Gás de Elétrons em Dimensão 2

Pedro V. B. de Melo

20 de Novembro de 2017

1 Equação de Estado de Elétrons Confinados no Plano

O estado do elétron será descrito pela equação de Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\vec{r})\psi = E\psi. \tag{1}$$

Como estamos considerando um elétron livre em $2D$, teremos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \underbrace{V(\vec{r})\psi}_{=0} = E\psi \tag{2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi \tag{3}$$

$$\nabla^2\psi = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi, \tag{4}$$

pois, pelo modelo de Sommerfeld,

$$V(\vec{r}) = \begin{cases} 0, \text{ se } x < L \text{ e } y < L, \\ \infty, \text{ caso contrário.} \end{cases}$$

Considerando que podemos separar a funcão de onda em uma função de x e outra de y:

$$\psi(x, y) = X(x)Y(y) \tag{5}$$

Nossa EDP será expressa então como:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)X(x)Y(y) = -\frac{2mE}{\hbar^2}X(x)Y(y) \tag{6}$$

$$Y(y)\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + X(x)\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}X(x)Y(y), \tag{7}$$

dividindo ambos os lados por $\psi(x, y)$:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{\partial^2 X(x)}{\partial x^2} + \frac{1}{Y(y)}\frac{\partial^2 Y(y)}{\partial y^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \tag{8}$$

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2 X(x)}{dx^2} + \frac{1}{Y(y)}\frac{d^2 Y(y)}{dy^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \tag{9}$$

Como o primeiro termo independe de y, e o segundo termo independe de x, a igualdade só é possível caso ambos termos sejam constantes por si. Chamaremos o primeiro termo de $-k_x^2$ e o segundo termo de $-k_y^2$.

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X}{dx^2} = -k_x^2, \tag{10}$$

$$\frac{1}{Y(y)}\frac{d^2Y}{dy^2} = -k_y^2, \tag{11}$$

$$k_x^2 + k_y^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \tag{12}$$

Resolvendo as equações anteriores, teremos:

$$\frac{d^2X}{dx^2} = -k_x X(x) \rightarrow X(x) = A_x e^{ik_x x} + C_x \tag{13}$$

$$\frac{d^2Y}{dy^2} = -k_y Y(y) \rightarrow Y(y) = A_y e^{ik_y y} + C_y. \tag{14}$$

Pelas condições de contorno de Born-von Karman,

$$\psi(x+L, y) = \psi(x, y), \tag{15}$$

$$\psi(x, y+L) = \psi(x, y), \tag{16}$$

$$\tag{17}$$

então

$$X(x+L) = A_x e^{ik_x(x+L)} + C_x = A_x e^{ik_x x} e^{ik_x L} + C_x = X(x) = A_x e^{ik_x x} + C_x, \tag{18}$$

$$Y(Y+L) = A_y e^{ik_y(y+L)} + C_y = A_y e^{ik_y y} e^{ik_y L} + C_y = Y(y) = A_y e^{ik_y y} + C_y. \tag{19}$$

Ora,

$$A_x e^{ik_x x} e^{ik_x L} + \cancel{C_x} = A_x e^{ik_x x} + \cancel{C_x}, \tag{20}$$

$$\cancel{A_x e^{ik_x x}} e^{ik_x L} = \cancel{A_x e^{ik_x x}}, \tag{21}$$

$$e^{ik_x L} = 1. \tag{22}$$

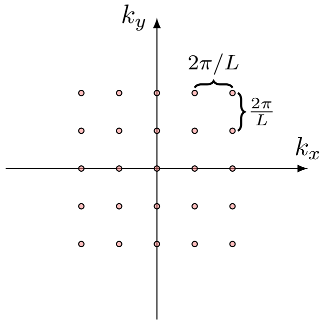
Como a exponencial complexa representa um vetor girante no plano dos complexos, com ângulo igual a seu argumento ($k_x L$), esta só será igual a 1 quando $k_x L = 2\pi n_x$, onde n_x é um número inteiro qualquer. Podemos proceder de forma análoga para $Y(y)$ e k_y, nos levando a $k_y L = 2\pi n_y$, onde n_y também é um inteiro qualquer. Com estas conclusões, sabemos então que nossa energia será escrita como:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2\right) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{2\pi n_x}{L}\right)^2 + \left(\frac{2\pi n_y}{L}\right)^2\right], \tag{23}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2\left(n_x^2 + n_y^2\right). \tag{24}$$

Esta expressão nos indica que temos uma energia $E(n_x, n_y)$ quantizada, que dependerá dos chamados *números quânticos* n_x e n_y. Se tivermos um gás de elétrons confinado em duas dimensões, qual seria a energia deste *ensemble* de partículas? Esta é uma pergunta interessante pois, pelo princípio da exclusão de Pauli, dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico. Teremos assim somente no máximo dois elétrons por nível de energia (um com *spin up* e outro com *spin down*).

1.1 Gás à Temperatura 0



Na condição de temperatura 0, teremos a menor quantidade de energia total possível no nosso sistema. Para isto, iremos "preencher" com elétrons os níveis de energia do menor para o maior, garantindo assim que nossa minimização seja satisfeita. Em dimensão 1 o problema se resume a calcular uma soma ordinária, enquanto que em dimensões superiores (como a nossa), teremos estados degenerados, pois podemos atingir dois valores de energia iguais com configurações diferentes. Nosso problema agora se restringe a distribuir k_x e k_y de maneira a encontrar uma configuração de energia total mínima. Então,

$$E_{tot} = \sum_{\substack{k_x, k_y \\ E < E_{max}}} E(k_x, k_y) \tag{25}$$

Vamos desenhar um diagrama para ilustrar como poderíamos obter esta somatória de energias $E(k_x, k_y)$ para chegar em um valor de energia total E_{tot}. Como nossa energia depende de k_x e k_y da seguinte forma:

$$E(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2\right), \tag{26}$$

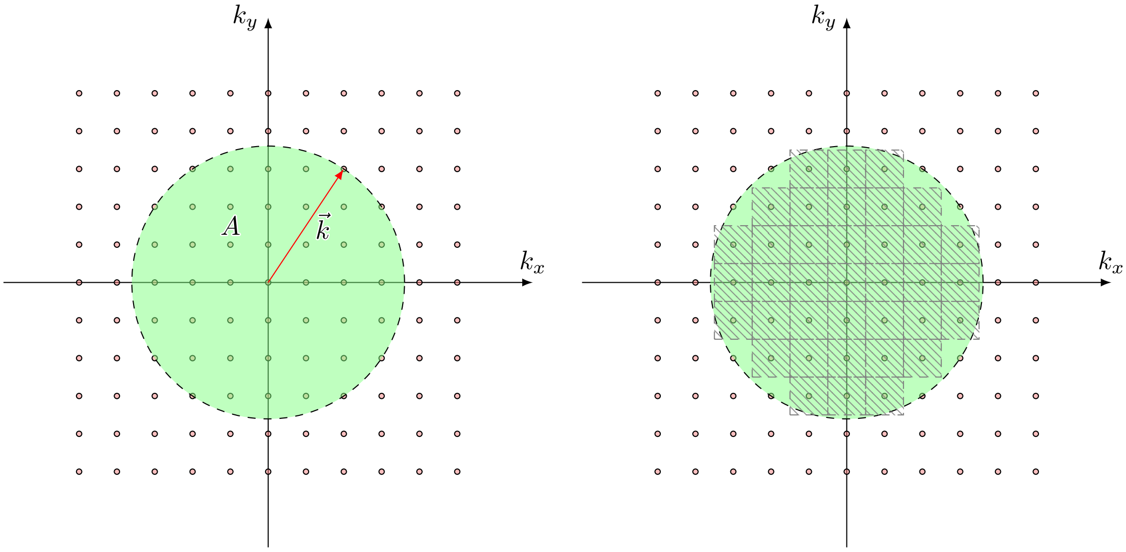


Figura 1: Diagrama ilustrativo da energia total do gás de elétrons. À esquerda, a área delimitada pelo círculo delimitado pelo raio de Fermi k_F. À direita, a área definida pelos pontos internos ao círculo definido por k_F.

podemos definir uma variável $k^2 \equiv k_x^2 + k_y^2$, de maneira a eliminar nossa degenerescência. Ora, se dispormos os valores permitidos (discretos e igualmente espaçados) de k_x e k_y em eixos ortogonais, k será análogo a o raio de um círculo com centro em $O = (k_x = 0, k_y = 0)$.

Necessitamos então somar o número de pontos enclausurados dentro da área delimitada pelo valor máximo de k: Ao observar a figura, percebemos que para calcular o número de pontos enclausurados numa determinada área, basta calcular a área hachurada e dividir pela área individual de cada retângulo de nossa grade. Como a figura geométrica é bastante irregular, não sabemos ao certo como calcular a área da mesma, mas é possível notar que, caso o círculo seja muito grande, calcular esta área é equivalente a calcular a área do círculo. Ora, temos uma intuição geométrica de como obter a energia do gás de elétrons, vamos então analisar algebricamente como seria nossa aproximação:

Temos que a energia total será a soma de todas as energias individuais dos subníveis somados até a energia de Fermi, como demonstrado na equação (25). Caso observemos a energia por unidade de área, teremos

$$u = \frac{E}{A} = \frac{1}{A} \sum_{E_n = E_1}^{E_F} E_n, \tag{27}$$

ora, caso tomemos o limite quando A cresce indefinidamente, mas a razão E/A permanece finita:

$$\lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} \sum_{k_x, k_y} F_k \to \iint F(k) dk_x dk_y. \tag{28}$$

Nossa contagem de energia total será então:

$$u = \frac{1}{A} \iint \frac{\hbar}{2m} (k_x^2 + k_y^2) dk_x dk_y = \frac{\hbar}{2m(2\pi)^2} \iint (k_x^2 + k_y^2) dk_x dk_y, \tag{29}$$

fazendo substituição de variáveis para coordenadas polares:

$$u = \frac{\hbar^2}{2m(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{k_F} k^2 dk (k \cdot d\theta) = \frac{\hbar^2}{2m(2\pi)^2} 2\pi \int_0^{k_F} k^3 dk = \frac{\hbar^2}{2m(2\pi)^{\cancel{2}}} \cancel{2\pi} \left[\frac{k^4}{4} \right]_{k=0}^{k=k_F}. \tag{30}$$

Desta forma, nosso resultado será:

$$u = \frac{\hbar^2}{16\pi m} k_F^2, \tag{31}$$

porém, como temos dois elétrons por estado de energia (devido à degenerescência do *spin*),

$$u = 2 \frac{\hbar^2}{16\pi m} k_F^2, \tag{32}$$

$$\boxed{u = \frac{\hbar^2}{8\pi m} k_F^2} \tag{33}$$

1.2 Potencial Químico (incompleto)

Para o gás de elétrons bidimensional, temos que nossa energia em função de k é

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m}k^2. \tag{34}$$

A distribuição de Fermi-Dirac, por sua vez, é definida como

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_BT}+1}, \tag{35}$$

onde μ é o potencial químico e k_B é a constante de Boltzmann.

$$u = \frac{1}{4\pi^3}\int \epsilon\left(\vec{k}\right) f\left(\epsilon\left(\vec{k}\right)\right) \tag{36}$$

Podemos dividir o número médio de partículas para obter a densidade eletrônica $n = N/V$, e usá-la para eliminar o potencial químico

$$n = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} f\left(\epsilon\left(\vec{k}\right)\right), \tag{37}$$

$$\int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} F\left(\epsilon\left(\vec{k}\right)\right), \tag{38}$$

$$\int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} F\left(\epsilon\left(\vec{k}\right)\right) = \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{\pi^2} F\left(\epsilon\left(\vec{k}\right)\right) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon g(\epsilon) F(\epsilon), \tag{39}$$

onde

$$g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2\pi^2}\sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}},\ \epsilon > 0; \tag{40}$$

$$= 0, \qquad \epsilon < 0. \tag{41}$$

$$g(\epsilon)d\epsilon = \left(\frac{1}{V}\right) \times \text{o numero de niveis com um eletron na faixa } \epsilon \text{ e } \epsilon + d\epsilon \tag{42}$$

$$g(\epsilon) = \frac{3}{2}\frac{n}{E_F}\sqrt{\frac{E}{E_F}},\ \epsilon > 0; \tag{43}$$

$$= 0, \qquad \epsilon < 0. \tag{44}$$

$$u = \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon g(\epsilon)\epsilon f(\epsilon) \tag{45}$$