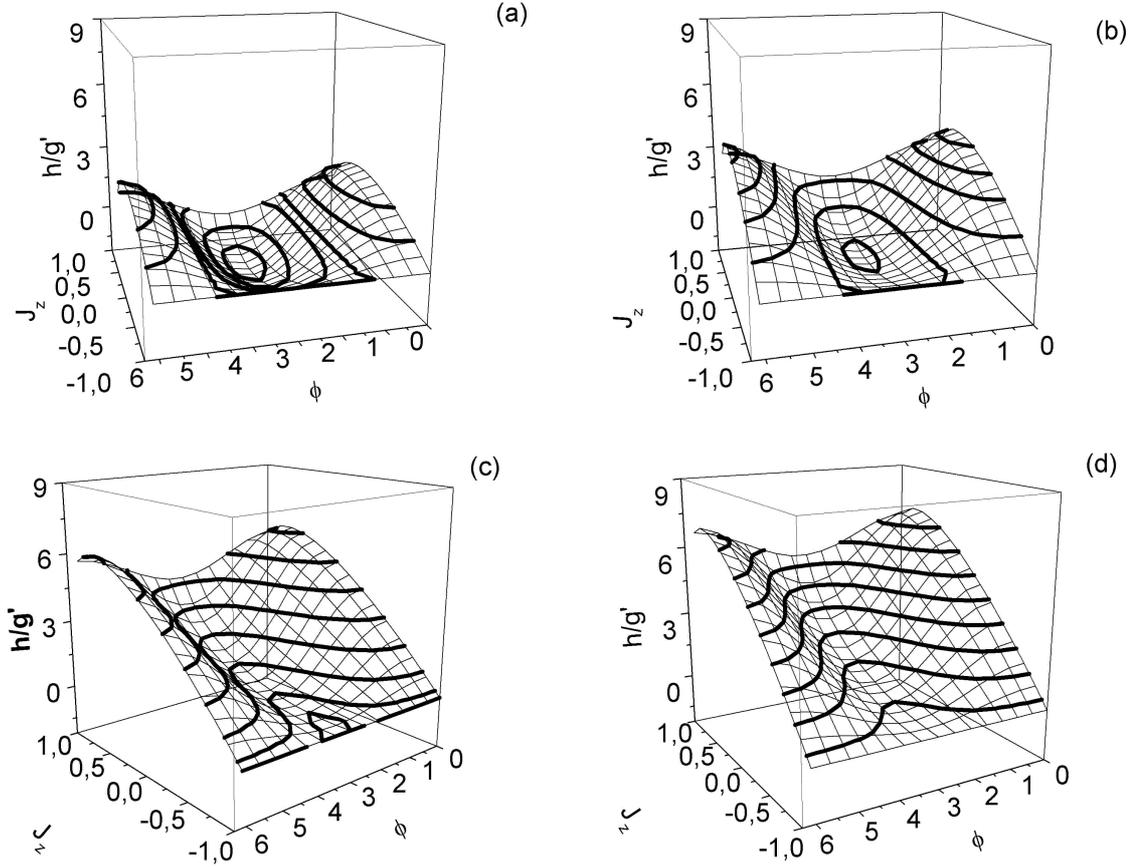
2-) Ponto de máximo

$$(\varphi, J_z) = \left( 2m\pi, \frac{1}{18} \left[ 6 - \left(\frac{\delta'}{g'}\right)^2 + \sqrt{\left(\frac{\delta'}{g'}\right)^4 + 24\left(\frac{\delta'}{g'}\right)^2} \right] \right) \quad (4.14)$$

3-) Ponto de mínimo

$$(\varphi, J_z) = \left( (2m+1)\pi, \frac{1}{18} \left[ 6 - \left(\frac{\delta'}{g'}\right)^2 - \sqrt{\left(\frac{\delta'}{g'}\right)^4 + 24\left(\frac{\delta'}{g'}\right)^2} \right] \right). \quad (4.15)$$

Esse último ponto crítico, equação (4.15), é de mínimo somente enquanto  $\delta'/g' < \sqrt{8}$ ; se passamos deste valor esse ponto se funde ao ponto de sela. Podemos ver a localização estimada destes pontos nos gráficos da superfície de  $H$ , mostrada na figura 4.3.

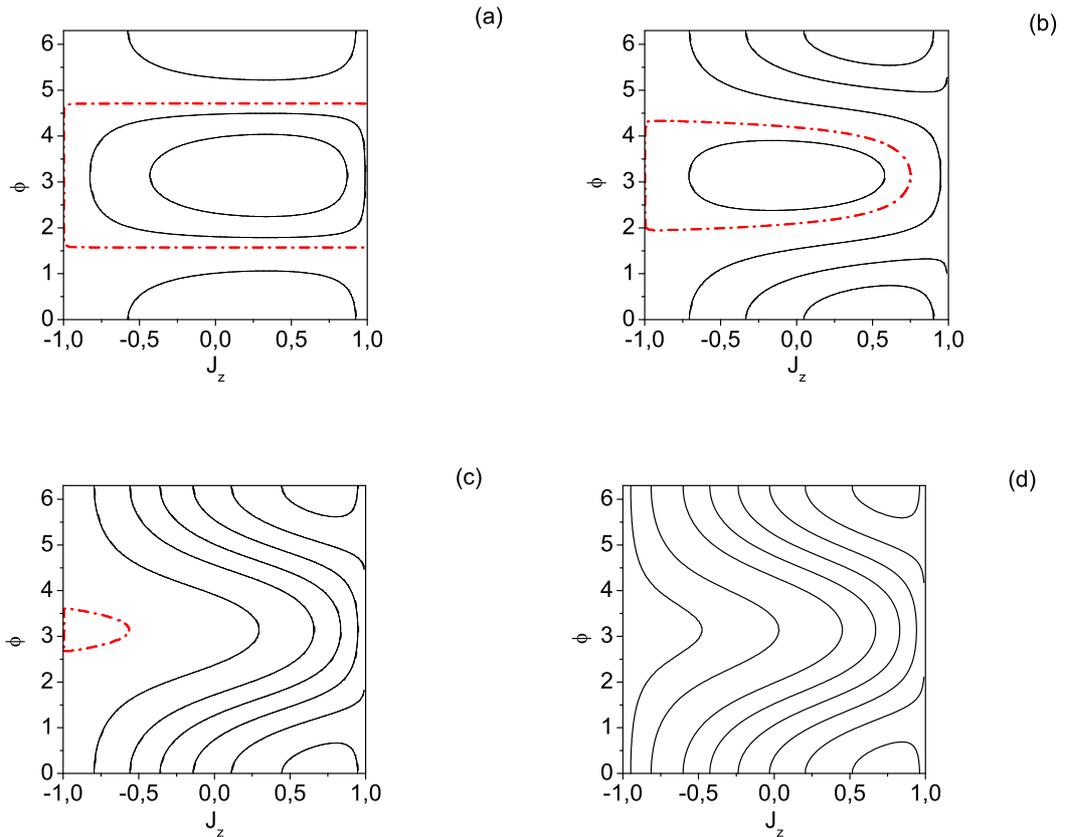


**Figura 4.3:** Superfícies da Hamiltoniana clássica  $h = 2g'\sqrt{1 - J_z}(1 + J_z)\cos\varphi + \delta'(1 + J_z)$ . Temos em (a)  $\delta'/g' = 0$ , em (b)  $\delta'/g' = 1,0$ , em (c)  $\delta'/g' = 2,5$  e em (d)  $\delta'/g' = 3,0$

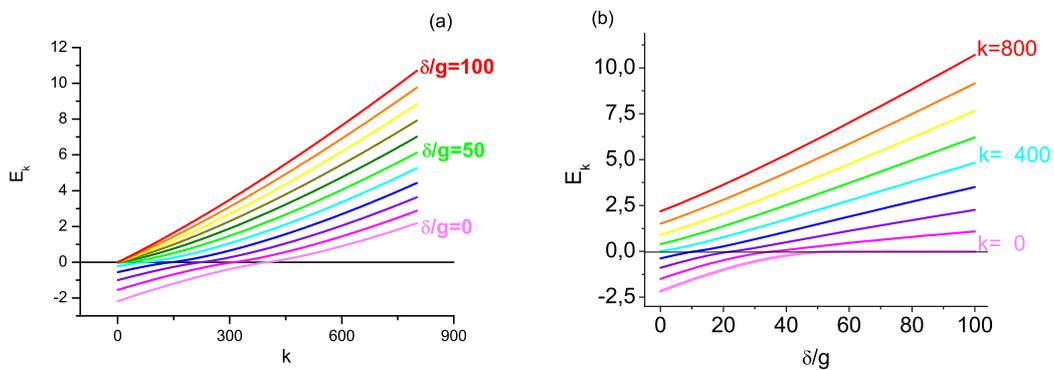
## 4.2 Resultados

No espaço de fase clássico, mostrado na figura 4.4, estão destacadas em vermelho as órbitas correspondentes à energia zero; essas órbitas são especiais porque elas separam dois regimes distintos de comportamento no espaço de fase, justamente por isso recebem o nome de órbitas separatrizes. Esta mudança nas órbitas é a marca da transição de fase no espaço clássico. No modelo quântico, a energia na qual o ponto de inflexão ocorre é sempre zero, e este ponto pode ser relacionado com a órbita separatriz já que ela também possui energia nula. Compare a figura 4.5 com a do espaço de fase da 4.4. Na figura 4.5(b), podemos ver que para  $\delta/g \sim 56$  existe um ponto de inflexão exatamente no zero de energia do estado fundamental. Quando vamos diminuindo o valor de  $\delta/g$ , o estado que apresenta este ponto de inflexão vai mudando, mas sempre ocorrendo energia nula. Quando chegamos em  $\delta/g = 0$  temos o estado  $k = 400$  apresentando o ponto de

inflexão, mas se  $\delta/g > 56$  na parte (a) ou se  $k > 400$  na parte (b) dessa mesma figura, não mais existe nenhum ponto de inflexão. Esse comportamento está refletido no espaço de fase clássico dos gráficos na figura 4.4, pois a separatriz também desaparece quando  $\delta'/g' > \sqrt{8}$ . Assim, podemos relacionar cada separatriz com um determinado estado quântico para cada valor de  $\delta/g$ .



**Figura 4.4:** Espaço de fase clássico correspondente às superfícies da figura 4.3. As órbitas destacadas em vermelho são as separatrizes para cada valor de  $\delta'/g'$



**Figura 4.5:** (a) Espectro de energia da figura 4.1. (b) Energia em função de  $\delta/g$  para estados entre  $k = 0$  e  $k = 800$  variando de 100 em 100 como indicado na figura. Note que a energia para o estado  $k = 0$  se anula após a transição

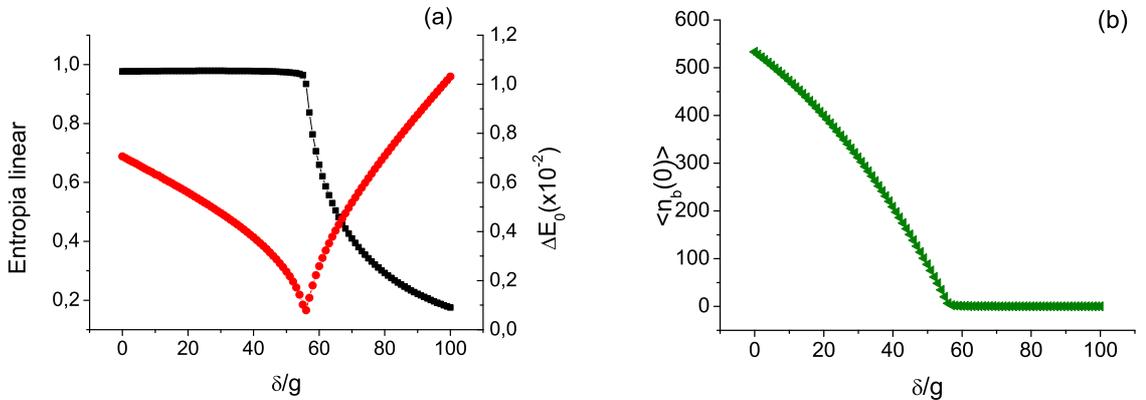
Como visto na seção 3.3, os níveis de energia devem se aproximar um do outro no ponto onde ocorre a transição de fase. No nosso caso, o Hamiltoniano pode ser escrito na forma  $H(\delta/g) = H_0 + \delta/gH_1$ , mas  $[H_0, H_1] = \sum_{\alpha}(a_{1\alpha}^{\dagger}a_{2\alpha}^{\dagger}b - b^{\dagger}a_{2\alpha}a_{1\alpha})$ , logo  $H_0$  e  $H_1$  não podem ser diagonalizados separadamente, e por isso não ocorrerá um cruzamento efetivo dos níveis de energia, e assim a transição de fase será de segunda ordem. Com isso, esperamos que a densidade de níveis seja máxima no ponto de inflexão, e ainda que a entropia linear tenha uma queda contínua ao passar pela transição, (seção 3.4). Dentro do nosso modelo, a entropia linear pode ser calculada da seguinte maneira [34]

$$\Delta = 1 - Tr\rho_f^2$$

onde  $\rho_f = Tr_b|\vartheta_k\rangle\langle\vartheta_k|$  é o operador densidade de férmions e  $|\vartheta_k\rangle$  representa um autoestado do Hamiltoniano da equação 4.2 e  $Tr_b$  é o traço parcial sobre as variáveis dos bósons. Então quando  $\Delta = 1$  o sistema está completamente emaranhado. Tomando o estado fundamental,  $|\vartheta_0\rangle$ , e variando  $\delta/g$  obtivemos a figura 4.6(a) (quadrinhos pretos). Note que, quando  $\delta/g > 56,6$  a entropia linear cai rapidamente mas de forma contínua, o que marca uma transição de fase de segunda ordem, como havíamos previsto anteriormente, pois não há o cruzamento entre os níveis de energia. Definimos a diferença na energia entre os estados adjacentes como

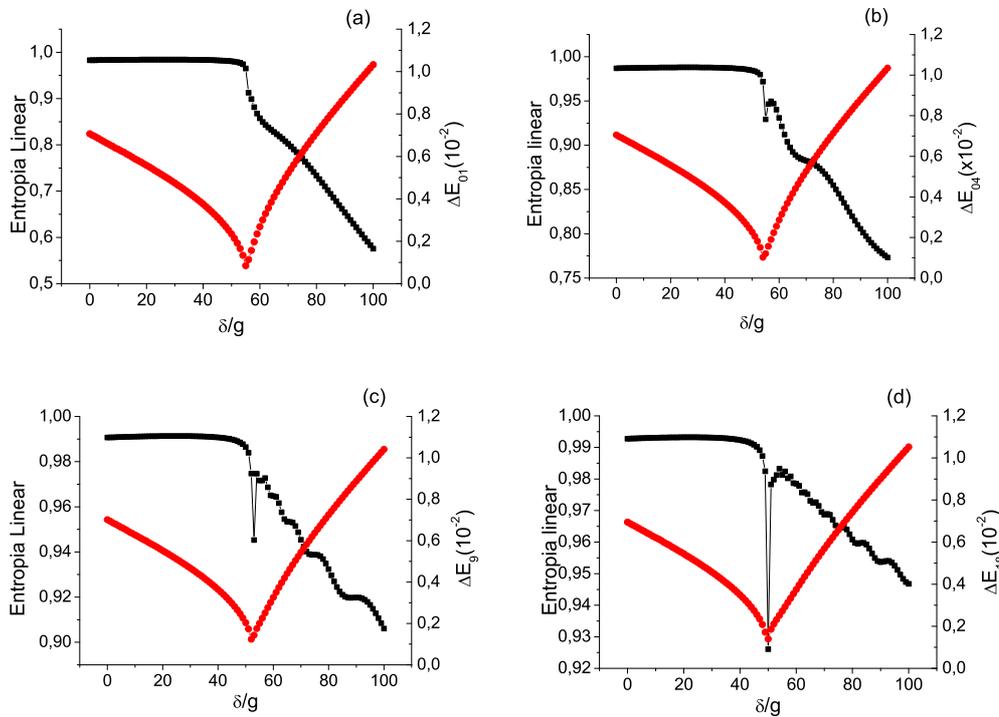
$$\Delta E_k = E_{k+1} - E_k$$

e confrontamos essa quantidade com a entropia linear na figura 4.6(a) (bolinhas vermelhas). Veja que a separação entre os níveis diminui e, exatamente quando a entropia cai, a separação exibe seu menor valor, indicando uma correlação entre a separação e a queda no emaranhamento. Na parte (b) dessa mesma figura, colocamos o gráfico do número médio de bósons, que também apresenta uma correlação com a queda na entropia. Para  $\delta/g > 56$  praticamente não mais existem bósons, enquanto que para  $\delta/g < 56$  o número de bósons é muito grande.



**Figura 4.6:** (a) Entropia linear,  $\Delta = 1 - Tr\rho_f^2$ , representada pelos quadrinhos pretos e diferença na energia,  $\Delta E_k = E_{k+1} - E_k$ , bolinhas vermelhas. (b) Número médio de bósons no sistema. Todas as curvas se referem ao estado fundamental do sistema

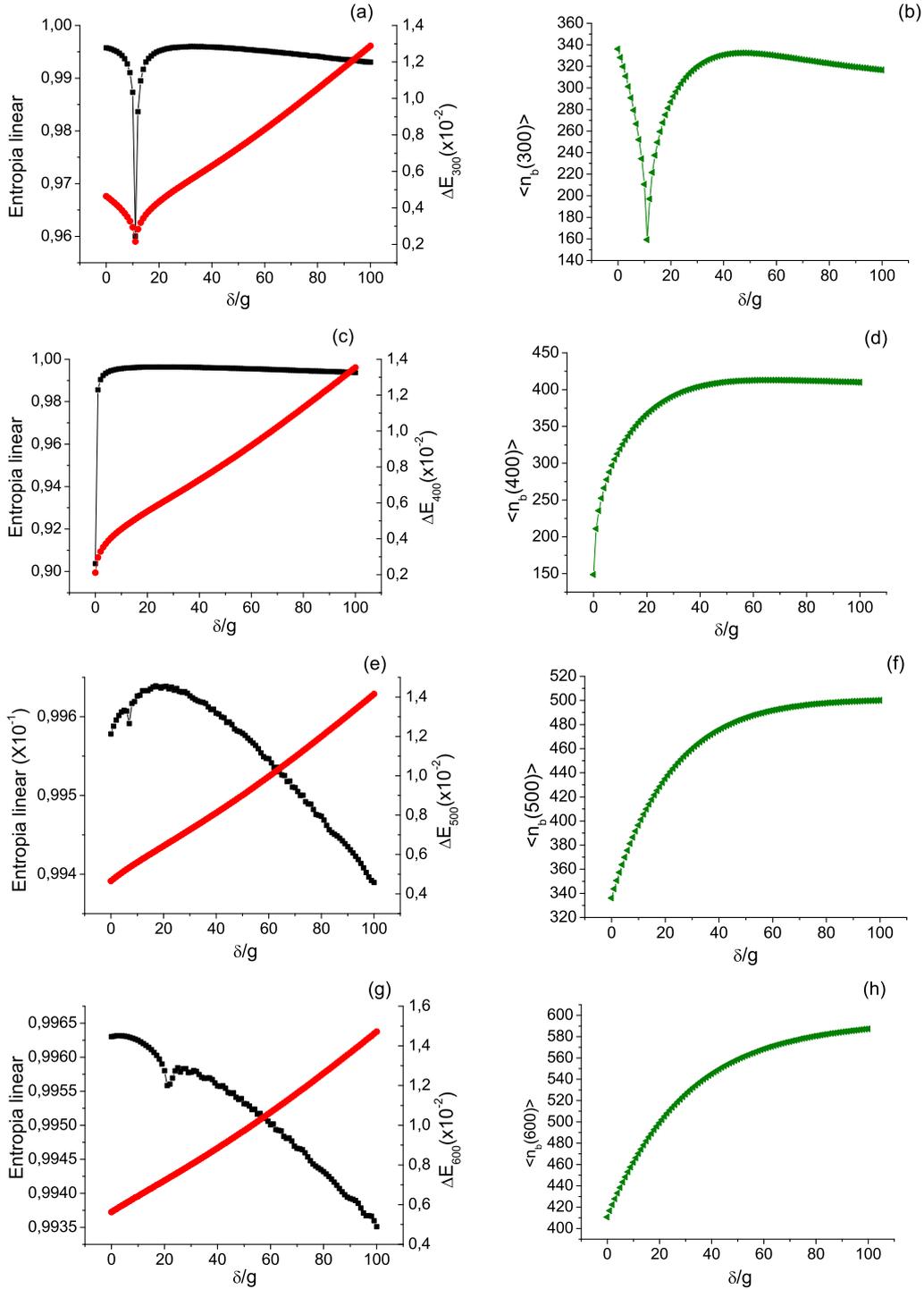
Na comparação entre o espaço de fase clássico e o espectro quântico, nós relacionamos a órbita separatriz com os estados quânticos, fundamental e excitados. Mas, se essa correspondência é verdadeira então os estados quânticos excitados devem mostrar o mesmo comportamento qualitativo para a entropia linear e a separação entre os níveis. Veja então como isso se mostra na figura 4.7 para valores pequenos de  $k$ . Podemos notar que o primeiro estado excitado, na parte (a) da figura, tem o mesmo comportamento qualitativo do estado fundamental. Os outros estados apresentam um comportamento um pouco diferente, mas ainda marcam bem o ponto em que ocorre a transição de fase. Em todos os casos, conseguimos reproduzir o comportamento de  $\Delta E$ , indicando a permanência da correlação.



**Figura 4.7:** Entropia linear,  $\Delta = 1 - \text{Tr} \rho_f^2$ , representada pelos quadrinhos pretos e diferença na energia,  $\Delta E_k = E_{k+1} - E_k$ , bolinhas vermelhas, para (a)  $k = 01$ , (b)  $k = 04$ , (c)  $k = 09$  e (d)  $k = 18$

Entretanto, na comparação clássico-quântico vimos que a transição deve ter indícios em todos os estados até o de  $k = 400$ . Para ver isso fizemos os mesmos gráficos de  $\Delta$ ,  $\Delta E$  e  $\langle n_b \rangle$  para os estados com  $k = 300, 400, 500, 600$  na figura 4.8. Note que os estados  $k = 300$  e  $k = 400$  mostram indícios da transição como inferimos anteriormente, e o estado  $k = 400$  mostra uma diferença ainda mais acentuada que os outros estados no valor da entropia linear quando  $\delta/g = 0$ . Isso se dá justamente da mesma forma que argumentamos anteriormente para relacionar este estado à separatriz para este valor do parâmetro  $\delta/g$ . Os estados  $k = 500$  e  $k = 600$  não mostram uma diferença significativa na entropia, e a separação na energia aumenta sempre. Ainda nessa figura, podemos ver o comportamento do número médio de bósons para cada um dos estados mencionados. Para  $k = 300$ , à medida que aumentamos o valor de  $\delta/g$ ,  $\langle n_b \rangle$  diminui se estamos antes da transição, e

aumenta após passarmos por ela. Podemos notar destas figuras que o emaranhamento está intimamente ligado ao número de bósons que está presente no sistema, pois para estados com  $k > 400$  temos  $\Delta \sim 1$ , e apresentam um número relativamente grande de bósons para todos os valores de  $\delta/g$ .

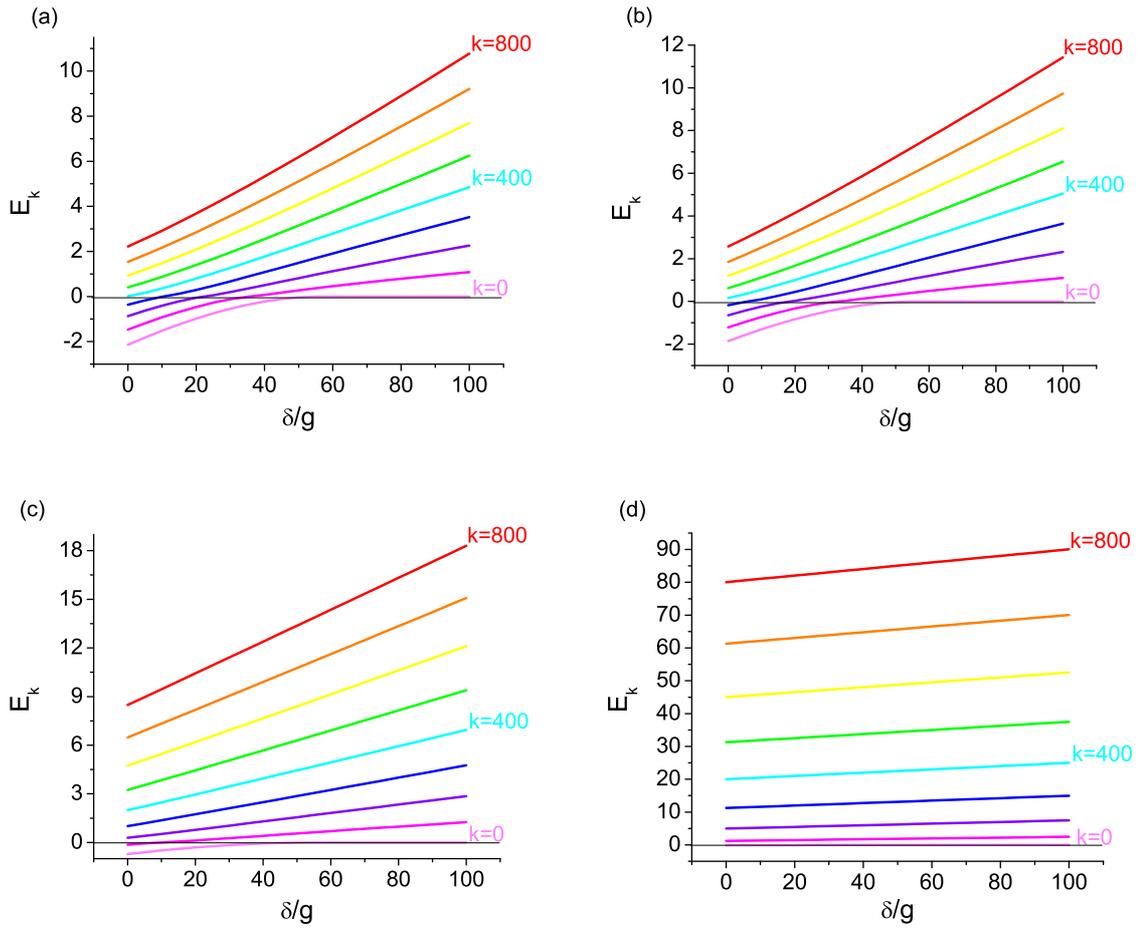


**Figura 4.8:** Entropia linear,  $\Delta = 1 - \text{Tr} \rho_f^2$ , representada pelos quadrinhos pretos, diferença na energia,  $\Delta E_k = E_{k+1} - E_k$ , bolinha vermelhas e número médio de bósons representado pelas estrelinhas verdes. Em (a) e (b)  $k = 300$ , em (c) e (d)  $k = 400$ , em (e) e (f)  $k = 500$  e finalmente em (g) e (h)  $k = 600$ .

Até aqui estamos considerando apenas o sistema com bósons não-interagentes. Como a interação entre eles poderia alterar tudo que mostramos até agora? Para descobrir, considere o Hamiltoniano

$$H^\dagger = g \sum_k \left( a_{1k}^\dagger a_{2k}^\dagger b + b^\dagger a_{2k} a_{1k} \right) + \delta b^\dagger b + \alpha (b^\dagger b)^2. \quad (4.16)$$

onde  $\alpha$  é parâmetro de interação entre os bósons. Na figura 4.9, para alguns valores de  $\alpha/g$ , podemos ver como a força da interação afeta a transição de fase. Quando  $\alpha/g$  é muito pequeno, obviamente não há uma mudança visível no comportamento do sistema, mas para  $\alpha/g = 1$ , podemos ver que não mais existe a transição de fase. Observe que o último estado a apresentar os indícios de transição deixa de ser  $k = 400$  e passa a ser  $k = 300$  para  $\alpha/g = 0,01$  e  $k = 100$  para  $\alpha/g = 0,1$ . A natureza da transição continua sendo a mesma, pois o comportamento qualitativo do número médio de bósons permanece semelhante ao caso sem interação.



**Figura 4.9:** Energia em função de  $\delta/g$  considerando bósons interagentes,  $H^\dagger$ , e utilizando  $\alpha/g$  igual a 0,001 em (a), 0,01 em (b), 0,1 em (c) e 1 em (d). ( $n = 1600$ )

## 4.3 Conclusão

No capítulo 2, vimos que o estado de meio preenchimento em sistemas bicamada pode existir em duas situações distintas: i) quando houver tunelamento entre as camadas e ii) quando os efeitos de muitos corpos predominam na ausência de tunelamento. Isso pode ocorrer em sistemas cuja única diferença entre eles é a separação  $d$  entre as camadas, sendo que o tunelamento ocorre quando as camadas são aproximadas a partir de um valor crítico estimado de  $d/l \approx 2$  [12]. No estado que apresenta efeitos de muitos corpos, esperamos um número considerável de bósons; já no estado de tunelamento não devem existir bósons, ainda que o número de elétrons e buracos continuem iguais.

Observando os resultados apresentados nas figuras 4.6 e 4.8, podemos ver que existe uma associação na queda da entropia linear com a diminuição no número médio de bósons no sistema. Com isso, podemos concluir que a transição de fase apresentada por nosso modelo está intimamente relacionada com a diminuição do número de bósons.

Ainda no capítulo 2, vimos que o estado que minimiza a energia, tanto no caso de tunelamento quanto no caso de muitos corpos, é aquele onde os elétrons na camada de cima estão imediatamente acima dos buracos na camada de baixo, ou seja, o estado incompressível. E este estado pode favorecer tanto o tunelamento quanto o estado coletivo. Além disso, para manter o sistema no estado de  $\nu_{Tot} = 1$ , é necessário um campo magnético e temperatura muito específicos, pois qualquer alteração, por pequena que seja, tira o sistema da condição de meio preenchimento.

Com isso, podemos argumentar sobre alguns aspectos físicos do nosso modelo: Veja que a constante de acoplamento,  $g$ , não deve depender nem do campo nem da temperatura, pois nosso modelo não permite ao sistema sair da condição de meio preenchimento. Então,  $g$  deve depender, essencialmente, apenas da separação entre as camadas. Por outro lado,  $\delta$  também depende da separação entre as camadas e por isso vamos analisar a relação entre a razão  $\delta/g$  e a separação entre as camadas.

Para tanto, vamos nos restringir à análise do estado fundamental. Na figura 4.6 podemos ver que quando  $\delta/g \rightarrow \infty$  o número de bósons se anula, mas se o valor de  $\delta/g$  vai diminuindo, a partir de um ponto específico ( $\delta/g = 56,6$ ), o número de bósons no sistema começa a crescer rapidamente. Como o número de bosons pode ser relacionado ao tunelamento, então temos que para  $\delta/g$  grande estamos no regime de tunelamento e para  $\delta/g$  pequeno estamos em um regime sem tunelamento. Isso corresponde exatamente ao experimento citado na subseção 2.5.2, pois o sistema apresenta tunelamento para  $d$  pequeno, mas com o aumento da separação, a partir de um certo valor ( $d/l \approx 2$ ), o tunelamento desaparece. Assim, podemos ver que  $\delta/g$  varia com o inverso da separação. Considerando ainda que, se  $d$  é pequeno, existe um favorecimento da formação de pares de férmions não ligados e se  $d$  é grande a formação de bósons é que será favorecida, podemos concluir que a transição de fase apresentada por nosso modelo representa a transição entre os estados de tunelamento e o coletivo.

Outro ponto a favor dessa analogia é a previsão experimental de que a transição entre os estados de tunelamento e o coletivo deve ser feita de maneira contínua. De fato, temos uma transição de segunda ordem que justamente é caracterizada por sua continuidade. Apesar de tudo isso, também podemos identificar imediatamente uma limitação para o modelo, comparando o limite que  $\delta/g \rightarrow 0$  e o limite experimental de  $d \rightarrow \infty$ . Nessa situação, nosso modelo apresenta um grande número de bósons, mas experimentalmente os éxcitons indiretos não deveriam existir já que a enorme separação entre as camadas impedirá que elétrons e buracos, de camadas distintas, interajam entre si. Ainda assim, é justa a associação entre o modelo e o experimento da referência [11].

---

# Condensação de Bose-Einstein dos éxcitons indiretos

---

No capítulo anterior estudamos a transição de fase que marca a formação dos éxcitons indiretos em SBC, agora pretendemos fazer o estudo da transição de fase que marca a condensação Bose-Einstein desses éxcitons. Assim, vamos recheiar esta parte do trabalho com ingredientes microscópicos através do estudo dos efeitos causados pela interação de Coulomb. Na primeira seção, calculamos os elementos de matriz coulombianos para verificar o comportamento da interação entre elétrons e buracos. Na seção seguinte propomos um estado fundamental para o sistema e fazemos o cálculo, utilizando o estado proposto, dos elementos de ordem de longo alcance fora da diagonal (off-diagonal long-range order - ODLRO) que é a única maneira de demonstrar rigorosamente se existe a condensação ou não. E, finalmente, na última seção apresentamos a conclusão a respeito desta parte do trabalho. Devemos salientar que muitos conceitos e resultados importantes obtidos no capítulo 2 serão utilizados aqui.

## 5.1 Elemento de matriz coulombiano

Como visto no capítulo 2, o sistema bicamada contém os ingredientes necessários para ocorrer a condensação de Bose-Einstein de éxcitons indiretos, tais como quebra espontânea de simetria e coerência de fase macroscópica. Mas, uma condição essencial que possibilita ocorrer a condensação é o fato de as partículas não ficarem restritas em um ponto específico no condensado, ao contrário, cada uma delas deve se encontrar sobre toda a extensão do condensado, em um estado de superposição coerente. Contudo, para verificar essa propriedade precisamos determinar o estado fundamental exato do sistema. O maior problema em se estudar BEC de éxcitons é justamente a construção dessa função de onda, isso porque ela deve ser construída a partir de pares de férmions e ainda assim, macroscopicamente, deve apresentar um comportamento bosônico. Podemos realizar cálculos numéricos, é verdade, mas nesse caso ficamos limitados a um número pequeno de partículas. Para fugir dessa restrição incômoda, faz-se necessário utilizar aproximações na forma de proposição para um estado modelo. Então, a idéia dessa parte do trabalho é justamente propor um estado fundamental aproximado para o BEC de éxcitons e verificar

se o termo ODLRO se anula no limite de grandes distâncias entre as partículas nesse estado. Além disso, verificamos ainda a qualidade dessa aproximação através de um cálculo exato para poucas partículas.

A condensação no sistema bicamada só será possível quando estamos na situação de meio preenchimento com ausência de tunelamento (capítulo 2). Nessa parte do trabalho estamos considerando o sistema sempre nestas condições e por tanto o tunelamento será desprezado neste capítulo. Como estamos querendo propor um estado fundamental para um eventual condensado, precisamos saber como se comporta a interação entre as partículas, ou seja, como se dá a troca de momento entre elétrons e buracos. Considerando que a natureza da interação entre um elétron e um buraco é puramente Coulombiana, vamos calcular os elementos de matriz dessa interação levando em conta que cada elétron está ocupando um estado do nível de Landau mais baixo dado na equação (2.10).

Para tanto, vamos utilizar o formalismo da segunda quantização, descrito na seção 3.1, para escrever os operadores densidade (de elétrons e de buracos) utilizando como base os estados do nível de Landau mais baixo,  $\varphi_k(\vec{r})$ . Assim, podemos escrever os operadores de campo para elétrons na forma

$$\psi(\vec{r}) = \sum_k \varphi_k(\vec{r}) a_k \quad \text{e} \quad \psi^\dagger(\vec{r}) = \sum_k \varphi_k^*(\vec{r}) a_k^\dagger, \quad (5.1)$$

onde  $a_k^\dagger$  ( $a_k$ ) são os operadores de criação (aniquilação) de elétrons. Para obtermos os operadores equivalentes para os buracos, basta lembrar que o ato de destruir um elétron é exatamente o mesmo de criar um buraco (capítulo 2). Considerando que os operadores  $\bar{\psi}^\dagger$  e  $c^\dagger$  são os operadores para buracos, temos

$$\bar{\psi}^\dagger(\vec{r}) \equiv \psi(\vec{r}) = \sum_k \varphi_k(\vec{r}) c_k^\dagger, \quad \text{onde} \quad c_k^\dagger = a_k. \quad (5.2)$$

Os operadores sempre criam (ou aniquilam) os elétrons na camada de cima e os buracos na camada de baixo do SBC e por isso não se faz necessário indexar as camadas. Como estamos interessados na troca de momento, calculamos os operadores densidade para elétrons,  $\rho(\vec{q})$ , e para buracos,  $\bar{\rho}(\vec{q})$ , no espaço de momentos através da transformada de Fourier da densidade no espaço de coordenadas, e encontramos os seguintes operadores

$$\begin{aligned}
\rho(\vec{q}) &= \int d^2r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}L_x l} \sum_{k,k'} \int d^2r e^{-i(q_x x + q_y y)} e^{-i(k-k')x} e^{\left[-\frac{(y+l^2k)^2 + (y+l^2k')^2}{2l^2}\right]} a_k^\dagger a_{k'} \\
&= \sum_{k,k'} \frac{e^{-l^2(k-k')^2/4}}{\sqrt{\pi}L_x l} \int d^2r e^{-i(q_x x + q_y y)} e^{-i(k-k')x} e^{\left[-\frac{[y+l^2(k+k')/2]^2}{l^2}\right]} a_k^\dagger a_{k'} \quad (5.3) \\
&= \sum_{k,k'} \delta_{q_x, k'-k} e^{-l^2(k'-k)^2/4} e^{\left(-\frac{l^2}{4}q_y^2 + \frac{il^2}{2}q_y(k+k')\right)} a_k^\dagger a_{k'} \\
\rho(\vec{q}) &= e^{\left(\frac{-l^2q^2}{4} + \frac{il^2q_y q_x}{2}\right)} \sum_k e^{il^2kq_y} a_k^\dagger a_{k+q_x}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}(\vec{q}) &= \int d^2r e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \bar{\psi}^\dagger(\vec{r})\bar{\psi}(\vec{r}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}L_x l} \sum_{k,k'} \int d^2r e^{-i(q_x x + q_y y)} e^{i(k-k')x} e^{\left[-\frac{(y+l^2k)^2 + (y+l^2k')^2}{2l^2}\right]} c_k^\dagger c_{k'} \quad (5.4) \\
\bar{\rho}(\vec{q}) &= e^{\left(\frac{-l^2q^2}{4} + \frac{il^2q_y q_x}{2}\right)} \sum_k e^{il^2kq_y} c_k^\dagger c_{k-q_x}
\end{aligned}$$

A interação entre as partículas no sistema bicamada é dada por

$$\int d^2r_1 d^2r_2 \Psi^\dagger(\vec{r}_1) \Psi^\dagger(\vec{r}_2) V(r_2 - r_1) \Psi(\vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1), \quad (5.5)$$

onde  $\Psi(\vec{r}) = \psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})$ , sendo que os índices 1 e 2 se referem a camada de cima e a camada de baixo respectivamente. Utilizando a notação de buracos podemos fazer a seguinte substituição  $\psi_1(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$  e  $\psi_2(\vec{r}) = \bar{\psi}^\dagger(\vec{r})$  e com isso temos que

$$\begin{aligned}
\Psi^\dagger(\vec{r}_1) \Psi^\dagger(\vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1) &= [\psi^\dagger(\vec{r}_1) + \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)][\psi^\dagger(\vec{r}_2) + \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2)][\psi(\vec{r}_2) + \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2)][\psi(\vec{r}_1) + \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)] \\
&= \psi^\dagger(\vec{r}_1) \psi^\dagger(\vec{r}_2) \psi(\vec{r}_2) \psi(\vec{r}_1) + \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) + \\
&\quad + \psi^\dagger(\vec{r}_1) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \psi(\vec{r}_1) + \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) \psi^\dagger(\vec{r}_2) \psi(\vec{r}_2) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_1) + \\
&\quad + \psi^\dagger(\vec{r}_1) \psi^\dagger(\vec{r}_2) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2) \psi(\vec{r}_1) + \dots \quad (5.6)
\end{aligned}$$

Na segunda igualdade temos que o primeiro termo representa a interação entre elétrons, o segundo a interação entre buracos, o terceiro e quarto a interação entre elétrons e

buracos, todos os outros termos representam os termos de tunelamento. Desprezando o tunelamento e colocando os operadores segundo conforme o ordenamento normal, temos

$$\begin{aligned} \Psi^\dagger(\vec{r}_1)\Psi^\dagger(\vec{r}_2)\Psi(\vec{r}_2)\Psi(\vec{r}_1) &\cong \psi^\dagger(\vec{r}_1)\psi^\dagger(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_1) + \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)\bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2)\bar{\psi}(\vec{r}_2)\bar{\psi}(\vec{r}_1) + \\ &- \psi^\dagger(\vec{r}_1)\bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2)\bar{\psi}(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_1) - \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)\psi^\dagger(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_2)\bar{\psi}(\vec{r}_1) \end{aligned} \quad (5.7)$$

Com isso, a interação de Coulomb toma a seguinte forma

$$\begin{aligned} \int d^2r_1 d^2r_2 \Psi^\dagger(\vec{r}_1)\Psi^\dagger(\vec{r}_2)V(r_2 - r_1)\Psi(\vec{r}_2)\Psi(\vec{r}_1) = \\ + \int d^2r_1 d^2r_2 \psi^\dagger(\vec{r}_1)\psi^\dagger(\vec{r}_2)V(r_2 - r_1)\psi(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_1) \\ + \int d^2r_1 d^2r_2 \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_1)\bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2)V(r_2 - r_1)\bar{\psi}(\vec{r}_2)\bar{\psi}(\vec{r}_1) \\ - 2 \int d^2r_1 d^2r_2 \psi^\dagger(\vec{r}_1)\bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2)V(r_2 - r_1)\bar{\psi}(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_1) \end{aligned} \quad (5.8)$$

onde os dois primeiros termos representam a repulsão entre partículas na mesma camada e o terceiro a atração entre partículas de camadas diferentes. É esse termo que vai ditar a dinâmica para a formação dos éxcitons que nos interessa aqui. Podemos calcular a transformada de Fourier do potencial de Coulomb em 2D [12,25] considerando a separação entre as camadas na direção de  $z$  igual a  $d$ , que é dado por

$$V(\vec{q}) = \frac{4\pi e^2 e^{-qd}}{\varepsilon_0 q} \quad (5.9)$$

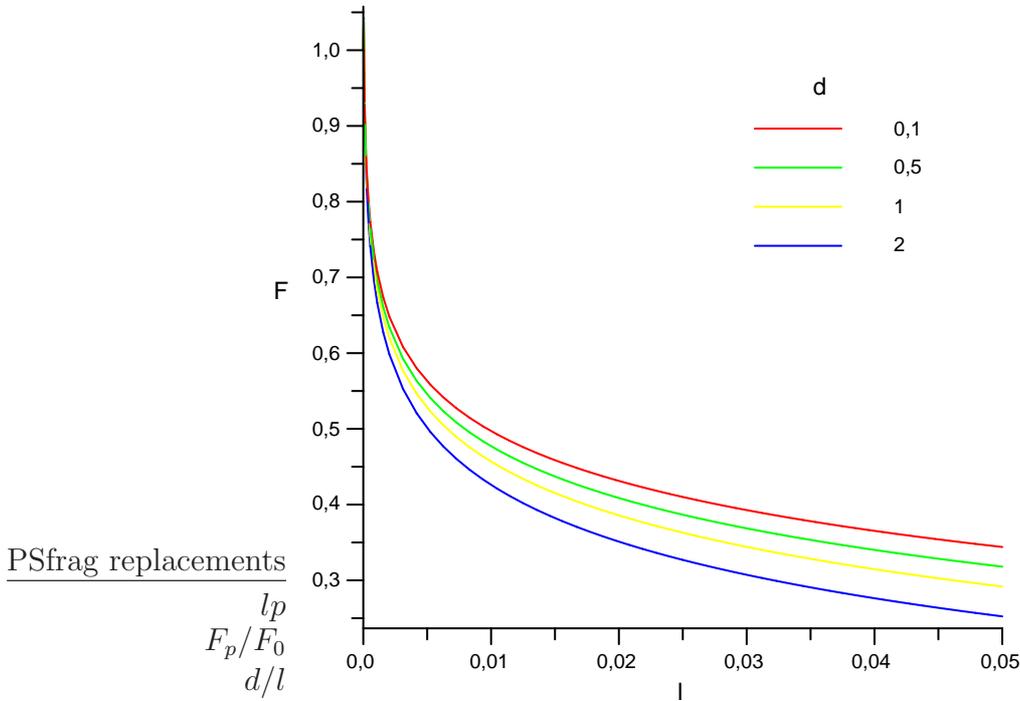
Como vimos na subseção 3.1.3 para um gás de elétrons degenerado devemos considerar apenas o caso de para  $q \neq 0$ . Então, tomando a transformada de Fourier do termos de interação elétron-buraco da equação (5.8), encontramos

$$\begin{aligned} -2 \int d^2r_1 d^2r_2 \psi^\dagger(\vec{r}_1)\bar{\psi}^\dagger(\vec{r}_2)V(r_2 - r_1)\bar{\psi}(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_1) &= -\frac{1}{2\pi^2} \sum_q \rho(\vec{q})V(\vec{q})\bar{\rho}(-\vec{q}) \\ &= \sum_{k,k',p} F_p a_k^\dagger c_{k'}^\dagger c_{k'+p} a_{k+p} \end{aligned} \quad (5.10)$$

onde

$$F_p = -\frac{4e}{L_x \varepsilon_0} \int dq_y \cos(l^2 q_y q_x) e^{-l^2 q^2 / 2} \frac{e^{-qd}}{q} \Big|_{q_x=p}. \quad (5.11)$$

Afim de visualizarmos o comportamento da interação de Coulomb, fizemos um gráfico para o fator  $F_p$  da equação (5.11) para alguns valores de  $d/l$  mostrado na figura 5.1. Podemos verificar que o comportamento qualitativo de  $F_p$  é um pico centrado no zero, com uma largura típica da ordem de 0,01 em unidades de  $lp$ . Isso significa que em nosso modelo devemos considerar que cada elétron interage, não apenas com o buraco de mesmo momento, mas também com outros com uma diferença de momento dentro do intervalo.



**Figura 5.1:** Gráfico de  $F_p$  normalizado em função de  $lp$  para diferentes valores de  $d/l$ . Note que a largura a meia altura é da ordem 0,01.

## 5.2 Estado fundamental e função de correlação entre éxcitons

Usando o formalismo da segunda quantização, representamos o estado de um éxciton pela ação de um operador de criação de elétrons  $a_k^\dagger$  e um de criação de buraco  $c_{k'}^\dagger$  sobre o estado de vácuo  $|0\rangle$ . Dizemos assim que o éxciton formado tem um momento interno  $p = k' - k$ . Dados os  $\Omega$  estados possíveis para os elétrons e buracos, uma forma possível para o estado de um éxciton com momento  $p$  é

$$|1, p\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{k=1}^{\Omega} a_k^\dagger c_{k+p}^\dagger |0\rangle. \quad (5.12)$$

Aqui  $|0\rangle$  é o vácuo de férmions, de modo que não existem elétrons no poço de cima nem buracos no de baixo. Podemos generalizar esse estado para um de  $n$  éxcitons de momento  $p$  simplesmente escrevendo

$$|n, p\rangle \equiv \mathfrak{N} \left( \sum_k a_k^\dagger c_{k+p}^\dagger \right)^n |0\rangle. \quad (5.13)$$

Sendo que esses estados obedecem a condição de ortogonalidade dada por

$$\langle m, q | n, p \rangle = \delta_{n,m} \delta_{p,q}.$$

Com base no gráfico de  $F_p$  (figura 5.1) e também através da diagonalização numérica exata do Hamiltoniano do sistema para poucos estados, concluímos que os estados de éxcitons com momento  $p = 0$  são os mais prováveis. Porém, devido ao fato da interação Coulombiana ser de longo alcance, também aparecem no estado fundamental, éxcitons com outros valores de momento interno. Neste ponto, propomos o seguinte Ansatz para o estado fundamental do SBC

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{p=0}^{\Omega} f_p |n, p\rangle \quad \text{onde} \quad \sum_p |f_p|^2 = 1, \quad (5.14)$$

e  $\Omega$  é o número total de orbitais degenerados no nível de Landau mais baixo. Desde que  $f_p$  obedeça a condição de normalização acima, podemos assumir para ele, por exemplo, uma forma Gaussiana

$$f_p = \sqrt{\frac{2}{\alpha\sqrt{\pi} + 1}} e^{-p^2/2\alpha^2}. \quad (5.15)$$

Agora podemos calcular o termo ODLRO para este estado e verificar se ele apresenta formação de BEC de éxcitons. Para tanto vamos inicialmente considerar o caso em que  $\alpha = 0$ , o que equivale a ter  $f_p = \delta_{p,0}$ . Assim, a equação (5.14) pode ser escrita como

$$|\Psi_0\rangle = |n, 0\rangle = \mathfrak{N} \left( \sum_k a_k^\dagger c_k^\dagger \right)^n |0\rangle. \quad (5.16)$$

Como  $\Omega$  é igual ao número total de estados possíveis de serem ocupados pelos pares elétron-buraco tal que  $\Omega > n$ , e na condição de meio preenchimento  $\Omega = 2n$ . Então

podemos escrever  $(\sum_k a_k^\dagger c_k^\dagger)^n = (a_1^\dagger c_1^\dagger + a_2^\dagger c_2^\dagger + \dots + a_\Omega^\dagger c_\Omega^\dagger)^n$ . Note que isto nos dá todas as maneiras possíveis de ocupar  $\Omega$  estados com  $n$  pares de férmions. Como não é permitido ter mais de um par em cada estado, isso se torna um problema combinatório no qual o número total de estados distintos é dado por  $\Omega!/[n!(\Omega - n)!]$  com um fator de ocupação igual a  $n!$  (veja apêndice B). Assim, podemos concluir que

$$\aleph = \sqrt{\frac{(\Omega - n)!}{n!\Omega!}}.$$

Por simplicidade, definimos  $|n\rangle \equiv |n, 0\rangle$ , e com isso o termo ODLRO pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \langle n | \psi^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') | n \rangle &= \\ &= \sum_{k_1, k_2, k'_2, k'_1} \langle n | \varphi_{k_1}^*(\vec{r}) a_{k_1}^\dagger \bar{\varphi}_{k_2}^*(\vec{r}) c_{k_2}^\dagger \bar{\varphi}_{k'_2}(\vec{r}') c_{k'_2} \varphi_{k'_1}(\vec{r}') a_{k'_1} | n \rangle \\ &= \sum_{k_1, k_2, k'_2, k'_1} \varphi_{k_1}^*(\vec{r}) \bar{\varphi}_{k_2}^*(\vec{r}) \bar{\varphi}_{k'_2}(\vec{r}') \varphi_{k'_1}(\vec{r}') \langle n | a_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger c_{k'_2} a_{k'_1} | n \rangle. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Note que aqui temos uma densidade de dois corpos diferentemente da seção 3.2.2, já que o éxciton é formado por um par de partículas. Após um longo e tedioso cálculo, encontramos que

$$\begin{aligned} \langle n | a_{k_1}^\dagger c_{k_2}^\dagger c_{k'_2} a_{k'_1} | n \rangle &= \delta_{k'_1 k_1} \delta_{k'_2 k_2} \sum_{i=1}^{\Gamma} \left[ \frac{n!}{(n-2i)!} \right]^2 \frac{\Omega!}{(\Omega - n + 2i)!} + \\ &+ \delta_{k'_2 k'_1} \delta_{k_2 k_1} \sum_{i=0}^{\Delta} \left[ \frac{n!}{(n-2i+1)!} \right]^2 \frac{\Omega!}{(\Omega - n + 2i - 1)!} + \\ &+ 2\delta_{k'_1 k_1} \delta_{k'_2 k_2} \sum_{i=1}^{\Theta} \sum_{j=2i}^{\theta} (-1)^{j+1} \left[ \frac{n!}{(n-j-1)!} \right]^2 \frac{\Omega!}{(\Omega - n + j + 1)!} + \\ &+ 2\delta_{k'_2 k'_1} \delta_{k_2 k_1} \sum_{i=1}^{\Xi} \sum_{j=2i}^{\xi} (-1)^{j+1} \left[ \frac{n!}{(n-j-2)!} \right]^2 \frac{\Omega!}{(\Omega - n + j + 2)!} \\ &\equiv \delta_{k'_1 k_1} \delta_{k'_2 k_2} \Sigma_1 + \delta_{k'_2 k'_1} \delta_{k_2 k_1} \Sigma_2 + 2\delta_{k'_1 k_1} \delta_{k'_2 k_2} \Sigma_3 + 2\delta_{k'_2 k'_1} \delta_{k_2 k_1} \Sigma_4 \\ &= \delta_{k'_1 k_1} \delta_{k'_2 k_2} (\Sigma_1 + 2\Sigma_3) + \delta_{k'_2 k'_1} \delta_{k_2 k_1} (\Sigma_2 + 2\Sigma_4) \end{aligned} \quad (5.18)$$

onde temos as seguintes definições:

$$\Gamma = \begin{cases} (n+1)/2 & \text{se } n \text{ é ímpar} \\ n/2 & \text{se } n \text{ é par} \end{cases} \quad \Delta = \begin{cases} (n-1)/2 & \text{se } n \text{ é ímpar} \\ n/2 & \text{se } n \text{ é par} \end{cases}$$

$$\Theta = \begin{cases} (n-1)/2 & \text{se } n \text{ é ímpar} \\ n/2 - 1 & \text{se } n \text{ é par} \end{cases} \quad \theta = \begin{cases} n-1 & \text{se } n \text{ é ímpar} \\ n-2 & \text{se } n \text{ é par} \end{cases}$$

$$\Xi = \begin{cases} (n-3)/2 & \text{se } n \text{ é ímpar} \\ n/2 - 1 & \text{se } n \text{ é par} \end{cases} \quad \xi = \begin{cases} n-3 & \text{se } n \text{ é ímpar} \\ n-2 & \text{se } n \text{ é par} \end{cases}$$

Cada uma dessas somatórias pode ser tratada em termos da função hipergeométrica generalizada fazendo apenas uma simples mudança de variáveis. Dados  $n$  e  $\Omega$ , tudo isso se reduz a números que podem ser escrito na forma

$$\Sigma_1 + 2\Sigma_3 = \frac{n(\Omega - n)}{\Omega(\Omega - 1)} \quad \text{e} \quad \Sigma_2 + 2\Sigma_4 = \frac{n(n-1)}{\Omega(\Omega - 1)}. \quad (5.19)$$

Substituindo estes resultados na equação (5.17) obtemos

$$\begin{aligned} & \left\langle n \left| \psi_1^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}_2^\dagger(\vec{r}') \bar{\psi}_2(\vec{r}') \psi_1(\vec{r}') \right| n \right\rangle = \\ & = \sum_{k_1, k_2, k'_2, k'_1} \varphi_{k_1}^*(\vec{r}) \bar{\varphi}_{k_2}^*(\vec{r}') \bar{\varphi}_{k'_2}(\vec{r}') \varphi_{k'_1}(\vec{r}') \left[ \delta_{k'_1 k_1} \delta_{k'_2 k_2} \frac{n(\Omega - n)}{\Omega(\Omega - 1)} + \delta_{k'_2 k'_1} \delta_{k_2 k_1} \frac{n(n-1)}{\Omega(\Omega - 1)} \right] \\ & = \frac{n(\Omega - n)}{\Omega(\Omega - 1)} \sum_{k_1, k_2} \varphi_{k_1}^*(\vec{r}) \bar{\varphi}_{k_1}^*(\vec{r}') \bar{\varphi}_{k_2}(\vec{r}') \varphi_{k_2}(\vec{r}') + \frac{n(n-1)}{\Omega(\Omega - 1)} \sum_{k, k'} \varphi_k^*(\vec{r}) \bar{\varphi}_{k'}^*(\vec{r}') \bar{\varphi}_{k'}(\vec{r}') \varphi_k(\vec{r}'). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Usando a função de onda do nível de Landau mais baixo dada na equação (2.10) para o elétron, e lembrando que a função de onda do buraco será  $\bar{\varphi}_k(\vec{r}) = \varphi_k^*(\vec{r})$ , podemos escrever

$$\begin{aligned}
\langle n | \psi^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') | n \rangle &= \frac{1}{(lL_x \sqrt{\pi})^2} \frac{n(\Omega - n)}{\Omega(\Omega - 1)} \sum_{k_1} e^{-(l^2 k_1 + y)^2 / l^2} \sum_{k_2} e^{-(l^2 k_2 + y')^2 / l^2} + \\
&+ \frac{1}{(lL_x \sqrt{\pi})^2} \frac{n(n - 1)}{\Omega(\Omega - 1)} \left| \sum_{k_1} e^{-ik_1(x-x')} e^{-[(y'+l^2 k_1)^2 + (y+l^2 k_1)^2] / 2l^2} \right|^2 \\
&= \frac{1}{2\pi l^2} \frac{n(\Omega - n)}{\Omega(\Omega - 1)} \left( \int_0^\infty e^{-(l^2 k + y)^2 / l^2} dk \right)^2 + \\
&+ \frac{1}{2\pi l^2} \frac{n(n - 1)}{\Omega(\Omega - 1)} e^{-\frac{(y-y')^2}{2l^2}} \left| \int_0^\infty e^{-ik_1(x-x')} e^{-l^2 \left(k + \frac{y+y'}{2l^2}\right)^2} dk \right|^2.
\end{aligned} \tag{5.21}$$

Na última passagem fizemos a substituição  $\sum_k \rightarrow (L_x/2\pi) \int_0^\infty dk$ , e resolvendo a última integral, encontramos que

$$\langle n | \psi^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') | n \rangle = \frac{n}{(2\pi l^2)^2 \Omega(\Omega - 1)} \left[ (\Omega - n) + (n - 1) e^{-\frac{|r-r'|^2}{2l^2}} \right]. \tag{5.22}$$

Tomando o limite em que  $|r - r'| \rightarrow \infty$  e  $\Omega, n \rightarrow \infty$  tal que  $\nu = n/\Omega$  permaneça constante, encontramos que

$$\langle n | \psi^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') | n \rangle \rightarrow \frac{\nu(1 - \nu)}{(2\pi l^2)^2}. \tag{5.23}$$

Esse resultado nos mostra que no limite termodinâmico o termo ODRLO não se anula, ou seja, o estado da equação (5.16) pode representar um estado de BEC.

Vamos agora considerar o caso em que  $\alpha \neq 0$ , e para isso seguiremos os mesmos passos anteriores. Inicialmente, vamos apresentar o cálculo utilizando a equação (5.13), que será utilizado no passo seguinte. Para  $|n, p\rangle$ , obtivemos

$$\begin{aligned}
\langle n, p | \psi^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') | n, q \rangle &= \\
\frac{n}{(2\pi l^2)^2 \Omega(\Omega - 1)} \left\{ (\Omega - n) e^{ip(x'-x)} e^{-l^2 p^2 / 2} + (n - 1) e^{-\left[\frac{(y-y')^2}{2l^2} - \frac{(x-x')^2}{2l^2}\right]} \right\} \delta_{p,q}.
\end{aligned} \tag{5.24}$$

Os termos não diagonais em  $p$  e  $q$  produzem uma contribuição da ordem de  $1/\Omega$ , o que vai a zero no limite termodinâmico. O mesmo ocorre com o último termo da equação acima. Podemos então considerar somente a seguinte equação

$$\langle n, p | \psi^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') | n, p \rangle = \frac{n(\Omega - n)}{(2\pi l^2)^2 \Omega (\Omega - 1)} e^{ip(x'-x)} e^{-l^2 p^2 / 2}. \quad (5.25)$$

Utilizando as equações (5.14) e (5.25) encontramos para o termo ODLRO com  $\alpha \neq 0$  o seguinte

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | \psi^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') | \Psi_0 \rangle &= \frac{n(\Omega - n)}{(2\pi l^2)^2 \Omega (\Omega - 1)} \sum_p e^{ip(x'-x)} \frac{2 e^{-p^2/\alpha^2}}{\alpha \sqrt{\pi} + 1} e^{2p^2/\alpha^2} \\ &= \frac{n(\Omega - n)}{(2\pi l^2)^2 \Omega (\Omega - 1)} \sqrt{\frac{2}{\alpha^2 l^2 + 2}} e^{-\frac{\alpha^2 (x'-x)^2}{2(\alpha^2 l^2 + 2)}} \end{aligned} \quad (5.26)$$

No limite termodinâmico essa equação se anula

$$\langle \Psi_0 | \psi^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}^\dagger(\vec{r}) \bar{\psi}(\vec{r}') \psi(\vec{r}') | \Psi_0 \rangle \rightarrow 0. \quad (5.27)$$

Fazendo  $\alpha = 0$  na equação (5.26) recuperamos o resultado dado pela equação (5.23)

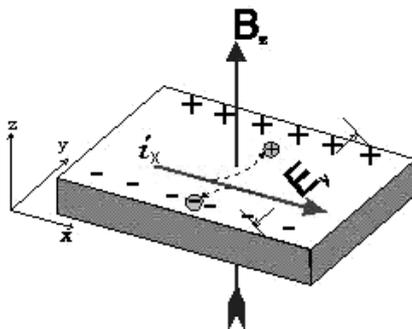
### 5.3 Conclusão

Com os resultados das equações (5.23) e (5.27) em mente podemos verificar que o fato da interação de Coulomb ser de longo alcance atrapalha a formação do estado de BEC. A formação de um condensado depende fortemente das correlações entre as partículas (elétrons e buracos) nas diferentes camadas. O estado de condensado é aquele em que os éxcitons formados têm apenas o momento interno nulo. Em outras palavras, devemos esperar que os elétrons de uma camada estejam verticalmente alinhados com os buracos da outra camada. Esta é, de fato, a imagem feita na análise do experimento relatado na referência [11]. No entanto, vimos a partir de um cálculo exato com poucas partículas que o fato da interação de Coulomb ser de longo alcance faz com que o estado de menor energia do sistema seja uma superposição de éxcitons com diferentes momentos internos, embora os coeficientes dos éxcitons de momento nulo sejam maiores. Como mostramos, tal superposição destrói as correlações de longo alcance do sistema, e portanto não podemos esperar que o estado formado seja um estado tipo BEC, caso apenas a interação de Coulomb seja responsável pela formação dos éxcitons. Entendemos que os resultados obtidos na ref. [11] não são conclusivos neste ponto, e que um estado coletivo do tipo BCS seria mais provável. No entanto, se houver algum outro tipo de interação entre as partículas que seja mais confinante no sentido de levar o sistema para um estado do tipo o estado incompressível, então poderíamos atestar pela formação de um condensado de Bose-Einstein de éxcitons indiretos no sistema bicamada.

## Efeito Hall Quântico

---

Edwin H. Hall, em 1879, descobriu que quando um campo magnético é aplicado perpendicularmente à direção de uma corrente fluindo através de um metal, uma diferença de potencial é desenvolvida perpendicularmente ao campo e à corrente [44], veja a figura A.1). O equilíbrio é alcançado quando a força magnética é balanceada pela força eletrostática, criada pelo acúmulo de cargas nas bordas da amostra. O coeficiente Hall é definido como  $R_H \equiv E_y/B_z i_x$ . A densidade de corrente é dada por  $i_x = v_x Nq$ , onde  $v_x$  é a velocidade do portador de carga,  $N$  é densidade de cargas no material e  $q$  é o valor da carga do portador. Com isso o coeficiente Hall pode ser escrito como  $R_H = 1/Nq$  (para um único tipo de portador).



**Figura A.1:** Placa condutora sob ação de um campo magnético,  $B_z$ , e densidade de corrente,  $i_x$ , perpendiculares entre si, dando origem a um campo elétrico,  $E_y$ . A diferença de potencial entre as bordas, carregadas positiva e negativamente, é chamada voltagem Hall.

Cem anos mais tarde, foi descoberto por Klaus von Klitzing [45, 46] o efeito Hall quântico (EHQ) que acontece em sistemas eletrônicos bi-dimensionais sujeitos a baixa temperatura [12]. O que difere o efeito Hall quântico do convencional é o fato de a condutância Hall (ou a resistividade) possuir valores discretos. Para mostrar isto, devemos levar em conta também o campo elétrico paralelo,  $E_0$ , gerado pelo movimento das partículas no interior da amostra, figura A.1. Incluindo o termo de campo elétrico na hamiltoniana da equação (2.2) obtemos:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p}_x + \frac{e}{c} B_0 y \right)^2 + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \frac{\hat{p}_z^2}{2m} - g\mu_s B_0 \hat{s}_z + eE_0 y. \quad (\text{A.1})$$

É possível fazer uma mudança de variáveis de tal forma que as soluções da equação de Schrödinger para essa hamiltoniana ainda sejam dadas pelas funções de onda da equação (2.9), a única diferença sendo que  $y_0$  não será mais dado por (2.5) e sim por:

$$y_0 = \frac{1}{\omega_c} \left( \frac{\hbar k}{m} - \frac{cE}{B} \right). \quad (\text{A.2})$$

É interessante notar que as funções de onda, dadas por (2.9), se referem ao movimento de cada partícula separadamente, o que implica que estamos considerando elétrons não interagentes. Com os resultados anteriores, podemos calcular a densidade de corrente,  $\vec{i}$ , dada por [31]

$$\vec{i} = \frac{-i\hbar}{2m} (\Psi^\dagger \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^\dagger), \quad (\text{A.3})$$

e obtemos que  $i_y = 0$  e

$$i_x = \frac{\hbar k}{2mlL_x\sqrt{\pi}} e^{-(y-y_0)^2/l^2}. \quad (\text{A.4})$$

A integração dessa equação nos fornece uma corrente parcial, que refere-se a cada estado do nível de Landau ocupado [47], que é  $eE_0/B_0L_x$ . Então, para encontrar a corrente total, basta multiplicar o resultado da integração pelo número de estados em cada nível de Landau, equação (??), e pelo fator de preenchimento,  $\nu$ , resultando em

$$I = \frac{\nu e^2}{h} V \quad (\text{A.5})$$

onde  $V$  é a diferença de potencial entre as bordas do condutor medida na direção de  $y$ . E a condutividade Hall será dada por

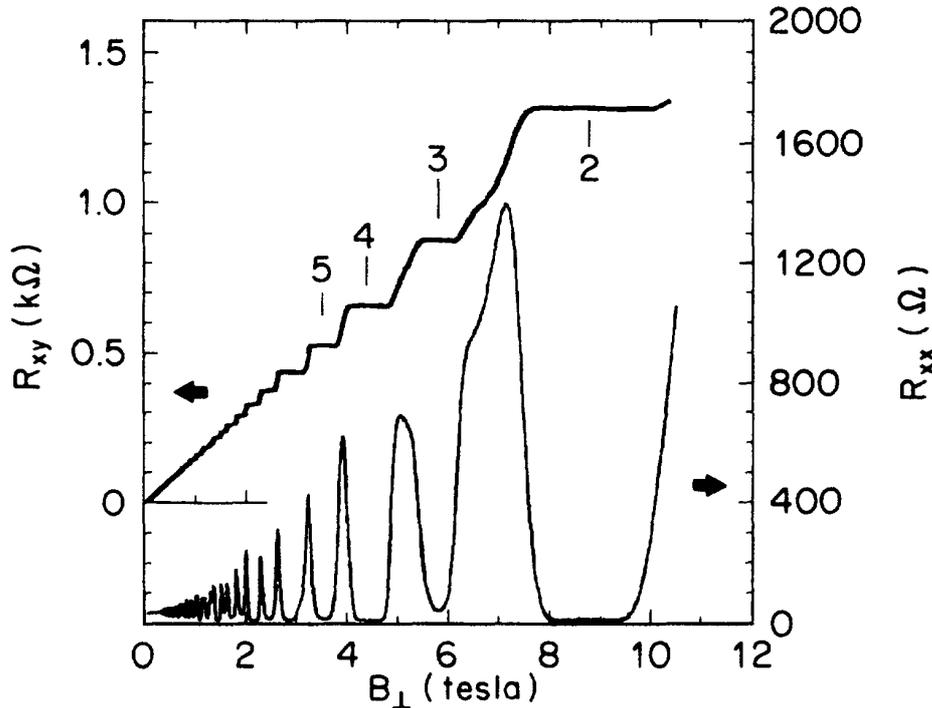
$$\sigma_{xy} = \frac{\nu e^2}{h}. \quad (\text{A.6})$$

Na presença de campo magnético constante, a condutividade torna-se um tensor

$$\sigma = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ -\sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

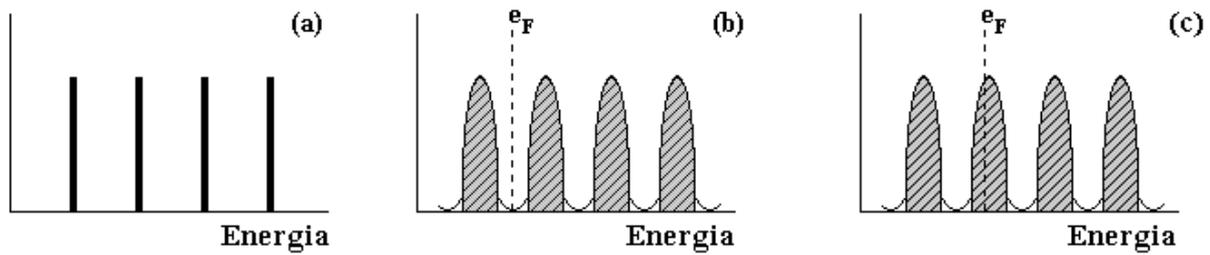
Mas a condutividade diagonal,  $\sigma_{xx}$  será nula, pois  $i_y = 0$ .

Na figura A.2, temos as medidas das componentes da resistência,  $R_{xy}$  e  $R_{xx}$ , feitas em uma amostra mantida a 0,3K de temperatura. Para entender o que ocorre na região de picos em  $R_{xx}$  e entre as partes planas de  $R_{xy}$ , vamos considerar a figura A.3. Na parte (a) dessa figura temos a representação dos níveis de Landau como funções  $\delta$  em pontos separados pelo fator  $1/2 \hbar\omega_c$ . O campo elétrico afeta drasticamente a localização dos elétrons, fazendo com que os níveis se alarguem em bandas [48], dando origem a estados estendidos que são quase degenerados, figura A.3 (b). A separação entre os estados estendidos é chamada por Laughlin na referência [49] de *gap* de mobilidade. Isso porque, se o nível de Fermi estiver localizado em algum lugar dentro deste *gap*, os elétrons não podem se mover para níveis de Landau que estejam acima do nível de Fermi, figura A.3 (b). Nesse caso, o transporte é feito sem dissipação e temos a situação discutida acima, em que  $R_{xx}$  se anula e  $R_{xy}$  apresenta os valores quantizados. Por outro lado, se o nível de Fermi possui uma energia tal que seja a mesma de uma banda de estados estendidos, figura A.3 (c), os elétrons conseguem se mover para todos os estados da banda, mesmo que eles possuam uma energia um pouquinho acima da energia de Fermi. Porém, haverá dissipação no movimento deles, a resistência aumentará provocando transferência de energia. Esta situação se dá justamente nas regiões de pico em  $R_{xx}$  e de aumento em  $R_{xy}$ .



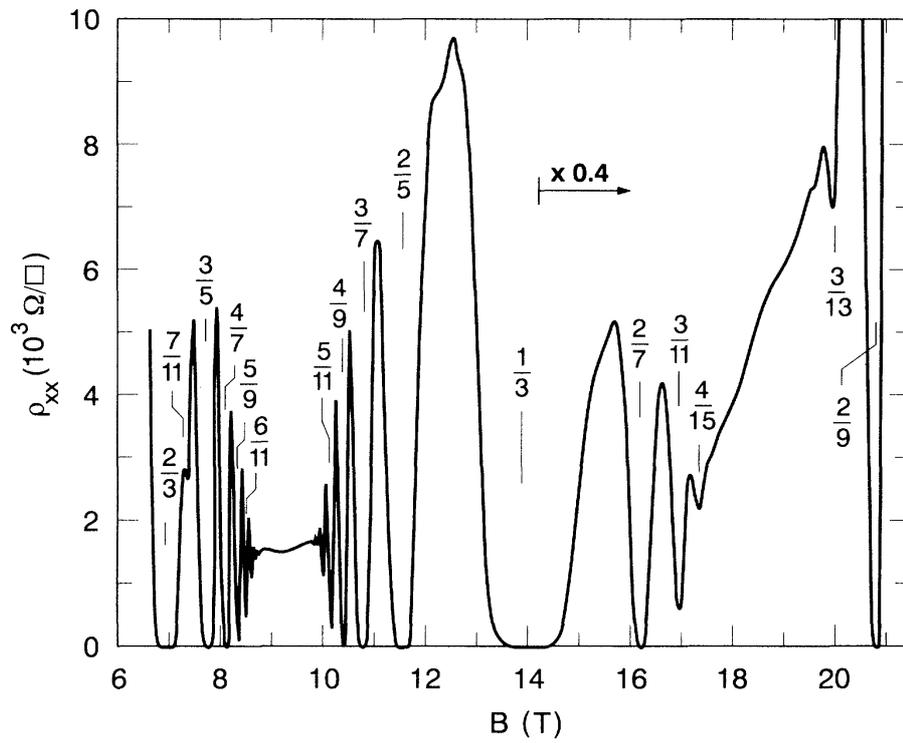
**Figura A.2:** Componentes da resistividade,  $R_{xx}$  e  $R_{xy}$ , medidas em uma heterojunção de GaAs-GaAlAs mantida a 0.3K de temperatura e densidade eletrônica  $n = 4,2 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$  [53].

Em amostras com mobilidade de portadores muito grande, aparecem outros valores de  $\nu$  entre os valores inteiros, veja a figura A.4 para medidas de resistividade diagonal  $\rho_{xy}$ .



**Figura A.3:** Representação dos níveis de Landau para os casos: (a) níveis localizados, representados por funções  $\delta$  e exatamente separados pelo fator de  $1/2 \hbar\omega_c$ ; (b) banda de estados estendidos quase degenerados, com a energia de Fermi entre a primeira e a segunda banda; (c) bandas de estados estendidos, com nível de Fermi localizado em cima da segunda banda. [49]

A condutividade ainda é dada pela equação (A.6), mas agora  $\nu$  é um número fracionário. Esse é o efeito Hall quântico fracionário (EHQF) e foi descoberto por Tsui, Stormer e Grossard [50] em 1982. Ele é uma manifestação do comportamento coletivo em sistemas bi-dimensionais com elétrons fortemente interagentes [51]. Aliás, essa é exatamente a grande diferença entre EHQF e o EHQ com  $\nu$  inteiro: a origem dos *gaps* na energia. Antes, eram devidos à quantização do movimento de cada partícula separadamente [49], agora, no EHQF, resultam do movimento coletivo de todos os elétrons do sistema [52].



**Figura A.4:** Resistividade diagonal,  $\rho_{xx}$ , medida em uma amostra mantida a 0,4K de temperatura e densidade eletrônica  $n = 1,12 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ . Para campos maiores que 14T, os dados foram divididos por um fator de 2,5. [54]

## Princípio fundamental da contagem

---

Considere um conjunto de  $N$  elementos do qual podemos retirar  $m$  amostras com  $n_m$  elementos em cada uma delas. Podemos fazer isso de várias maneiras diferentes, considerando se pode, ou não, haver repetições e se estes elementos possuem, ou não, um ordenamento. A idéia do princípio fundamental da contagem [55] é saber de quantas maneiras isso pode ser feito em cada caso citado acima. Para isso, primeiro devemos saber se cada etapa de dividir o conjunto é independente das demais, ou não. Vamos, então, dividir um conjunto  $m$  vezes com  $\mu_i$  maneiras de efetuar cada divisão  $i$ . Então, o número de maneiras possíveis de efetuar todas as  $m$  etapas será dada pelo produto  $\prod_{i=1}^m \mu_i$ , caso as amostras do conjunto sejam independentes, e pela soma  $\sum_{i=1}^m \mu_i$ , caso as amostras sejam dependentes uma da outra. Para os casos de nosso interesse podemos nos restringir a amostras independentes. Começaremos, então, com o caso mais simples no qual temos um conjunto de  $N$  elementos ordenados e queremos saber de quantas maneiras podemos mudar a ordem destes elementos.

**Lema 1** *O número de permutações dos  $N$  elementos de um dado conjunto, denotado por  $P_N$ , é dado por*

$$P_N = N!.$$

**Prova do Lema 1** *Temos  $N$  elementos a serem permutados sem repetição, por tanto para o primeiro elemento temos  $N$  possibilidades de escolha, para o segundo  $N - 1$  e assim por diante até o último elemento restante. O número de maneiras possíveis de fazer estas permutações será então  $N(N - 1)(N - 2)\dots 3 \cdot 2 \cdot 1 \equiv N!$ .*

Consideremos agora um conjunto de  $N$  elementos dos quais queremos retirar amostras com  $n$  elementos ordenados. Os elementos retirados não podem ser recolocados no conjunto para serem usados novamente. Então queremos saber quantas amostras de  $n$  elementos podem ser retiradas do conjunto  $N$ .

**Lema 2** *O número de amostras ordenadas, sem reposição e com  $n$  elementos que podem*

ser retiradas de um conjunto com  $N$  elementos,  $(N)_n$ , será dado por

$$(N)_n = N(N-1)(N-2)\dots(N-n+1) = \frac{N!}{(N-n)!}.$$

**Prova do Lema 2** De maneira análoga à prova do Lema 1, podemos pensar que o primeiro elemento da amostra pode ser retirado de  $N$  maneiras diferentes o segundo de  $N-1$  maneiras, mas agora não vamos retirar todos os elementos. Queremos parar no  $n$ -ésimo elemento que tem  $N-(n-1)$  maneiras de ser retirado. Assim temos que existem  $N(N-1)(N-2)\dots(N-n+1)$  amostras diferentes que podem ser retiradas do conjunto.

Se, por outro lado, os elementos puderem retornar ao conjunto antes da próxima retirada, então quantas amostras com  $n$  elementos podemos obter?

**Lema 3** O número de amostras ordenadas, com reposição e contendo  $n$  elementos que podem ser retiradas de um conjunto com  $N$  elementos, será dado por

$$N^n.$$

**Prova do Lema 3** Ao recolocarmos os elementos de volta no conjunto o número de maneira possíveis de tirar cada um dos elementos será  $N$ . Se queremos retirar  $n$  elementos teremos  $N \cdot N \cdot \dots \cdot N \cdot N = N^n$ .

Agora vamos considerar que as amostras sejam não ordenadas. Queremos saber, então, quantas amostras deste tipo podemos conseguir do conjunto de  $N$  elementos, considerando que não haverá reposição.

**Lema 4** O número de amostras não ordenadas sem reposição com  $n$  elementos retiradas de um conjunto com  $N$  elementos,  $C_{N,n}$ , é dado por

$$C_{N,n} = \frac{(N)_n}{P_n} = \frac{N!}{n!(N-n)!}$$

**Prova do Lema 4** O número de amostras ordenadas que podem ser retiradas de um conjunto de  $N$  elementos é dada no Lema 2 por  $(N)_n = N!/(N-n)!$ . No caso em questão as amostras são não ordenadas, ou seja, em uma dada amostra, a troca de dois elementos não nos conduz a uma amostra diferente. Por tanto das  $(N)_n$  amostras temos que descartar todas as trocas dos  $n$  elementos. Isso pode ser feito dividindo pelo número de permutações dos  $n$  elementos,  $P_n = n!$ , dada no Lema 1. Por tanto, temos que  $C_{N,n} = \frac{(N)_n}{P_n} = \frac{N!}{n!(N-n)!}$ .

O Lema 2 nos fornece o número de amostras, cada uma com  $n$  elementos, que podem ser retirados de um conjunto com  $N$  elementos. Um problema ainda mais interessante é saber de quantas maneiras distintas um dado conjunto de  $N$  elementos pode ser dividido em  $m$  amostras não ordenadas com  $n_i$  elementos em cada uma. Sendo que isso deve ser feito considerando a condição de que  $\sum_{i=1}^m n_i = N$ .

**Lema 5** *O número de maneiras possíveis de dividir um conjunto de  $N$  elementos em  $m$  amostras não ordenadas com  $n_i$  elementos em cada uma, de modo que  $\sum_{i=1}^m n_i = N$ , é dado por*

$$\frac{N!}{n_1!n_2!\dots n_m!}$$

**Prova do Lema 5** *Do conjunto de  $N$  elementos devemos retirar inicialmente  $n_1$  deles, e isso pode ser feito de  $C_{N,n_1}$  maneiras distintas, de acordo com o Lema 4. Com isso nos restam  $N - n_1$  elementos no conjunto. Deste conjunto restante devemos retirar  $n_2$  elementos, que poderá ser feito de  $C_{N-n_1,n_2}$  maneiras diferentes, e assim por diante. Na última retirada temos apenas  $n_{m-1} + n_m = N - (n_1 + n_2 + \dots + n_{m-2})$  elementos e então essa retirada poderá ser feita de  $C_{N-(n_1+n_2+\dots+n_{m-2}),n_{m-1}}$  maneiras. Com isso temos que o número de maneira de dividir um conjunto em amostras com quantidades de elementos diferentes em cada uma será*

$$\begin{aligned} & C_{N,n_1} \cdot C_{N-n_1,n_2} \cdot \dots \cdot C_{N-(n_1+n_2+\dots+n_{m-2}),n_{m-1},n_{m-2}} = \\ & \frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \cdot \frac{(N-n_1)!}{n_2!(N-(n_1+n_2))!} \cdot \dots \cdot \frac{(N-(n_1+n_2+\dots+n_{m-2}))!}{n_{m-1}!(N-(n_1+n_2+\dots+n_{m-1}))!} = \\ & \frac{N!}{n_1!} \cdot \frac{1}{n_2!} \cdot \dots \cdot \frac{1}{n_{m-1}!(N-(n_1+n_2+\dots+n_{m-1}))!} = \\ & \frac{N!}{n_1!} \cdot \frac{1}{n_2!} \cdot \dots \cdot \frac{1}{n_{m-1}!n_m!} = \frac{N!}{n_1!n_2!\dots n_m!} \end{aligned}$$

## Discriminante e a classificação dos pontos críticos

---

Para classificar os pontos críticos de uma função de duas variáveis,  $f(x, y)$ , podemos calcular o seguinte determinante avaliado no ponto crítico de interesse  $(x_c, y_c)$

$$D(x_c, y_c) = \begin{vmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{vmatrix}_{(x_c, y_c)} \quad (\text{C.1})$$

e verificar o sinal de  $D$ . Se  $D > 0$  temos um ponto de extremo e se  $D < 0$  temos um ponto de sela. Para saber se o ponto de extremo é máximo ou mínimo locais devemos olhar para o sinal de uma das derivadas segundas de  $f$  (já que  $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \left[ \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right]^2$  os sinais das derivadas  $\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$  e  $\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}$  são os mesmos). Assim se o sinal é positivo o ponto será um máximo local, e sendo negativo será um mínimo local.

---

---

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

---

- [1] S. A. Moskalenko e D. W. Snoke, *Bose-Einstein Condensation of Excitons and Biexcitons*, Cambridge University Press, 2000.
- [2] S. A. Moskalenko, *Fiz. Tverd. Tela* **4**, 276 (1962).
- [3] J. P. Eisenstein, *Solid State Communication* **127**, 123 (2003).
- [4] M. Kellogg, J. P. Einstein, L. N. Pfeiffer e K. W. West, *Phys. rev. Lett.* **93**, 036801 (2004).
- [5] E. Tutuc, M. Shayegan e D. A. Huse, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 036802 (2004).
- [6] L. V. Butov, A. L. Ivanov, A. Imamoglu, P. B. Littlewood, A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov K. L. Campman e A. C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5608 (2001).
- [7] J. M. Blatt, K. W. Böer e W. Brandt, *Phys. Rev.* **126**, 1691 (1962).
- [8] D. W. Snoke, J. P. Wolfe e A. Mysyrowicz, *Phys. Rev. B* **41** (1990).
- [9] T. Goto, M. Y. Shen, S. Koyama e T. Yokouchi, *Phys. Rev. B* **55**, 7609 (1997).
- [10] L. V. Keldysh e A. N. Kozlov, *Zh. Eksp. teor. Fiz. Pis'ma* **5**, 238 (1967); *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **54**, 978 (1968)[*Sov. Phys. JETP* **27**, 521 (1968)].
- [11] J. P. Eisenstein e A. H. MacDonald, *Nature* **432**, 691 (2004)
- [12] S. Das Sarma e A. Pinczuk, *Perspectives in Quantum Hall Effects*, Wiley Interscience, 1997.
- [13] L. D. Landau e E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, terceira edição, Pergamon Press, 1962.
- [14] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley and Sons, New York, 2005.
- [15] T. Chakraborty e P. Pietiläinen, *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 2784 (1987).
- [16] D. Yoshioka, A. H. MacDonald e S. M. Girvin, *Phys. Rev. B*, **39**, 1932 (1989).
- [17] F. D. M. Haldane e E. H. Rezayi, *Bull. Am. Phys. Soc.* **32**, 892 (1987).

- [18] A. H. MacDonald, P. M. Platzman e G. S. Boedinger, *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 775 (1990).
- [19] K. Moon, H. Mori, K. Yang, S. M. Girvin, A. H. MacDonald, L. Zheng, D. Yoshika e S.-C. Zang, *Phys. Rev. B*, **51**, 5138 (1995).
- [20] S. Q. Murphy, J. P. Eisenstein, G. S. Boedinger, L. N. Pfeiffer e K. W. West, *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 728 (1994).
- [21] H. A. Fertig, *Phys. Rev. B*, **40**, 1087 (1989).
- [22] E. Tutuc et al., *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 076802 (2003).
- [23] A. F. R. de Toledo Piza, *Mecânica Quântica*, EDUSP, São Paulo, 2003.
- [24] A. L. Fetter e J. D. Walecka. "*Quantum theory of many-particle system*", McGraw-Hill Book company, New York, 1971.
- [25] P. B. Littlewood, P. R. Eastham, J. M. Keeling, F. M. Marchetti, B. D. Simons e M. H. Szymanska, *J. Phys. Condens. Matter* **16** S3597 (2004).
- [26] E. A. Cotta, *Estudo de efeitos eletrodinâmicos numa microcavidade semicondutora com um poço quântico (SQW) de GaAs*, dissertação de mestrado, UFMG, 2004.
- [27] Sachdev, S., *Quantum phase transitions*, Cambridge university press, New York (2006).
- [28] A. Oslerlon, Luigi amico, G. Falci e Rosario Fazio, *Letters to Nature* **416**, 608 (2002).
- [29] N. Goldenfeld, *Lectues on phase transitions and the renormalization group*, Addison-Wesley Publishing Company, New York (1993).
- [30] Tobias J. Osborne e Michael A. Nielsen, *Phys. Rev. A* **66**, 032110-1 (2002).
- [31] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics*, Word Scientific Publishing, New Jersey, 2000.
- [32] M. de O. Terra Cunha, *Emaranhamento: caracterização, manipulação e conseqüências*, Tese de Doutorado, UFMG, 2005.
- [33] V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 197 (2002).
- [34] Ji Il Kim, M. C. Nemes, A. F. R. de Toledo Piza e H. E. Bores, *Phys. Rev. Let.* **77**, 207 (1996).
- [35] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini e D. Shahar, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 316 (1997).
- [36] Giancarlo Q. Pellegrino, *Aspectos de integrabilidade e caos relacionados a quebra de simetria em modelos de poucos spins*, tese de doutorado, UNICAMP, 1994.

- [37] Maurício Reis, Terra Cunha, M. O., Oliveira, A. C. and Nemes, M. C., *Phys Lett A* **344**, 164, (2005).
- [38] A.N. Salgueiroa, M.C. Nemes, M.D. Sampaio e A.F.R. de Toledo Piza, *Physica A* **290**, 4 (2001).
- [39] E. H. Lieb, *Commun. math. Phys.* **31**, 327 (1973).
- [40] M. B. Cibils, Y. Cucho, W. F. Wreszinski, J-P. Amiet e H. Beck, *J. Phys. A: Math. Gen.* **23**, 545 (1990).
- [41] J. Schwinger, W. A. Benjamin, *Quantum Kinematics and Dynamics* W. A. Benjamin Inc. Publishers, New York, 1970.
- [42] H. Goldstein, *Classical mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1980.
- [43] W. D. Heiss e M. Müller, *Phys. Rev. E* **66**, 016217 (2002).
- [44] E. H. Hall, *Am. J. of Math.* **2**, 287 (1879).
- [45] K. von Klitzing, G. Dorda e M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 494 (1980).
- [46] K. von Klitzing, *Surf. Sci.*, **113**, 1 (1982).
- [47] M. Stone, *Quantum Hall Effect*, World Scientific, 1992.
- [48] S. A. Trugman, *Phys. Rev. B*, **27**, 7539 (1983).
- [49] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. B*, **23**, 5632 (1981).
- [50] D. C. Tsui, H. L. Stormer e A. C. Grossard, *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 1559 (1982).
- [51] R. B. Laughlin, *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 1395 (1983).
- [52] J. K. Jain, *Phys. Rev. B*, **63**, 199 (1989).
- [53] G. S. Boedinger, L. N. Pfeifer e K. W. West, *Phys. Rev. B*, **45**, 11391 (1992).
- [54] R. R. Du, H. L. Stormer, D. C. Tsui, L. N. Pfeiffer, K. W. West, *Phys. Rev. Lett.*, **70**, 2944 (1993).
- [55] C. A. B. Dantas, *Probabilidade: Um Curso Introdutório*, EDUSP, São Paulo, 2000.

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)