



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA
MESTRADO ACADÊMICO EM FÍSICA

FRANCISCO MATEUS ALVES GUIMARÃES

**CONDIÇÕES PARA A FORMAÇÃO DE SUPERSÓLIDOS EM CONDENSADOS DE
BOSE-EINSTEIN EXCITÔNICOS EM SEMICONDUTORES BIDIMENSIONAIS**

FORTALEZA

2022

FRANCISCO MATEUS ALVES GUIMARÃES

CONDIÇÕES PARA A FORMAÇÃO DE SUPERSÓLIDOS EM CONDENSADOS DE
BOSE-EINSTEIN EXCITÔNICOS EM SEMICONDUTORES BIDIMENSIONAIS

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Prof. Dr. Andrey Chaves.

Coorientador: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

FORTALEZA

2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

G978c Guimarães, Francisco Mateus Alves.

Condições para a formação de supersólidos em condensados de Bose-Einstein Excitônicos em semicondutores bidimensionais / Francisco Mateus Alves Guimarães. – 2022.

67 f. : il. color.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2022.

Orientação: Prof. Dr. Andrey Chaves.

Coorientação: Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa.

1. Condensado de Bose-Einstein. 2. Éxcitons. 3. Supersólidos. I. Título.

CDD 530

FRANCISCO MATEUS ALVES GUIMARÃES

CONDIÇÕES PARA A FORMAÇÃO DE SUPERSÓLIDOS EM CONDENSADOS DE
BOSE-EINSTEIN EXCITÔNICOS EM SEMICONDUTORES BIDIMENSIONAIS

Dissertação apresentada ao Curso de Mestrado Acadêmico em Física do Programa de Pós-Graduação em Física do Centro de Ciências da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de mestre em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em: 26/07/2022.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Andrey Chaves (Orientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa (Coorientador)
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará (UFC)

Prof. Dr. Aristeu Rosendo Pontes Lima
Universidade da Integração Internacional da
Lusofonia Afro-Brasileira (UNILAB)

Ao meu pai, que com muito carinho e apoio, não mediu esforços para que eu chegasse até esta etapa de minha vida.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos Deuses, pela força motriz que vai me ajudando a trilhar meu caminho.

Minha enorme gratidão ao meu pai, por ter prestado suporte em toda a minha formação, por ter se esforçado pra sempre me dar uma educação de qualidade. Meu pai é para mim, o motivo principal de todo meu esforço.

Agradeço ao meu orientador, professor e amigo Dr. Andrey Chaves, por todo apoio e orientação do planejamento e elaboração deste trabalho.

À minha irmã, que sempre esteve comigo, que sempre me deu os melhores conselhos e que sempre torceu por mim.

Aos membros da banca, prof. Dr. Aristeu e prof. Dr. Diego Rabelo, por aceitarem o convite de participar da banca examinadora desta dissertação.

Gostaria de agradecer meu colega de grupo José Fernandes, pelos debates e sugestões a respeito do trabalho desenvolvido aqui.

Aos meus colegas do grupo do GTMC, pelos debates e pelos ensinamentos no decorrer desses últimos anos.

Gostaria de agradecer aos meus amigos de infância, Renan, Bruna e Felipe, que mesmo sem saber, sempre me deram forças para seguir o meu sonho. Estudar Física!

Agradeço o apoio financeiro como pagamento de bolsa oferecido pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Enfim, agradeço a todos que de uma forma ou de outra contribuíram para o desenvolvimento desse estudo.

Obrigado a todos!

“É, pois, um dever moral do cientista arriscar-se a cometer erros e a sofrer críticas, para que a ciência continue avançando.”

(FERRERO, 1985, p. VIII)

RESUMO

O estudo das transições de fase e a busca por novas fases da matéria continua, até os dias atuais, sendo de grande interesse para a física da matéria condensada. Dentre essas fases, temos o condensado de Bose-Einstein, obtido quando bósons sob determinadas circunstâncias são resfriados à temperaturas extremamente baixas. Neste trabalho, nos focamos em estudar um sistema que vem sendo investigado em diversas plataformas, que são condensados de éxcitons. Nesses sistemas, estudamos o comportamento no estado fundamental do BEC de éxcitons quando o sistema apresenta um mínimo de roton (excitações elementares). Com isso, a partir de uma abordagem de campo médio, e por meio de soluções numéricas, estudamos quais condições são necessárias para que o sistema apresente uma transição para a fase supersólida, isto é, possuindo tanto uma ordem cristalina de longo alcance quanto a propriedade de fluir sem fricção. Introduzindo o potencial apresentando um mínimo de roton na equação de Gross-Pitaevskii e deixando que a função de onda propague no tempo imaginário, obtemos o perfil do sistema no estado fundamental.

Palavras-chave: condensado de Bose-Einstein; éxcitons; supersólidos.

ABSTRACT

The study of phase transitions and the search for new phases of matter continues, until the present day, has been a topic of great interest for the physics of condensed matter. Among these phases, we have the Bose-Einstein condensate, obtained when bosons under certain circumstances are cooled to extremely low temperatures. In this work, we focus on studying a system that has been investigated in several platforms, which are exciton condensates. In these systems, we study the behavior in the ground state of the BEC of excitons when the system presents a minimum of roton (elementary excitations). Thus, from a mean field approach, and through numerical solutions, we study the necessary conditions for the system to present a transition to the supersolid phase, that is, having both a long-range crystalline order and the property of flowing without friction. Introducing the potential presenting a roton minimum in the Gross-Pitaevskii equation and letting the wave function propagate in imaginary time, we obtain the profile of the system in the ground state.

Keywords: Bose-Einstein condensate; excitons; supersolid.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1 – Imagens em cores falsas que exibem a distribuição de velocidades em uma nuvem de átomos de ^{87}Rb . A primeira imagem representa a nuvem pouco antes da condensação. A segunda imagem, o exato momento da condensação, e a última, o momento após a evaporação, onde obtém-se um condensado quase puro. 13
- Figura 2 – Estrutura do grafite (à esquerda) e do grafeno (à direita). O grafeno é um material 2D alótropo (substâncias diferentes formadas pelo mesmo elemento) do carbono na forma de um favo de mel. 17
- Figura 3 – Estrutura cristalina de uma monocamada de TMD, mostrando uma camada de um metal de transição (em azul) entre duas camadas de átomos de calcogênios (em amarelo). 17
- Figura 4 – A base é constituída de um íon Cs^+ na posição 000 e um íon Cl^- em $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$ a) Ilustração de um cristal de cloreto de cézio, CsCl . b) Célula untária do CsCl . 19
- Figura 5 – Representação do cristal. Cada ponto em azul na rede representa um núcleo atômico, periodicamente espaçado. 19
- Figura 6 – a) Níveis de energia formando uma banda a medida que Δ aumenta. b) Curva de dispersão $E(k)$ em função k na zona de Brillouin. 22
- Figura 7 – Bandas de valência e condução em um semiconductor. a) Em $T = 0$ K a banda de valência está completamente preenchida. b) Preenchimento das bandas em um semiconductor quando $T > 0$ K. Aqui elétrons podem saltar para a banda de condução devido à excitação térmica. 23
- Figura 8 – Representação de bandas de valência e condução em um semiconductor. a) Em $T = 0$ a banda de valência está completamente preenchida por elétrons e a banda de condução completamente vazia. b) Para $T > 0$ o elétron pode ganhar energia suficiente para transitar para banda de condução, deixando na banda de valência um estado vazio. 25
- Figura 9 – Representação do deslocamento do buraco para diferentes instantes ao ser aplicado um campo elétrico \mathbf{E} 26
- Figura 10 – Diagrama do GaAs em $T = 0$ K. Observamos no diagrama do GaAs as diferentes curvaturas de banda, e conseqüentemente, buracos com massa efetiva maior que de outros. 27

Figura 11 – Representação de elétrons e buracos em um material <i>bulk</i> (lado esquerdo) e confinados em poços quânticos (lado direito).	30
Figura 12 – Ilustração do dispositivo constituído por dois cristais de TMD alinhados em ângulo e separados por barreiras de nitreto de boro hexagonal (hBN).	32
Figura 13 – Exemplo de três fases diferentes para BECs dipolar em que as partículas estão confinadas em uma armadilha em geometria de panqueca. Essas imagens representam o perfil do estado fundamental do sistema, obtida a partir da solução da equação de Gross-Pitaevskii.	34
Figura 14 – Representação do espectro de excitações elementares de ^4He superfluido. Na figura, Δ representa a energia do mínimo de roton com momento $p = \hbar k$	36
Figura 15 – Representação esquemática do processo para obtenção da função de onda no tempo $t + \Delta t$	46
Figura 16 – Um condensado de éxcitons interagindo remotamente com um gás de elétrons 2D situado em uma fina camada metálica.	49
Figura 17 – a) Gráfico do espectro de excitação e b) potencial de interação éxciton-éxciton efetivo para três valores da distância de separação L entre a camada do éxciton e elétron.	50
Figura 18 – Perfil de densidade de um BEC de éxcitons no espaço real e no espaço recíproco. a) Para uma separação de 30 nm o estado fundamental é um superfluido homogêneo. b) No espaço recíproco, o estado superfluido é representado por um ponto. c) Para uma separação de 18 nm, um arranjo triangular passa a se formar no estado de menor energia do sistema. d) Um arranjo periódico também surge no espaço recíproco. e) Ainda para uma distância de 18 nm, ruídos no sistema podem levar à uma fase metaestável. e) A fase metaestável se apresenta no espaço recíproco como anéis concêntricos em torno de $k = 0$	51
Figura 19 – Gráfico do potencial da Eq. (3.4). As diferentes curvas correspondem a interação entre os éxcitons, de modo que a interação é tanto maior quanto maior for os valores no domínio negativo de $V_{\text{exc-exc}}^{\text{eff}}(k)$	54

Figura 20 – Gráficos dos diferentes perfis de densidade do condensado de éxcitons no espaço real. Em a) não observamos nenhum padrão formado no estado fundamental do sistema. Conforme o potencial ultrapassa para o domínio negativo, uma mudança no perfil da densidade passa a acontecer, até que em c) podemos ver um padrão triangular se formar. A partir daí, d-f) observamos picos da densidade distribuídos. 55

Figura 21 – Produzida pelo autor. a) O gráfico mostra o aumento do valor médio de ocupação do estado fundamental ($j = 0$) para função de distribuição de Bose-Einstein conforme $z \rightarrow 1$. b) Comparação entre as funções de distribuição de Bose-Einstein, Fermi-Dirac e Boltzmann. Para altas temperaturas as três funções apresentam o mesmo comportamento. 66

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	12
1.1	Condensado de Bose-Einstein	12
1.1.1	<i>A equação de Gross-Pitaevskii</i>	14
1.2	Materiais bidimensionais	16
1.3	Estrutura bandas de energia	18
1.4	Massa efetiva	23
1.5	Éxcitons	27
1.5.1	<i>Modelo de uma banda</i>	28
1.6	Condensado de Éxcitons	30
1.7	Supersólidos em condensados de Éxcitons	32
1.7.1	<i>Um pouco de história</i>	32
1.7.2	<i>Rotons e supersolidez</i>	35
1.8	Escopo da Dissertação	37
2	TÉCNICA <i>SPLIT OPERATOR</i>	38
2.1	Operador evolução temporal	38
2.2	A equação de Schrödinger	39
2.3	Construção da técnica <i>Split Operator</i>	40
2.3.1	<i>Método de Cayley</i>	42
2.3.2	<i>Método da transformada de Fourier</i>	45
2.4	Evolução no tempo imaginário	47
3	RESULTADOS	49
3.1	Supersolidez em sistemas de Bose-Fermi	49
3.2	Teoria de Gross-Pitaevskii	52
4	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	56
	REFERÊNCIAS	57
	APÊNDICE A –ESTATÍSTICA DE UM GÁS IDEAL	64
A.1	Estatística de Bose-Einstein	65
A.2	Estatística de Fermi-Dirac	65

1 INTRODUÇÃO

1.1 Condensado de Bose-Einstein

No ano de 1995, ganha força uma das mais promissoras áreas de pesquisa na Física da atualidade, a área dos sistemas ultrafrios. Nesse ano, foram feitas as primeiras observações experimentais de um novo estado da matéria. O condensado de Bose-Einstein (BEC, do inglês, *Bose-Einstein condensate*) [1, 2, 3], previsto teoricamente 70 anos antes pelos físicos Satyendra Nath Bose e Albert Einstein.

Em 1924, o físico indiano Bose apresentou uma dedução alternativa à estatística de um gás de fótons [4] e a fórmula do espectro de radiação do corpo negro, deduzida previamente pelo físico alemão Max Planck. Tendo seu trabalho sido recusado para publicação pela *Philosophical Magazine*, Bose buscou a ajuda do físico alemão Albert Einstein para que solicitasse a publicação no periódico *Zeitschrift für Physik*. Einstein, portanto, julgando a importância do trabalho, considera o pedido e efetua algumas considerações finais. O modelo estatístico foi estendido por Einstein de forma a incluir sistemas com o número de partículas com massa conservado [5], associando ondas à matéria, ideia recente de de Broglie, sendo os bósons as partículas que obedecem a essa estatística. O número de ocupação média dessas partículas em um determinado estado i é escrito como (ver apêndice A),

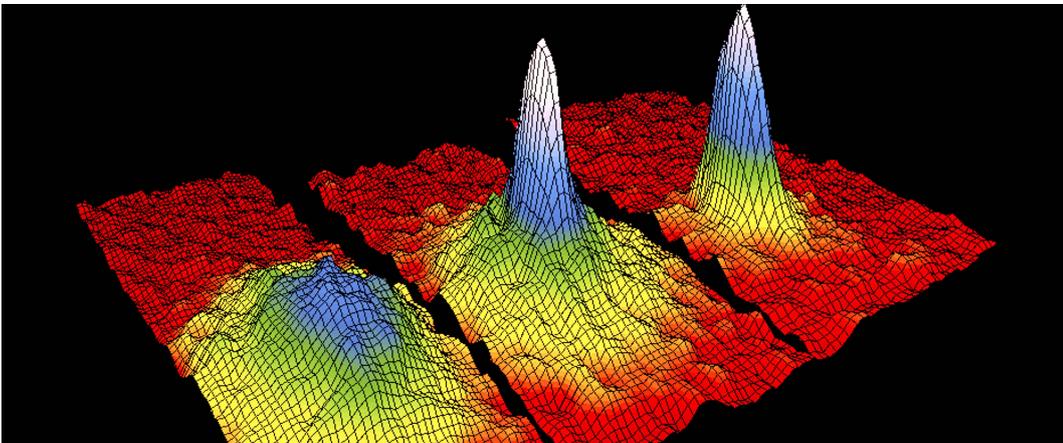
$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{e^{(\epsilon_i - \mu)/k_B T} - 1}, \quad (1.1)$$

em que k_B é a constante de Boltzmann, T a temperatura, ϵ_i a energia de uma partícula no estado i e μ o potencial químico. Einstein previu que abaixo de uma certa temperatura, o número de ocupação de partículas no estado fundamental do gás aumentaria rapidamente conforme a temperatura tendesse a zero, de modo que em $T = 0$, todas as partículas constituintes do gás se condensariam nesse estado. Na perspectiva da mecânica quântica, esse estado condensado é visto como uma onda de matéria coerente proveniente da superposição das ondas de de Broglie, semelhante ao que ocorre em um laser [6].

Os experimentos iniciais para a obtenção dos primeiros condensados foram realizados pelo grupo do *Joint Institute for Laboratory Astrophysics* (JILA) de onde estavam à frente os físicos norte-americanos Eric Allin Cornell e Carl Wieman. O sistema investigado tinha cerca de 2.5×10^{12} átomos/ cm^3 de rubídio ^{87}Rb , aprisionados em uma armadilha magnética e resfriados, por técnicas a laser e evaporativamente, até a ordem de 170 nano Kelvins [1], onde o sistema

passou a ter um caráter macroscópico, podendo ser considerado como um "átomo gigante". Alguns meses depois, o grupo do *Massachusetts Institute of Technology* (MIT), liderado pelo físico alemão Wolfgang Ketterle, obteve a condensação de átomos de sódio ^{23}Na , a qual tinha uma densidade da ordem de 10^{14} átomos/ cm^3 na temperatura de $2\mu\text{K}$ [3]. A assinatura da condensação foi obtida por meio de uma imagem de absorção gerada após a liberação dos átomos da armadilha. Essa imagem representa o perfil de densidade da nuvem de átomos. Na Fig. 1,

Figura 1 – Imagens em cores falsas que exibem a distribuição de velocidades em uma nuvem de átomos de ^{87}Rb . A primeira imagem representa a nuvem pouco antes da condensação. A segunda imagem, o exato momento da condensação, e a última, o momento após a evaporação, onde obtém-se um condensado quase puro.



Fonte: Retirada de [7]

vemos na distribuição mostrada à esquerda da imagem que acima de uma certa temperatura, a nuvem se torna esférica depois de um tempo suficientemente longo. Isso se deve ao fato da distribuição do momento isotrópico de um gás ser governada pela distribuição clássica de Boltzmann. Abaixo dessa temperatura crítica, é observada uma mudança nas imagens, onde é visto um pico emergir. Na distribuição intermediária da imagem mostrada na Fig. 1, é possível perceber que esse pico é mais estreito que a nuvem térmica, pois ele caracteriza a contribuição dos átomos condensados no estado fundamental do potencial confinador. Uma fração macroscópica dos átomos se condensa, onde esses átomos condensados passam a ser descritos pela função de onda de partícula única. Na ausência de interações, essa função de onda é o estado fundamental da armadilha.

É possível estimar a ordem de grandeza da temperatura crítica para se obter um BEC a partir de argumentos dimensionais. Para um gás uniforme de partículas livres, as quantidades relevantes são a massa M da partícula, o número de partículas por unidade de volume n , e a constante de Planck \hbar . A quantidade com dimensão de energia que pode ser formada a partir de

\hbar , M e n é $\hbar^2 n^{2/3}/M$. Com isso, dividindo essa energia pela constante de Boltzmann k , obtemos a estimativa para a temperatura dada por

$$T_c = C \frac{\hbar^2 n^{2/3}}{M k_B}, \quad (1.2)$$

onde C é um fator numérico que depende do tipo de armadilha utilizada para o confinamento. Quando avaliamos a Eq. (1.2) em termos da massa e densidade apropriada ao Hélio ^4He à pressão de vapor saturado, obtemos uma temperatura de transição de aproximadamente 3.13K, que é próxima a temperatura abaixo da qual os fenômenos da superfluidade são observados, o chamado ponto λ ($T_\lambda = 2.17\text{K}$). Com essa propriedade superfluida, observamos um escoamento em que não há perda de energia por viscosidade. Ainda hoje, esse fenômeno mexe com a curiosidade dos cientistas, muito embora tenhamos evidências da relação desse fenômeno com BEC [8].

Alguns obstáculos costumam ser encontrados ao se tentar verificar teoria com a prática experimental. Um desses obstáculos, no que diz respeito ao fenômeno de condensação, aparece quando as interações entre os átomos exercem um papel não desprezível [9], fazendo com que a distribuição de Bose-Einstein não retrate com exata precisão o que é observado experimentalmente. Para contornar esse problema, conforme temos uma grande parte das partículas encontrando-se no estado fundamental, desprezamos os efeitos da parcela não condensada de partículas, mantendo uma teoria exata da fração condensada. A teoria utilizada para isso sintetiza a chamada equação de Gross-Pitaevskii (eGP), obtida em 1961, por E. P. Gross [10] e L. Pitaevskii [11]. Essa é uma das principais equações no estudo de BEC.

A eGP foi obtida via aproximação de campo médio, e possui uma certa semelhança com a equação de Schrödinger, diferenciando-se por um termo não-linear, que aparece devido à interação entre os átomos. Ela é utilizada para o estudo das propriedades estáticas e dinâmicas da função de onda que descreve um BEC. Alguns procedimentos numéricos [12, 13, 14, 15, 16] e métodos analíticos por meio de um *ansatz* gaussiano [17] costumam ser utilizados para a resolução da eGP.

1.1.1 A equação de Gross-Pitaevskii

Podemos derivar a eGP a partir de um princípio de ação mínima, utilizando uma lagrangeana adequada para sistemas dependentes do tempo. Dessa forma, partimos escrevendo

$$\delta\mathcal{A}[\Psi, \Psi^*] = 0, \quad (1.3)$$

em que a ação $\mathcal{A}[\Psi, \Psi^*]$ tem a forma

$$\mathcal{A}[\Psi, \Psi^*] = \int d^3r \int_{t_1}^{t_2} dt \Psi^*(\mathbf{r}, t) \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H(\mathbf{r}, t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.4)$$

O Hamiltoniano $H(\mathbf{r}, t)$ é decomposto da forma

$$H(\mathbf{r}, t) = H_0(\mathbf{r}, t) + H_{\text{int}}(\mathbf{r}, t), \quad (1.5)$$

onde no primeiro termo à direita da igualdade está inclusa a energia de uma partícula, correspondente às energias cinética e de aprisionamento devido à um potencial externo V_{ext} :

$$H_0(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}), \quad (1.6)$$

em que M é a massa das partículas do sistema estudado. Já a interação entre duas partículas é dada pelo Hamiltoniano

$$H_{\text{int}}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int d^3r' \Psi^*(\mathbf{r}', t) V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t), \quad (1.7)$$

com uma interação geral V_{int} entre dois bósons com coordenada relativa \mathbf{r} .

Sendo o Lagrangeano (\mathcal{L}) o integrando da ação (1.4), a função $\Psi \rightarrow 0$ quando $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ ao integrarmos \mathcal{L} , e satisfazendo a condição $\delta\Psi(\mathbf{r}', t_1) = \delta\Psi(\mathbf{r}', t_2)$ para qualquer ponto \mathbf{r} no espaço, obtemos a equação de Euler-Lagrange, considerando que a massa M do sistema é constante,

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Psi^*} - \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \Psi^*} \right) - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\Psi}^*} = 0, \quad (1.8)$$

em que o Lagrangeano tem a seguinte forma, considerando os Hamiltonianos expressos pelas Eqs. (1.5)-(1.7)

$$\mathcal{L} = i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla \Psi^* \nabla \Psi - \Psi^* V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) \Psi - \Psi^* H_{\text{int}}(\mathbf{r}, t) \Psi. \quad (1.9)$$

Assim, das equações (1.8)-(1.9) obtemos a eGP dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2M} + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int d^3r' \Psi^*(\mathbf{r}', t) V_{\text{int}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}', t) \right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (1.10)$$

Esta equação se tornou a principal ferramenta para o estudo da teoria de BEC por descrever com grande eficiência fenômenos observados nesses sistemas. Foi derivada independentemente por E. P. Gross [10] e L.P. Pitaevskii [11] em 1961 e utilizada pela primeira vez para estudar a presença de vórtices em BEC fracamente interagentes.

1.2 Materiais bidimensionais

Em uma análise cronológica, podemos ver como, no passar das décadas, dispositivos tecnológicos têm atingido níveis cada vez mais sofisticados. Há pouco mais de sete décadas, o mundo observava o funcionamento do primeiro computador digital de grande escala, o ENIAC [18]. Após isso, cientistas intensificaram seus esforços para corresponder à necessidade de se obter dispositivos eletrônicos menores e mais eficientes. Nessa perspectiva, os materiais semicondutores passaram a ter grande interesse por parte dos cientistas, resultando num salto para o segmento da eletrônica.

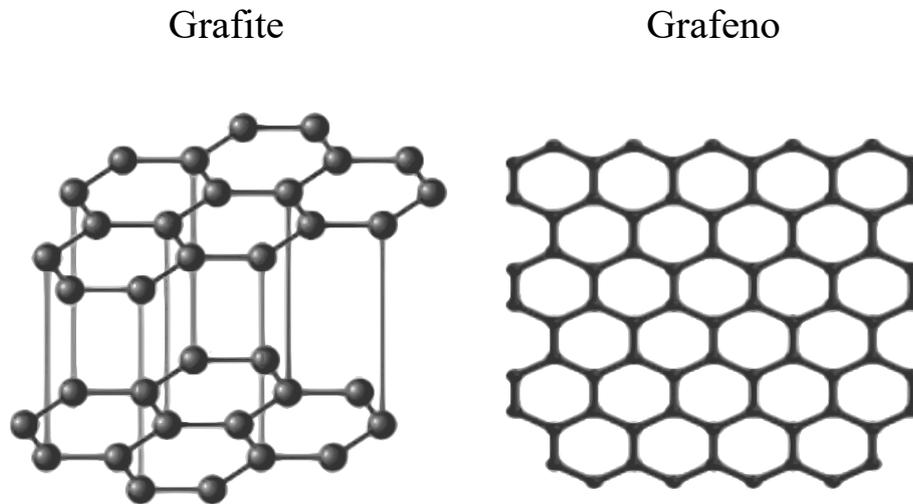
A síntese de novos materiais que apresentem propriedades otimizadas consiste numa área em constante estudo na ciência dos materiais. Atualmente, materiais como o grafeno e dicalcogeneto de metais de transição (TMD, do inglês, *Transition Metal Dichalcogenides*) representam promissoras alternativas para a indústria [19, 20], podendo vir a substituir eventualmente materiais como o silício, que hoje é um material utilizado na fabricação de transistores, porém, suas propriedades elétricas já estão no limite do que elas podem oferecer, tendo em vista a demanda da indústria por materiais cada vez mais robustos em dimensões de poucos átomos.

O grafeno se categoriza como um material bidimensional (2D), ou seja, possui uma única camada de átomos. Porém, essa concepção de material 2D foi por muito tempo considerado inconsistente, isso porque Peierls [21] e independentemente Landau [22] mostraram que cristais perfeitamente 2D eram termicamente instáveis. Nesses cristais, as flutuações térmicas causariam deslocamentos atômicos na ordem da constante da rede, promovendo um arranjo tridimensional à estrutura. No ano de 2004, no entanto, o grafeno [23] foi sintetizado por meio de esfoliação mecânica de camadas de grafite (ver Fig. 2), rendendo um Nobel para os físicos Andre Geim e Konstantin Novoselov em 2010. Características como resistência mecânica [25], alta condutividade elétrica e mobilidade térmica do grafeno [26, 27] o tornaram centro das atenções dos cientistas e da indústria devido ao seu grande potencial tecnológico no ramo da optoeletrônica.

Além do grafeno, existem muitos outros materiais 2D, que podem ser obtidos pelas mesmas técnicas utilizadas para isolar o grafeno, apresentando uma grande variedade de propriedades físicas e representando potenciais aplicações [28, 29], como os, já mencionados, TMD's, podendo citar o dissulfeto de molibdênio (MoS_2) [30], nitreto de boro hexagonal (hBN) [31], fosforeno [32], entre outros.

Os TMD's representam uma subclasse de materiais produzidos a partir de um metal

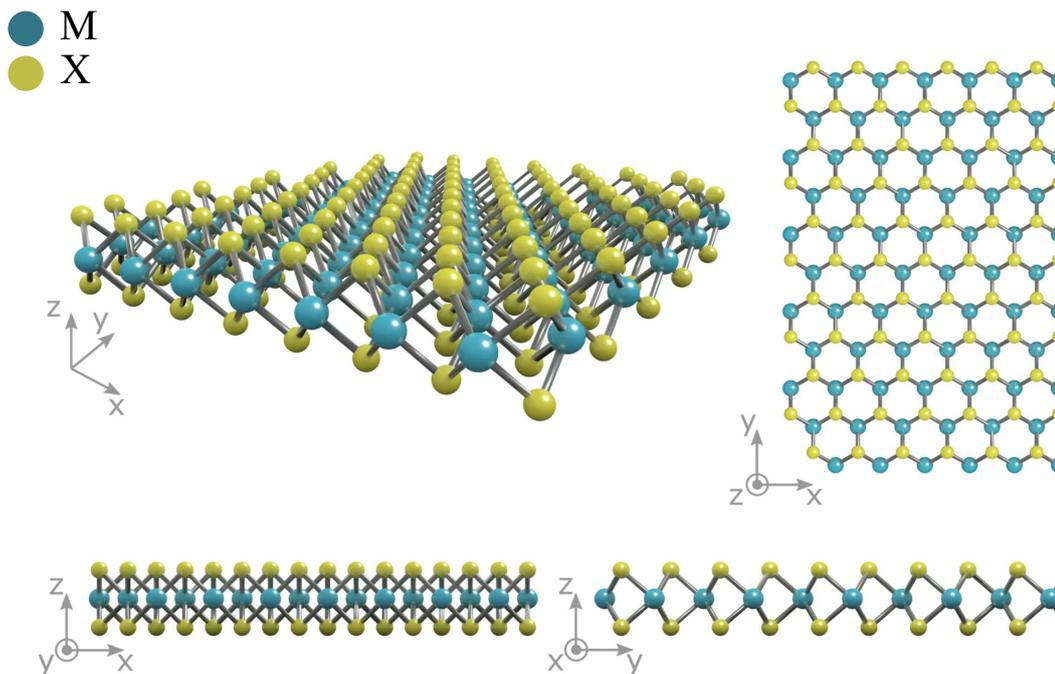
Figura 2 – Estrutura do grafite (à esquerda) e do grafeno (à direita). O grafeno é um material 2D alótropo (substâncias diferentes formadas pelo mesmo elemento) do carbono na forma de um favo de mel.



Fonte: Adaptado de [24].

de transição, usualmente, do grupo IV (Ti, Zr, Hf), V (V, Nb, Ta) ou VI (Mo, W) e dois calcogênios (S, Se, Te), podendo assim serem representados pela fórmula MX_2 . As monocamadas de TMD's são formadas pela sobreposição de três camadas intercaladas e fracamente acopladas X-M-X, como mostra a Fig. 3, onde observamos a estrutura em diferentes perspectivas. Além de tudo,

Figura 3 – Estrutura cristalina de uma monocamada de TMD, mostrando uma camada de um metal de transição (em azul) entre duas camadas de átomos de calcogênios (em amarelo).



Fonte: Adaptado de [33].

novas propriedades podem ser alcançadas a partir do empilhamento de varias camadas desses materiais, dando origem as chamadas heteroestruturas da van der Waals [35].

As monocamadas de TMD's são estáveis o suficiente em temperatura ambiente, e nesses materiais, a interação coulombiana é extremamente alta devido ao forte confinamento quântico em conjunto com a fraca blindagem dielétrica. Como resultado dessa forte interação, esses sistemas são uma ótima plataforma para se investigar fenômenos relacionados à fotônica e optoeletrônica, promovida pela elevada energia de ligação entre os portadores de cargas (elétrons e buracos), fornecendo oportunidades únicas para manipular opticamente os estados de spin e vale. Em sua estrutura eletrônica, apresentam um *gap* (esse conceito ficará mais claro quando falarmos de estruturas de banda) indireto quando estão em *bulk* e no limite de uma camada, o *gap* se torna direto [34].

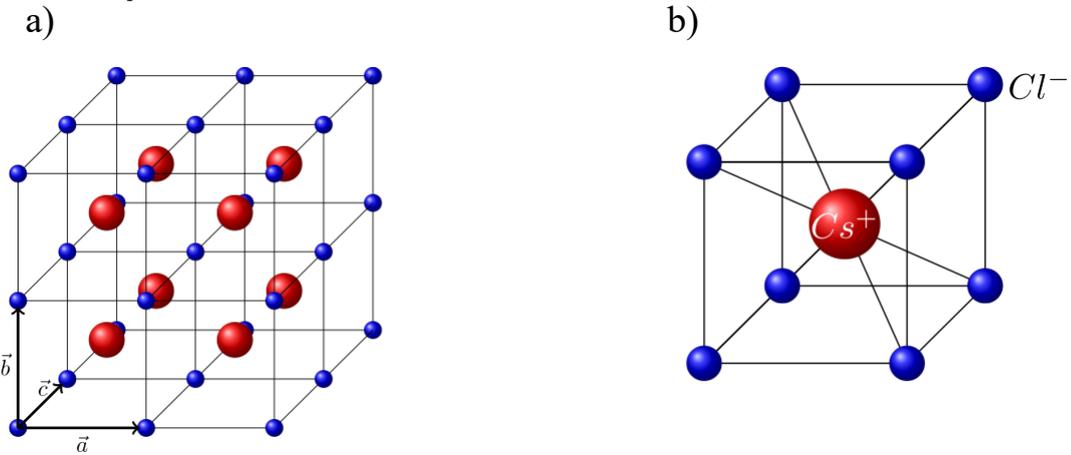
1.3 Estrutura bandas de energia

Atualmente, os dispositivos eletrônicos estão profundamente inseridos no nosso cotidiano: nos aparelhos telefônicos, notebooks, TV's, pen-drive e etc. A maioria dos materiais que são utilizados para a fabricação desses dispositivos têm a estrutura de sólidos cristalinos. Um cristal perfeito é caracterizado por um arranjo regular e periódico de átomos ou íons, produzido por sucessivas translações de uma célula unitária, definida por três vetores unitários \vec{a} , \vec{b} e \vec{c} . Os átomos se ordenam dessa forma por ser essa configuração que minimiza a energia eletrostática total do conjunto. A Fig. 4a) apresenta a estrutura de um cristal de cloreto de césio, onde observamos como o par de íons de Cs^+ e Cl^- , relativo a cada ponto da rede cristalina formam a base do cristal. A rede cristalina é uma concepção matemática composta de pontos da célula unitária transladada.

Vamos brevemente investigar como elétrons se comportam ao transitarem por estruturas cristalinas. Por isso, recapitulemos alguns conceitos. Para átomos isolados, existem níveis energéticos discretos que podem ser ocupados pelos elétrons, organizados em camadas (1, 2, 3, ...) e subcamadas (*s*, *p*, *d*, *f*). Para um átomo com vários elétrons, o estado fundamental é obtido distribuindo os pares de elétrons de *spins* opostos, conforme exige o princípio de exclusão de Pauli. Dessa forma, a configuração eletrônica de um átomo isolado representa o arranjo dos elétrons no interior dos estados permitidos.

Podemos estudar esses conceitos voltando nossos interesses para materiais sólidos, que por sua vez, consiste em um grande número de átomos agrupados, formando um arranjo

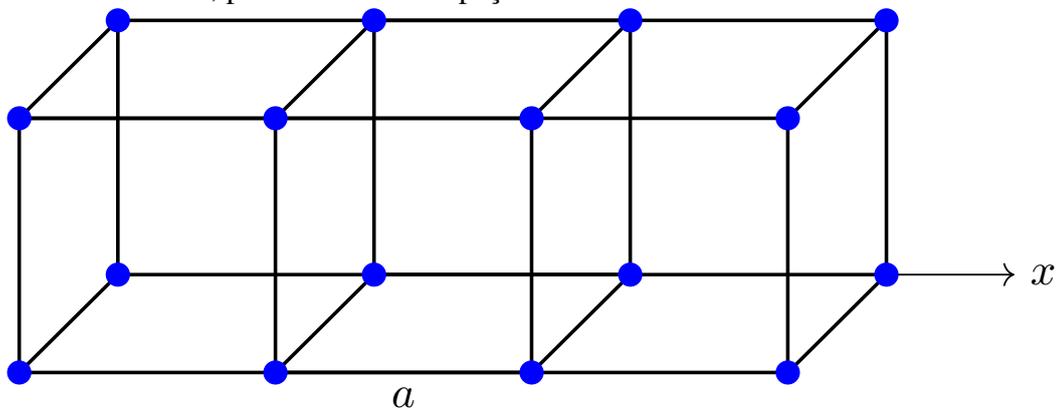
Figura 4 – A base é constituída de um íon Cs^+ na posição 000 e um íon Cl^- em $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$



Fonte: Produzida pelo autor.

atômico ordenado observado em um sólido cristalino. Quando as distâncias de separação são relativamente grandes entre os átomos, podemos considerar que cada átomo independe dos demais, tendo os níveis de energia e configuração eletrônica que teria caso estivesse isolado. No entanto, conforme os átomos estão próximos uns dos outros, os elétrons de um átomo passam a sentir a ação dos elétrons e núcleos dos demais átomos, acrescentando uma dificuldade a mais no cálculo exato dos estados eletrônicos nesses sistemas. Contudo, algumas aproximações podem ser feitas para iniciar uma investigação sobre os estados eletrônicos em sólidos cristalinos. Assim, como mostra a Fig 5, podemos considerar que os núcleos atômicos estão fixos, de modo que suas posições são bem definidas na rede cristalina e que um único elétron transita na rede.

Figura 5 – Representação do cristal. Cada ponto em azul na rede representa um núcleo atômico, periodicamente espaçado.



Fonte: Produzida pelo autor.

Suponhamos inicialmente que os íons regularmente espaçados formem um potencial periódico unidimensional $V(x \pm a) = V(x)$, onde a corresponde o espaçamento da rede. Para

o caso onde esse potencial é infinitamente alto entre dois sítios vizinhos, é natural esperar que o estado fundamental desse sistema é aquele para o qual a partícula esteja completamente localizada em um dos sítios da rede, por exemplo, no n -ésimo sítio cujo *ket* correspondente seja denotado por $|n\rangle$. Sabemos que a energia para esse autoestado é E_0 , já que $H|n\rangle = E_0|n\rangle$. Entretanto, observe que teremos estados similares localizados em outros sítios, resultando no mesmo valor de energia. Dessa forma, teremos n cópias do estado fundamental, em que n varia de $-\infty$ a ∞ , todos degenerados. Na investigação desse problema, podemos considerar um operador de translação na rede, $\tau(l)$, de modo que quando l coincide com o espaçamento da rede, teremos

$$\tau^\dagger(a)V(x)\tau(a) = V(x \pm a) = V(x). \quad (1.11)$$

Pode-se mostrar que $\tau(a)$ é unitário, porém não hermitiano, e sendo a parcela da energia cinética do Hamiltoniano H invariante por translações para qualquer deslocamento, é válido $[H, \tau(a)] = 0$, podendo portanto H e τ serem diagonalizados simultaneamente. No entanto, temos que $\tau(l)|x'\rangle = |x' + l\rangle$, e certamente o *ket* $|n\rangle$ não é autoestado do operador de translação da rede, já que se aplicarmos esse operador $\tau(a)$ à $|n\rangle$, teremos

$$\tau(a)|n\rangle = |n + 1\rangle, \quad (1.12)$$

e assim, embora $\tau(a)$ comute com o Hamiltoniano, $|n\rangle$ não é um autoestado de $\tau(a)$ assim como ele é de H . Entretanto, da relação de comutação entre H e τ , devemos ter estados que sejam autoestados desses dois operadores. Podemos escrever esses estados como sendo

$$|\theta\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta) |n\rangle, \quad (1.13)$$

onde θ é um parâmetro real e que varia no intervalo $(-\pi, \pi)$. É fácil ver que $|\theta\rangle$ é um autoestado de H , uma vez que $|n\rangle$ é autoestado do Hamiltoniano com autovalor de energia E_0 . Para verificar que $|\theta\rangle$ é um autoestado do operador de translação na rede, basta aplicar $\tau(a)$ a Eq. (1.13)

$$\begin{aligned} \tau(a)|\theta\rangle &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta)\tau(a)|n\rangle = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta)|n+1\rangle \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta - i\theta)|n\rangle \\ &= \exp(i\theta)|\theta\rangle. \end{aligned} \quad (1.14)$$

Observe que o autovalor de energia independe da variável θ neste caso.

No caso mais realístico, ocorre que o potencial entre sítios vizinhos não é infinitamente alto, o que leva a um efeito de tunelamento quântico, isto é, a função de onda da partícula no autoestado n se estende para além do n -ésimo sítio. Nesse caso, ainda podemos construir um *ket* $|n\rangle$ com a propriedade da Eq. (1.12), e embora os elementos da diagonal de H ainda sejam iguais devido à invariância translacional, em que teremos $\langle n|H|n\rangle = E_0$, independente de n , não podemos mais assegurar que o Hamiltoniano seja completamente diagonal nessa base, em decorrência dos efeitos de tunelamento.

Vamos supor, portanto, que as barreiras entre sítios vizinhos sejam altas, porém não infinitas. Ocorre que podemos desprezar os efeitos que sítios distantes têm sobre determinado sítio da rede, de modo que os únicos elementos de matriz de H de relevância conectam vizinhos imediatos, isto é, $\langle n'|H|n\rangle \neq 0$ somente se $n' = n$ ou $n' = n \pm 1$. Essa aproximação é conhecida, do inglês, como *tight-binding*. Definimos

$$\langle n \pm 1|H|n\rangle = -\Delta. \quad (1.15)$$

Observe que devido à invariância de translação do Hamiltoniano, Δ não depende de n . Assim, aplicando H à função $|\theta\rangle$ apresentada na Eq. (1.13), considerando os primeiros vizinhos, obtemos

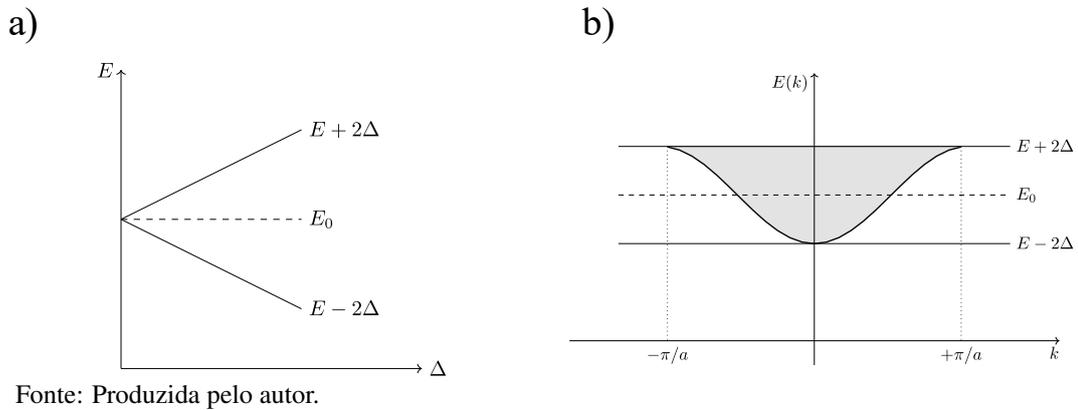
$$\begin{aligned} H|\theta\rangle &= H \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta) |n\rangle \\ &= E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta) |n\rangle - \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta) |n+1\rangle - \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta) |n-1\rangle \\ &= E_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta) |n\rangle - \Delta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(in\theta) [\exp(-i\theta) + \exp(i\theta)] |n\rangle \\ &= (E_0 - 2\Delta \cos \theta) |\theta\rangle, \end{aligned} \quad (1.16)$$

e nesse caso, o autovalor de energia depende da variável θ . A Fig. 6a) mostra como os autovalores de energia começam a formar uma banda contínua de energia à medida que Δ aumenta. Essa distribuição de autovalores ocorre entre $E_0 - 2\Delta$ e $E_0 + 2\Delta$. O significado de θ pode ser obtido ao projetarmos $|\theta\rangle$ no espaço das posições, onde temos esse parâmetro dado por $\theta = ka$, onde k é o vetor de onda do elétron e a o parâmetro de rede. Assim, ficamos com

$$E(k) = E_0 - 2\Delta \cos(ka), \quad (1.17)$$

onde k varia de $-\pi/a$ a π/a . Essa região é conhecida como primeira zona de Brillouin. A Eq. (1.17) define a curva de dispersão representado na Fig. 6b).

Figura 6 – a) Níveis de energia formando uma banda a medida que Δ aumenta. b) Curva de dispersão $E(k)$ em função k na zona de Brillouin.



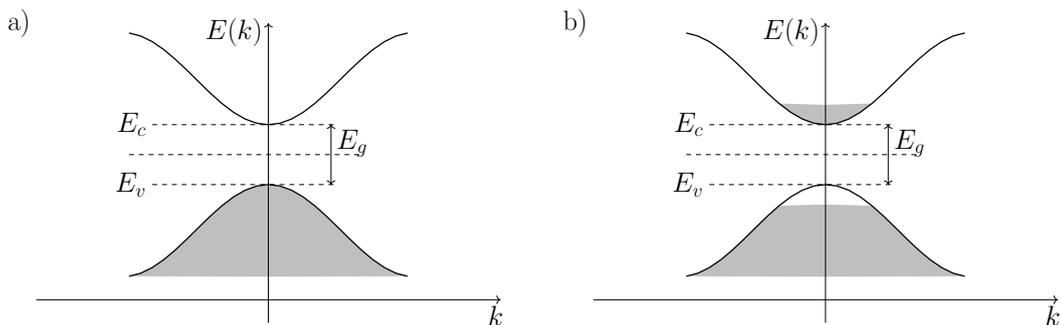
Com as aproximações realizadas, isto é, considerando os núcleos atômicos fixos e periodicamente espaçados e que apenas um elétron transita na rede, bem como considerando somente os efeitos dos primeiros vizinhos para cada sítio do arranjo periódico, pudemos investigar as propriedades dos sólidos cristalinos, tal como o fato de que potenciais periódicos formam bandas de energia, característica importante dos sólidos cristalinos. Até aqui consideramos apenas um elétron se movendo na rede, mas em situações mais realistas, muitos elétrons se movem em um potencial como o estudado aqui. Esses elétrons, obedecendo o princípio de exclusão de Pauli, começam a preencher a banda, e daí passamos a enxergar com mais clareza o que caracterizam os metais, semicondutores e isolantes.

Os sólidos apresentam uma notável faixa de condutividade elétrica σ , estendendo-se numa faixa de variação de 27 ordens de grandeza [36]. De fato, uma das formas possíveis para classificar os materiais sólidos é quanto à facilidade com a qual eles conduzem corrente elétrica, isto é, a facilidade que os portadores de carga têm de se movimentar no sólido. Nesse contexto, os sólidos são classificados como materiais condutores, semicondutores e isolantes. Os metais são exemplos de materiais bons condutores, possuindo uma condutividade típica de $10^7(\Omega m)^{-1}$, ao contrário dos isolantes que possuem uma condutividade elétrica entre 10^{-10} e $10^{-20}(\Omega m)^{-1}$. Alguns materiais, no entanto, possuem uma condutividade intermediária, entre 10^{-6} e $10^4(\Omega m)^{-1}$, e estes são conhecidos como semicondutores.

Os materiais semicondutores são definidos como materiais em que para $T = 0$ K, suas bandas de energia estão completamente preenchidas por elétrons até a última banda de energia, chamada de banda de valência, enquanto a banda seguinte, chamada de banda de condução, está completamente vazia. Também são caracterizados por um *gap* (intervalo de energia entre a banda de valência e a banda de condução em que os elétrons são proibidos

de preencher) de energia pequeno, em comparação ao que se tem em um material isolante. Como esse *gap* é relativamente pequeno, é possível facilmente excitar (por meio da absorção de fóton, por exemplo) um elétron da banda de valência para a banda de condução, desde que seja fornecida pelo menos a energia mínima para que o elétron sofra essa transição para a banda seguinte. Nesse processo, a passagem de elétrons para a banda de condução deixa na banda de valência estados que se comportam como portadores de cargas positivas, também chamados de buracos. Assim, quanto menor a energia do *gap* E_g entre as bandas, menos energia será necessário para o elétron saltar para a banda de condução. A Fig. 7 ilustra o preenchimento das bandas de valência e condução para a) $T = 0$ e b) $T > 0$, bem como a energia do *gap* que as separam. Para semicondutores, a uma temperatura ambiente, o valor de E_g é da ordem de 1 eV, o que faz com que tenham uma condutividade elétrica significativa.

Figura 7 – Bandas de valência e condução em um semicondutor. a) Em $T = 0$ K a banda de valência está completamente preenchida. b) Preenchimento das bandas em um semicondutor quando $T > 0$ K. Aqui elétrons podem saltar para a banda de condução devido à excitação térmica.



Fonte: Produzida pelo autor.

1.4 Massa efetiva

Para o entendimento das propriedades eletrônicas em materiais semicondutores, é fundamental que tenhamos conhecimento sobre o conceito de massa efetiva, quantidade essa utilizada para modelar o comportamento dos portadores de carga como forma de simplificar a estruturas de bandas. Nesse contexto, chamamos de massa efetiva a massa que uma partícula aparenta ter ao responder a determinada força. Vamos inicialmente investigar o comportamento dos elétrons e buracos quando submetidos a essas forças.

Podemos descrever o movimento de um elétron como um pacote de onda que se propaga com a velocidade de grupo $v_g = \partial\omega/\partial k$. Como a energia do elétron é dada por $E = \hbar\omega$,

temos que

$$\frac{\partial E}{\partial k} = \hbar v_g. \quad (1.18)$$

Se uma força F atua sobre o elétron, a sua energia varia obedecendo $dE = F dx$. Sendo ainda $dx = v_g dt$, chegamos em

$$F = \hbar \frac{dk}{dt}. \quad (1.19)$$

Sendo $p = \hbar k$ o momento do elétron, fica claro que a Eq. (1.19) é exatamente a segunda lei de Newton, em que observamos que a rede não influencia na variação do momento com o tempo, mas a energia em função do momento. Podemos ainda obter uma expressão para a aceleração, sabendo que $a = dv_g/dt$, temos

$$a = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k \partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \frac{dk}{dt}. \quad (1.20)$$

Substituindo essa expressão na Eq. (1.19), chegamos em

$$F = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2} a. \quad (1.21)$$

Lembrando que da segunda lei de Newton, $F = ma$, observamos que um elétrons em um cristal quando submetido a uma força externa, comporta-se como um elétron livre, no entanto, com uma massa efetiva dada por

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2}. \quad (1.22)$$

Perceba que utilizando a relação de dispersão para o elétron livre $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ na última equação, obtemos $m^* = m$, isto é, a massa efetiva é a própria massa do elétron.

Consideramos para obtenção da Eq. (1.22) que a energia só depende do módulo de \mathbf{k} . No entanto, para o caso mais geral, o problema requer que levemos em conta a anisotropia do sistema, o que em outras palavras, significa dizer que a energia depende de k_x, k_y, k_z [37, 38]. Dessa forma, a massa efetiva não atua mais como uma quantidade escalar e sim tensorial, escrita da forma

$$m_{\alpha,\beta}^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k_\alpha \partial k_\beta}, \quad (1.23)$$

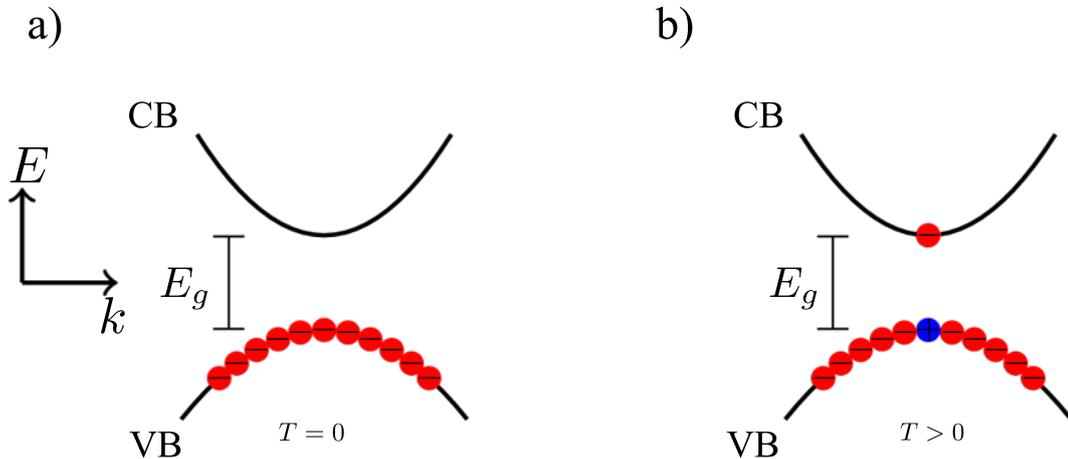
sendo $k_{\alpha(\beta)}$ componentes de \mathbf{k} .

A massa efetiva é usualmente associada às propriedades do material, uma vez que podemos observar, pela Eq. (1.22), que a energia E está relacionada com k e a sua dependência

em estruturas cristalinas pode ser investigada observando a concavidade das bandas, o que sugere que a massa efetiva na banda de condução é diferente na banda de valência, e que se diferencia de um material para outro.

A Fig. 8a) ilustra a configuração para um semicondutor em $T = 0$ quando a banda de valência do material está completamente preenchida por elétrons. Conforme aumentamos a temperatura no sistema, elétrons podem ganhar a energia mínima para saltarem para a banda seguinte, como vemos na Fig. 8b). O vazio deixado pelo elétron após saltar para banda de

Figura 8 – Representação de bandas de valência e condução em um semicondutor. a) Em $T = 0$ a banda de valência está completamente preenchida por elétrons e a banda de condução completamente vazia. b) Para $T > 0$ o elétron pode ganhar energia suficiente para transitar para banda de condução, deixando na banda de valência um estado vazio.



Fonte: Produzido pelo autor.

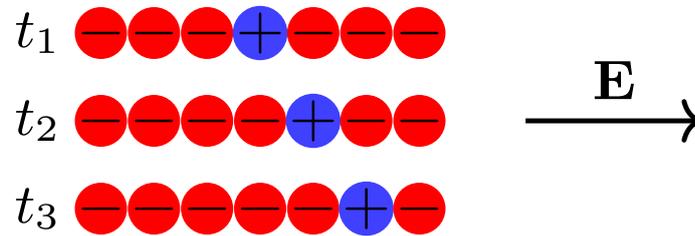
condução é comumente chamado de lacuna ou buraco. Na Fig. 9 observamos como esse estado vazio se comporta na presença de um campo elétrico E aplicado. Perceba que à medida que o tempo decorre, os elétrons passam a ocupar esse estado vazio, deixando outro buraco que posteriormente será preenchido por outro elétron, o que acaba promovendo o deslocando desse estado vazio no mesmo sentido do campo elétrico, fazendo com que na prática, o sistema se comporte como se fosse apenas um buraco, com carga positiva.

Quando a banda de valência está completamente preenchida o somatório sobre todos os autovetores de estado é zero

$$\sum k_i = \sum_{k_i \neq k_e} k_i + k_e = 0, \quad (1.24)$$

onde k_e diz respeito ao vetor de onda de um elétron. Considerando a situação em que o elétron é

Figura 9 – Representação do deslocamento do buraco para diferentes instantes ao ser aplicado um campo elétrico \mathbf{E} .



Fonte: Produzida pelo autor.

excitado e sofre uma transição para a banda de condução, temos

$$\sum_{k_i \neq k_e} k_i = -k_e. \quad (1.25)$$

É interessante notar que o elétron está ausente no estado k_e e o momento associado ao buraco está em $-k_e$, de modo que a posição do buraco é descrita, portanto, como a do elétron ausente.

Assim,

$$k_b = -k_e \quad (1.26)$$

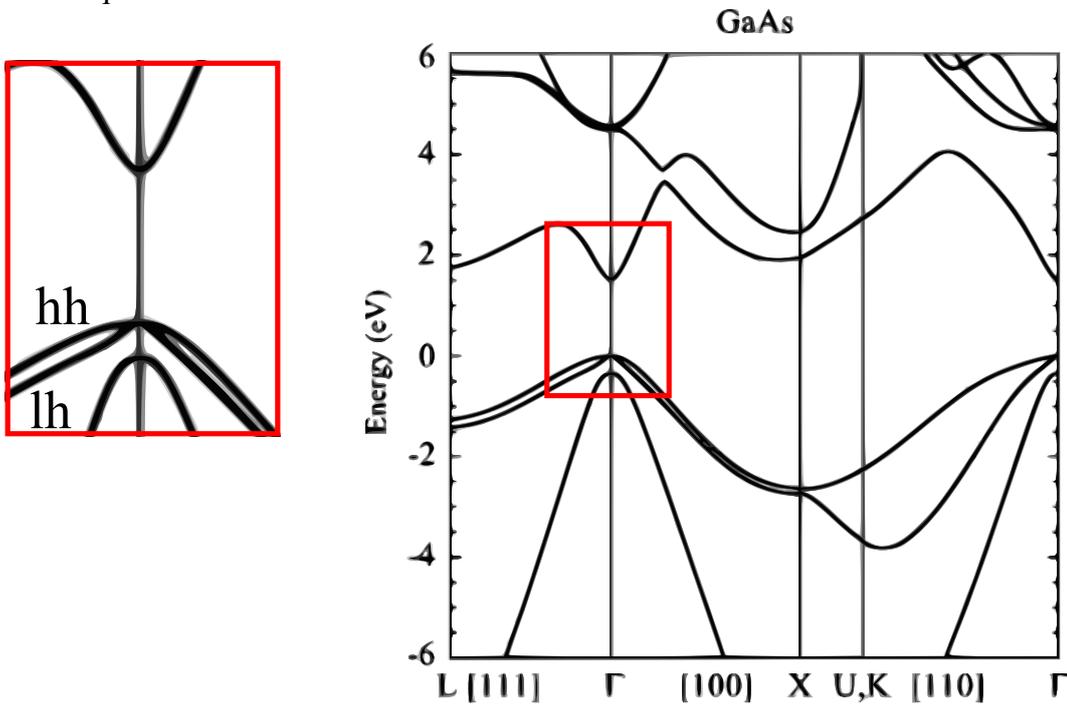
onde k_b é o vetor de onda do buraco. Da Eq. (1.22) vemos que a massa efetiva do elétron na banda de valência é negativa, o que se mostra na curvatura na banda, mas como o momento associado ao buraco nessa banda é, como vimos na Eq. (1.26) $k_b = -k_e$, chegamos que a massa efetiva do buraco é dada por

$$m_b^* = -\frac{\hbar^2}{\partial^2 E / \partial k^2}, \quad (1.27)$$

mostrando que a massa efetiva para os buracos é positiva, resultado coerente com o fato de que, ao aplicarmos um campo elétrico, observamos o buraco se deslocar no sentido em que aponta o campo elétrico aplicado.

A Fig. 10 mostra a estrutura de bandas do GaAs. Duas bandas de valência são mostradas neste material, além disso, a energia mais baixa da banda de condução e a energia mais alta da banda de valência estão no mesmo eixo, tendo assim um *gap* direto. Da Eq. (1.27), podemos notar que a massa efetiva do buraco é tanto maior quanto menor for a curvatura da banda. Para estes, é dado o nome de buraco pesado, ou do inglês, *heavy hole*. Para o buraco que não está nessa banda de menor curvatura, chamamos de buraco leve, ou do inglês, *light hole*. Podemos também observar a presença das bandas de buraco pesado e buraco leves observando a

Figura 10 – Diagrama do GaAs em $T = 0$ K. Observamos no diagrama do GaAs as diferentes curvaturas de banda, e conseqüentemente, buracos com massa efetiva maior que de outros.



Fonte: Adaptado de [39].

curvatura da $E(k)$. Outros materiais como InAs e InP apresentam semelhança com a estrutura de banda do GaAs.

1.5 Éxcitons

Vimos que um elétron pode ser excitado e sofrer uma transição da banda de valência para a banda de condução, deixando um estado vazio, também chamado de buraco, na banda de valência. Esse buraco se comporta como uma partícula de carga positiva. Chamamos de *exciton* esse par elétron-buraco ligados pela interação coulombiana. Um fator marcante para a formação dessa quasi-partícula é que a velocidade do grupo do par elétron-buraco sejam iguais [40].

O conceito de *exciton* foi inicialmente introduzido pelo físico Yakove Frenkel [41], onde a natureza dos chamados "éxcitons de Frenkel" é caracterizada por uma forte ligação elétron-buraco em um sítio da rede. Esses éxcitons são geralmente encontrados em materiais orgânicos e em haletos alcalinos. Posteriormente surgiu um outro modelo de exciton, proposto por Wannier em 1937 [42] que será o que utilizaremos nesse trabalho. No modelo de Wannier, por outro lado, os éxcitons são formados em materiais inorgânicos como o silício (Si) ou o arseneto de gálio (GaAs). Aqui a periodicidade da rede desempenha um papel crucial, uma vez que de acordo

com o teorema de Bloch, os estados eletrônicos formam bandas de energia. Como vimos no modelo da massa efetiva, na qual utilizamos para investigar as propriedades excitônicas, essas bandas no estado fundamental do semicondutor estão totalmente ocupadas ou desocupadas, caracterizando a banda de valência e a banda de condução, respectivamente. Nos éxcitons de Wannier, ao contrário do que ocorre para os éxcitons de Frenkel, a interação coulombiana é fortemente blindada devido à constante dielétrica do material, ocasionando uma fraca interação entre elétrons e buracos, a qual estão espacialmente separadas na rede cristalina.

Os éxcitons de Wannier são fenomenologicamente descritos pelo par elétron-buraco correlacionados pela atração coulombiana. Os elétrons têm carga negativa $-|e|$ e massa positiva m_e geralmente menor do que a massa do elétron livre m_0 devido à interação com os íons da rede. Os buracos, como já visto, possuem carga positiva $|e|$ e massa positiva m_b . A interação entre elétron situado na banda de condução e o buraco na banda de valência é fraca devido à constante dielétrica do semicondutor e o problema se assemelha muito com o que temos no átomo de hidrogênio (problema entre um próton e um elétron).

1.5.1 Modelo de uma banda

No modelo de uma banda, calculamos a energia de ligação do exciton por meio da aproximação da massa efetiva [43] de modo que assumimos que as bandas tanto do elétron quanto do buraco são isotrópicas e com comportamento parabólico. Assim, a descrição matemática do exciton é idêntica à que temos para o problema do átomo de hidrogênio. O Hamiltoniano desse sistema é escrito como

$$H^{exc} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_b}\nabla_b^2 - V(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_b|), \quad (1.28)$$

sendo os sub-índices e e b correspondentes ao elétron e ao buraco, respectivamente. Facilita reescrever a última equação em termos das coordenadas do centro de massa. Dessa forma,

$$M = m_e + m_b, \quad (1.29)$$

é a massa total do par elétron-buraco, e a posição do centro de massa é escrita como

$$\mathbf{R} = \frac{m_e\mathbf{r}_e + m_b\mathbf{r}_b}{m_e + m_b} = \gamma_e\mathbf{r}_e + \gamma_b\mathbf{r}_b, \quad (1.30)$$

com $\gamma_e = 1 - \gamma_b = m_b/(m_e + m_b)$. O momento do centro de massa é escrito em termos dos momentos do elétron e do buraco

$$\mathbf{P} = M\dot{\mathbf{R}} = m_e\dot{\mathbf{r}}_e + m_b\dot{\mathbf{r}}_b = \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_b, \quad (1.31)$$

onde \mathbf{p}_e é o momento do elétron e \mathbf{p}_b do buraco. Observando o movimento relativo entre o par elétron-buraco podemos escrever a massa reduzida μ como $\mu^{-1} = m_e^{-1} + m_b^{-1}$ enquanto que a coordenada espacial relativa entre as duas partículas é $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_b$. Dessa forma, o momento relativo do par é dado por

$$\mathbf{p} = \mu \dot{\mathbf{r}} = \frac{m_e m_b}{m_e + m_b} = \gamma_b \mathbf{p}_e - \gamma_e \mathbf{p}_b. \quad (1.32)$$

Das Eqs. (1.31) e (1.32) é fácil checar a relação entre os momentum do elétron e buraco com do centro de massa e o momentum relativo entre o par elétron-buraco. Dessas substituições, o Hamiltoniano da Eq. (1.28) pode ser escrito de modo que a equação de Schrödinger fica escrita como

$$\left[\frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + V(r) \right] \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E_{nk} \Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}). \quad (1.33)$$

A forma do potencial é $V(r) = e^2/4\pi\epsilon r$ e podemos resolver o problema para duas dimensões, notando que podemos aplicar o método de separação de variáveis na Eq. (1.33) e escrever a função de onda como

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \varphi(\mathbf{r}), \quad (1.34)$$

onde V é o volume do cristal e $\varphi(\mathbf{r})$ satisfaz a equação

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon r} \right] \varphi(\mathbf{r}) = \mathcal{E}_n \varphi(\mathbf{r}). \quad (1.35)$$

A solução analítica desse problema é análogo à do átomo de hidrogênio [44]. Em duas dimensões, os autovalores de (1.35) são dados por [45]

$$\mathcal{E}_n = -\frac{R_y}{(n - 1/2)^2} \quad (1.36)$$

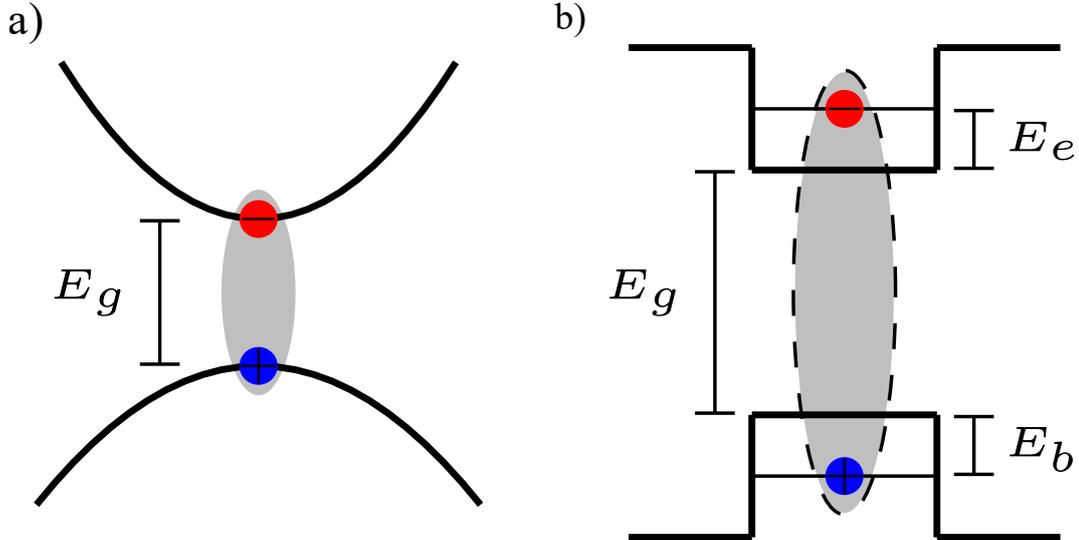
onde R_y é a energia de Rydberg:

$$R_y = \frac{\mu e^4}{2(4\pi\epsilon)^2 \hbar^2}. \quad (1.37)$$

Assim, em materiais onde não há potencial externo de aprisionamento, o buraco está situado no topo da banda de valência, como mostra a Fig. 11a), e a energia de ligação do exciton é calculada como

$$E^{exc} = E_g - |E_{nk}|, \quad (1.38)$$

Figura 11 – Representação de elétrons e buracos em um material *bulk* (lado esquerdo) e confinados em poços quânticos (lado direito).



Fonte: Produzido pelo autor.

onde E_g é a energia do *gap* entre as bandas de valência e condução do material e E_{nk} é a energia de ligação do exciton. Porém, se tratando de heteroestruturas semicondutoras, éxcitons também podem ser produzidos em poços, fios e pontos quânticos. Esses materiais desempenham um importante papel para o avanço da ciência por permitir um aumento considerável na energia de ligação dos éxcitons, isso devido à presença de um potencial de confinamento para os portadores de carga, como mostra a Fig. 11. Nessas heteroestruturas, o elétron e o buraco não ficam situados na borda da banda por conta do potencial de confinamento, pois eles têm uma energia mínima E_e e E_b , respectivamente, devido ao confinamento. Nesse caso, a energia do exciton é calculada como

$$E^{exc} = E_g + E_e + E_b - |E_{nk}|, \quad (1.39)$$

onde as energias do elétron e do buraco são obtidas resolvendo a equação de Schrödinger para o respectivo potencial.

1.6 Condensado de Éxcitons

Em temperaturas extremamente baixas (em torno de nanokelvins), amostras constituídas de átomos bosônicos podem condensar em um único estado, resultando no fenômeno conhecido como BEC. Antes mesmo de sua primeira observação experimental com átomos de ^{87}Rb , o fenômeno de BEC já era utilizado para tentar explicar as peculiaridades do comportamento do hélio líquido, já que nesse estado as partículas podem ganhar propriedades de

superfluidez, isto é, fluírem sem nenhuma fricção. Muito foi discutido nas últimas décadas também sobre a possibilidade de estados excitados não localizados, como as quasi-partículas compostas eletricamente neutras chamadas éxcitons, de satisfazerem as condições necessárias para se obter um BEC de altas temperaturas em semicondutores [46].

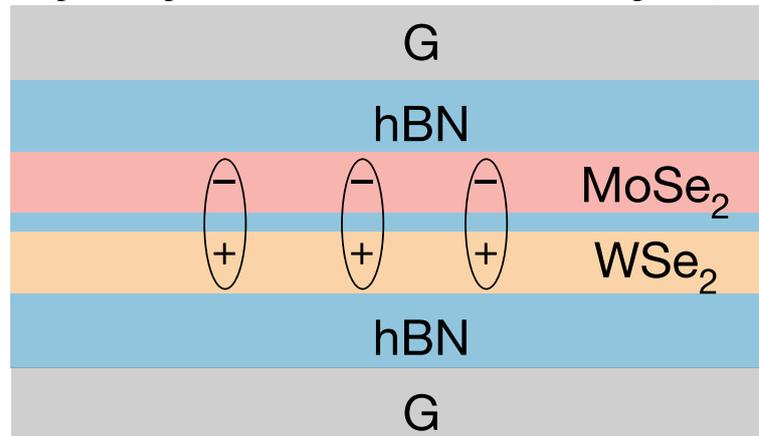
Como já comentado, é facilmente possível criar um exciton apenas fornecendo a energia mínima para o elétron sofrer transição para a banda de condução, de modo que o elétron excitado e o estado desocupado simulado como sendo uma partícula de carga positiva chamada de buraco tenha uma interação coulombiana entre si. Embora quando vistos separadamente elétrons e buracos sejam férmions, esperamos que o exciton tenha o comportamento de uma partícula bosônica devido à soma de *spins*. Possuindo essa natureza, é natural prever que éxcitons possam condensar, com a vantagem deles possuírem uma massa efetiva bem menor do que a massa atômica, resultando em uma possível condensação em temperaturas bem mais altas do que aquelas necessárias para átomos alcalinos.

Uma das dificuldades que surgem no processo de tentar se obter um BEC de éxcitons está relacionado com o fenômeno de recombinação entre elétron e buraco, isto é, o sistema libera energia em forma de luz, num processo chamado de eletroluminescência. A dificuldade está justamente em conseguir resfriar o sistema antes que essa recombinação ocorra. Uma forma de tentar contornar esse problema é separando elétrons e buracos em camadas semicondutoras próximas. Nos anos 70 [47], foi apresentado a ideia de colocar os éxcitons em dois poços quânticos separados, mantendo uma distância suficiente para que ainda houvesse uma energia de interação coulombiana eficiente entre elétrons e buracos [48]. Como consequência, o tempo de vida útil do exciton aumentava. Esses éxcitons produzidos dessa forma são comumente chamado de éxcitons indiretos, ou éxcitons dipolares. A separação espacial entre os elétrons e os buracos em sistemas de poços quânticos fornece uma física única para o BEC produzido a partir dessas partículas, devido à interação repulsiva exciton-exciton dipolar [49], reforçada pela separação espacial dos poços quânticos. Experimentos utilizando um gás de éxcitons quasi-bidimensional em poços quânticos acoplados de GaAs foram produzidos em 2002 [50] e posteriormente em poços quânticos semicondutores acoplados de grafeno [51, 52, 53, 54], porém a fraca ligação do exciton nesses sistemas, limita a temperatura de condensação para em torno de 1K, o que já é uma temperatura bem elevada se comparar com os nanokelvins necessário no caso dos átomos alcalinos.

Outra plataforma que possibilita a existência de éxcitons formados por elétrons e bu-

racos espacialmente separados é aquela formada por semicondutores 2D de TMD's (MX_2 , $M = Mo, W$; $X = S, Se$). Com isso, evidências experimentais de condensação de éxcitons intercambiadas de altas temperaturas em camadas duplas 2D de $MoSe_2 - WSe_2$ foram relatadas recentemente [55]. O dispositivo utilizado consistiu em dois cristais de monocamada TMD alinhados separados por uma barreira de túnel de nitreto de boro hexagonal (hBN) de duas a três camadas, conforme mostra a Fig. 12. A barreira interrompe a recombinação do par elétron-buraco entre

Figura 12 – Ilustração do dispositivo constituído por dois cristais de TMD alinhados em ângulo e separados por barreiras de nitreto de boro hexagonal (hBN).



Fonte: Adaptado de [55].

as camadas, resultando em uma maior densidade de éxcitons. Nas duas extremidades foram colocados *gates* simétricos feitos de eletrodos de grafeno, que servem para controlar a densidade de elétrons e buracos na camadas do dispositivo. Com isso, observaram uma grande corrente elétrica proveniente do tunelamento dos portadores de carga entre as camadas, onde essa corrente está relacionada apenas com a densidade de éxcitons. Combinando mensurações de tunelamento e eletroluminescência, pode-se observar que a eletroluminescência mostra uma dependência do limiar da densidade do éxciton, uma dependência sensível do desequilíbrio de carga e flutuações críticas consistentes com a condensação do éxciton. Estas observações persistiram até cerca de 100 K.

1.7 Supersólidos em condensados de Éxcitons

1.7.1 *Um pouco de história*

Em nossa visão clássica do mundo, entendemos sólidos como objetos rígidos, enquanto que a capacidade de fluir está relacionada com os líquidos. Apesar dessa visão poder

serguramente ser empregada em nosso cotidiano, essa distinção é rompida em baixas temperaturas, quando os efeitos quânticos se tornam cada vez mais predominantes, possibilitando inusitadas formas da matéria, como é o caso do supersólido. O supersólido é um estado da matéria com característica peculiar, onde as partículas formam uma estrutura ordenada no espaço, tais como os cristais, porém simultaneamente, possuem propriedades de um superfluido, isso é, não possuem qualquer viscosidade, caracterizando uma física exótica e que até os dias atuais, continua atraindo interesse da comunidade científica.

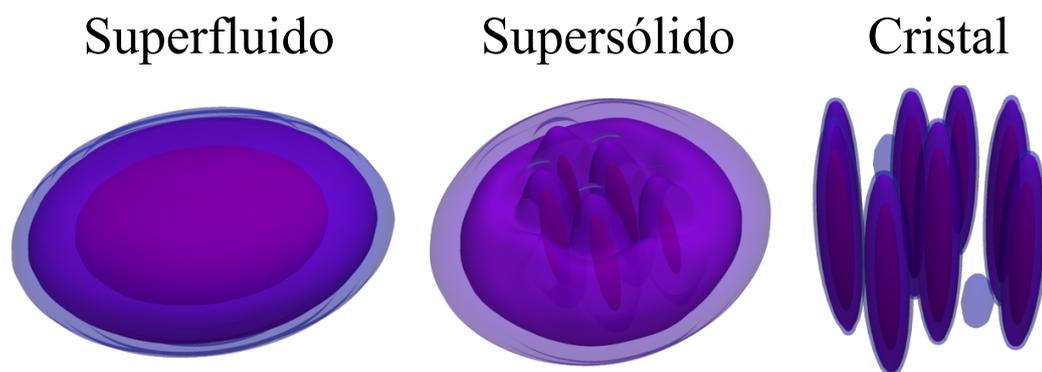
Embora as condições que levam à transição para uma fase supersólida esteja atualmente sendo alvo de intensa pesquisa em várias plataformas experimentais, não podemos dizer que a busca por este estado seja propriamente atual. Os debates que guiaram os cientistas até as atuais evidências experimentais do supersólido se iniciaram há pelo menos cinco décadas [56], com o ponto inicial para tais pesquisas no campo podendo ser atribuído aos experimentos com o ^4He , onde muito se discutia sobre a conexão do BEC e comportamentos contra-intuitivos observados nesses sistemas. Daí em diante, fascinados com a nova física apresentada, cientistas se dedicaram a encontrar um ambiente onde pudesse ser observados as características de supersólidos.

Evidências de supersolidez foram encontradas em BEC's de átomos manipulados por luz, produzidos pelo grupo do professor do *Massachusetts Institute of Technology*, Wolfgang Ketterle [57], onde partiram de um BEC de átomos de sódio, dotado de propriedades superfluídas. Em seguida, por meio de técnicas de laser, manipularam o movimento dos átomos do condensado, introduzindo acoplamento spin-órbita. Com um sistema inicial de lasers, alteraram o número de spin de metade dos átomos, resultando em uma mistura de dois BEC's, simultaneamente. Observaram com isso a densidade do sólido se apresentar em faixas, e quando jogaram luz no sistema, perceberam uma deflexão, sugerindo o surgimento de um novo material. Um outro experimento realizado no mesmo ano pelo grupo do professor Tilman Esslinger *ETH Institute for Quantum Electronics*, [58], também partiu de um sistema de BEC, mas dessa vez, de átomos de rubídio. Com os átomos em câmaras de ressonância óptica que se cruzam, cada uma sendo constituída de dois pequenos espelhos opostos, incidiram sobre o condensado uma luz laser que se espalhou em ambas as câmaras, com isso, foi adotado um padrão regular, semelhante a um cristal. Embora as assinaturas de supersolidez tenham sido registradas nesses dois experimentos, a fraca interação entre os bósons em um BEC de gás atômico e o fato dos átomos serem muito diluídos não apresentam, à primeira vista, a possibilidade de uma modulação de densidade

nesses sistemas. No entanto, um possível caminho para encontrar um supersólido surgiu quando foi proposta uma maneira de se obter a interação necessária entre átomos na forma de uma interação dipolar de longo alcance [59, 60], isso porque nesse sistema, as interações dipolares entre os átomos induzem o chamado mínimo de roton, que será abordado com mais detalhes logo a frente. Ainda em sistemas ultrafrios, peculiares comportamentos da matéria em escala macroscópica, como a formação de gotículas quânticas dipolares a partir de BEC's de ^{164}Dy [61]. Experimentos produzidos nesses sistemas confirmaram a presença de supersolidez [62, 63, 64], embora supersólidos dessas gotículas quânticas ainda estejam envolto de muitas dúvidas, como por exemplo, a influência de uma orientação arbitrária do campo polarizador externo, uma vez que os experimentos foram realizados com esse campo externo apontando em uma das três direções de simetria da armadilha que aprisiona o sistema. Desde então, BECs de átomos com grande momentos de dipolos magnéticos se tornaram um dos melhores ambientes para se procurar propriedades de um supersólido.

A Fig. (13) ilustra três fases distintas de um gás de Bose dipolar.

Figura 13 – Exemplo de três fases diferentes para BECs dipolar em que as partículas estão confinadas em uma armadilha em geometria de panqueca. Essas imagens representam o perfil do estado fundamental do sistema, obtida a partir da solução da equação de Gross-Pitaevskii.



Fonte: Adaptado de [65].

Todavia, evidências do fenômeno de supersolidez não se concentram apenas em sistemas de BECs atômicos. O fenômeno de BEC oferece uma notória relação entre a mecânica e a estatística de partículas, e sob certas circunstâncias [66] foi previsto que os estados ligados chamados de éxcitons também viriam a sofrer um BEC em semicondutores. Considerando um sistema de bicamadas, espera-se que o BEC de éxcitons seja uniforme e apresente característica superfluida quando a distância entre as duas camadas é muito menor do que a distância entre as

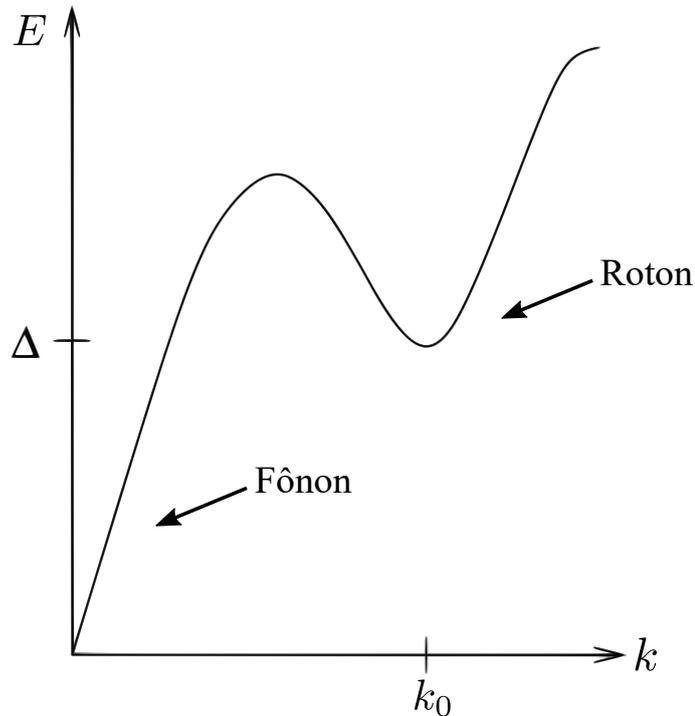
partículas [67]. Resultados teóricos foram alcançados nesses sistemas, onde baseando-se nos princípios gerais, uma fase supersólida foi obtida para uma baixa densidade de elétron-buraco [68]. No entanto, toda a discussão para obtenção do supersólido foi feita na ausência de desordem no sistema, isto é, considerando a temperatura crítica para um BEC em duas dimensões $T = 0$. Uma das indicações que está atrelada ao surgimento de uma fase com ordem cristalina e de longo alcance tanto no espaço real quanto no espaço recíproco e que venha sustentar um fluxo sem fricção é que o sistema apresente uma instabilidade de *roton*. Com isso, foi previsto teoricamente que um sistema híbrido de um condensado de éxcitons em poços quânticos na presença de um gás de elétrons 2D fornece as condições para a transição para a fase supersólida [69]. Para esse trabalho, baseamos nossos estudos das condições de supersolidez a partir de condensados de éxcitons em semicondutores considerando esse sistema híbrido mencionado, embora mais recentemente traços de supersólidos em heteroestruturas semicondutoras mais simples tenham também sido previstas [70].

1.7.2 *Rotons e supersolidez*

Rotons são essencialmente um tipo especial de excitações coletivas, bem como fônons, semelhante às partículas (isso porque elas carregam momento e energia bem definidas, sendo assim referidas como quasi-partículas) e que estão presentes nos conceitos usados para descrever as propriedades de superfluidez do ^4He [71] bem como surgem em sistemas de BECs onde a interação dipolar entre as componentes do sistema desempenham um papel relevante [60] (BECs de átomos com alto momento de dipolo magnético). O que caracteriza essa quasi-partícula chamada roton é a sua relação de dispersão, que pode ser visto na Fig. 14, já que essa excitação apresenta um mínimo de energia com um momento finito (também chamado de momento de roton), em contraste com a relação de dispersão dos fônons, onde temos que sua energia geralmente aumenta com o momento.

O inverso do momento estabelece um comprimento de onda correspondente ao período da modulação espacial associada à excitação. Assim, no caso do roton, que exibe um mínimo de energia, o sistema é preferencialmente excitado com uma modulação de comprimento de onda correspondente a esse mínimo de energia, o comprimento de onda do roton. O comportamento atípico dos rotons exprime a predisposição dos fluidos de produzir uma modulação de densidade de comprimento de onda curto no espaço, precedente de uma instabilidade de cristalização. Isso está relacionado com a significativa correlação entre as partículas, em função

Figura 14 – Representação do espectro de excitações elementares de ^4He superfluido. Na figura, Δ representa a energia do mínimo de roton com momento $p = \hbar k$.



Fonte: Adaptado de [72].

da alta densidade do fluido.

As fronteiras para o estudo de novas fases da matéria foram expandidas com os avanços teóricos e experimentais em sistemas ultrafrios [57, 58]. Com isso, outras plataformas foram sendo exploradas, e métodos para reproduzir as condições que levam BECs de átomos dipolares a apresentarem traços de supersolidez foram desenvolvidos [62, 63, 64]. BECs de éxcitons em semicondutores se tornaram candidatos promissores para isso (ver [73, 74]), e um dos fatores que pode ser de antemão mencionado, é fato da massa efetiva dos éxcitons ser consideravelmente menor que a de átomos frios, promovendo a possibilidade de BEC com temperaturas mais altas. Porém, o tempo de vida dos éxcitons costuma não ser longo o suficiente para chegar na fase condensada e o par elétron-buraco acabam recombinando e emitindo a energia. Contudo, éxcitons com elétrons e buracos separados espacialmente foram usados para contornar essa dificuldade [47, 48], e assim, o processo de recombinação é suprimido resultando num tempo de vida maior dos éxcitons.

1.8 Escopo da Dissertação

Neste trabalho estudamos sistemas formados por condensados de éxcitons que apresentem condições para que ocorra uma transição para uma fase supersólida. Para isso, o Capítulo 2 desta dissertação se dedica a descrever a técnica matemática utilizada como ferramenta para resolver numericamente o problema abordado. O método adotado para tal objetivo sintetiza a técnica da propagação no tempo imaginário, onde a partir da implementação de um código computacional, podemos avaliar o estado fundamental do sistema.

No Capítulo 3, apresentamos os resultados obtidos baseados em um sistema particular onde um gás de elétrons 2D interage remotamente com um sistema de éxcitons condensados. Esse sistema inspirou a construção de uma função matemática aproximada para o potencial. A partir dela, foi possível investigar o efeito da interação entre os éxcitons para vários valores dos parâmetros da função de interação.

Finalmente, apresentamos nossas conclusões a respeito do tema abordado e sugerimos a possibilidade de estudar as condições e efeitos para a transição para uma fase supersólida uma outra plataforma, chamada de superredes de moiré.

2 TÉCNICA *SPLIT OPERATOR*

A técnica *Split operator* corresponde a uma técnica numérica que nos permite resolver a equação de Schrödinger em uma situação arbitrária por meio da implementação do operador de evolução temporal. Essa técnica é amplamente útil para o estudo das propriedades eletrônicas em baixa dimensão. Pode ser utilizada, por exemplo, para investigar a dinâmica de pacotes de ondas de espinores [75] e em estudos de caos quântico [76].

Aqui, construímos duas formas de aplicar a técnica *Split operator*: a primeira consiste em utilizar a forma de Cayley para a exponencial. Esse tratamento possibilita a aplicação do método em sistemas em que há uma quebra da invariância translacional, por exemplo, devido à potenciais externos [77]. A segunda forma é por meio de uma transformada de Fourier, fato que obriga as condições de contorno serem periódicas. Ao final, descrevemos o processo de evolução no tempo imaginário, que nos permite investigar como a função de onda se comporta no decorrer do tempo.

2.1 Operador evolução temporal

Seja um *ket* no estado $|\alpha\rangle$. Em um tempo posterior não necessariamente o sistema permanecerá nesse estado. Então, em um tempo decorrente, tomemos que o *ket* de estado do sistema é

$$|\alpha, t_0; t\rangle, (t > t_0) \quad (2.1)$$

onde t_0 é o instante em que o sistema se encontra. Considerando que o tempo é um parâmetro contínuo, temos que

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\alpha, t_0; t\rangle = |\alpha, t_0; t_0\rangle = |\alpha, t_0\rangle \quad (2.2)$$

Queremos estudar como o sistema se comporta ao evoluir no tempo de t_0 a t . O *ket* de estado $|\alpha, t_0\rangle$ e o *ket* de estado $|\alpha, t_0; t\rangle$ estão relacionados por um operador chamado de operador evolução temporal, de modo que

$$|\alpha, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (2.3)$$

Esse operador evolução temporal obedece a algumas propriedades. Uma das fundamentais é a propriedade de unitariedade que surge da conservação da probabilidade,

$$\mathcal{U}^\dagger(t, t_0)\mathcal{U}(t, t_0) = 1. \quad (2.4)$$

Outra propriedade de \mathcal{U} é a propriedade de composição,

$$\mathcal{U}(t_2, t_0) = \mathcal{U}(t_2, t_1)\mathcal{U}(t_1, t_0), (t_2 > t_1 > t_0) \quad (2.5)$$

que significa que se quisermos estudar a evolução temporal do sistema de t_0 a t_2 obtemos o mesmo resultado se consideramos uma evolução de t_0 a t_1 e depois de t_1 a t_2 .

É pertinente que escrevamos o operador evolução temporal infinitesimal, desse modo,

$$|\alpha, t_0; t_0 + dt\rangle = \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) |\alpha, t_0\rangle \quad (2.6)$$

onde temos

$$\lim_{dt \rightarrow 0} \mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 \quad (2.7)$$

Esperando que a diferença entre $\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0)$ e 1 seja de primeira ordem em dt e o hamiltoniano seja responsável por gerar evolução temporal, todas as condições são satisfeitas por

$$\mathcal{U}(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{iHdt}{\hbar} \quad (2.8)$$

em que supomos o operador hamiltoniano H sendo hermitiano.

2.2 A equação de Schrödinger

Considerando a propriedade de composição de \mathcal{U} , temos, com base nas eqs. (2.5, 2.8), que

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) = \mathcal{U}(t + dt, t)\mathcal{U}(t, t_0) = \left[1 - \frac{iHdt}{\hbar}\right] \mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.9)$$

daí, temos

$$\mathcal{U}(t + dt, t_0) - \mathcal{U}(t, t_0) = -\frac{iHdt}{\hbar} \mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.10)$$

ou ainda, escrevendo na forma diferencial,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{U}(t, t_0) = H\mathcal{U}(t, t_0) \quad (2.11)$$

que é a equação de Schrödinger para o operador evolução temporal. Escrevamos agora a equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = H\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.12)$$

sendo $\Psi(\mathbf{r}, t)$ a solução da eq. (2.12), temos

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{U}(t, t_0)\Psi(\mathbf{r}, t_0), \quad (2.13)$$

onde $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ retrata a condição inicial.

Para obter as soluções formais da equação de Schrödinger para o operador evolução temporal, devemos considerar três casos, cada um resultando em uma forma possível para $\mathcal{U}(t, t_0)$ a depender da Hamiltoniano específico para cada caso.

- Caso 1: O operador Hamiltoniano é independente do tempo, isto é, $V = V(\mathbf{r})$. Desta forma,

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp\left[-\frac{iH(t - t_0)}{\hbar}\right]. \quad (2.14)$$

- Caso 2: O Hamiltoniano depende do tempo e $[H(t), H(t')] = 0 \text{ p/ } \forall t, t'$. Assim,

$$\mathcal{U}(t, t_0) = \exp\left[-\left(\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt' H(t')\right]. \quad (2.15)$$

- Caso 3: O Hamiltoniano depende do tempo, porém $[H(t), H(t')] \neq 0$. Neste caso,

$$\mathcal{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right) \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1)H(t_2) \cdots H(t_n). \quad (2.16)$$

O passo a passo das demonstrações pode ser acompanhado nos capítulos 2 e 4 de [81].

Nosso interesse prático corresponde ao caso 1, onde o Hamiltoniano não depende explicitamente do tempo. Assim, executamos a eq. (2.13) com $\mathcal{U}(t, t_0)$ dado pela eq. (2.14), sendo esse nosso problema numérico, trabalhado a partir da chamada técnica *Split Operator*.

2.3 Construção da técnica *Split Operator*

No estudo aqui abordado, estamos trabalhando com o problema em que o sistema é conservado, isto é, o Hamiltoniano independe explicitamente do tempo,

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

e portanto, para o cálculo da evolução temporal da função de onda, executamos a Eq. (2.13) com base na Eq. (2.14), que apresenta a forma do operador evolução temporal $\mathcal{U}(t, t_0)$ para o caso em que $V = V(\mathbf{r})$, de modo que

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} H \Delta t\right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.18)$$

Como é possível observar na Eq. (2.17), a Hamiltoniana é a soma da energia cinética, $T = p^2/2m$, com a energia potencial $V = V(\mathbf{r})$. Porém, um problema surge ao querer separar a exponencial de um operador que é constituído pela soma de dois operadores que não comutam. Para o caso em que dois operadores A e B comutam, temos a relação,

$$\exp[A + B] = \exp[A]\exp[B] \Leftrightarrow [A, B] = 0. \quad (2.19)$$

Como a exponencial da Hamiltoniana $H = T + V$ não pode ser separada dessa forma, já que T e V não comutam, podemos nos apoiar em uma solução que faz uso de uma forma aproximada, chamada aproximação de Suzuki [78] para o cálculo da exponencial

$$\exp \left[\alpha \sum_{i=1}^n A_i \right] = f_m \{ A_j \} + \mathcal{O}(\alpha^{m+1}), \quad (2.20)$$

onde é definido um aproximante $f_m(A_1, A_1, \dots, A_q)$ e $\mathcal{O}(\alpha^{m+1})$ representa um erro da ordem de α^{m+1} . Para nosso interesse prático, utilizaremos o aproximante $f_2(A_1, A_2)$, onde $m = 2$ foi escolhida para assegurar um erro máximo de Δt^3 . A forma de $f_2(A_1, A_2)$ é

$$f_2(A_1, A_2) = \exp \left[\frac{\alpha}{2} A_1 \right] \exp[\alpha A_2] \exp \left[\frac{\alpha}{2} A_1 \right]. \quad (2.21)$$

Com isso, foi possível achar uma solução para o problema que surge ao querer separar a exponencial da soma de operadores que não comutam, como é o caso de $T + V$, uma vez que temos uma forma de escrever $\exp[\alpha \sum A_j]$ como aplicações sequenciais de exponenciais que carregam a dependência de somente um dos operadores.

Podemos então escrever a Eq. (2.14), como

$$\mathcal{U}(t + \Delta t, t) = \exp \left[-i \left(\frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \frac{\Delta t}{\hbar} \right], \quad (2.22)$$

onde $\mathbf{r} = (x, y, z)$. Tendo em vista as Eqs. (2.20) e (2.21), ficamos com

$$\mathcal{U}(t + \Delta t, t) = \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] \exp \left[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar} \right] \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] + \mathcal{O}(\Delta t^3), \quad (2.23)$$

e então obtemos a forma para $\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t)$,

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) &= \mathcal{U}(t + \Delta t, t)\Psi(\mathbf{r}, t) \\ &= \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] \exp \left[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar} \right] \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (2.24)$$

que para um Δt suficientemente pequeno, pode ser aproximado para

$$\Psi(x, y, z, t + \Delta t) \cong \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] \exp \left[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar} \right] \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] \Psi(x, y, z, t). \quad (2.25)$$

Repare que agora calcular $\Psi(x, y, z, t + \Delta t)$ corresponde a três sucessivas aplicações de operadores exponenciais. Na primeira etapa, nós apenas multiplicamos a função de onda pelo operador exponencial mais a direita da eq. (2.25), obtendo

$$\xi(x, y, z, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] \Psi(x, y, z, t) \quad (2.26)$$

o que resulta em

$$\Psi(x, y, z, t + \Delta t) \cong \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] \exp \left[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar} \right] \xi(x, y, z, t + \Delta t). \quad (2.27)$$

No próximo passo, multiplicamos ξ pelo operador exponencial que carrega o termo da energia cinética. Para isso, podemos resolver permanecendo no espaço real, e utilizar a forma de Cayley da exponencial. Outra forma de realizar essa multiplicação é a partir da transformada de Fourier de ξ , onde agora trabalhamos com ela no espaço recíproco, e as exponenciais da parte cinética também são escritas no espaço recíproco. Detalhamos a primeira forma a seguir.

2.3.1 Método de Cayley

Para resolver a partir do método de Cayley, consideramos a aplicação do operador exponencial da parte cinética com ξ , de modo que podemos escrever, com base na Eq. (2.27),

$$\eta(x, y, z, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{ip^2\Delta t}{2m\hbar} \right] \xi(x, y, z, t + \Delta t) \quad (2.28)$$

e como $[p_i, p_j] = 0$, podemos fazer a separação

$$\begin{aligned} \eta(x, y, z, t + \Delta t) &= \exp \left[-\frac{i(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)\Delta t}{2m\hbar} \right] \xi(x, y, z, t + \Delta t) \\ &= \exp \left[-\frac{ip_x^2\Delta t}{2m\hbar} \right] \exp \left[-\frac{ip_y^2\Delta t}{2m\hbar} \right] \exp \left[-\frac{ip_z^2\Delta t}{2m\hbar} \right] \xi(x, y, z, t + \Delta t) \end{aligned} \quad (2.29)$$

Para resolver a eq. (2.29), devemos fazer as aplicações das exponencias, onde da primeira aplicação da exponencial, mais à direita, temos

$$a^{(1)}(x, y, z, t + \Delta t) = \exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \xi(x, y, z, t + \Delta t), \quad (2.30)$$

e assim seguimos aplicando, onde para a segunda exponencial,

$$a^{(2)}(x, y, z, t + \Delta t) = \exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] a^{(1)}(x, y, z, t + \Delta t), \quad (2.31)$$

e então, obtemos η fazendo

$$\eta(x, y, z, t + \Delta t) = \exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] a^{(2)}(x, y, z, t + \Delta t). \quad (2.32)$$

Podemos resolver a Eq. (2.30) fazendo uso de uma transformada de Fourier, no entanto, aqui partiremos para a solução utilizando a forma aproximada da exponencial

$$\exp[\alpha A] = \frac{\left[1 + \frac{\alpha A}{2}\right]}{\left[1 - \frac{\alpha A}{2}\right]} + \mathcal{O}(\alpha^4) \quad (2.33)$$

de modo que ficamos, considerando um intervalo Δt pequeno,

$$a^{(1)}(x, y, z, t + \Delta t) = \left[\frac{1 + \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}}{1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}} \right] \xi(x, y, z, t + \Delta t), \quad (2.34)$$

dessa forma, chegamos em,

$$\left[1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] a^{(1)}(x, y, z, t + \Delta t) = \left[1 + \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \xi(x, y, z, t + \Delta t). \quad (2.35)$$

E portanto, obtemos a equação diferencial,

$$a^{(1)}(x, y, z, t + \Delta t) - \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} a^{(1)}(x, y, z, t + \Delta t) = \xi(x, y, z, t + \Delta t) + \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \xi(x, y, z, t + \Delta t) \quad (2.36)$$

Para resolver a eq. (2.36), estabelecemos que o sistema que estamos lidando está contido dentro de uma caixa de dimensões L_x, L_y, L_z , de modo que os intervalos,

$$0 \leq x \leq L_x, \quad (2.37)$$

$$0 \leq y \leq L_y,$$

$$0 \leq z \leq L_z,$$

são discretizados em N_x, N_y, N_z pontos, respectivamente. A distância de um ponto a seu vizinho é, portanto,

$$\Delta x = L_x/N_x, \quad (2.38)$$

$$\Delta y = L_y/N_y,$$

$$\Delta z = L_z/N_z.$$

Sendo $f_{i,j,k}$ uma função definida no intervalo discretizado (2.37), onde $i = 1, 2, \dots, N_x$, $j = 1, 2, \dots, N_y$ e $k = 1, 2, \dots, N_z$, podemos escrever a forma de diferença finita das derivadas [79],

$$\frac{\partial}{\partial z} f_{i,j,k} = \frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k-1}}{2\Delta z} + \mathcal{O}(\Delta z^2) \quad (2.39)$$

e

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f_{i,j,k} = \frac{f_{i,j,k+1} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j,k-1}}{\Delta z^2} + \mathcal{O}(\Delta z^2), \quad (2.40)$$

de modo que podemos escrever a eq. (2.36) na forma,

$$-\gamma_z a_{i,j,k-1}^{(1)} + (1 + 2\gamma_z) a_{i,j,k}^{(1)} - \gamma_z a_{i,j,k+1}^{(1)} = \gamma_z \xi_{i,j,k-1} + (1 - 2\gamma_z) \xi_{i,j,k} + \gamma_z \xi_{i,j,k+1} \quad (2.41)$$

onde $\gamma_z = i\hbar\Delta t/4m\Delta z^2$. Considerando condições de contorno finita, temos

$$\Psi(z \leq 0) = \Psi(z \geq L_z) = 0 \quad (2.42)$$

onde $a_{i,j,0}^{(1)} = a_{i,j,N_z+1}^{(1)} = 0$ bem como $\xi_{i,j,0} = \xi_{i,j,N_z+1} = 0$. Com base nessas condições, chegamos a

$$\begin{pmatrix} A_1 & A_2 & 0 & 0 & \cdots \\ A_2 & A_1 & A_2 & 0 & \cdots \\ 0 & A_2 & A_1 & A_2 & \cdots \\ 0 & 0 & A_2 & A_1 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & A_2 & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ a_{i,j,k-1}^{(1)} \\ a_{i,j,k}^{(1)} \\ a_{i,j,k+1}^{(1)} \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A'_1 & A'_2 & 0 & 0 & \cdots \\ A'_2 & A'_1 & A'_2 & 0 & \cdots \\ 0 & A'_2 & A'_1 & A'_2 & \cdots \\ 0 & 0 & A'_2 & A'_1 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & A'_2 & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \xi_{i,j,k-1} \\ \xi_{i,j,k} \\ \xi_{i,j,k+1} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

onde os elementos de matriz são,

$$A_1 = 1 + 2\gamma_z \quad A_2 = -\gamma_z \quad (2.44)$$

e

$$A'_1 = 1 - 2\gamma_z \quad A'_2 = \gamma_z \quad (2.45)$$

A matriz apresentada na Eq. (2.43) é uma matriz tridiagonal. É possível determinar $a^{(1)}$ resolvendo $N_x \times N_y$ sistemas, cada um contendo N_z equações e N_z incógnitas. Repare ainda podemos simplesmente multiplicar o lado direito de (2.43) já que conhecemos $\xi(x, y, z, t + \Delta t)$. Usando subrotinas computacionais [80], podemos resolver numericamente a equação da matriz tridiagonal para $a^{(1)}(x, y, z, t + \Delta t)$. Podemos determinar tanto $a^{(2)}$ quanto η , apresentados nas eqs. (2.31) e (2.32), seguindo os passos que fizemos para $a^{(1)}$, apresentado na eq. (2.30).

Obtido $\eta(x, y, z, t + \Delta t)$, temos condições de determinar a função de onda no tempo $t + \Delta t$, fazendo a aplicação

$$\Psi(x, y, z, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] \eta(x, y, z, t + \Delta t) \quad (2.46)$$

Portanto, conseguimos resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo a partir do cálculo de sistemas de matrizes tridiagonais, de modo que a evolução temporal da função de onda é obtido repetindo o processo em um *loop*.

2.3.2 Método da transformada de Fourier

Podemos, ao invés de trabalhar com as exponenciais de derivadas, como feito na subseção anterior, realizar a multiplicação,

$$\begin{aligned}\eta(x, y, z, t + \Delta t) &= \exp\left[-\frac{i(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)\Delta t}{2m\hbar}\right] \xi(x, y, z, t + \Delta t) \\ &= \exp\left[-\frac{ip_x^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{ip_y^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{ip_z^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \xi(x, y, z, t + \Delta t),\end{aligned}\quad (2.47)$$

tomando a transformada de Fourier (TF) de ξ . Portanto, ficamos com uma simples multiplicação de ξ com a exponencial da parte cinética, que pode ser expressa no espaço recíproco, lembrando da fórmula de de Broglie, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Dessa forma, sabendo que a transformada de Fourier é escrita como

$$\tilde{f}(\mathbf{k}) = \mathcal{F}\{f(\mathbf{r})\} = \int \frac{d^3r}{(2\pi)^3} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f(\mathbf{r}), \quad (2.48)$$

e sua inversa,

$$f(\mathbf{r}) = \mathcal{F}^{-1}\{\tilde{f}(\mathbf{k})\} = \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{f}(\mathbf{k}), \quad (2.49)$$

a eq. (2.47) pode ser reescrita como,

$$\tilde{\eta}(k_x, k_y, k_z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i\hbar k_x^2 \Delta t}{2m}\right] \exp\left[-\frac{i\hbar k_y^2 \Delta t}{2m}\right] \exp\left[-\frac{i\hbar k_z^2 \Delta t}{2m}\right] \tilde{\xi}(k_x, k_y, k_z, t + \Delta t). \quad (2.50)$$

Agora o que nos resta é multiplicar, começando da terceira exponencial,

$$b^{(1)}(k_x, k_y, k_z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i\hbar k_z^2 \Delta t}{2m}\right] \tilde{\xi}(k_x, k_y, k_z, t + \Delta t). \quad (2.51)$$

Realizando a segunda multiplicação, temos

$$b^{(2)}(k_x, k_y, k_z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i\hbar k_y^2 \Delta t}{2m}\right] b^{(1)}(k_x, k_y, k_z, t + \Delta t). \quad (2.52)$$

E por fim, para determinar $\tilde{\eta}$, fazemos

$$\tilde{\eta}(k_x, k_y, k_z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i\hbar k_x^2 \Delta t}{2m}\right] b^{(2)}(k_x, k_y, k_z, t + \Delta t). \quad (2.53)$$

Para que determinemos a função de onda da eq. (2.27), precisamos agora tomar a transformada inversa (TFI) de $\tilde{\eta}(\mathbf{k})$,

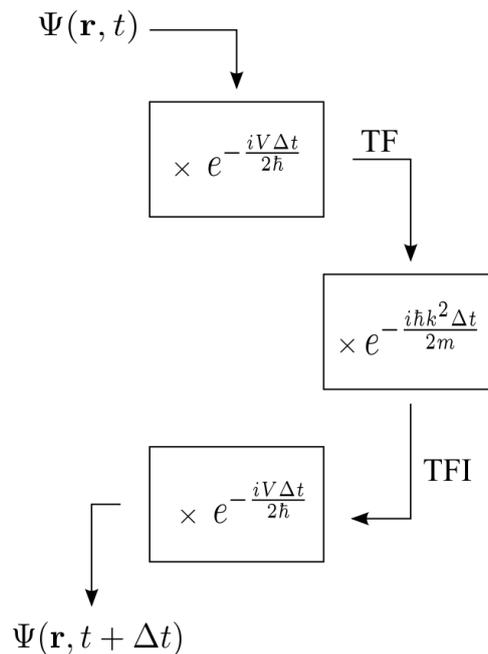
$$\eta(\mathbf{r}) = \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{\eta}(\mathbf{k}), \quad (2.54)$$

e então, finalmente obtemos,

$$\Psi(x, y, z, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{iV\Delta t}{2\hbar} \right] \eta(x, y, z, t + \Delta t). \quad (2.55)$$

Uma forma condensada de descrever os passos que fizemos pode ser apresentada na esquematização da Fig. 15. O processo consistiu em multiplicarmos a função de onda no espaço real com o operador exponencial do espaço real. Para driblar as derivadas que apareceriam, passamos a trabalhar no espaço recíproco através de uma transformada de Fourier, onde após mudarmos para esse espaço, multiplicamos a função de onda pelo operador energia cinética, também representado no espaço recíproco. Por fim, retornamos para o espaço real e por meios de uma transformada inversa e fizemos outra aplicação do operador exponencial retratado na eq. (2.55).

Figura 15 – Representação esquemática do processo para obtenção da função de onda no tempo $t + \Delta t$.



Fonte: Produzida pelo autor.

Por meio do método de transformada de Fourier, estamos necessariamente assumindo que nossas condições de contorno são periódicas, ao contrário de como fizemos na subseção anterior. No entanto, é válido ressaltar que poderíamos também considerar as condições de contorno periódicas e obter relações matriciais da forma semelhante ao que é apresentada na eq.

(2.43).

2.4 Evolução no tempo imaginário

Se tivéssemos todos os autoestados do sistema, poderíamos obter o estado fundamental propagando uma função de onda arbitrária no tempo imaginário. Como os autoestados de um operador hermitiano formam uma base ortonormal completa, podemos escrever qualquer função arbitrária como combinação linear desses autoestados,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n \psi_n(\mathbf{r}) \exp \left[-\frac{iE_n t}{\hbar} \right], \quad (2.56)$$

em que os ψ_n são as autofunções e o E_n a autoenergia no n -ésimo autoestado. Dessa forma, fazendo $t = -i\tau$, a eq. (2.56) pode ser reescrita como,

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp \left[-\frac{E_0 \tau}{\hbar} \right] \left\{ c_0 \psi_0 + \sum_n c_n \psi_n \exp \left[-\frac{(E_n - E_0) \tau}{\hbar} \right] \right\}. \quad (2.57)$$

Como $n > 0$ o que faz com que $E_n - E_0 > 0$, dessa forma, ao fazermos $\tau \rightarrow \infty$, o termo que representa o estado fundamental passa a ter cada vez mais relevância quando comparado com os demais termos. À medida que o tempo imaginário evolui, devemos ir normalizando a função de onda de instante em instante, de modo que observaremos a função de onda inicial propagada no tempo imaginário convergindo para a função de onda do estado fundamental.

Mas poderíamos não ter conhecimento a respeito dos autoestados do sistema, o que se tornaria um problema ao tentarmos resolver através de uma combinação linear conforme mostra a Eq. (2.56). No entanto, devemos ainda assim, obter a função de onda do estado fundamental ao deixar que a uma onda inicial arbitrária se propague no tempo imaginário. Podemos partir de outro método de propagações para estudar o problema, por exemplo, consideremos a evolução no tempo mostrada na Eq. (2.13), que por conveniência reescrevemos a seguir

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \mathcal{U}(t, t_0) \Psi(\mathbf{r}, t_0), \quad (2.58)$$

onde mantemos nosso interesse em sistemas cujo Hamiltoniana independe do tempo, o que nos faz trabalhar com a expressão para $\mathcal{U}(t, t_0)$ apresentada na eq. (2.14). Assim, fazendo novamente $t = -i\tau$, temos que

$$\Psi(\mathbf{r}, \tau + \Delta\tau) = \exp \left[-\frac{H \Delta\tau}{\hbar} \right] \Psi(\mathbf{r}, \tau). \quad (2.59)$$

Para resolver a Eq. (2.59), mais uma vez podemos usar a expansão de Suzuki como feito na Seção 2.3.1. Após o decorrer de um tempo suficientemente longo, a função de onda

inicial $\Psi(\mathbf{r}, \tau)$ evoluirá para a função de onda do estado fundamental ψ_0 do sistema. Para obter a energia do estado fundamental resta então calcular

$$E_0 = \int d^3r \psi_0^* H \psi_0. \quad (2.60)$$

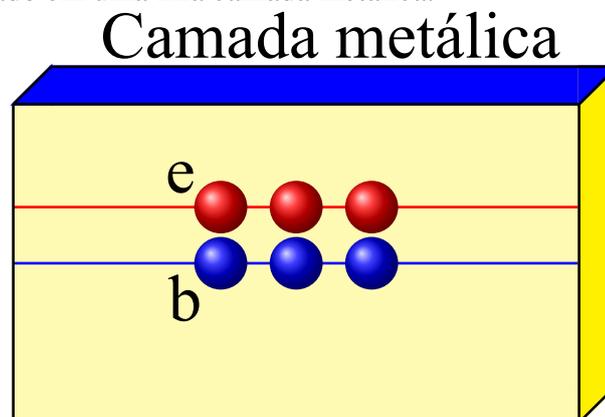
3 RESULTADOS

Neste capítulo, discutimos sobre uma configuração que possibilita observar uma transição de fase em um sistema de condensado de éxcitons onde nessa configuração há um mínimo de roton na relação de dispersão na energia do éxciton. A partir da teoria de Gross-Pitaevskii, utilizada para o estudo das propriedades dinâmicas de um BEC, investigamos como esse sistema se comporta no estado fundamental, resolvendo a equação de Gross-Pitaevskii numericamente, por meio do método de propagação no tempo imaginário, desenvolvido no Capítulo 2 desta dissertação. Com isso, observamos o perfil da função no estado de menor energia e procuramos por configurações onde a solução do estado fundamental apresente uma ordem cristalina e que apresente ao mesmo tempo uma natureza superfluida.

3.1 Supersolidez em sistemas de Bose-Fermi

Condensados em semicondutores ganharam a atenção dos cientistas com o propósito de testar comportamentos anômalos nesses sistemas, e em vista do progresso relatado [50, 82], um intenso trabalho se iniciou para alcançar as condições que levam esses sistemas a sofrerem uma transição para uma fase supersólida. Embora o surgimento de um mínimo de roton na maioria dos casos estudados experimentalmente não aconteça provavelmente devido à característica da interação éxciton-éxciton, um mínimo de roton e até mesmo uma instabilidade de roton foi prevista para um sistema híbrido, como mostrado na Fig. 16. Esse sistema é

Figura 16 – Um condensado de éxcitons interagindo remotamente com um gás de elétrons 2D situado em uma fina camada metálica.

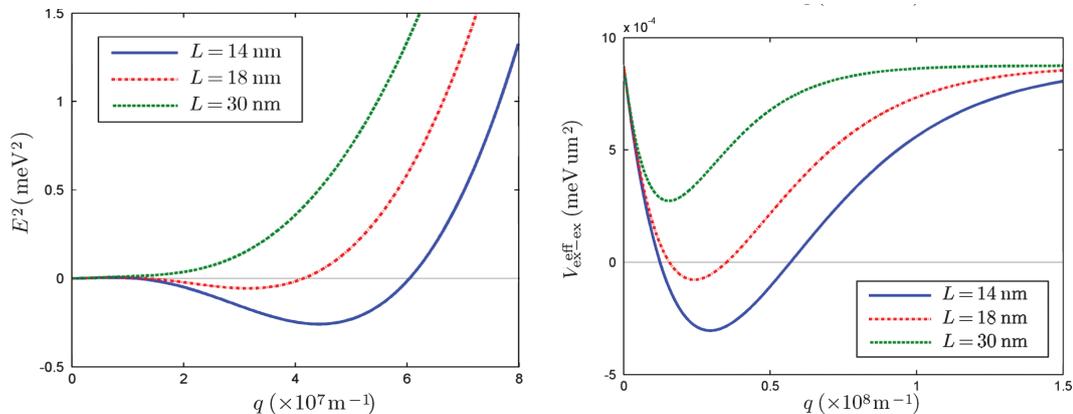


Fonte: Produzido pelo autor.

constituído de poços quânticos semicondutores acoplados contendo um condensado de éxcitons espacialmente indiretos 2D interagindo (sem sobreposição) com um gás de elétrons livre 2D

localizados em uma fina camada metálica crescida no topo da estrutura semicondutora [83]. O sistema é polarizado de forma que os momentos de dipolo dos éxcitons estão orientados para a fina camada metálica, isso porque essa configuração impede a formação de trions e a recombinação rápida [69]. O fato dos éxcitons se espalharem devido à interação com os elétrons remotamente livres, faz com que os éxcitons com momento diferente de zero atraiam um aos outros, levando a uma formação de roton na dispersão do éxciton, como pode ser visto na Fig. 17a). O mínimo de roton nesse sistema é controlado pela distância entre o gás de elétrons 2D e o condensado de éxcitons, de modo que quanto menor a distância entre esses dois componentes do sistema (Fig. 16b)), mais atrativo se torna a interação entre os éxcitons do condensado, ocasionando um mínimo de roton com valores cada vez mais negativos. A dedução do potencial de interação éxciton-éxciton efetivo e a obtenção de rotons no sistema híbrido de Bose-Fermi pode ser acompanhada em [83].

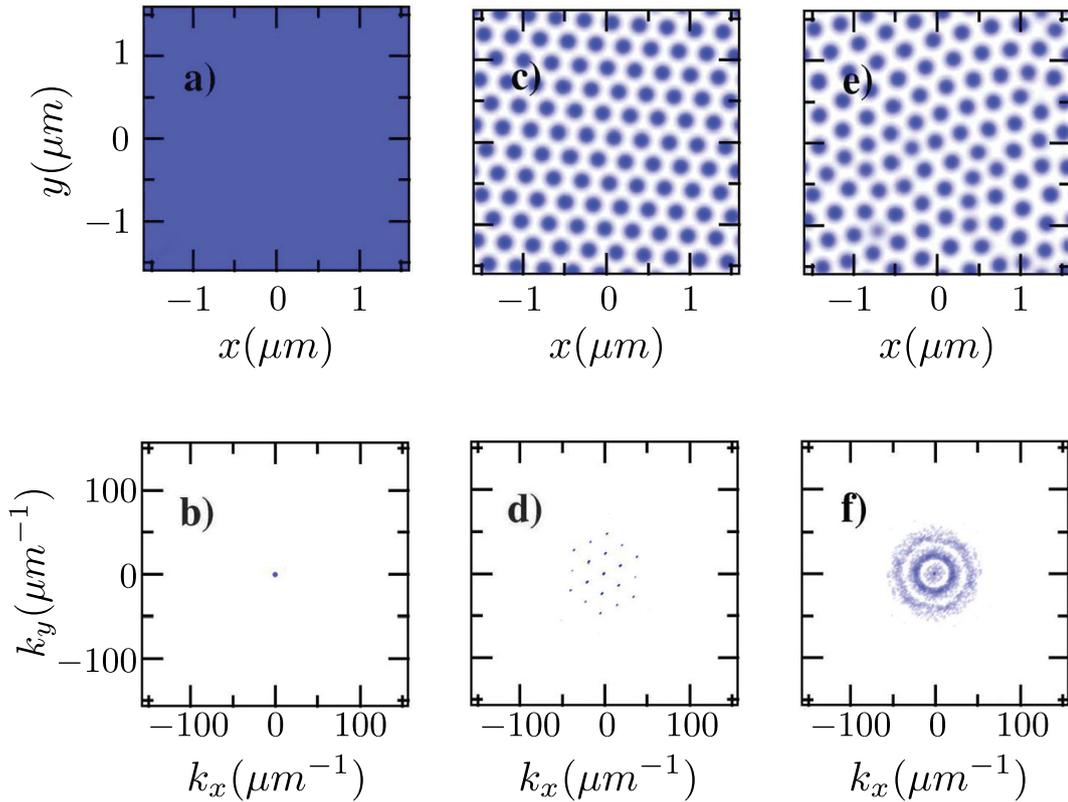
Figura 17 – a) Gráfico do espectro de excitação e b) potencial de interação éxciton-éxciton efetivo para três valores da distância de separação L entre a camada do éxciton e elétron.



Fonte: Adaptado de [69].

Nesse sistema, como retrata a Fig. 18, três diferentes regimes foram obtidos pelo procedimento de minimização numérica. Quando o espectro de excitação se encontra apenas na região positiva de energia, correspondendo à uma distância de 30 nm do gás de elétrons 2D e o condensado de éxcitons, a solução do estado fundamental é um superfluido, representado na Fig. 18a). No espaço recíproco, essa solução é um pico, como pode ser visto na Fig. 18b). Conforme a distância é reduzida, uma notável mudança ocorre no perfil do condensado para o estado de menor energia. Em uma distância de 18 nm, o sistema passa a apresentar um padrão trinagular no seu estado fundamental devido à quebra espontânea de simetria (ver Fig. 18c)). No estado

Figura 18 – Perfil de densidade de um BEC de éxcitons no espaço real e no espaço recíproco. a) Para uma separação de 30 nm o estado fundamental é um superfluido homogêneo. b) No espaço recíproco, o estado superfluido é representado por um ponto. c) Para uma separação de 18 nm, um arranjo triangular passa a se formar no estado de menor energia do sistema. d) Um arranjo periódico também surge no espaço recíproco. e) Ainda para uma distância de 18 nm, ruídos no sistema podem levar à uma fase metaestável. e) A fase metaestável se apresenta no espaço recíproco como anéis concêntricos em torno de $k = 0$.



Fonte: Adaptado de [69].

recíproco (Fig. 18d)), o surgimento do arranjo cristalino é indicada pela aparição de picos que correspondentes aos vetores da rede, e a constante de rede desse padrão é definida pelo valor do vetor de onda dos mínimos de roton [69]. Ainda pode acontecer da solução numérica apresentar um arranjo cristalino desregular, apresentado na Fig. 18e). Essas soluções não correspondem ao estado fundamental do sistema, no entanto, constituem mínimos locais da energia. No espaço recíproco, essa assinatura de cristalização surge como anéis concêntricos em torno de $k = 0$ (Fig. 18f)). À uma distância de 14 nm entre o gás de elétrons 2D e o condensado, o procedimento de minimização leva ao colapso da função de onda, uma vez que a abordagem de campo médio é quebrada.

Assim, baseamos-nos nesse sistema para os estudos a respeito de supersólidos em semicondutores 2D, tendo em vista que esse ambiente híbrido possibilita a obtenção de uma transição para a fase supersólida [69]. Procuramos construir matematicamente um potencial de

interação funcionalmente igual ao potencial deduzido em [83] que foi o mesmo utilizado em [69] para observar os traços de supersolidez.

Para esse sistema, investigamos a transição para fase supersólida de éxcitons por meio de uma abordagem de campo médio, de onde temos a chamada eGP dependente do tempo e estudamos o potencial matemático construído, checando a possibilidade de coexistência entre uma fase superfluida e uma ordem cristalina por meio de uma minimização numérica da energia do sistema usando o propagador no tempo imaginário.

3.2 Teoria de Gross-Pitaevskii

A base teórica para teoria de Gross-Pitaevskii foi desenvolvida no Capítulo 1 desta dissertação. Embora a eGP tenha sido originalmente utilizada para lidar com BEC de átomos fracamente interagente, podemos seguramente utilizá-la no nosso problema. A diferença que surge é quanto ao potencial de aprisionamento, que no caso dos experimentos envolvendo átomos alcalinos, utiliza-se uma armadilha, tipicamente parabólica, para aprisionar as partículas, enquanto que no problema desenvolvido aqui o potencial existente é apenas devido a interação éxciton-éxciton.

Assim, para um condensado de éxcitons, consideramos o método aproximativo para determinar a função de onda para sistemas de muitos corpos, chamada de descrição de Hartree-Fock, na qual escrevemos o *ansatz*,

$$\Psi_{\pm}(\mathbf{r}, t) = \prod_i \psi_{\pm}(\mathbf{r}_i, t) \quad (3.1)$$

onde no limite máximo do número de partículas N chegamos à energia de campo médio com um potencial de interação não local

$$E_{\pm} = N_{\pm} \int d\mathbf{r} \psi_{\pm}^*(\mathbf{r}, t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\text{ex}}} \nabla^2 + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r}' (V_{\text{ex-ex}}^{\text{eff}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n_{\text{tot}}(\mathbf{r}', t) + \alpha n_{\mp}(\mathbf{r}', t)) \right) \psi_{\pm}(\mathbf{r}, t), \quad (3.2)$$

em que \pm representa o estado *spin* $+1$ e -1 do éxciton, α remete à constante de interação entre dois componentes de *spin* do éxciton, $n_{\text{tot}}(\mathbf{r}, t) = n_{+}(\mathbf{r}, t) + n_{-}(\mathbf{r}, t) = N_{+} |\psi_{+}(\mathbf{r}, t)|^2 + N_{-} |\psi_{-}(\mathbf{r}, t)|^2$ e $V_{\text{ex-ex}}^{\text{eff}}(\mathbf{r})$ é o potencial de interação éxciton-éxciton. Vale ressaltar ainda que m_{ex} é a massa do éxciton, que é diferente da massa dessas mesmas quasi-partículas formadas em monocamadas de semicondutores. Para esse caso, temos que a eGP nos dá

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_{\pm}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_{\text{ex}}} \psi_{\pm}(\mathbf{r}, t) + \int d\mathbf{r}' V_{\text{ex-ex}}^{\text{eff}}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n_{\text{tot}}(\mathbf{r}', t) \psi_{\pm}(\mathbf{r}, t) + \alpha n_{\mp}(\mathbf{r}', t) \psi_{\pm}(\mathbf{r}, t). \quad (3.3)$$

O trabalho que motivou esse estudo envolve sistemas mediados por um gás de elétrons, e comumente, a interação éxciton-éxciton é uma interação retardada no tempo, de modo que para obter a eGP não retardada, é calculado a média do potencial de interação em uma faixa de frequência limitada pela frequência de dissociação do éxciton.

Neste trabalho, consideramos um potencial no espaço recíproco que apresenta um mínimo, escrito como

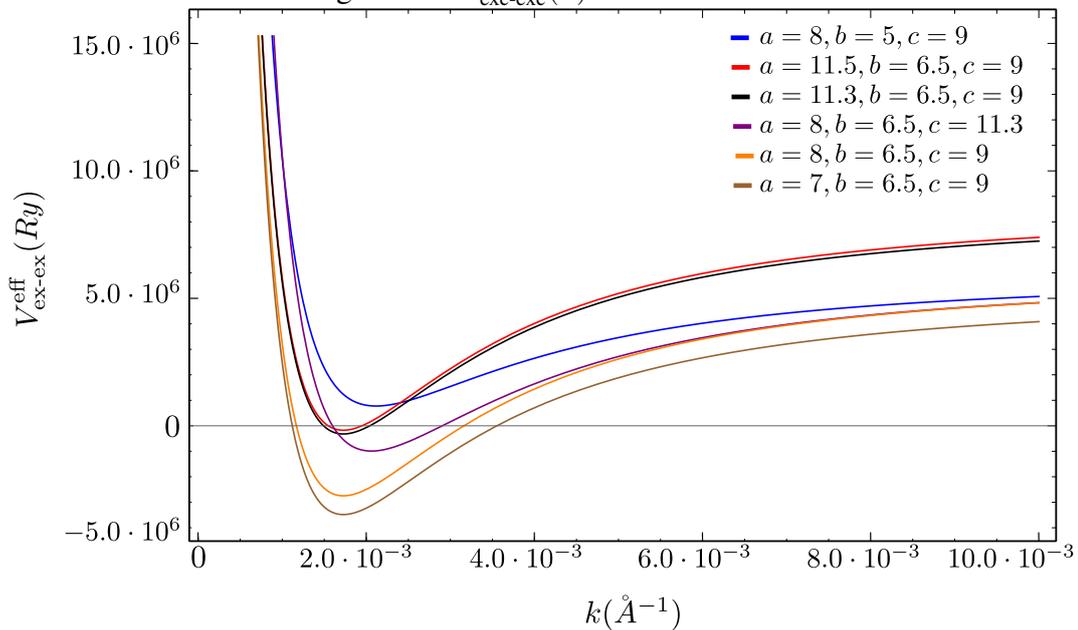
$$V_{\text{exc-exc}}^{\text{eff}}(k) = \left(a \cdot 10^4 - \frac{b}{(k/a_0 + 0.02)^2} + \frac{c \cdot 10^{-5}}{(k/a_0 + 0.02)^4} \right) / Ry, \quad (3.4)$$

onde a_0 é o raio de bohr, Ry a energia de Rydberg e os parâmetros a , b e c desempenham o papel de controlar o comportamento da curva do potencial de interação (em [69], o que exerce esse papel é exatamente a distância entre o gás de elétrons 2D e o condensado de éxcitons). O potencial escrito na Eq. (3.4) não corresponde a um resultado obtido a partir de determinada descrição teórica para um problema, mas sim foi construído a partir de um *fitting* de um potencial do tipo Lenard-Jones, com o intuito de investigar a influência de um mínimo no potencial e como este afeta o perfil do sistema no estado fundamental. Esse estudo pode ser realizado através da variação dos parâmetros a , b e c , que nos fornecem diferentes aspectos da curva, o que do ponto de vista físico, nos dá informação a respeito da interação entre os éxcitons, podendo possuir uma natureza mais ou menos atrativa. A Fig. 19 mostra o comportamento do potencial matemático construído, com um mínimo no espaço dos momentum.

Considerando os diferentes comportamentos de $V_{\text{exc-exc}}^{\text{eff}}$ podemos a partir do tratamento de Gross-Pitaevskii apresentada na Eq. (3.3), procurar por uma situação onde seja observada uma transição para a fase supersólida. Para isto, resolvemos numericamente a eGP para diferentes comportamentos do potencial de interação por meio da técnica formulada no Capítulo 2. Aqui, consideramos $\alpha = 0$, que significa dizer que não existe interação entre as componentes do spin dos éxcitons, e assim, trabalhamos com um condensado com apenas uma componente do éxciton. Do ponto de vista experimental isso é perfeitamente viável, uma vez que é possível produzir éxcitons de spin $+1$ ou -1 , como por exemplo, os TMD's, só controlando a polarização da luz. Os diferentes potenciais de interação efetivo correspondentes aos vários éxcitons resultaram em diferentes perfis para o sistema no estado fundamental conforme mostra a Fig. 20.

Em vista de recuperar os resultados obtidos pelo trabalho original [69], tomamos inicialmente o potencial inteiramente na região positiva da energia. Nesse regime, a solução numérica da eGP fornece um regime onde o estado fundamental do sistema é um superfluido

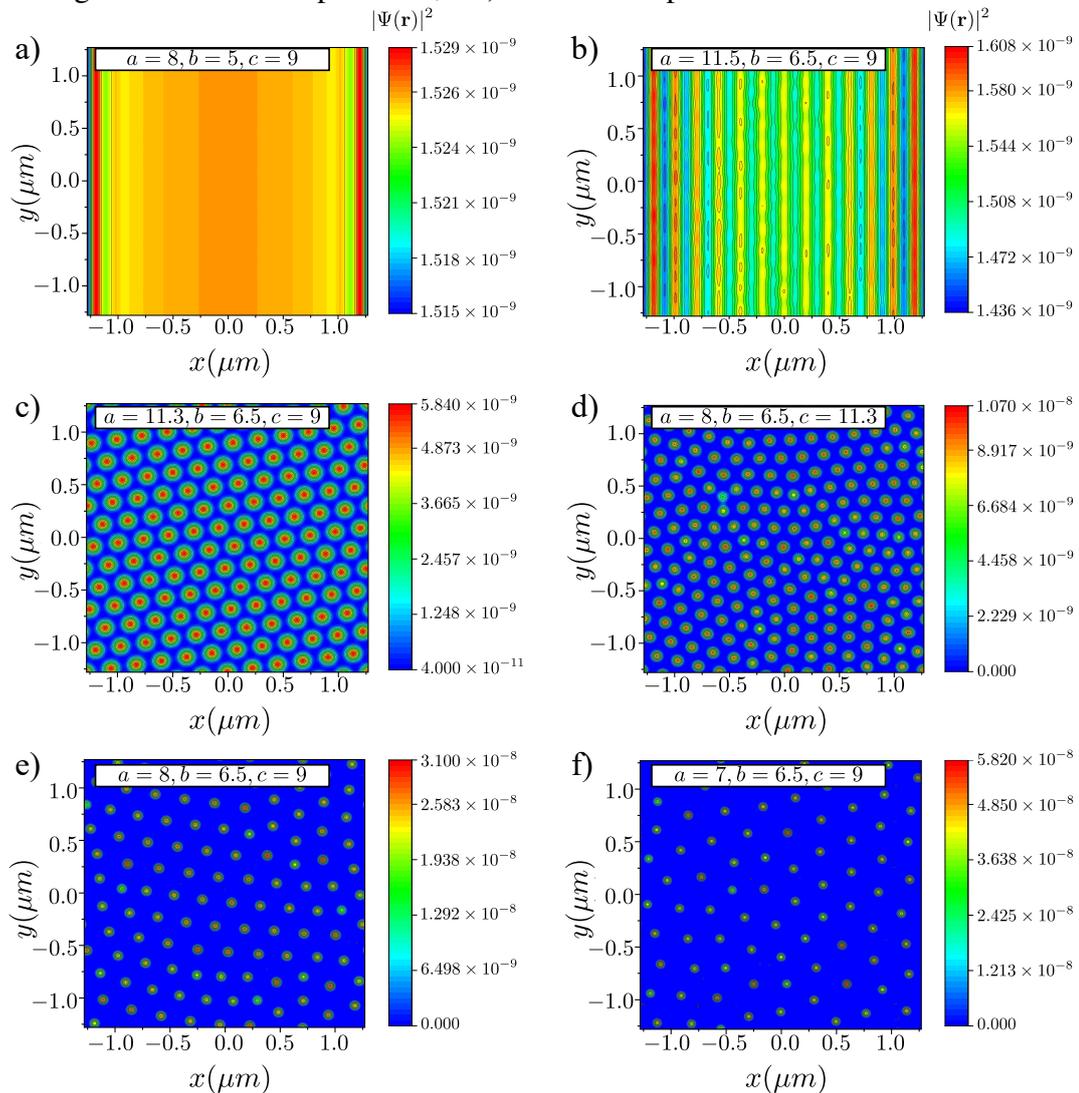
Figura 19 – Gráfico do potencial da Eq. (3.4). As diferentes curvas correspondem a interação entre os éxcitons, de modo que a interação é tanto maior quanto maior for os valores no domínio negativo de $V_{\text{exc-exc}}^{\text{eff}}(k)$.



Fonte: Produzido pelo autor.

homogêneo, assim como na Fig. 18a). No entanto, para gráfico da Fig. 20a), observamos faixas verticais, e isso se deve ao fato de que no processo de elaboração do código, precisamos ajustar a construção dos eixos de modo que o programa diferencie os eixos x e y . Conforme vamos tornando a interação entre os éxcitons mais forte, o que implica dizer que estamos tornando o mínimo do potencial mais negativo, mudanças na densidade do sistema no estado fundamental passam a ocorrer. Embora ainda não seja nítido, a Fig. 20b) mostra a aparição de certos picos. Na Fig. 20 c), notamos uma mudança no perfil de densidade, e um estado caracterizado por um padrão triangular torna-se o estado fundamental do sistema. A orientação da rede é escolhida aleatoriamente em um processo de quebra espontânea de simetria, conforme as flutuações iniciais no processo de minimização numérica em complemento com a quebra de simetria relativa à fase determinada arbitrariamente da função do condensado. Nas Figs. 20 d-f), observamos um distanciamento dos picos de densidade conforme o mínimo do potencial atinge valores mais negativos de $V_{\text{exc-exc}}^{\text{eff}}$. Outro aspecto que pode ser discutido é o desordenamento dos picos para certos parâmetros do potencial. Na Fig. 20 d) notamos esses padrões desarranjados com estruturas poli-cristalinas, que decorre de distorções iniciais, a partir das quais o processo de minimização produz essas soluções. Para valores muito negativos do mínimo do potencial, o procedimento numérico leva ao colapso da função de onda, apontando que o estado fundamental não pode ser estabelecido devido à quebra do modelo de campo médio [69].

Figura 20 – Gráficos dos diferentes perfis de densidade do condensado de éxcitons no espaço real. Em a) não observamos nenhum padrão formado no estado fundamental do sistema. Conforme o potencial ultrapassa para o domínio negativo, uma mudança no perfil da densidade passa a acontecer, até que em c) podemos ver um padrão triangular se formar. A partir daí, d-f) observamos picos da densidade distribuídos.



Fonte: Produzido pelo autor.

4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho apresentamos a base teórica para um estudo a respeito da transição para a fase supersólida em sistemas constituídos de BECs de éxcitons em semicondutores. Para isso, introduzimos a física utilizada em BECs de átomos alcalinos bem como a teoria sobre as quasi-partículas chamadas éxcitons. Com isso pudemos entender o processo realizado para se obter BECs desses éxcitons.

Toda essa bagagem nos preparou para investigar as condições que levam esses sistemas a sofrerem uma transição para uma fase supersólida. Uma dessas condições é que a interação entre as componentes do sistema promovam o surgimento de uma instabilidade de roton, isto é, excitações elementares que apresentam um mínimo de energia com um momento finito. Sendo assim, construímos um potencial funcionalmente semelhante ao utilizado pelo trabalho que motivou esse estudo para investigarmos o surgimento de uma fase que apresentasse uma ordem cristalina e superfluida ao mesmo tempo. Introduzindo o potencial construído na equação de Gross-Pitaevskii, obtivemos por meio da propagação no tempo imaginário o perfil da função de onda no estado fundamental, onde os resultados mostram um padrão triangular, indicando que o sistema de fato cristalizou. O trabalho desenvolvido mostra quais características e parâmetros esse potencial deve possuir, na prática, para que se possa obter e controlar a fase supersólida de éxcitons.

Pretendemos agora expandir nossos estudos agora para sistemas constituídos de camadas atômicas finas empilhadas, onde o alinhamento atômico entre as redes exibem variações periódicas determinado pelo descasamento da constante de rede e o ângulo de torção entre as camadas, dando origem à chamada super rede de moiré. Essas plataformas fornecem uma boa base para investigar os efeitos de muitos corpos dos bósons, uma vez que as propriedades ópticas nesses materiais são governadas por bósons compostos por pares de elétrons e buracos ligados, também conhecidos como éxcitons de moiré. O éxciton neste caso está em uma rede de potenciais periódicos, passando a possuir uma nova estrutura de bandas, a estrutura de bandas de moiré. Dessa estrutura de bandas, podemos finalmente extrair uma nova massa efetiva, ou seja, a massa efetiva do éxciton de moiré, que é fortemente ajustável por ângulos de rotação e campos externos, trazendo assim a possibilidade de se varrer uma grande quantidade de valores possíveis para massas de éxcitons, em busca de uma situação onde a equação de Gross-Pitaevskii levaria a uma fase supersólida como estado de menor energia.

REFERÊNCIAS

- [1] ANDERSON, Mike H. et al. Observation of Bose-Einstein condensation in a dilute atomic vapor. **science**, v. 269, n. 5221, p. 198-201, 1995.
- [2] BRADLEY, Cl C. et al. Evidence of Bose-Einstein condensation in an atomic gas with attractive interactions. **Physical review letters**, v. 75, n. 9, p. 1687, 1995.
- [3] DAVIS, Kendall B. et al. Bose-Einstein condensation in a gas of sodium atoms. **Physical review letters**, v. 75, n. 22, p. 3969, 1995.
- [4] BOSE, Satyendra Nath. Planck's law and the hypothesis of light quanta. **Z. Phys**, v. 26, n. 178, p. 1.5, 1924.
- [5] EINSTEIN, Albert. Sitzber, Kgl preuss. **Akad. Wiss**, v. 261, 1924.
- [6] CHIOCCETTA, Alessio; GAMBASSI, Andrea; CARUSOTTO, Iacopo. Laser operation and Bose-Einstein condensation: analogies and differences. **arXiv preprint arXiv:1503.02816**, 2015.
- [7] COHEN-TANNOUDJI, Claude; GUÉRY-ODELIN, David. Advances in atomic physics: an overview. 2011.
- [8] LONDON, Fritz. The λ -phenomenon of liquid helium and the Bose-Einstein degeneracy. **Nature**, v. 141, n. 3571, p. 643-644, 1938.
- [9] CORNELL, Eric A.; ENSHER, Jason R.; WIEMAN, Carl E. Experiments in dilute atomic Bose-Einstein condensation. **arXiv preprint cond-mat/9903109**, 1999.
- [10] GROSS, Eugene P. Structure of a quantized vortex in boson systems. **Il Nuovo Cimento (1955-1965)**, v. 20, n. 3, p. 454-477, 1961.
- [11] PITAEVSKII, Lev P. Vortex lines in an imperfect Bose gas. **Sov. Phys. JETP**, v. 13, n. 2, p. 451-454, 1961.
- [12] EDWARDS, Mark; BURNETT, Keith. Numerical solution of the nonlinear Schrödinger equation for small samples of trapped neutral atoms. **Physical Review A**, v. 51, n. 2, p. 1382, 1995.

- [13] RUPRECHT, 1PA et al. Time-dependent solution of the nonlinear Schrödinger equation for Bose-condensed trapped neutral atoms. **Physical Review A**, v. 51, n. 6, p. 4704, 1995.
- [14] EDWARDS, Mark et al. Properties of a Bose-Einstein condensate in an anisotropic harmonic potential. **Physical Review A**, v. 53, n. 4, p. R1950, 1996.
- [15] DALFOVO, Franco; STRINGARI, Sandro. Bosons in anisotropic traps: Ground state and vortices. **Physical Review A**, v. 53, n. 4, p. 2477, 1996.
- [16] DODD, R. J. et al. Role of attractive interactions on Bose-Einstein condensation. **Physical Review A**, v. 54, n. 1, p. 661, 1996.
- [17] BAYM, Gordon; PETHICK, Christopher J. Ground-state properties of magnetically trapped Bose-condensed rubidium gas. **Physical review letters**, v. 76, n. 1, p. 6, 1996.
- [18] HAIGH, Thomas; PRIESTLEY, Mark. Innovators assemble: Ada Lovelace, Walter Isaacson, and the superheroines of computing. **Communications of the ACM**, v. 58, n. 9, p. 20-27, 2015.
- [19] LIU1, Guanxiong et al. Graphene-based non-Boolean logic circuits. **Journal of Applied Physics**, v. 114, n. 15, p. 154310, 2013.
- [20] JARIWALA, Deep et al. Emerging device applications for semiconducting two-dimensional transition metal dichalcogenides. **ACS nano**, v. 8, n. 2, p. 1102-1120, 2014.
- [21] PEIERLS, Rudolf. Quelques propriétés typiques des corps solides. In: **Annales de l'institut Henri Poincaré**. 1935. p. 177-222.
- [22] LANDAU L. D., Zur theorie der phasenumwandlungen II, **Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion** v. 11, n. 26, 1937.
- [23] NOVOSELOV, Kostya S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. **science**, 306, n. 5696, p. 666-669, 2004.
- [24] LIU, Changjiang et al. Advance on the dispersion treatment of graphene oxide and the graphene oxide modified cement-based materials. **Nanotechnology Reviews**, v. 10, n. 1, p. 34-49, 2021.
- [25] LEE, Changgu et al. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. **Science**, v. 321, n. 5887, p. 385-388, 2008.

- [26] HUANG, Meihua; LI, Lirong; GUO, Yonglang. Microwave heated polyol synthesis of Pt₃Te/C catalysts. **Electrochimica acta**, v. 54, n. 12, p. 3303-3308, 2009.
- [27] PATHAK, Sandeep; SHENOY, Vijay B.; BASKARAN, G. Possible high-temperature superconducting state with a $d + id$ pairing symmetry in doped graphene. **Physical Review B**, v. 81, n. 8, p. 085431, 2010.
- [28] MOUNET, Nicolas et al. Two-dimensional materials from high-throughput computational exfoliation of experimentally known compounds. **Nature nanotechnology**, v. 13, n. 3, p. 246-252, 2018.
- [29] NOVOSELOV, Kostya S. et al. Two-dimensional atomic crystals. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 102, n. 30, p. 10451-10453, 2005.
- [30] MAK, Kin Fai et al. Atomically thin MoS₂: a new direct-gap semiconductor. **Physical review letters**, v. 105, n. 13, p. 136805, 2010.
- [31] DEAN, Cory R. et al. Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics. **Nature nanotechnology**, v. 5, n. 10, p. 722-726, 2010.
- [32] CASTELLANOS-GOMEZ, Andres. Black phosphorus: narrow gap, wide applications. **The journal of physical chemistry letters**, v. 6, n. 21, p. 4280-4291, 2015.
- [33] Molybdenum Disulfide (MoS₂): Theory e Applications. **Ossila**. 2022. Disponível em: <https://www.ossila.com/pages/molybdenum-disulfide-mos2>. Acesso em: 05 de julho de 2022.
- [34] SPLENDIANI, Andrea et al. Emerging photoluminescence in monolayer MoS₂. **Nano letters**, v. 10, n. 4, p. 1271-1275, 2010.
- [35] GEIM, Andre K.; GRIGORIEVA, Irina V. Van der Waals heterostructures. **Nature**, v. 499, n. 7459, p. 419-425, 2013.
- [36] CALLISTER JR, William D.; RETHWISCH, David G. **Materials science and engineering: an introduction**. wiley, 2020.
- [37] SZE, Simon M.; LI, Yiming; NG, Kwok K. **Physics of semiconductor devices**. John wiley & sons, 2021.

- [38] BALKANSKI, M.; WALLIS, R. F. **Semiconductor Physics and Application**, New York: Oxford Univ. 2000.
- [39] RICHARD, Soline; ANIEL, Frédéric; FISHMAN, Guy. Energy-band structure of Ge, Si, and GaAs: A thirty-band $k\hat{p}$ method. **Physical Review B**, v. 70, n. 23, p. 235204, 2004.
- [40] COHEN, Marvin L.; CHELIKOWSKY, James R. Electronic structure and optical properties of semiconductors. Springer Science & Business Media, 2012.
- [41] FRENKEL, Jacov. On the transformation of light into heat in solids. I. **Physical Review**, v. 37, n. 1, p. 17, 1931.
- [42] WANNIER, Gregory H. The structure of electronic excitation levels in insulating crystals. **Physical Review**, v. 52, n. 3, p. 191, 1937.
- [43] KORMÁNYOS, Andor et al. $k \cdot p$ theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors. **2D Materials**, v. 2, n. 2, p. 022001, 2015.
- [44] CHERNIKOV, Alexey et al. Exciton binding energy and nonhydrogenic Rydberg series in monolayer WS₂. **Physical review letters**, v. 113, n. 7, p. 076802, 2014.
- [45] YANG, X. L. et al. Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory. **Physical Review A**, v. 43, n. 3, p. 1186, 1991.
- [46] BLATT, John M.; BÖER, K. W.; BRANDT, Werner. Bose-Einstein condensation of excitons. **Physical Review**, v. 126, n. 5, p. 1691, 1962.
- [47] LOZOVIK, Yu E.; YUDSON, V. I. Feasibility of superfluidity of paired spatially separated electrons and holes; a new superconductivity mechanism. **JETP Lett.(USSR)(Engl. Transl.);(United States):**, v. 22, n. 11, 1975.
- [48] SIVALERTPORN, Kanchana et al. Direct and indirect excitons in semiconductor coupled quantum wells in an applied electric field. **Physical Review B**, v. 85, n. 4, p. 045207, 2012.
- [49] SCHINDLER, Christoph; ZIMMERMANN, Roland. Analysis of the exciton-exciton interaction in semiconductor quantum wells. **Physical Review B**, v. 78, n. 4, p. 045313, 2008.
- [50] BUTOV, L. V. et al. Towards Bose–Einstein condensation of excitons in potential traps. **Nature**, v. 417, n. 6884, p. 47-52, 2002.

- [51] BUTOV, L. V. Condensation and pattern formation in cold exciton gases in coupled quantum wells. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 16, n. 50, p. R1577, 2004.
- [52] LI, J. I. A. et al. Excitonic superfluid phase in double bilayer graphene. **Nature Physics**, v. 13, n. 8, p. 751-755, 2017.
- [53] LIU, Xiaomeng et al. Quantum Hall drag of exciton condensate in graphene. **Nature Physics**, v. 13, n. 8, p. 746-750, 2017.
- [54] BURG, G. William et al. Strongly enhanced tunneling at total charge neutrality in double-bilayer graphene-WSe₂ heterostructures. **Physical review letters**, v. 120, n. 17, p. 177702, 2018.
- [55] WANG, Zefang et al. Evidence of high-temperature exciton condensation in two-dimensional atomic double layers. **Nature**, v. 574, n. 7776, p. 76-80, 2019.
- [56] BALIBAR, Sebastien. The enigma of supersolidity. **Nature**, v. 464, n. 7286, p. 176-182, 2010.
- [57] LI, Jun-Ru et al. A stripe phase with supersolid properties in spin-orbit-coupled Bose-Einstein condensates. **Nature**, v. 543, n. 7643, p. 91-94, 2017.
- [58] LÉONARD, Julian et al. Supersolid formation in a quantum gas breaking a continuous translational symmetry. **Nature**, v. 543, n. 7643, p. 87-90, 2017.
- [59] O'DELL, D. H. J.; GIOVANAZZI, S.; KURIZKI, Gershon. Rotons in gaseous Bose-Einstein condensates irradiated by a laser. **Physical review letters**, v. 90, n. 11, p. 110402, 2003.
- [60] SANTOS, L.; SHLYAPNIKOV, G. V.; LEWENSTEIN, M. Roton-maxon spectrum and stability of trapped dipolar Bose-Einstein condensates. **Physical review letters**, v. 90, n. 25, p. 250403, 2003.
- [61] KADAU, Holger et al. Observing the Rosensweig instability of a quantum ferrofluid. **Nature**, v. 530, n. 7589, p. 194-197, 2016.
- [62] TANZI, Luca et al. Observation of a dipolar quantum gas with metastable supersolid properties. **Physical review letters**, v. 122, n. 13, p. 130405, 2019.

- [63] BÖTTCHER, Fabian et al. Transient supersolid properties in an array of dipolar quantum droplets. **Physical Review X**, v. 9, n. 1, p. 011051, 2019.
- [64] CHOMAZ, L. et al. Long-lived and transient supersolid behaviors in dipolar quantum gases. **Physical Review X**, v. 9, n. 2, p. 021012, 2019.
- [65] GALLEMÍ, A. et al. Quantized vortices in dipolar supersolid Bose-Einstein-condensed gases. **Physical Review A**, v. 102, n. 2, p. 023322, 2020.
- [66] STRINGARI, S. in *Bose-Einstein Condensation*, edited by A. Griffin, DW Snoke, and S. Stringari. 1995.
- [67] LOZOVIK, Yu E.; YUDSON, V. I. A new mechanism for superconductivity: pairing between spatially separated electrons and holes. **Zh. Eksp. Teor. Fiz.**, v. 71, p. 738, 1976.
- [68] JOGLEKAR, Yogesh N.; BALATSKY, Alexander V.; SARMA, S. Das. Wigner supersolid of excitons in electron-hole bilayers. **Physical Review B**, v. 74, n. 23, p. 233302, 2006.
- [69] MATUSZEWSKI, Michał; TAYLOR, Thomas; KAVOKIN, Alexey V. Exciton supersolidity in hybrid Bose-Fermi systems. **Physical review letters**, v. 108, n. 6, p. 060401, 2012.
- [70] CONTI, Sara et al. Chester supersolid of spatially indirect excitons in double-layer semiconductor heterostructures. **arXiv preprint arXiv:2205.06598**, 2022.
- [71] LANDAU, L. Theory of the superfluidity of helium ii. **Physical Review**, APS, v. 60, n. 4, p. 356, 1941.
- [72] PETHICK, Christopher J.; SMITH, Henrik. **Bose-Einstein condensation in dilute gases**. Cambridge university press, 2008.
- [73] MOSKALENKO, Svâtoslav Anatol'evič; MOSKALENKO, S. A.; SNOKE, D. W. **Bose-Einstein condensation of excitons and biexcitons: and coherent nonlinear optics with excitons**. Cambridge University Press, 2000.
- [74] HIGH, Alexander A. et al. Spontaneous coherence in a cold exciton gas. **Nature**, v. 483, n. 7391, p. 584-588, 2012.
- [75] CHAVES, Andrey et al. The split-operator technique for the study of spinorial wavepacket dynamics. **Communications in computational physics**, v. 17, n. 3, p. 850-866, 2015.

- [76] FEIT, M. D.; FLECK JR, J. A. Wave packet dynamics and chaos in the Hénon–Heiles system. **The Journal of chemical physics**, v. 80, n. 6, p. 2578-2584, 1984.
- [77] DEGANI, Marcos H. Stark ladders in strongly coupled GaAs-AlAs superlattices. **Applied physics letters**, v. 59, n. 1, p. 57-59, 1991.
- [78] SUZUKI, Masuo. Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations. **Physics Letters A**, v. 146, n. 6, p. 319-323, 1990.
- [79] DEVRIES, Paul L.; WOLF, Robert P. A first course in computational physics. **Computers in Physics**, v. 8, n. 2, p. 178-179, 1994.
- [80] PRESS, W. H.; TEUKOLSKY, S. A.; FLANNERY, B. P.; VETTERLING, W. T. Numerical recipes in Fortran 77: volume 1, volume 1 of Fortran numerical recipes: the art of scientific computing. [S.l.]: Cambridge university press, 1992.
- [81] SAKURAI, Jun John; NAPOLITANO, Jim. **Mecânica quântica moderna**. bookman, 2013.
- [82] AMO, Alberto et al. Superfluidity of polaritons in semiconductor microcavities. **Nature Physics**, v. 5, n. 11, p. 805-810, 2009
- [83] SHELYKH, Ivan A.; TAYLOR, Thomas; KAVOKIN, Alexey V. Rotons in a hybrid Bose-Fermi system. **Physical review letters**, v. 105, n. 14, p. 140402, 2010.

APÊNDICE A – ESTATÍSTICA DE UM GÁS IDEAL

Em um gás quântico ideal não há interações entre as partículas do sistema, podendo ser definido pelo conjunto de números

$$\{n_1, n_2, \dots, n_j, \dots\} \equiv \{n_j\}, \quad (\text{A.1})$$

onde o subscrito j corresponde ao estado quântico de um orbital e n_j o número de ocupação desse orbital. No caso dos férmions, como eles obedecem ao princípio de exclusão de Paulin, o número de ocupação n_j só poderá ser 0 ou 1 para qualquer j , isso por conta que dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente. Para os bósons, entretanto, podemos ter de 0 à N partículas ocupando um mesmo orbital, sendo N o número total de partículas que compõe o sistema.

Para determinado estado $\{n_j\}$ a energia do sistema é dada por

$$E = \sum_j \varepsilon_j n_j, \quad (\text{A.2})$$

em que a ε_j corresponde a energia do orbital j . O número de total de partículas é

$$N = \sum_j n_j. \quad (\text{A.3})$$

Segundo a física estatística, no *ensemble* grande canônico, a função de partição é definida como,

$$\Xi(T, V, \mu) = \prod_j \left\{ \sum_n \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)n] \right\}. \quad (\text{A.4})$$

onde ε_j é a energia de uma partícula no estado j e $\beta \equiv 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann e T a temperatura. O valor esperado para o número de partículas $\langle n_j \rangle$ em cada estado é obtido por meio da relação

$$\langle n_j \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \varepsilon_j} \ln \Xi, \quad (\text{A.5})$$

e o valor esperado para a energia ε_j

$$\langle \varepsilon_j \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \Xi + \frac{\mu}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \ln \Xi. \quad (\text{A.6})$$

Agora vamos discutir a estatística para cada tipo de partícula.

A.1 Estatística de Bose-Einstein

O comportamento de bósons não interagentes em equilíbrio termodinâmico pode ser estudado a partir do mecanismo do *ensemble* grande canônico, de modo que temos um vínculo com o potencial químico μ , na qual está relacionado a energia necessária para inserir uma partícula no sistema.

Observemos que o somatório na variável muda n apresentada na eq. (A.4) varia de 0 até o número total de partículas N do sistema, logo, se tivermos $N \rightarrow \infty$, e tendo em vista que para a soma convergir devemos ter $\exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)] < 1$ para qualquer valor de j , podemos recorrer as propriedades da série geométrica e reescrever a função de partição como

$$\ln \Xi(T, V, \mu) = - \sum_j \ln\{1 - \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)]\}. \quad (\text{A.7})$$

Como o menor valor para a energia ε_j é zero, para que $\exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)] < 1$, temos que $\exp[\beta\mu] < 1$, ou seja, o potencial químico μ deve ser estritamente negativo. Portanto, o número médio de ocupação em um determinado estado j , com base nas eqs. (A.5) e (A.7) é dado por

$$\langle n_j \rangle_{\text{BE}} = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_j - \mu)] - 1}. \quad (\text{A.8})$$

E assim, vemos que a condição de $\mu < 0$ para o caso dos bósons está de acordo com a exigência de que $\langle n_j \rangle_{\text{BE}} \geq 0$. A eq. (A.8) é chamada de função de distribuição de Bose-Einstein. É conveniente, para um análise da influência do potencial químico, adotar a quantidade $z \equiv \exp[\beta\mu]$, também conhecida como *fugacidade*.

A.2 Estatística de Fermi-Dirac

Como já mencionado, os bósons possuem um número inteiro de spins (ex: fótons, glúons, etc.), os férmions possuem um número semi-inteiro de spin (ex: elétrons, neutrôns, etc.). Enquanto os bósons tendem a se aglomerarem no estado de menor energia, os férmions obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, que afirma que dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico simultaneamente, e isso se deve ao fato da função de onda total do sistema ser antissimétrica com relação a permuta de duas partículas. Assim, como n só pode ser 0 ou 1, temos que

$$\sum_{n=0,1} \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)n] = 1 + \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)], \quad (\text{A.9})$$

de onde segue que

$$\ln \Xi = \sum_j \ln \{1 + \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)]\}. \quad (\text{A.10})$$

Da eq. (A.5), chegamos à função de distribuição de Fermi-Dirac,

$$\langle n_j \rangle_{\text{FD}} = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_j - \mu)] + 1} \quad (\text{A.11})$$

onde $0 \geq \langle n_j \rangle_{\text{FD}} \geq 0$, satisfazendo o princípio de exclusão de Pauli.

Em relação a função de distribuição de Bose-Einstein apresentada na eq. (A.8), para altos valores da temperatura, o potencial químico deve ser negativo $\mu < 0$. Dentro do contexto quântico, com o número de partículas fixo, a medida que a temperatura diminui, o potencial químico do bósons aumenta, atingindo um limite $\mu \rightarrow 0^-$, isto é, $z \rightarrow 1$, para determinada temperatura crítica T_c e permanece no valor de $\mu = 0$ para valores abaixo dessa temperatura $T < T_c$. Porém, μ não excede esse limite, caso contrário, a função de distribuição para esse estado de partícula seria negativo, e portanto, não físico. A partir da Fig. 21a), podemos observar que a ocupação média do estado fundamental aumenta conforme a temperatura diminui, implicando em valores cada vez menos negativos para o potencial químicos, seguindo o limite de que $0 < z < 1$.

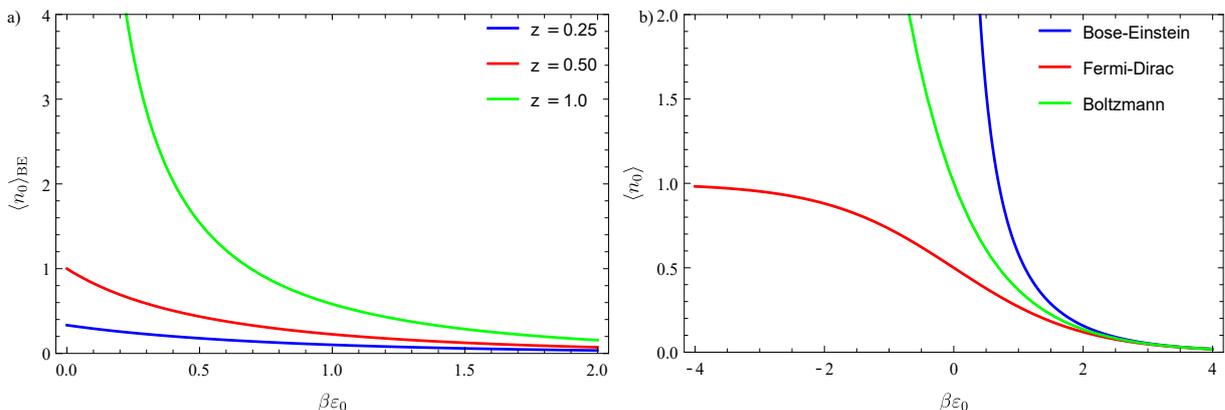


Figura 21 – Produzida pelo autor. a) O gráfico mostra o aumento do valor médio de ocupação do estado fundamental ($j = 0$) para função de distribuição de Bose-Einstein conforme $z \rightarrow 1$. b) Comparação entre as funções de distribuição de Bose-Einstein, Fermi-Dirac e Boltzmann. Para altas temperaturas as três funções apresentam o mesmo comportamento.

Em altas temperaturas, os efeitos da estatística quântica tornam-se desprezíveis, e nessa situação clássica, não diferenciamos as partículas em bósons ou férmions. Nesse regime devemos ter que $\exp[\beta(\varepsilon_j - \mu)] \gg 1$, para qualquer j , ou seja, $z \equiv \exp[\beta\mu] \ll 1$. Dessa forma, conforme apresenta a Fig. 21b, no limite clássico, temos que tanto a função de distribuição de

Bose-Einstein (A.8) quanto a de Fermi-Dirac (A.11) se aproximam da função de distribuição de Boltzmann

$$\langle n_j \rangle_{\text{B}} = \exp[-\beta(\varepsilon_j - \mu)]. \quad (\text{A.12})$$