

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PISA
FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI
ANNO ACCADEMICO 1993-1994
TESI DI LAUREA IN FISICA

REGOLE DI SOMMA
IN UN
GAS DI ELETTRONI STRATIFICATO

Candidato :
RICCARDO FANTONI

Relatore :
Chiar.mo Prof. M.P.TOSI

Controrelatori :
Chiar.mo Prof. L.MARTINELLI Chiar.mo Prof. F.CORNOLTI

Indice

Indice	I
1 Introduzione	1
1.1 Il gas di elettroni stratificato	1
1.2 Regole di somma e andamenti asintotici	4
1.3 Motivazioni	8
1.4 Approccio	8
1.5 Scopo	9
2 Sistemi elettronici bidimensionali	10
2.1 Il sistema di elettroni in 2D quantistico e classico	10
2.2 Elettroni sulla superficie dell' elio liquido	11
2.2.1 Cristallizzazione di Wigner classica	12
2.3 Lo strato di inversione	15
2.4 Super-reticoli artificiali	18
2.4.1 Effetto Hall quantistico e cristallizzazione di Wigner in campo magnetico	21
2.5 Composti intercalati	26
2.5.1 Struttura	30
2.5.2 Proprietà elettroniche	33
2.6 Sommario	36
3 Proprietà di schermo in modelli teorici	38
3.1 Il gas di elettroni stratificato (LEG)	39
3.2 Teoria della risposta lineare nel LEG	43
3.2.1 Regola di somma sulla compressibilità	47
3.2.2 Il segno della compressibilità	50
3.3 Risposta dielettrica del LEG non interagente	54
3.4 Risposta dielettrica in RPA	59
3.4.1 Eccitazioni collettive in RPA	60
3.5 Scambio e correlazione nella risposta dielettrica del LEG	65
3.5.1 Correzione di campo locale	67
3.5.2 Potenziale interionico schermato	69

3.6	Risposta dielettrica di un sistema a due piani	70
4	Schermo statico e regole di somma nel LEG classico	75
4.1	Introduzione	75
4.2	Condizioni di equilibrio	78
4.2.1	Prime definizioni	78
4.2.2	Limite termodinamico	84
4.3	Regole di somma multipolari	87
4.4	Comportamento asintotico delle correlazioni	89
4.4.1	Numero finito di piani	89
4.4.2	Numero infinito di piani	104
4.4.3	Una particolare chiusura delle BGY ed il tipo di clustering corrispondente	118
4.5	Comportamento asintotico delle correlazioni in un LEG con piani cristallizzati	121
4.5.1	Le equazioni WLMB	122
4.5.2	Clustering compatibile con la rottura dell' invarianza traslazionale dei piani del LEG	124
4.6	Dinamica	127
4.6.1	Definizioni	127
4.6.2	Comportamento a piccoli tempi	130
4.6.3	Analisi delle eccitazioni nel LEG a grandi lunghezze d' onda dalle regole di somma sui momenti	133
5	Conclusioni	137
5.1	Prospettive	142
5.1.1	Clustering e regole di somma nel jellium omogeneo tridimen- sionale	143
5.1.2	Problemi aperti	145
A	Le funzioni di correlazione di Ursell	148
B	Sviluppo multipolare del campo elettrico in eccesso di un 2DJ	150
C	Andamento asintotico del termine a (n+1) corpi nelle BGY - 1 -	154
D	Andamento asintotico del termine a (n+1) corpi nelle BGY - 2 -	156
E	Formalismo utile per l' approccio al jellium quantistico	159
	Bibliografia	165

Capitolo 1

Introduzione

1.1 Il gas di elettroni stratificato

Il modello del gas di elettroni stratificato a cui ci riferiamo con la sigla LEG (dall'inglese 'layered electron gas') consiste di una matrice regolare di N_p piani paralleli, in ciascuno dei quali sono confinati N elettroni di massa m e carica e , interagenti attraverso il potenziale Coulombiano tridimensionale $1/|R|$ ed immersi in un fondo inerte rigido ed uniforme di cariche di segno opposto, che assicura la neutralità di carica totale del sistema. Più sinteticamente definiremo il LEG come una serie di N_p jellium bidimensionali ad una componente (2DJ), paralleli tra loro e con spaziatura d costante.

Questo modello estremamente anisotropo di un gas di elettroni in una struttura stratificata rappresenta naturalmente una semplificazione estrema rispetto a qualunque sistema fisico realizzabile in laboratorio o esistente in natura. Nonostante questo, esso serve come prototipo per sistemi più realistici (in cui ad esempio si dà spessore non nullo ai piani, si permette agli elettroni di saltare tra piani diversi, ecc . . .), e spesso è usato come prima approssimazione per studiare le proprietà elettroniche di materiali naturali o artificiali con strutture anisotrope.

D' altra parte il modello 'matematico' del LEG è un esempio di sistema Coulombiano inomogeneo idoneo ad essere studiato con gli strumenti della meccanica statistica, anche come caso intermedio nella transizione tra regimi di diversa dimensionalità spaziale. Nel limite di grande separazione tra i piani, il LEG si comporta qualitativamente come una serie di 2DJ isolati, mentre in quello di piccola separazione tra i piani, il LEG si comporta qualitativamente come un gas di elettroni tridimensionale.

Nel lavoro di tesi metteremo in evidenza la rilevanza fisica del LEG presentando diversi sistemi fisici naturali o artificiali, che possono essere schematizzati in prima approssimazione mediante tale modello. Per $N_p = 1$ il LEG si riduce ad un 2DJ che nel limite classico costituisce un modello per elettroni intrappolati sulla superficie dell' He liquido [1, 2] (sistema importante per lo studio della cristallizzazione di Wigner di un sistema quasi bidimensionale di elettroni quasi classici), mentre nel

limite di plasma degenere è impiegato per studiare il sistema di elettroni degli strati di inversione in semiconduttori [3, 4]. Il carattere bidimensionale della dinamica degli elettroni nei due sistemi appena citati è stato ben stabilito da una vasta serie di esperimenti.

Per $N_p \gg 1$ il LEG serve come prima approssimazione per tutti quei sistemi di laboratorio catalogabili sotto il nome di super-reticoli stratificati. Questi si dividono in due classi complementari: quella dei composti intercalati e quella dei materiali artificialmente stratificati.

Nel processo di intercalazione atomi o molecole sono incorporati tra gli strati di un materiale ospitante naturalmente stratificato. I composti intercalati che meglio sono schematizzati dal LEG sono quelli che hanno come materiale ospitante o dicalcogenuri di metalli di transizione (TiS_2 , TaS_2) o la grafite. Data comunque l'eccezionale capacità della grafite di fornire super-reticoli con alto ordine cristallino e periodicità molto fedele (anche per N_p elevati), i composti intercalati della grafite (GICs) sono stati certamente quelli a cui il modello teorico del LEG è stato più frequentemente applicato per studiare le proprietà elettroniche degli strati di grafite (a partire dal lavoro pionieristico di Visscher e Falicov [5]). Per quanto riguarda la modellizzazione degli intercalati, osserviamo che in alcuni composti di intercalazione si sono osservate fasi ordinate delle strutture intraplanari degli strati di intercalato. In molti composti (come C_8Cs , C_{24}Cs , C_{24}K , $\text{Ag}_{1/3}\text{TiS}_2$) sono state direttamente osservate transizioni di fase solido-liquido negli intercalati. Nel costruire modelli teorici per la descrizione della fase ordinata e delle transizioni di fase, è necessario decidere inizialmente se il giusto punto di partenza sia un modello di gas reticolare od un continuo. Nel caso dei dicalcogenuri di metalli di transizione gli atomi di intercalato (Ag, Li, ...) sono confinati in siti specifici rendendo appropriata la descrizione tramite il reticolo. D'altra parte esperimenti di diffusioni di raggi X su C_{24}Cs , C_{24}K , RbC_{24} , indicano che in questi materiali l'intercalato non è in registro col reticolo della grafite né ad alte, né a basse temperature. Essi suggeriscono che ad alte temperature è possibile utilizzare un modello di liquido bidimensionale per la descrizione della struttura dell'intercalato. Questa assunzione è stata utilizzata da Plischke [6] e da Miesenböck e Tosi [7] per costruire potenziali di coppia effettivi tra gli ioni alcalini degli intercalati, utilizzando la funzione dielettrica statica in RPA del LEG schermante [6] e con le correzioni dovute allo scambio ed alle correlazioni Coulombiane a corto raggio intraplanari [7].

La seconda classe di super-reticoli stratificati sono i super-reticoli a semiconduttori. Queste sono strutture stratificate artificialmente attraverso la giunzione (eterogiunzione) di semiconduttori con diversi 'band-gap' (intervalli di energie proibite). Le discontinuità del band-gap risultante dell'intero super-reticolo sulle eterogiunzioni, creano una serie di buche di potenziale unidimensionali lungo la direzione \hat{z} di crescita del super-reticolo. Tali buche di potenziale vengono riempite attraverso tecniche di drogaggio e quantizzano il moto degli elettroni lungo la direzione di crescita del super-reticolo, confinandoli su strati ortogonali a \hat{z} , quando esse siano sufficientemente profonde. In un super-reticolo artificiale, lo spettro di singola particella per

il moto lungo la direzione di crescita del reticolo è caratterizzato da una serie di sotto-bande corrispondenti agli stati discreti di buca-quantistica. I super-reticoli a semiconduttori si dividono a loro volta in quelli di tipo I e quelli di tipo II, a seconda del tipo di portatori intrappolati nelle buche quantistiche: in quelli di tipo I (tra cui il più comune è GaAs/Al_xGa_{1-x}As) i portatori sono tutti elettroni; in quelli di tipo II (ad esempio GaSb/InAs) strati di elettroni sono alternati a strati di buche.

Nel lavoro di tesi presenteremo le proprietà di schermo del LEG ricavabili dallo studio di alcuni modelli teorici nell'ambito della teoria della risposta lineare, che sono stati applicati al LEG in letteratura: LEG non interagente (nella cui trattazione introdurremo la funzione di risposta di Lindhard di un 2DJ e quella di Vlasov dell'analogo sistema classico), LEG in RPA (del quale descriveremo anche le eccitazioni collettive), correzioni di campo locale nel LEG (in STLS per trovare il potenziale interionico schermato dagli elettroni su i piani di grafite dei GICs, o col metodo di Świerkowski ed al. [8] per mostrare che per effetto delle interazioni interstrato tra gli elettroni la densità critica per la cristallizzazione di Wigner in un 2DJ isolato è inferiore a quella di un 2DJ inserito in un LEG).

Gran parte dei contributi originali del lavoro di tesi riguardano l'analisi di alcune regole di somma del gas di elettroni stratificato nel limite classico e dei comportamenti asintotici delle sue funzioni di correlazione troncate¹, per grandi separazioni spaziali tra le particelle, che chiameremo 'clustering'. In particolare studieremo i seguenti sistemi: il 2DJ classico (già ampiamente studiato in letteratura), il LEG con 2, 3 ed un numero finito di piani ed infine il LEG con un numero infinito di piani come 'limite termodinamico' del caso precedente. Il punto importante che abbiamo voluto sottolineare è che per un monostrato ed in generale per un LEG con un numero finito di piani, un decadimento algebrico delle correlazioni ed un decadimento algebrico del potenziale sono consistenti tra loro. Cioè tale situazione è compatibile con l'equazione di Poisson e con le equazioni di equilibrio sulle funzioni di correlazione. In questo caso la mancanza di un decadimento con legge esponenziale nelle funzioni di correlazione (clustering esponenziale) caratteristico dei sistemi omogenei tridimensionali, è un effetto della limitatezza spaziale del sistema di cariche (lungo \hat{z}). Ci aspettiamo quindi che per quanto riguarda il tipo di clustering compatibile con le equazioni di equilibrio, il LEG con un numero infinito di piani che si estende in tutto lo spazio 3D, abbia un comportamento diverso dal LEG con un numero finito di piani. Vedremo che il LEG nel limite termodinamico sul numero di piani è equivalente al sistema, meno realistico ma più semplice 'matematicamente' [9] del LEG con N_p finito ma con condizioni cicliche sul primo e sull'ultimo piano. Mostriamo inoltre che in tale sistema preso per $d \rightarrow 0$ (quando diventa un continuo lungo \hat{z}) il clustering esponenziale è compatibile con la struttura delle equazioni di equilibrio. In tal caso il LEG ha un comportamento simile a quello di un Jellium ad una componente di carica nel limite classico (abbreviato con la sigla OCP dall'inglese 'One-Component-Plasma') in 3D omogeneo (in cui valgono le stesse condizioni di

¹Vedi (4.19) e (4.20)

clustering [10]).

1.2 Regole di somma e andamenti asintotici

Nello studio dei fluidi carichi siamo guidati da tutta una serie di 'condizioni al contorno' esatte, sulle funzioni di correlazioni statiche e dinamiche del sistema di particelle cariche all' equilibrio termodinamico, su cui è possibile controllare risultati numerici e teorici. Queste condizioni che chiameremo regole di somma, esprimono sempre, in un modo o in un altro, le proprietà di schermo e di neutralità, caratteristiche fondamentali di un qualunque sistema Coulombiano.

Guidati dalle regole di somma note per il sistema dell' OCP tridimensionale, e riassunte nell' articolo di rassegna di Ph.A.Martin [11], abbiamo trovato per alcune di esse la forma assunta per il sistema del LEG, presentandone una derivazione fondamentale basata sui principi della meccanica statistica. Per capire meglio di cosa stiamo parlando, elenchiamo tali regole di somma come appaiono nell' OCP tridimensionale. Queste si dividono in due gruppi: quelle che riguardano la statica del sistema e quelle che riguardano la dinamica.

(i) Statica.

Lo stato di equilibrio termodinamico di un sistema di N corpi è completamente determinato dalla conoscenza delle N funzioni di distribuzione ridotte ad n corpi ($n \leq N$) $\rho^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$. Esse sono definite² in modo tale che $\rho^{(n)}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) d\mathbf{r}_1 \dots d\mathbf{r}_n$ sia la probabilità che osservando la configurazione spaziale del sistema di N corpi, un corpo sia nel volume $d\mathbf{r}_1$ intorno a \mathbf{r}_1 , un secondo in $d\mathbf{r}_2$ intorno a \mathbf{r}_2 , ecc ... In genere si trattano in pratica solo le prime due o tre distribuzioni ridotte. Gran parte delle informazioni sulla struttura dei sistemi fluidi deriva dalla conoscenza della funzione di distribuzione radiale $g(\mathbf{r}) = \rho^{(2)}(\mathbf{r}, O)/n^2$ o del fattore di struttura statico $S(\mathbf{q})$. Queste funzioni sono legate dalla relazione:

$$S(\mathbf{q}) = 1 + n \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} [g(\mathbf{r}) - 1] \quad , \quad (1.1)$$

dove n è la densità di particelle del sistema. La divergenza del potenziale Coulombiano per $|\mathbf{r}| = 0$ impone che nel sistema classico si abbia $\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow 0} g(|\mathbf{r}|) = 0$; inoltre due particelle a grande distanza sono scorrelate così che $\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} g(|\mathbf{r}|) = 1$; infine per la (4.28) si ha $\lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow \infty} S(\mathbf{q}) = 1$. Il comportamento di $S(\mathbf{q})$ per piccoli $|\mathbf{q}|$ è in generale, meno ovvio e costituisce l' aspetto più caratteristico della statica dell' OCP. Esso è soggetto alle seguenti regole di somma:

- *Regola di somma di carica o di elettroneutralità e regole di somma multipolari.*

$$\lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} S(\mathbf{q}) = 0 \quad \text{ovvero} \quad n \int d\mathbf{r} [g(\mathbf{r}) - 1] = -1 \quad , \quad (1.2)$$

²Vedi l' introduzione al capitolo 2

esprime il fatto che la nuvola di cariche schermante una carica e del fluido ha una carica totale $-e$ (schermo completo).

La regola di somma di carica costituisce la più semplice di un insieme di regole di somma, chiamate multipolari, che dipendono dal tipo di decadimento asintotico delle funzioni di correlazione troncate del sistema Coulombiano per grandi separazioni spaziali tra le cariche (vedi la proposizione 2.2 in [11]). Le regole di somma multipolari (l,n), espresse in termini delle armoniche sferiche $Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}})$, per $\mathbf{r}_1 \neq \dots \neq \mathbf{r}_n$ hanno la seguente forma:

$$\int d\mathbf{r} |\mathbf{r}|^l Y_{l,m}(\hat{\mathbf{r}}) [\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) - \rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)] \quad (1.3)$$

$$+ \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \rho(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = 0 \quad . \quad (1.4)$$

L'origine di queste regole di somma risiede nella natura a lungo raggio del potenziale Coulombiano. Esse non sono influenzate da interazioni a raggio finito tra le particelle ed esprimono il fatto che le correlazioni non possono decrescere 'più velocemente' dell'interazione totale (quella diretta più quella indotta).

- *Regola di somma di Stillinger-Lovett o condizione sul secondo momento.*

$$\lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \frac{S(\mathbf{q})}{|\mathbf{q}|^2} = \frac{1}{K_D^2} \quad \text{ovvero} \quad n \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}|^2 [g(\mathbf{r}) - 1] = -\frac{6}{K_D^2} \quad , \quad (1.5)$$

esprime la capacità del fluido di schermare una qualunque distribuzione di carica esterna su una distanza dell'ordine della lunghezza di schermo di Debye-Hückel $\lambda_D = K_D^{-1} = 1/\sqrt{4\pi n\beta e^2}$ (dove $\beta = 1/K_B T$).

- *Regola di somma sulla compressibilità o condizione sul quarto momento.*

$$\lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \frac{S(\mathbf{q}) - |\mathbf{q}|^2/K_D^2}{|\mathbf{q}|^4} = -\frac{\chi_T^o}{\chi_T} \frac{1}{K_D^4} \quad \text{ovvero}$$

$$n \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}|^4 [g(\mathbf{r}) - 1] = -\frac{\chi_T^o}{\chi_T} \frac{120}{K_D^4} \quad , \quad (1.6)$$

esprime il fatto che la risposta del fluido ad una perturbazione statica con grande lunghezza d'onda (corrispondente ad una compressione uniforme) deve essere legata alla compressibilità termodinamica χ_T del fluido (con $\chi_T^{-1} = n(\partial p/\partial n)_{T,N}$). Abbiamo indicato con χ_T^o la compressibilità isoterma di un gas ideale classico, cioè β/n .

La proprietà rilevante dei sistemi Coulombiani classici è che le correlazioni possono decadere, e spesso decadono, molto più velocemente di una qualunque potenza

inversa della distanza tra le particelle [10]. Quando questo accade lo schermo delle cariche fisse è perfetto. La densità di particelle in eccesso non ha momenti di multipolo di alcun ordine.

Dall'analisi di Alastuey e Martin [10] sul decadimento delle correlazioni di fluido classico, ricaviamo che se il potenziale di interazione tra le particelle $\phi(\mathbf{r})$ ha un andamento a grandi $|\mathbf{r}|$ del tipo $\phi(\mathbf{r}) \sim |\mathbf{r}|^{-s}$, allora le funzioni di correlazione troncate di uno stato di equilibrio dell' OCP non possono decadere più velocemente di $|\mathbf{r}|^{-(6-s)}$ quando $0 < s < 2$ e $s \neq 1$ e più velocemente di $|\mathbf{r}|^{-3}$ quando $2 \leq s < 3$. Il caso Coulombiano $s = 1$ è l'unico ³ in cui il decadimento delle funzioni di correlazione deve essere [10] più veloce di qualunque potenza inversa della distanza (in accordo con la teoria di Debye-Hückel) ⁴.

In questo lavoro di tesi presenteremo le proprietà di clustering delle funzioni di correlazione del 2DJ che è già stato studiato in Ref. [10], e del LEG per $N_p = 2, 3$ e ∞ .

Le regole di somma sono importanti nello studio dei plasmi fortemente accoppiati, dove l'interazione Coulombiana tra le particelle gioca un ruolo essenziale e non può essere considerata una debole perturbazione. In questo limite di forte accoppiamento ogni relazione esatta fornisce informazioni importanti. Inoltre, se si possiede una funzione di correlazione di coppia ottenuta da teorie approssimate e si vogliono ricavare informazioni su correlazioni di ordine maggiore, allora dovremmo usare costruzioni che rispettino le regole di somma. Infine, simili controlli sono necessari nel derivare equazioni integrali approssimate per la funzione di correlazione di coppia, chiudendo con un 'ansatz' opportuno ad esempio le equazioni di equilibrio gerarchiche di Born-Green-Yvon (BGY).

(ii) *Dinamica.*

Lo stato dinamico di un sistema classico di N corpi ad ogni istante temporale t , è definito dalle funzioni di correlazione $\rho(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}'; \dots; t | \mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1; \dots; \mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n)$ tra un insieme di particelle con posizioni e velocità $\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}'; \dots$ al tempo t ed un altro $\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1; \dots; \mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n$ al tempo $t = 0$ (definite nella sottosezione 4.6.1). Ometteremo nelle funzioni di correlazione le variabili di velocità su cui integriamo.

Anche la dinamica di un fluido carico classico offre una serie di proprietà particolari: in presenza di uno sbilanciamento di cariche, provocato da cause esterne, il sistema tenderà a ristabilire la neutralità di carica. Però a differenza del caso statico, la nuvola di cariche coinvolta in tale processo avrà in generale dei multipoli non nulli in conseguenza: (i) degli effetti di inerzia che impediscono l'istantanea formazione dello schermo perfetto; (ii) dei processi di collisione tra le particelle che

³Per $s > 3$ (caso integrabile) le correlazioni decadono esattamente come $|x|^{-s}$. Infine se ϕ è a raggio finito, il clustering è esponenziale.

⁴È stato verificato esplicitamente da Jancovici [12] che, per l' OCP bidimensionale con interazione $-\ln(\mathbf{r}/r_o)$ a $\beta e^2 = 2$, le correlazioni hanno un decadimento gaussiano.

rompono lo schermo perfetto della nuvola. Per questo motivo le correlazioni dipendenti dal tempo non mostrano un clustering esponenziale nello spazio, nemmeno nell'intervallo di parametri termodinamici caratteristici per una fase di plasma.

Soltanto un numero limitato di regole di somma rimarranno vere nel caso dinamico:

- Generalizzazione della regola di somma di carica. La regola di somma di carica vale a tutti i tempi, quando specifichiamo velocità e posizione delle particelle fissate inizialmente:

$$\int d\mathbf{r} \rho(\mathbf{r}; t | \mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1; \dots; \mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n) = 0 \quad . \quad (1.7)$$

- Generalizzazione della regola di somma di dipolo. La regola di somma di dipolo vale a tutti i tempi, quando specifichiamo solo la posizione delle particelle fissate inizialmente:

$$\int d\mathbf{r} \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}; t | \mathbf{r}_1; \dots; \mathbf{r}_n) = 0 \quad . \quad (1.8)$$

- Generalizzazione della regola di somma di Stillinger-Lovett.

$$\lim_{|\mathbf{q}| \rightarrow 0} \frac{S(\mathbf{q}; t)}{|\mathbf{q}|^2} = \frac{\cos(\omega_p t)}{K_D^2} \quad . \quad (1.9)$$

dove adesso $S(\mathbf{q}; t)$ è la funzione di struttura dinamica di van Hove ed ω_p è la frequenza di plasma $\sqrt{4\pi n e^2 / m}$.

Nessun'altra regola di somma multipolare è soddisfatta dalle correlazioni dipendenti dal tempo dell'OCP in 3D, come si deduce [13] dall'espansione a piccoli tempi per $S(\mathbf{r}; t)$. I coefficienti di t^2 , t^4 e t^6 di tale espansione decadono velocemente nello spazio, se le correlazioni statiche hanno un decadimento asintotico esponenziale, mentre il coefficiente di t^8 decade algebricamente come $1/|\mathbf{r}|^{10}$ per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$.

Da una analisi del clustering spaziale compatibile con la gerarchia BBGKY (Born-Bogolyubov-Green-Kirkwood-Yvon), si conclude che la funzione di struttura dinamica deve decadere non più lentamente di $1/|\mathbf{r}|^6$ [13].

Da questi argomenti, anche se non riusciamo a determinare l'esatto comportamento asintotico di $S(\mathbf{r}; t)$, ricaviamo forti indicazioni dell'assenza di un regime esponenziale nella dinamica dell'OCP tridimensionale. Cioè $S(\mathbf{q}; t)$ non è mai analitica a $\mathbf{q} = 0$ per $t \neq 0$. Questo è qualitativamente diverso dalle previsioni della teoria di campo medio (l'approssimazione di Vlasov) che dà un fattore di struttura analitico⁵. Da questo punto di vista l'effetto delle correlazioni a 3 e più punti non può essere trascurato.

Nel lavoro di tesi ritroveremo per il LEG la regola di somma di carica dinamica, il coefficiente di t^2 dell'espansione a piccoli tempi della funzione di struttura dinamica e discuteremo il coefficiente di t^4 di tale sviluppo in connessione con le eccitazioni collettive, di singola particella e collisionali del LEG classico.

⁵La dinamica di Vlasov si riduce al moto ad un corpo in un potenziale di campo medio e non include quindi i processi di collisione (vedi sezione 3.3)

1.3 Motivazioni

Nel lavoro di tesi abbiamo descritto tre recenti lavori (due teorici ed uno sperimentale) in cui il LEG assume ruoli diversi: Miesenböck e Tosi [7] utilizzano il LEG come semplice modello del sistema di elettroni della grafite nei GICs, per ricavare i potenziali effettivi di coppia negli intercalati metallici. Świerkowski e Neilson [8] lo utilizzano come semplice modello del sistema di elettroni di una eterostruttura a semiconduttori, per mostrare che in opportune strutture di buche quantistiche multiple è possibile aumentare la densità critica per la cristallizzazione di Wigner in un liquido di elettroni bidimensionale in assenza di campo magnetico. Infine Eisenstein, Pfeiffer e West [14] utilizzano il LEG con $N_p = 2$ per determinare sperimentalmente il valore assoluto ed il segno della compressibilità del gas di elettroni bidimensionale.

Questi lavori indicano l'opportunità di trattare correttamente le correlazioni Coulombiane tra elettroni giacenti su piani diversi, che chiameremo correlazioni interpiano. In particolare in entrambi i modelli teorici proposti da Miesenböck e Tosi e da Świerkowski e Neilson per lo studio della risposta dielettrica del LEG, si trascurano le correlazioni Coulombiane interpiano a corto raggio: nel primo, i valori dei parametri del modello permettono di trascurare, in prima approssimazione, tali correlazioni interstrato; nel secondo si adotta fin dall'inizio una approssimazione di campo medio per la descrizione dell'accoppiamento tra piani diversi.

Preliminare ad un raffinamento di queste teorie è lo studio per il modello del LEG, delle regole di somma e del clustering delle correlazioni intrapiano e soprattutto interpiano.

1.4 Approccio

Partendo dai principi della meccanica statistica abbiamo cercato regole di somma sulle funzioni di correlazione statiche e dinamiche del modello del LEG nel limite classico. Ad esempio nell'analisi della statica del LEG, seguendo l'approccio adottato da Martin nello studio delle regole di somma nei fluidi carichi [11], esploreremo le conseguenze non banali dell'assumere che le funzioni di correlazione di equilibrio di un LEG nel limite termodinamico di piani infinitamente estesi, esistano e soddisfino le equazioni integrali statiche identiche a quelle della gerarchia BGY (Born-Green-Yvon) per il sistema classico con volume finito. Queste equazioni si ricavano dalla gerarchia BBGKY dipendente dal tempo che descrive l'evoluzione delle funzioni di distribuzione ridotte a n-corpi dipendenti dalle posizioni e dalle velocità, $\rho^{(n)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{v}_1; \dots; \mathbf{r}_n, \mathbf{v}_n; t)$. Tali equazioni saranno anche il punto di partenza per lo studio della dinamica del LEG. La gerarchia BBGKY ha la forma [15]:

$$\frac{\partial \rho^{(n)}}{\partial t} = H_n \rho^{(n)} + C_{n,n+1} \rho^{(n+1)} \quad , \quad (1.10)$$

dove H e C sono operatori lineari. Assumendo che $\rho^{(n)}$ sia un prodotto di una parte Maxwelliana nelle velocità e di una parte puramente spaziale. La gerarchia BGY si

ottiene ponendo $\partial\rho^{(n)}/\partial t = 0$.

Sappiamo che queste equazioni stazionarie e le BBGKY sono identità per le funzioni di distribuzione dell'insieme canonico o del gran canonico del LEG di volume finito. Noi assumeremo *a priori* che esista il limite delle funzioni di distribuzione per volume infinito del LEG a N_p piani e che in tale limite, esse continuino a soddisfare le stesse equazioni gerarchiche ⁶.

1.5 Scopo

Lo scopo del Lavoro di tesi è riassunto nei seguenti punti:

- (i) Determinare alcune regole di somma della statica e della dinamica del LEG classico.
- (ii) Studiare la dipendenza dalla dimensionalità spaziale delle proprietà di clustering spaziale delle funzioni di correlazione statiche di un sistema Coulombiano nel limite classico, sfruttando la caratteristica del LEG di fornire un sistema di cariche a metà strada tra l'OCP in 2D e quello in 3D.

⁶È in generale ragionevole aspettarci che la seconda assunzione valga se vale la prima.

Capitolo 2

Sistemi elettronici bidimensionali

2.1 Il sistema di elettroni in 2D quantistico e classico

L'interesse per lo studio del gas di elettroni in spazi di dimensione minore di tre è certamente giustificato dalla convinzione che sia possibile approfondire la conoscenza di un certo tipo di sistema studiando l'influenza della dimensionalità spaziale sulle sue proprietà fisiche; ma, soprattutto, è giustificato dal fatto che esistono situazioni fisiche descrivibili in termini di un gas di elettroni quasi unidimensionale (1DEG) o quasi bidimensionale (2DEG). Ad esempio elettroni quantistici in uno strato di inversione di un sistema metallo-ossido-semiconduttore (MOS come ad esempio Si-SiO₂-metallo) [3, 4], o elettroni classici intrappolati dal potenziale immagine, sulla superficie dell'He liquido [1], formano un gas di elettroni quasi bidimensionale ed hanno offerto negli anni '70 l'opportunità di sviluppare e studiare alcune nuove aree della fisica importanti per la comprensione delle proprietà dei film sottili e delle interfacce.

Il sistema ideale del gas bidimensionale di elettroni interagenti può essere parametrizzato da quattro costanti fondamentali: la massa m dell'elettrone, la sua carica e ¹, l'area media che occupa $1/n_2$ ed infine la temperatura $T = 1/\beta K_B$ (dove nel caso classico β^{-1} è la energia cinetica media per elettrone). In funzione di questi parametri possiamo esprimere due costanti caratteristiche del sistema elettronico: (i) la distanza media tra le particelle, r_o , tale che $\pi r_o^2 n_2 = 1$ ed a cui spesso ci si riferisce in unità del raggio di Bohr ($a_B = \hbar^2/m_e^2$) indicandola con $r_s = r_o/a_B$; (ii) la costante di accoppiamento tra gli elettroni, definita come il rapporto tra l'energia

¹Indicheremo con e la carica effettiva dell'elettrone. Chiamando e_o l'unità di carica elettrica, avremo: (i) nel caso dello strato di inversione, in cui supponiamo il piano di elettroni circondato da un mezzo (nel MOS il semiconduttore) di costante dielettrica ϵ_f , gli elettroni interagiscono col potenziale Coulombiano tridimensionale con la carica effettiva $e = -e_o/\sqrt{\epsilon_f}$; (ii) nel caso di elettroni nello stato di superficie dovuto alle forze immagini di un dielettrico di costante dielettrica ϵ_d questi interagiscono col potenziale Coulombiano tridimensionale con la carica effettiva $e = -e_o\sqrt{2/(1+\epsilon_d)}$.

potenziale Coulombiana media e l' energia cinetica media per particella. La costante di accoppiamento è data per un sistema classico da $\Gamma = \beta e^2 / r_o$ ed è proporzionale a $\sqrt{n_2}$, mentre per un sistema quantistico è la stessa $r_s = (mr_o^2 / \hbar^2)(e^2 / r_o)$ ed è allora proporzionale a $1 / \sqrt{n_2}$.

2.2 Elettroni sulla superficie dell' elio liquido

Un monostrato di elettroni intrappolati sulla superficie dell' elio liquido costituisce un buon esempio di sistema realizzabile in laboratorio e descrivibile (vedi ad esempio [16]) col modello ideale di un 2DJ nel limite classico, (spesso definito il modello del *plasma ad una componente* classico, bidimensionale abbreviato OCP (dall' inglese 'One-Component-Plasma') classico in 2D). Questo fatto è essenzialmente dovuto, oltre che alla geometria del sistema fisico, alla sua proprietà di avere densità superficiali di elettroni che possono essere variate di diversi ordini di grandezza e alla proprietà della superficie dell' elio di essere sufficientemente 'pulita' (priva di trappole, impurità libere cariche, centri diffusori, ...).

Un elettrone in eccesso fuori da una superficie libera di He liquido può venir legato proprio 'sopra' la superficie (vedi figura 2.1) in una buca di potenziale formata

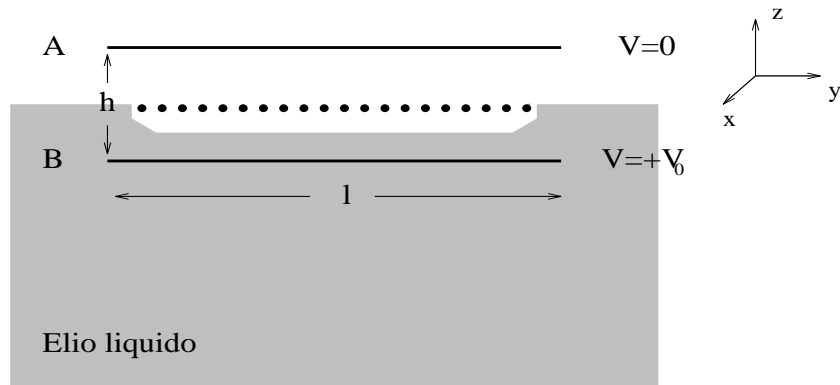


FIGURA 2.1: Rappresentazione schematica dell' esperimento proposto da R.S.Crandal [17] per creare un sistema bidimensionale di elettroni sulla superficie dell' elio. Il piatto metallico B è immerso nell' elio, il piatto metallico A collegato a terra è sopra la superficie dell' elio. Gli elettroni sono mostrati dai puntini sulla superficie dell' elio. La lunghezza l rappresenta il diametro dei piatti e dà una rozza misura delle dimensioni del sistema di elettroni. Deve essere $h \ll l$ per minimizzare gli effetti di bordo e $h \gg r_o$ per poter considerare il campo elettrico tra A e B uniforme.

dalla combinazione del potenziale immagine classico a lungo raggio e della barriera repulsiva (di $\sim 1\text{eV}$ e dovuta all' affinità elettronica negativa dell' ^4He) che impedisce la sua penetrazione nel liquido. Mentre l' elettrone è legato lungo la direzione perpendicolare alla superficie con energia di legame 0.7meV , esso rimane libero di

muoversi parallelamente alla superficie ². Per un elettrone legato, la dimensione spaziale della sua funzione d'onda perpendicolarmente alla superficie è in generale $\sim 10^2 \text{\AA}$ mentre la distanza media dalla superficie dell'elio liquido è dell'ordine di 70\AA . Le densità superficiali raggiungibili sperimentalmente sono ³ $10^5 \text{cm}^{-2} \leq n_2 \leq 10^9 \text{cm}^{-2}$. Una densità elettronica tipica di 10^8cm^{-2} corrisponde ad una distanza media tra gli elettroni di $r_o \sim 10^4 \text{\AA}$. Dal confronto tra l'ordine di grandezza della distanza media tra gli elettroni e l'estensione spaziale della funzione d'onda di singolo elettrone lungo la normale alla superficie dell'elio liquido, ricaviamo che il sistema può essere considerato essenzialmente bidimensionale.

Anche nel limite sperimentale di $n_2 = 10^9 \text{cm}^{-2}$, l'energia di Fermi è 0.03K ⁴ che è piccola relativamente alle temperature sperimentali comunemente in gioco; possiamo quindi dire che gli elettroni obbediscono alla statistica classica a differenza di ciò che accade per i sistemi di elettroni quasi 2D realizzati con i semiconduttori, in cui gli elettroni formano in genere sistemi quantistici degeneri (ad esempio in uno strato di inversione Si-SiO₂ le densità tipiche degli elettroni sulla superficie di Si sono di $\sim 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e la massa effettiva degli elettroni parallela a tale superficie è $\sim 0.2m$, valori che danno a tale sistema una temperatura di Fermi di $\sim 140 \text{K}$). Possiamo allora dire che gli elettroni interagiscono come cariche puntiformi ed hanno una dinamica confinata in uno spazio quasi bidimensionale. Ad una temperatura indicativa di 0.5K l'intervallo di densità superficiali raggiungibili sperimentalmente corrisponde ad un intervallo per le costanti di accoppiamento Γ (rapporto tra energia potenziale ed energia cinetica medie per elettrone) raggiungibili di $2 \leq \Gamma \leq 200$.

2.2.1 Cristallizzazione di Wigner classica

Un gas di elettroni classico a temperatura zero forma sempre uno stato cristallino. Nel 1934 Wigner [18] anticipò che un gas di elettroni tridimensionale quantistico immerso in un fondo uniforme e neutralizzante di cariche positive nel suo stato fondamentale, assume per densità sufficientemente basse una configurazione reticolare che gli permette di minimizzare la sua energia nonostante l'aumento di energia cinetica previsto dal principio di indeterminazione di Heisenberg per la localizzazione degli elettroni nei siti del reticolo.

Per lo stato fondamentale la cristallizzazione di Wigner si verifica solo a basse densità, cioè ad alti r_s , a causa della competizione dell'energia cinetica di Fermi per elettrone $\propto 1/r_s^2$ e di quella potenziale media per elettrone $\propto 1/r_s$. Wigner

²In generale si assume di poter tener conto di qualunque interazione tra gli elettroni ed il liquido in grado di modificare il moto parallelo alla superficie attraverso l'approssimazione di massa effettiva degli elettroni.

³Come vedremo più avanti, questo ampio spettro di densità sperimentalmente raggiungibili, ha reso tale sistema particolarmente utile nello studio e nella realizzazione sperimentale della cristallizzazione di Wigner di un sistema classico 2D.

⁴Per un 2DEG abbiamo che la temperatura di degenerazione di Fermi è legata alla densità superficiale di elettroni n_2 dalla relazione $T_F = E_F/K_B = \pi \hbar^2 n_2 / K_B m^*$ con m^* la massa effettiva dell'elettrone.

osservò che per minimizzare l'energia potenziale al tendere di $r_s \rightarrow \infty$, gli elettroni si sarebbero dovuti 'evitare' il più possibile, situazione che è certamente realizzata se si localizzano sui siti di un reticolo cristallino ⁵. La transizione di Wigner può essere interpretata come una instabilità dello stato metallico, in cui il sistema di elettroni possiede una superficie di Fermi sferica ben definita, rispetto allo stato non metallico in cui abbiamo la localizzazione spaziale degli elettroni.

Simulazioni numeriche di Monte Carlo per lo stato fondamentale prevedono la transizione di fase dallo stato liquido allo stato solido per $r_s \sim 100 \pm 20$ nel sistema di elettroni in 3D [22] ed a $r_s \sim 37$ nel sistema in 2D [26]. Questi valori giustificano le difficoltà sperimentali nell'osservare tali transizioni: il maggiore ostacolo sperimentale è rappresentato dalla tendenza alla localizzazione degli elettroni dovuta al disordine (impurezze ecc ...) a densità più alte di quelle previste per la cristallizzazione di Wigner.

L'anticipazione di Wigner è stata seguita da un grande interesse teorico e sperimentale rivolto essenzialmente alla ricerca di evidenze sperimentali per il fenomeno della cristallizzazione degli elettroni. Crandall e Williams [27] osservarono che l'analoga transizione di fase sarebbe dovuta avvenire nell'OCP classico bidimensionale per densità superficiali di carica sufficientemente alte.

Nel caso del sistema classico, essendo l'energia cinetica per particella indipendente dalla densità, dovremmo trovare la transizione solo per alti valori della densità, cioè per $\Gamma \gg 1$. Effettivamente Grimes e Adams [2] hanno presentato nel 1979 le prime evidenze sperimentali per la transizione da un liquido di elettroni a un cristallo di elettroni (avente un reticolo con cella fondamentale triangolare), nel sistema di elettroni classici intrappolati sulla superficie dell'elio liquido. Essi trovano una Γ per la fusione di $\Gamma_f = 137 \pm 15$ ⁶ (la transizione è stata studiata per $3 \cdot 10^8 \text{cm}^{-2} \leq n_2 \leq 9 \cdot 10^8 \text{cm}^{-2}$ e sono state ricavate temperature di fusione nell'intervallo $0.35K \leq T_f \leq 0.65K$ confronta con figura 2.2) in accordo col precedente calcolo di Monte Carlo di Gann ed al. [28], che fissava la fusione per $110 \leq \Gamma_f \leq 140$ (vedi figura 2.2) e stabiliva la stabilità del reticolo triangolare contro l'instabilità di quello quadrato.

⁵Usando i calcoli di Fuchs [19] sulla costante di Madelung di diverse strutture reticolari si trova, in accordo con le previsioni di Wigner, che quella con minore energia potenziale per qualunque valore della densità è il cristallo b.c.c.. Questo porta ad una energia per elettrone circa due volte più bassa di quella ottenuta in approssimazione di Hartree-Fock, mostrando che un determinante di Slater di onde piane non ha più significato fisico per $r_s \rightarrow \infty$. Nonostante ciò le altre possibili configurazioni reticolari sono solo di poco più alte in energia. Foldy [20] ha mostrato che esiste una transizione all'f.c.c., o a qualche altro reticolo, a temperature maggiori. Con un approccio basato sulla teoria del funzionale densità, Senatore e Pastore [21] studiando la stabilità rispetto al liquido omogeneo con spin polarizzati del cristallo di elettroni bcc ed fcc, hanno trovato che il bcc diventa stabile ad $r_s = 102$ (in accordo con [22]). Con lo stesso tipo di approccio Tozzini e Tosi [23] dimostrano la stabilità meccanica contro piccole deformazioni, per il reticolo bcc ad $r_s = 100$.

Varie stime [24] basate sull'approssimazione armonica applicata al reticolo elettronico danno come distanza minima tra gli elettroni richiesta per la cristallizzazione: $r_o = 10-50\text{\AA}$. Infine Kugler [25] ha dimostrato che un reticolo di elettroni anarmonico può essere stabile solo per $r_o < 350\text{\AA}$.

⁶ Poiché $\Gamma = e^2/r_s K_B T$ allora la curva di fusione $\Gamma = \Gamma_f$ ha la forma $T_f = \text{costante} \times \sqrt{n_2}$.

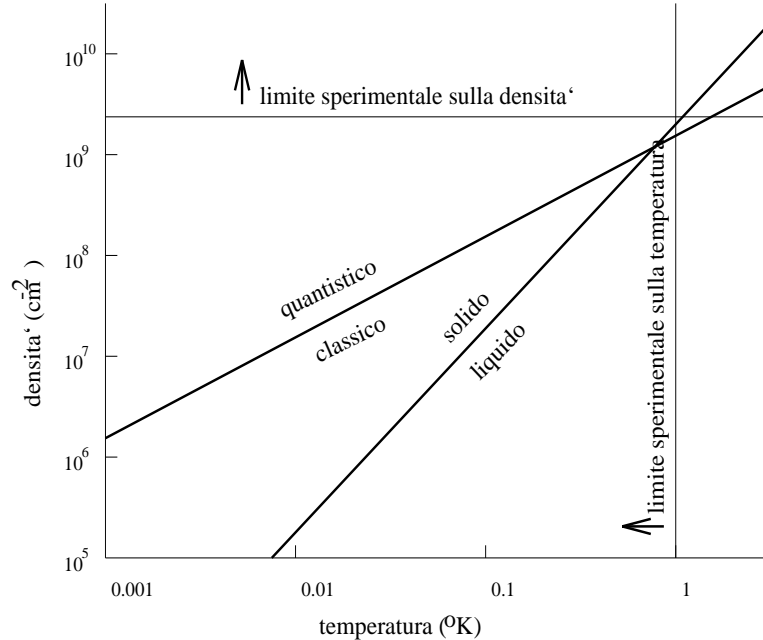


FIGURA 2.2: Grafico densità vs temperatura che mostra la zona transizione di fase prevista da Gann ed al. [28]. Soltanto la regione di temperature maggiori di 1K e di densità minori, approssimativamente, di $2 \cdot 10^9 \text{cm}^{-2}$ erano state esplorate sperimentalmente. La linea dove la lunghezza d'onda termica di de Broglie $\lambda_{dB} = \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/m}$ è un quarto della distanza tra i primi vicini è stata inclusa per dare una indicazione della regione in cui gli effetti quantistici diventano importanti.

Le ricerche sperimentali sull' analogo quantistico ⁷ del 2DEG sulla superficie dell' elio liquido, ossia il 2DEG formato negli strati di inversione a semiconduttori (di tipo MOS) ⁸, non hanno portato ancora a risultati definitivi anche se lo studio di tali sistemi in campi magnetici (che convertono l' energia cinetica di traslazione degli elettroni in energia cinetica di rotazione) ha portato, come vedremo meglio nella sottosezione 2.4.1, ad altre importanti osservazioni tra cui la più importante è stata la scoperta dell' effetto Hall frazionario. Il diagramma di fase qualitativo per un 2DEG su tutto lo spazio (n_2, T^2) è mostrato in figura 2.3.

Recentemente Świerkowski e Neilson [8] hanno mostrato teoricamente come la densità critica per la cristallizzazione di Wigner in un 2DEG quantistico (in assenza di campo magnetico) possa essere aumentata in opportune strutture di buche quantistiche multiple, come ad esempio la struttura a semiconduttori GaAs-AlGaAs che descriveremo nella sottosezione 2.4, fino ad un fattore tre rispetto al caso del singolo strato di elettroni per effetto delle correlazioni Coulombiane tra elettroni in diverse

⁷Van Horn [29] ha proposto che un sistema fisico quantistico in cui si potrebbe avere un reticolo di Wigner è costituito dal sistema degenere di protoni all' interno di una stella nana bianca.

⁸Suggerita nel 1972 da Chaplik [30] come un possibile sistema in cui poter osservare la cristallizzazione di Wigner.

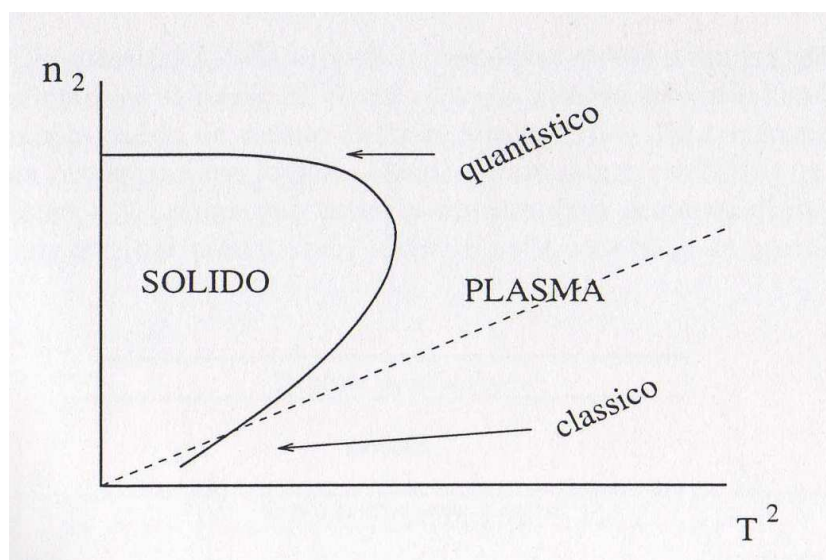


FIGURA 2.3: Mostra il diagramma di fase qualitativo di un 2DEG nello spazio (n_2, T^2) . La curva tratteggiata, $\lambda_{dB} \propto r_o$, determina la regione in cui gli effetti quantistici diventano importanti. La curva solida è la curva di fusione. Nel regime classico deve essere $T_f = \sqrt{n_{2f}}$ (vedi nota 6). Nel regime quantistico l'energia cinetica media per elettrone è data dall'energia di Fermi $E_F = (\hbar^2 \pi n_2)/m$, e la curva di fusione $E_F \propto 1/r_o$ impone $n_{2f} \sim \text{costante}$.

buche quantistiche. I loro argomenti verranno presentati in dettaglio nel capitolo 3.

È importante, a questo punto, commentare sull'esistenza nella fase 'solida' bidimensionale di un ordine cristallino a lungo-raggio. A questo proposito Alastuey e Jancovici [31] hanno dimostrato che in un sistema classico di elettroni bidimensionale, nonostante la natura a lungo raggio del potenziale Coulombiano $1/r$, non si può avere un ordine cristallino a lungo raggio; essi mostrano, col semplice argomento di Peierls basato sull'approssimazione armonica, e più rigorosamente, con un argomento ispirato all'approccio di Mermin, come la localizzazione degli elettroni di un 2DEG infinito sui siti ordinati di un reticolo cristallino a lungo raggio sia rotta dai fononi acustici trasversi. La dimostrazione ha comunque, come limitazione fondamentale, il fatto che si applica solo nel limite termodinamico⁹; e le sue conclusioni, naturalmente, non vietano l'esistenza di una fase solida caratterizzata da un'ordine a lungo raggio delle posizioni delle cariche, nel caso pratico di sistemi finiti che possono essere studiati in laboratorio o in simulazioni al computer.

2.3 Lo strato di inversione

Uno strato di inversione (o strato di accumulazione) di tipo n è realizzato sulla superficie di un semiconduttore di tipo p quando le bande di energia del semicondut-

⁹Il limite termodinamico costituisce anche ciò che toglie all'argomento di Alastuey e Jancovici completo rigore matematico: mancano infatti informazioni sull'esistenza del limite termodinamico delle funzioni di correlazione del sistema con superficie finita.

tore sono 'piegate', in prossimità della superficie, tanto da rendere il minimo della banda di conduzione inferiore al livello di Fermi. Questa distorsione delle bande può essere realizzata applicando un campo elettrico alla superficie del semiconduttore ad esempio in una configurazione Metallo-Ossido-Semiconduttore (MOS) quale quella mostrata in figura 2.4, oppure può essere provocata dalla presenza di impurità cariche (positivamente, nel nostro caso) vicino o sulla superficie in questione. Nel MOS siamo quindi in grado di realizzare uno strato superficiale di portatori mi-

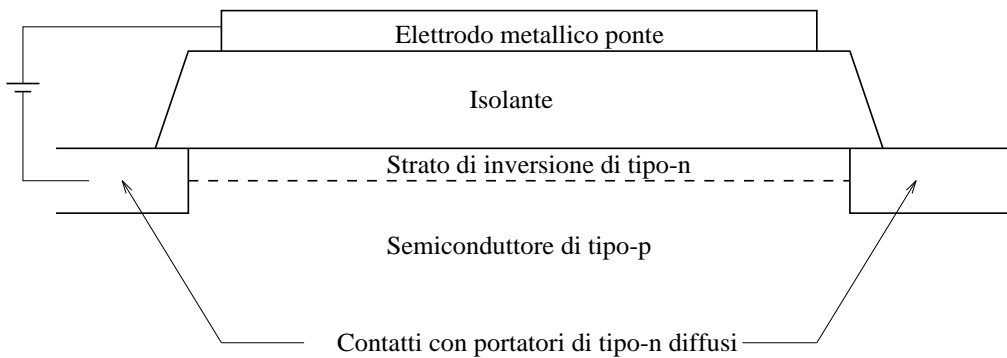


FIGURA 2.4: Struttura schematica Metallo-Isolante-Semiconduttore (MOS) per esperimenti da strati di inversione. La concentrazione di elettroni nello strato di inversione è variata cambiando il voltaggio di gate. La conduttanza dello strato di inversione è misurata applicando piccole differenze di potenziale tra i contatti di tipo n e misurando le correnti risultanti. Lo spessore tipico dello strato di inversione è 100\AA o meno, quello dell'ossido è generalmente compreso tra $1000 - 5000\text{\AA}$.

noritari, di densità controllabile tramite il campo elettrico applicato¹⁰ (e variabile, come minimo, di due ordini di grandezza), all'interfaccia tra il semiconduttore e l'ossido. Il campo elettrico utilizzato in uno strato di inversione è, in generale ($> 10^6\text{V/cm}$ [33]), sufficientemente forte da creare in prossimità della superficie una buca di potenziale la cui larghezza, nella direzione ortogonale all'interfaccia ossido-semiconduttore (asse \hat{z}), è piccola rispetto alla lunghezza d'onda dei portatori di carica. Tale buca, approssimativamente triangolare, porta alla quantizzazione [34] del moto dei portatori lungo l'asse \hat{z} . A ciascuno di questi stati quantizzati corrisponde una banda di livelli energetici continua al variare dell'impulso dei portatori parallelo alla superficie, ciò che chiamiamo sub-banda elettronica di superficie (la cui esistenza è stata verificata sperimentalmente da misure spettroscopiche [35]). A basse temperature, i portatori occupano quasi esclusivamente la sub-banda inferiore dando chiara evidenza, in esperimenti in campo magnetico, di una dinamica quasi 2D [32].

¹⁰Vale in generale [32] una relazione del tipo $n_2 = \epsilon(V_g - V_o)/4\pi\delta e$ in unità cgs, dove ϵ = costante dielettrica dell'ossido, V_g = potenziale di gate, V_o potenziale di gate di soglia, δ = spessore dell'ossido.

Consideriamo l' esempio concreto di elettroni intrappolati nell' interfaccia Si-SiO₂ [001]. La banda di conduzione del Si consiste di sei valli equivalenti con massa effettiva longitudinale $m_l = 0.98m$ e massa effettiva trasversa $m_t = 0.19m$. Il campo elettrico applicato rompe la degenerazione in gruppi di due e di quattro, in corrispondenza alle due diverse orientazioni dell' ellissoide rispetto alla superficie, e la sub-banda ad energia più bassa è formata dagli stati doppiamente degeneri con massa maggiore, m_l , normale alla interfaccia [33]. Le energie degli elettroni in questa sub-banda sono date da:

$$E_o(\mathbf{k}) = E_o + \frac{\hbar^2}{2m_t}(k_x^2 + k_y^2) \quad , \quad (2.1)$$

e la corrispondente funzione d' onda di singolo elettrone è data (sopprimendo le variabili di spin) da :

$$\psi_o(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{A}}\zeta_o(z)e^{i(k_x x + k_y y)} \quad , \quad (2.2)$$

dove abbiamo indicato con A l' area dello strato e con $\zeta_o(z)$ la funzione d' onda di involuppo che descrive il confinamento degli elettroni nello strato di inversione e che si assume essere la stessa per tutti gli elettroni quando solo la sub-banda più bassa in energia è popolata ¹¹. Tale funzione di involuppo può essere determinata risolvendo l' equazione di Schrödinger autoconsistentemente con l' equazione di Poisson [4].

Quando più di una sub-banda dello strato di inversione (di tipo MOS) è popolata allora esso fornisce un sistema fisico che può essere descritto attraverso un modello costituito da un numero limitato di 2DEG (mai così elevato come quelli che si raggiungono, come vedremo più avanti, nei super-reticoli) paralleli e spazialmente separati (per i nodi delle funzioni d' onda degli stati elettronici eccitati). Il riempimento di più sub-bande è facilmente realizzabile nello strato di inversione di InSb a densità moderata [36]. In questi campioni perdiamo la libertà di manipolare la separazione spaziale tra i gas bidimensionali di cariche che, come vedremo, costituisce una delle proprietà che rendono particolarmente interessanti i super-reticoli.

Alla fine degli anni '70 tale interesse verso portatori di carica confinati in uno spazio bidimensionale è stato alimentato dagli sviluppi nella realizzazione sperimentale di tali sistemi in super-reticoli stratificati descrivibili in prima approssimazione da una matrice periodica di 2DEG (LEG o dall' inglese 'Layered Electron Gas'). Nel seguito descriveremo due classi importanti e complementari di super-reticoli stratificati costituite dai *composti intercalati*, realizzati inserendo strati atomici o molecolari della specie chimica 'ospite' (l' intercalato) tra gli strati di un materiale 'ospitante' stratificato naturalmente, e dai *materiali artificialmente stratificati*, tipicamente preparati con la tecnica della 'epitassia da fasci molecolari' (MBE dall' inglese 'Molecular-Beam-Epitaxy') o quella della 'deposizione chimica metallorganica da vapore' (MOCVD dall' inglese 'Metal-organic-Chemical-Vapour-Deposition')

¹¹Nel caso ideale del 2DEG in $z = 0$ prenderemo $|\zeta_o(z)|^2 = \delta(z)$. Questa approssimazione facilita lo studio analitico del sistema fisico.

tramite la deposizione, controllata piano per piano, delle specie costituenti sotto vuoto spinto.

2.4 Super-reticoli artificiali

Una rappresentazione schematica di super-reticolo artificiale costituito da due diversi materiali semiconduttori (ad es: InAs-GaSb, GaAs-AlAs, Ge-GaAs, ecc . . .) è data in figura 2.5. Nella direzione di crescita del super-reticolo (direzione \hat{z}) troviamo m

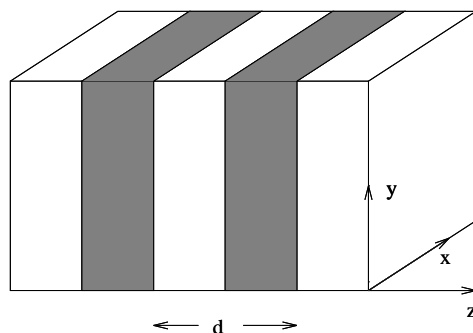


FIGURA 2.5: Super-reticolo ad eterogiunzione di periodicità d . Ciascuna cella fondamentale del super-reticolo consiste di un materiale M_1 di spessore d_1 e di un materiale M_2 di spessore d_2 .

monostrati atomici del materiale M_1 depositati, in modo netto su scala atomica, su n monostrati atomici del materiale M_2 a formare un super-reticolo con cella unitaria di dimensioni $(m + n)$ spaziate reticolari lungo la direzione di crescita. Un campione macroscopico di tale super-reticolo $M_1 - M_2$ è un nuovo materiale con proprietà di volume intermedie tra quelle dei materiali M_1 ed M_2 .

Nel tipico campione di super-reticolo a semiconduttori (di spessore $\sim 1\mu m$), la cella fondamentale è ripetuta molte volte (~ 100 volte) e può essere composta da pochi o da molti strati (avendo spessori da 10 \AA a 500 \AA). A questo proposito, possiamo osservare come i composti intercalati della grafite (i GICs) si possano considerare come il caso limite di super-reticoli artificiali dove uno dei costituenti di figura 2.5 è un singolo strato atomico o molecolare con una netta interfaccia verso l'altro costituente.

Due tipi di super-reticoli artificiali sono stati studiati in gran dettaglio: la struttura GaAs-Ga_xAl_{1-x}As, appartenente a quelli che sono chiamati super-reticoli di tipo I, e la eterostruttura InAs-GaSb, appartenente a quelli che sono chiamati super-reticoli di tipo II. La divisione dei super-reticoli artificiali nei due tipi dipende dal tipo di portatori intrappolati nelle loro buche di potenziale.

Il super-reticolo di tipo I GaAs-Ga_xAl_{1-x}As, è caratterizzato dal fatto che nel contatto con tra i due materiali, il band-gap di GaAs è completamente contenuto in quello di Ga_xAl_{1-x}As. Questo determina delle discontinuità su entrambe le bande di valenza (V) e di conduzione (C) e quindi sul band-gap dell' eterostruttura che abbiamo schematizzato in figura 2.6 (a) [37]. La discontinuità del band-gap del

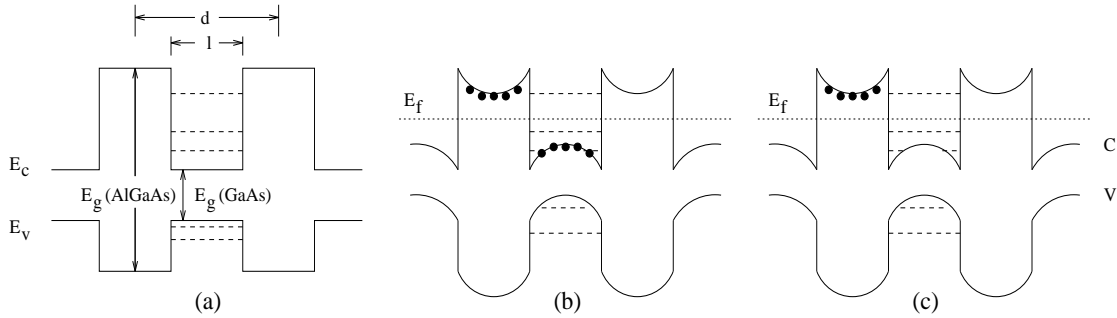


FIGURA 2.6: Mostra schematicamente le bande di conduzione e di valenza di un super-reticolo ad eterogiunzione GaAs-Ga_xAl_{1-x}As (per $x \sim 0.3$ abbiamo $\Delta E_c \sim 300 \text{ meV}$) con vari metodi di drogaggio: (a) non drogato (matrice periodica, con periodo d , di buche quantistiche di spessore l); (b) drogaggio uniforme (ad esempio tramite un fascio di Si (di tipo n) che investe, continuamente, la eterostruttura). Si raggiungono così mobilità dell' ordine $\mu \sim 1000 - 2500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ (c) drogaggio modulato (drogando, ad esempio con impurità di Si, solo i piani di Ga_xAl_{1-x}As fuori dalle regioni di interfaccia coi piani di GaAs così che data la trascurabile diffusione del Si alle temperature di crescita del super-reticolo ($\sim 600^\circ\text{C}$), i piani di GaAs conterranno solo impurità non intenzionali ($10^{14} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Si raggiungono con tale tecnica mobilità dell' ordine di $\mu \sim 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$). I punti neri rappresentano gli stati donori responsabili del trasferimento di carica alle sub-bande bidimensionali, rappresentate con le linee tratteggiate, nella banda di conduzione del GaAs. Col drogaggio il livello di Fermi si alza andando ad occupare la banda di conduzione del super-reticolo.

super-reticolo determina nella banda di conduzione (E_c) del piano di GaAs, buche di potenziale separate da barriere di potenziale sui piani di Ga_xAl_{1-x}As. Drogando selettivamente i piani di Ga_xAl_{1-x}As (ad esempio tramite la tecnica del drogaggio-modulato, vedi figura 2.6 (c)) con specie droganti di tipo n, produciamo donori ionizzati su tali piani ed elettroni nelle buche di potenziale laterali (sulle giunzioni con il GaAs). Una tale redistribuzione di carica crea un potenziale elettrostatico che piega le bande e confina gli elettroni intorno ($\sim 100 \text{ \AA}$) alle giunzioni lasciandoli liberi di muoversi parallelamente ad esse (dentro il foglio in figura 2.6). Infatti le bande piegate producono delle buche di potenziale unidimensionale che quantizzano il moto degli elettroni lungo la direzione di crescita del super-reticolo. La banda di conduzione del GaAs si divide così in una serie di sub-bande ben descrivibili tramite le bande caratteristiche del moto bidimensionale (ortogonale all' asse del super-reticolo) di elettroni liberi di opportuna massa effettiva. Se la densità elettronica non è troppo alta, così che soltanto la sub-banda più bassa sia occupata da elettroni, allora tale super-reticolo, a basse temperature, è ben schematizzabile da un sistema periodico di 2DEG spazialmente separati chiamato LEG (dall' in-

glese 'layered-electron-gas'). A questo proposito, molta attenzione è stata rivolta ai super-reticoli di GaAs-Ga_xAl_{1-x}As drogati, per la possibilità che hanno manifestato di raggiungere, sul piano di GaAs, mobilità molto alte ($10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) [37, 38] dovute alla separazione spaziale delle impurità droganti (nei piani Ga_xAl_{1-x}As) dai portatori mobili (nei piani GaAs); tali mobilità risultano quasi indipendenti, a temperatura ambiente, dallo spessore degli strati ed hanno, in generale, una dipendenza dalla temperatura fortemente dipendente dal drogaggio (quasi indipendenti dalla temperatura per $n \sim 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, fortemente decrescenti col raffreddamento del composto per $n < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Le più alte mobilità nei super-reticoli a semiconduttori sono state raggiunte introducendo strati molto sottili (con spessori vicini a quelli dei monostrati e chiamati "delta-drogaggio" [38]). In questo limite il trasferimento di carica, nel drogaggio modulato dei super-reticoli a semiconduttori appena descritto, è analogo al fenomeno del trasferimento di carica nei GICs.

Nel super-reticolo di tipo II, ad esempio InAs-GaSb [39] troviamo alle giunzioni un insolito allineamento delle bande di energia di InAs e GaSb: al punto Γ il massimo della banda di valenza di GaSb giace approssimativamente sopra il minimo della banda di conduzione di InAs. Quindi, nella eterogiunzione InAs-GaSb, si trova una separazione spaziale tra elettroni e buche dovuta al trasferimento di cariche ($\sim 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) da GaSb a InAs. Super-reticoli di tipo II di InAs-GaSb sottili (di spessore $\leq 170 \text{ \AA}$) sono semiconduttori che presentano una separazione spaziale di elettroni e di buche termicamente eccitati ed un loro confinamento rispettivamente negli strati di InAs e di GaSb. Per spessori maggiori di 170 \AA tali super-reticoli acquistano un carattere semimetallico e contengono elettroni (in InAs) e buche (in GaSb) anche a $T = 0$. Allo scopo del nostro lavoro è sufficiente considerare i super-reticoli artificiali di tipo II come distribuzioni periodiche unidimensionali di strati di elettroni alternati a strati di buche dove gli elettroni e le buche separati spazialmente tra loro si possono considerare come confinati su piani.

In generale entrambi i tipi di super-reticoli artificiali descritti, essendo descrivibili come sistemi periodici di piani paralleli egualmente spazati e contenenti gas bidimensionali di portatori di carica (gas di elettroni su tutti i piani per quelli di tipo I e alternanza di gas di elettroni e gas di buche sui piani per quelli di tipo II), si possono considerare come sistemi intermedi tra configurazioni bidimensionali e tridimensionali di cariche: più in generale i modelli utilizzati nella loro descrizione avranno comportamenti rispecchianti la transizione tra regimi di diversa dimensionalità. Quando la spaziatura tra i piani è grande, ci aspettiamo un accoppiamento trascurabile tra questi, e di conseguenza un comportamento bidimensionale del sistema; nel limite opposto il sistema diventa effettivamente tridimensionale. Poiché lo spessore dei diversi strati di un super-reticolo può essere controllato tramite la tecnica di crescita, tale sistema ci fornisce un modo di studiare la transizione tra un comportamento bidimensionale a uno tridimensionale in diverse grandezze fisiche caratterizzanti il sistema (spettro dei modi collettivi di eccitazione, bande di energia, ecc. . .).

2.4.1 Effetto Hall quantistico e cristallizzazione di Wigner in campo magnetico

Le eterostrutture a semiconduttori ad alte mobilità sono un ottimo sistema fisico su cui studiare l'effetto Hall quantistico (QHE). Immaginiamo di sottoporre un 2DEG con una densità di elettroni n_2 ad un campo magnetico B e ad un campo elettrico E , uniformi e ortogonali tra loro, in modo da avere B ortogonale al piano del 2DEG (vedi figura 2.7).

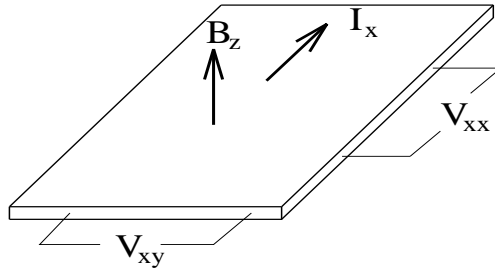


FIGURA 2.7: Schema per l'effetto Hall.

L'effetto Hall classico (1879) basato sul modello a elettroni liberi è applicabile ad un 2DEG in cui $\omega_c \tau \ll 1$ con $\omega_c = |e|B/cm$ frequenza di ciclotrone e τ tempo di rilassamento del sistema di elettroni. Esso prevede che la resistività trasversa (di Hall) ρ_{xy} , uguale al rapporto tra il potenziale di Hall V_{xy} e la corrente I_x generata dal campo E , aumenti linearmente col campo B : $\rho_{xy} = B/n_2|e|c$ e che la resistività longitudinale $\rho_{xx} = V_{xx}/I_x$ sia indipendente dal campo B .

Ciò che si osserva in laboratorio, ad esempio in giunzioni GaAlAs-GaAs di alta qualità a temperature molto basse (dell'ordine del mK), è completamente diverso ed è mostrato in figura 2.8. La resistenza di Hall è mostrata una serie di plateaus quantizzati: i plateaus connessi con l'effetto Hall quantistico intero (IQHE scoperto nel 1980 da K.Von Klitzing, G.Dorda e M.Pepper) hanno

$$\rho_{xy} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{\nu} \quad , \quad (2.3)$$

con ν intero e sono con estrema accuratezza (meglio di una parte su 10^8) indipendenti dai dettagli del campione (geometria, presenza di disordine, ...); i plateaus connessi con l'effetto Hall quantistico frazionario (FQHE scoperto nel 1985 da D.Tsui, H.Störmer e A.Gassard [40] per $\nu = 1/3$, mentre cercavano di osservare la cristallizzazione Wigner studiando le proprietà di magnetotrasporto della eterogiunzione GaAs- $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ ad alta mobilità) corrispondono a $\nu = p/q$ (con p intero e q intero dispari). Questi ultimi sono osservabili solo nel limite estremamente quantistico di

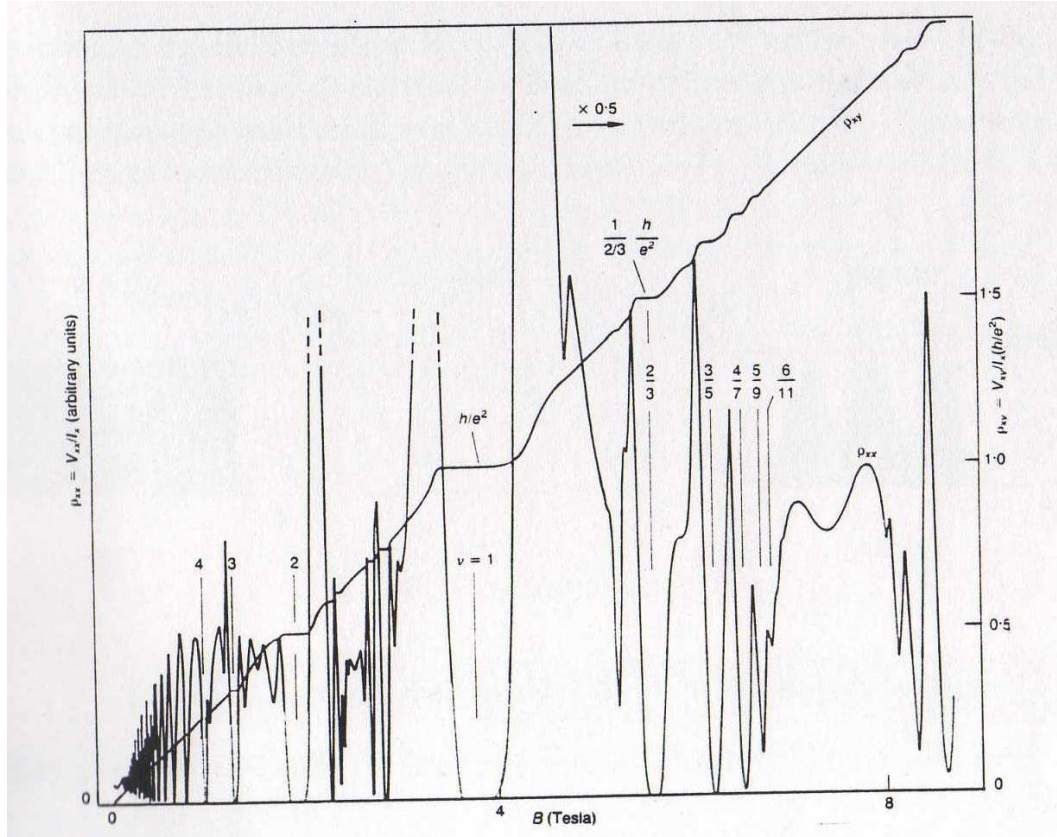


FIGURA 2.8: Dati sperimentali per il QHE a temperature dell' ordine dei mK (QHE per $\nu = 1 - 4$; FQHE per $\nu < 1$).

alti campi magnetici (quando la scala di *lunghezza magnetica* relativa alle interazione intrastrato vale $l_B = \sqrt{\hbar/eB} \sim 100\text{\AA}$), basse temperature ($T < 2K$), alte mobilità elettroniche ($\mu > 10^5 \text{cm}^2/Vs$) e basso disordine. La seconda quantità mostrata in figura ρ_{xx} oscilla con B e ha un minimo per ogni plateau di ρ_{xy} . Associata a tale quantizzazione appare per effetto termico una dissipazione esponenzialmente piccola nella resistività longitudinale: $\rho_{xx} \sim e^{-\Delta/2T}$ (per $T \rightarrow 0$ abbiamo che ρ_{xx} è idealmente nulla per quei valori del campo magnetico per cui ρ_{xy} presenta un plateau) dove l' energia di attivazione Δ per il caso intero ($\Delta \sim 100K$) è principalmente dovuta ad effetti di singola particella (gap tra livelli di Landau), mentre per il caso frazionario il gap di eccitazione ($\Delta_{1/3} \sim 6K$) è un effetto collettivo proveniente dalle correlazioni a molti corpi dovuti alle interazioni Coulombiane.

Nonostante i due tipi di plateaus appaiano simili, quelli per ν intero si possono ancora, come nel caso classico, capire col modello di elettroni non interagenti, quelli per ν frazionario, invece, possono essere spiegati solo attraverso l' interazione elettrone-elettrone.

IQHE (ν intero)

Per un sistema in 2D in assenza di campo magnetico il numero di elettroni liberi con una data energia è una costante, indipendente dall' energia. Quando accendiamo un campo magnetico le energie accessibili dagli elettroni si quantizzano (vedi figura 2.9) in livelli energetici ben stabiliti (i livelli di Landau ¹²) $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_c$. ¹³ In ciascun livello di Landau gli elettroni percorrono orbite le cui coordinate del centro x_o e y_o costituiscono osservabili non definibili simultaneamente. L' estensione delle funzioni d' onda è definita dalla lunghezza magnetica l_B . Il numero di stati di singolo

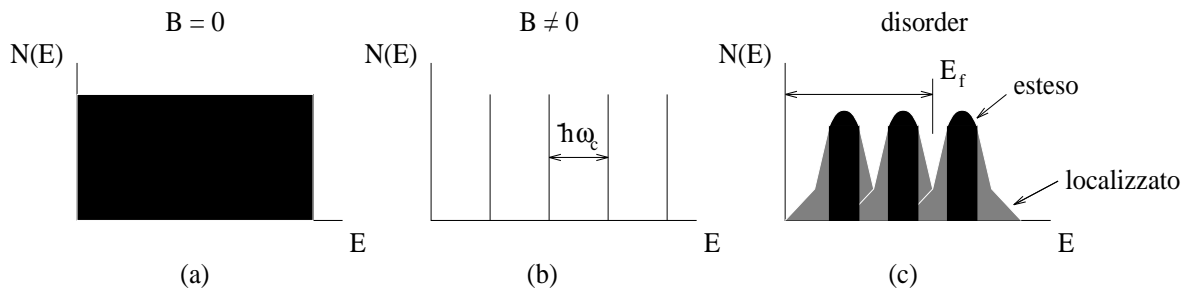


FIGURA 2.9: Densità degli stati di elettroni non interagenti in 2D.

elettrone per ciascun livello di Landau (degenerazione di Landau n_L) per unità di area è $n_L = eB/hc$, quindi il numero di livelli di Landau occupati in un campione di densità elettronica superficiale n_2 è $\nu = n_2/n_L$. L' indice ν viene chiamato *fattore di riempimento di Landau* ed è lo stesso che entra nella quantizzazione della resistività trasversa ¹⁴. Il fattore di riempimento si trova spesso definito come il rapporto tra il numero di elettroni del 2DEG ed $N_\Phi = \Phi/\Phi_o$, dove Φ è il flusso del campo magnetico attraverso il 2DEG e $\Phi_o = hc/e$ è il quanto di flusso del campo magnetico, ed è anche proporzionale al rapporto tra l' area rinchiusa in ciascuna orbita di ciclotrone e l' area per elettrone.

Possiamo qualitativamente spiegare l' esistenza dell' IQHE supponendo che il disordine intrinsecamente legato ai campioni reali provochi un allargamento dei livelli di Landau attraverso la formazione di due diversi tipi di stati (vedi figura 2.9): quelli *estesi* responsabili del trasporto di corrente e situati in prossimità dei livelli di Landau del campione ideale e quelli *localizzati* in cui gli elettroni sono, ad esempio, intrappolati nelle impurità e che costituiscono i bordi dei livelli di Landau allargati.

¹²Landau fu il primo a studiare, nel 1930, il problema di un elettrone in campo magnetico usando la meccanica quantistica.

¹³Stiamo trascurando, per semplicità, lo spin dell' elettrone il cui accoppiamento col campo magnetico porta alla seguente corretta forma dei livelli energetici di un elettrone in campo magnetico costretto ad una dinamica bidimensionale: $E_n = (n + 1/2 + \sigma)\hbar\omega_c$ dove $\sigma = \pm 1/2$. Gli stati $(n, \sigma = 1/2)$ e $(n + 1, \sigma = -1/2)$ risultano degeneri.

¹⁴Il fattore di riempimento appena definito tiene conto di entrambi gli stati di singolo elettrone con spin-su e spin-giù: quando $\nu = 2$ sono completamente riempiti sia il più basso livello per gli elettroni con spin-su che il più basso livello per gli elettroni con spin-giù.

A basse temperature l'energia di Fermi E_F determina il confine tra una regione ($E < E_F$) di stati energetici in maggioranza pieni ed una ($E > E_F$) di stati in maggioranza vuoti. L'andamento di figura 2.8 di ρ_{xx} e ρ_{xy} si spiega allora osservando che al variare di B , l'energia di Fermi $E_F = (n_L \nu) \hbar^2 \pi / m$ (di un 2DEG a $T = 0$) si troverà periodicamente per ν intero a metà strada tra due livelli di Landau del campione ideale ordinato (la cui spaziatura, al contrario di E_F , dipende da B). La resistività longitudinale misura la dissipazione di energia e dipende dal numero di elettroni che possono effettivamente dissipare energia eccitandosi in stati estesi, cioè a quelli che sono in un intorno di E_F quando E_F è nella regione di energie previste per gli stati estesi. Questo giustifica i minimi di ρ_{xx} per ν intero¹⁵. La resistività trasversa ρ_{xy} ha contributi da tutti gli stati estesi sotto E_F e rimane costante quando E_F passa nelle regioni di energie previste per gli stati localizzati.

Secondo questa pittura l'energia di attivazione Δ , che compare nella dipendenza di ρ_{xx} dalla temperatura, si interpreta come il gap di energia tra E_F ed il più basso stato esteso vuoto.

FQHE (ν frazionario)

La densità di stati di singola particella discussa nel caso di ν intero è tale da rendere molto degenerare un livello di Landau parzialmente riempito (lo stato con $\nu = 1/3$ sarebbe 84 volte degenerare per un sistema di soli tre elettroni indipendenti). L'interazione Coulombiana rompe la degenerazione del livello di Landau parzialmente riempito, che si separa, come mostrato in figura 2.10 in una serie di stati quantistici a molti elettroni (questi stati sono stati studiati per primi da R.Laughlin, D.Holdane e D.Yashioka, B.Halperin e P.Lee) tra cui quello di energia più bassa è separato dagli stati di eccitazione termica da un piccolo gap $\delta \sim 1K$ (in accordo con i dati sperimentali). Laughlin ha scoperto teoricamente [41] che gli stati fondamentali di sistemi con valori del parametro di riempimento del tipo $\nu = 1/m$ con m dispari sono descrivibili come stati liquidi incomprimibili fino a quando rimaniamo nell'ipotesi di completa polarizzazione degli spin degli elettroni lungo B . Inoltre gli stati fondamentali degli stati di FQHE con $\nu = p/q$ possiedono eccitazioni a molti elettroni non localizzati che portano carica frazionaria $e^* = \pm e/q$ (quasi-elettroni o quasi-buche). L'interazione di queste quasi-particelle col disordine porta agli andamenti osservati in figura 2.8 per ρ_{xx} e ρ_{xy} con un ragionamento analogo al caso dell'IQHE.

La competizione tra il cristallo di Wigner e gli stati di QHE è un'indicazione della complessità del diagramma di fase del sistema di elettroni che stiamo descrivendo. Ci aspettiamo lo stato di cristallo di Wigner per valori sufficientemente bassi di ν quando, per $\nu \leq \nu_c$ la distanza media tra gli elettroni diventa grande in confronto con i raggi delle orbite di ciclotrone quantizzate. I valori previsti teoricamente per ν_c sono sensibili all'approssimazione usata nel conto teorico e stanno nell'intervallo $1/3 < \nu_c < 1/10$.

¹⁵Che in un sistema bidimensionale non implicano divergenze della conduttività longitudinale essendo $\sigma_{xx} = \rho_{xx} / (\rho_{xx}^2 + \rho_{xy}^2)$ e ρ_{xy} finita.

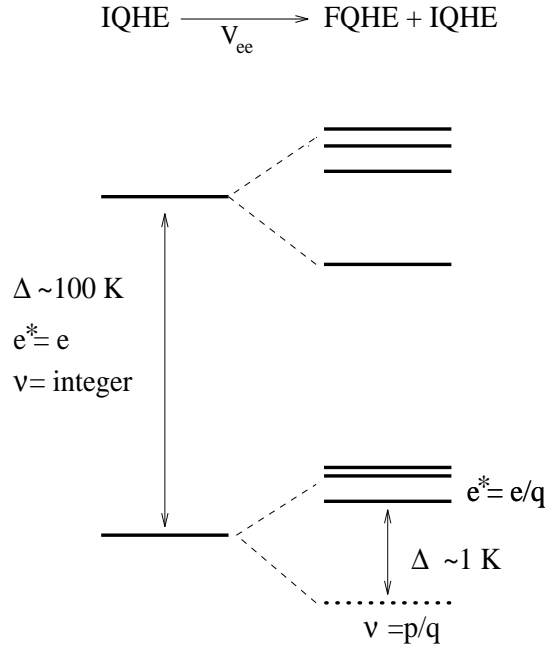


FIGURA 2.10: Mostra la distinzione tra gli stati di IQHE e di FQHE.

Le tecniche sperimentali usate per studiare la transizione di Wigner nelle eterogiunzioni a semiconduttori sono di tre tipi: quelle che studiano le proprietà di magnetotrasporto, quelle che utilizzano la spettroscopia a radio-frequenze e quelle che studiano le proprietà magneto ottiche del campione.

Nelle tecniche di magnetotrasporto la proprietà comunemente studiata per riconoscere lo stato di cristallo degli elettroni è la conduttività elettrica. A $T = 0$ il cristallo può trasportare corrente solo muovendosi collettivamente contro il fondo del semiconduttore ospitante e le eventuali impurità. Nel suo stato fondamentale il cristallo si muove e si distorce in modo da localizzare gli elettroni in posizione favorite dall'inevitabile disordine presente nel sistema. Un debole campo elettrico nel sistema non è sufficiente a spostare il cristallo e si dice che esso è 'pinned' dal disordine. In questo caso la resistenza Ohmica del sistema a $T = 0$ risulta infinita. Questo comportamento è stato rivelato su un campione a basso disordine per un intervallo di $\nu < 1/5$ ed, ancora, per uno stretto intervallo di $\nu > 1/5$ da Jiang ed al. [42]. Il comportamento nelle immediate vicinanze di $\nu = 1/5$ è qualitativamente diverso, ed è, in accordo con la teoria di Laughlin, quello tipico degli stati di un liquido incompressibile. Nello stesso intervallo di valori del fattore di riempimento, Goldman ed al. [43] hanno trovato evidenze per l'esistenza di un campo elettrico di soglia sopra il quale la resistenza differenziale del campione decresce in accordo con l'idea che campi elettrici sufficientemente elevati riescono a liberare il cristallo di Wigner pinned. Questi esperimenti basati sull'osservazione di anomalie nelle pro-

prietà di trasporto hanno mostrato come sia possibile per diversi campioni, ma per valori simili nella T e nel ν , andare da fluido a solido in modo continuo almeno due volte al diminuire del fattore di riempimento. Tali esperimenti in accordo con le interpretazioni teoriche, mostrano che la fase liquida si trova vicino a valori dispari di ν^{-1} ¹⁶.

Le misure di assorbimento a radio-frequenze suggeriscono un $\nu_c \sim 0.23$ [44].

I primi esperimenti di magneto-ottica [45] che hanno sondato il sistema diluito di elettroni 2D nel limite estremamente quantistico (fino a $\nu = 1/13$) sono stati quelli di Buhmann ed al. [46, 44] su una singola eterogiunzione GaAs-Al_xGa_{1-x}As ($x=0.28-0.32$) di alta qualità ¹⁷. Essi osservano nello spettro di luminescenza di tale campione una linea addizionale al di sotto di un $\nu_c = 0.28$ e di una temperatura critica $T_c = 1.4K$ per $B = 26T$. Essa cresce in intensità al diminuire del fattore di riempimento, dominando lo spettro per $\nu < 1/11$. La sua comparsa è accompagnata da una forte riduzione nel segnale di luminescenza integrato in funzione del campo magnetico, mentre la sua intensità relativa diminuisce nettamente in corrispondenza di $\nu = 1/5, 1/7$ ed $1/9$. La mancanza di correlazione tra ν_c e le proprietà del campione legate al disordine (come ad esempio la larghezza del livello di Landau) indicano la natura intrinseca della nuova linea che per gli autori segnala la formazione di un cristallo di Wigner pinned. Risultati preliminari negli esperimenti di Buhmann ed al. indicano che la temperatura critica è fortemente dipendente dal fattore di riempimento e si annulla per $\nu > \nu_c$ ed a $\nu = 1/5, 1/7$ e $1/9$. Qualitativamente essi presumono che il diagramma di fase, $T_c(\nu)$, abbia la forma mostrata in figura 2.11.

2.5 Composti intercalati

I composti intercalati sono in generale formati inserendo strati atomici o molecolari di una specie chimica 'ospite', chiamata l'intercalato, tra gli strati di un materiale 'ospitante' [47] (vedi figura 2.12). Affinchè si possa realizzare tale processo di intercalazione è necessario, ma non sufficiente ¹⁸ usare materiali ospitanti stratificati: con legami intraplanari forti e legami interplanari molto deboli.

I materiali in grado di subire intercalazione vengono classificati in base alla loro rigidità (vedi figura 2.13) e suddivisi in 3 classi: i materiali della classe I (grafite [48, 49, 50, 51], BN, ecc ...) sono i più flessibili ed hanno, come unità fondamentale della

¹⁶Dagli esperimenti di magnetotrasporto è stato stabilito il carattere di liquido di Fermi incompressibile per gli stati fondamentali di sistemi con $\nu = 1/3, 1/5, 1/7$ [44]).

¹⁷In cui la larghezza del livello di Landau fosse minore di $0.3meV$.

¹⁸La non sufficienza è esemplificata dal caso del BN con essenzialmente la stessa struttura cristallina e costanti reticolari della grafite, ma con grosse difficoltà di intercalazione. Questo si spiega osservando che, a differenza dal carattere semimetallico della grafite con $40meV$ di sovrapposizione delle bande, BN è un isolante con un gap di $4.5eV$; questo fa in modo che la grafite abbia, a differenza del BN, un'alta densità di stati vicini al livello di Fermi che facilita e permette il trasferimento di carica con l'intercalato e la conseguente attrazione elettrostatica tra quest'ultimo ed i piani di grafite ad esso adiacenti.

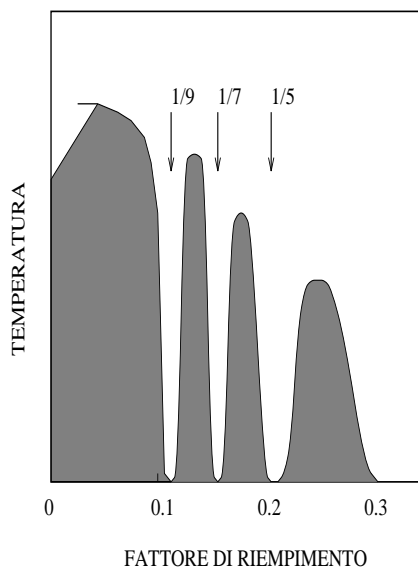


FIGURA 2.11: Forma del diagramma di fase $T_c(\nu)$ suggerita da Buhmann ed al. [44].

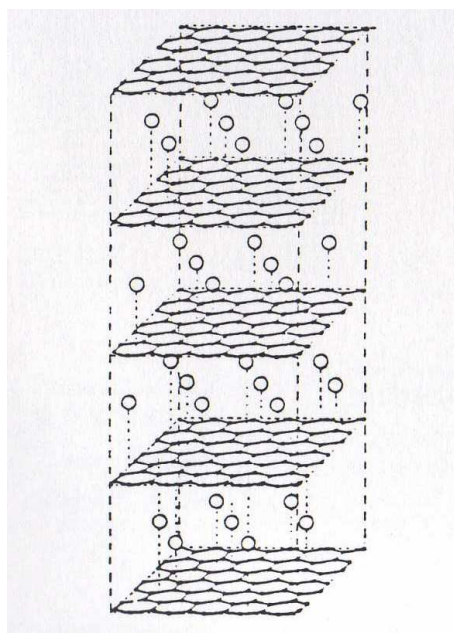


FIGURA 2.12: Modello di Rüdorff e Schulze per un GIC. Mostra una matrice di strati di grafene (singoli strati isolati estratti dalla struttura della grafite e rappresentati dai punti pieni) alternati a strati di potassio (i cerchi vuoti).

struttura, un monostrato (3.35\AA di spessore per la grafite); l'unità fondamentale della struttura di materiale della classe II (dicalcogenuri di metalli di transizione [52, 53], i semiconduttori del gruppo III-IV rispettivamente Ga, In e S, Se) è il triplostrato XM₂X dove M rappresenta lo strato del metallo di transizione e X quello del

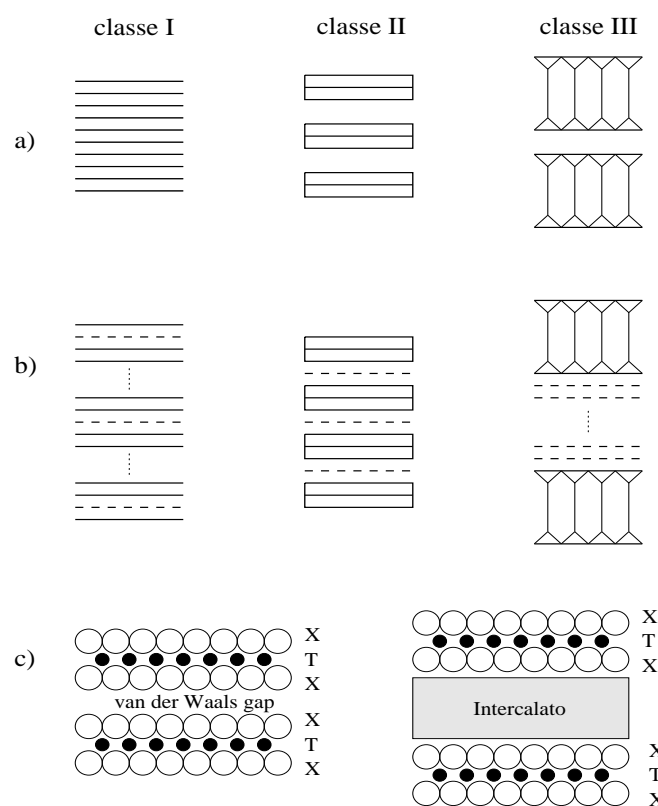


FIGURA 2.13: Classificazione schematica di (a) grafite pura (b) le forme intercalate di (a). In (b) le linee tratteggiate (continue) rappresentano strati di ospite (ospitante). Vengono mostrate tre classi di composti di intercalazione tra cui quelli della classe I hanno la più bassa rigidità degli strati e quelli della classe III la più alta. In (c) abbiamo una rappresentazione schematica di un dicalcogenuro TX_2 , dove T è il metallo e X il calcogeno (S, Se o Te), ed il gap di Van der Waals interstrato, prima e dopo l'inserimento di un intercalato.

calcogeno; tra gli strati del triplo strato abbiamo legami covalenti forti, tra tripli strati abbiamo deboli legami di Van der Waals [54]; esempi di materiali rigidi della classe III sono le argille siliciche che formano i CIC [55, 56, 57] (dall'inglese 'clay intercalation compounds') in cui l'unità fondamentale della struttura è tipicamente spessa $\sim 10\text{\AA}$ (o più [56]).

La grafite è il materiale ospitante più facilmente intercalabile e forma composti di intercalazione con molte centinaia di specie chimiche (la sintesi di nuovi composti idonei all'intercalazione è una delle maggiori attività della chimica sintetica [58, 59, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67]). Condizione necessaria per la realizzazione dell'intercalazione è che ci sia tra ospite ed ospitante una attività chimica sufficiente per: (i) realizzare il trasferimento di carica dall'intercalato al materiale ospitante necessario per legare con attrazione elettrostatica gli strati dei due materiali adiacenti; (ii) fornire l'energia elastica necessaria a separare strati adiacenti di materiale ospitante nel processo di intercalazione (nelle figure 2.12 e 2.14 è evidente la

dilatazione lungo l'asse del super-reticolo dovuto all'intercalazione).

Quando un composto di intercalazione è energeticamente stabile si può in generale preparare tramite varie tecniche come: il metodo del trasporto di vapore tra due zone, la crescita da fase liquida, la crescita da soluzione o tecniche elettrochimiche [58]. Tra queste possibilità le tecniche elettrochimiche sono quelle che meglio ci permettono di preparare composti intercalati esotici [68] mentre il trasporto in vapore fornisce composti con gli staging più fedeli [58].

La ragione fondamentale per cui i composti di intercalazione sono particolarmente idonei allo studio della fisica 2D e' legata al fenomeno di *staging* ('impacchettamento') per cui un numero costante di strati del materiale ospitante (il numero o indice di *stage* appunto) sono racchiusi tra piani di intercalato come mostra la figura 2.14 [49, 50]. Il fenomeno di staging determina la creazione di una matrice periodica

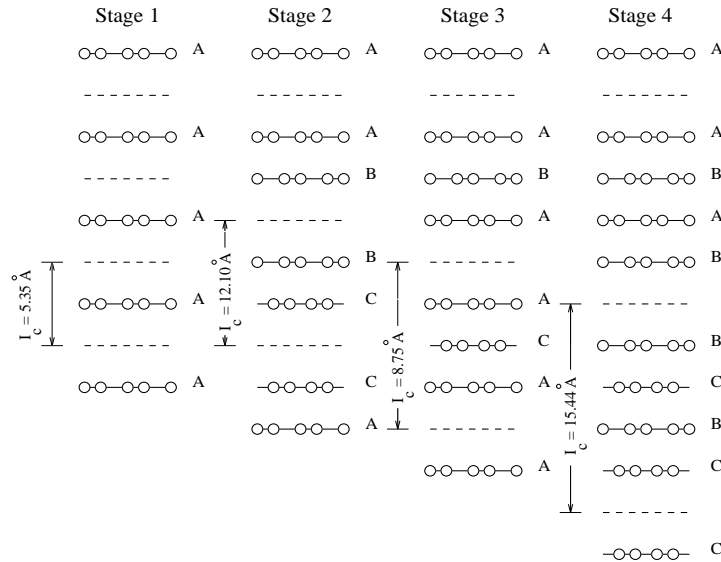


FIGURA 2.14: Illustrazione schematica del fenomeno di staging nei GICs con indice di staging $1 \geq n \geq 4$. In figura gli intercalati di potassio sono indicati con linee tratteggiate e gli strati di grafite da linee continue congiungente cerchi vuoti rappresentando schematicamente una proiezione della posizione degli atomi di C. La disposizione ...ABAB... nella successione degli strati di grafite per stages $n \geq 2$ tipica della grafite pura è mantenuta. Per ciascuno stage è indicata la distanza I_c tra intercalati adiacenti. Per lo stage-1 C_8K la cella unitaria comprende tutti gli intercalati distinti dall'indice di stratificazione ($\alpha, \beta, \gamma, \delta$).

di piani di intercalato (un super-reticolo 1D perpendicolare ai piani degli strati). Lo staging permette di controllare la separazione tra piani di intercalato contigui, costituendo così un mezzo per controllare l'interazione interplanare e la variazione di molte proprietà fisiche su larga scala; ad esempio, poichè la concentrazione di portatori liberi di carica della grafite ospitante è molto bassa (10^{-4} portatori/atomo a temperatura ambiente) l'intercalazione con specie chimiche diverse con diversa concentrazione di portatori liberi permette ampie variazioni nelle concentrazioni di

portatori liberi realizzabili, oltre ai drastici cambiamenti nella reattività chimica dell'intercalato dovuti ai suoi legami col materiale ospitante ¹⁹, e quindi delle proprietà elettriche termiche e magnetiche del materiale ospitante.

Tra tutti i materiali ospitanti la grafite è l'unica in grado di fornire super-reticoli con un alto ordine cristallino e periodicità molto fedele nel fenomeno di staging anche per ordini di stage alti (si possono sintetizzare super-reticoli con n fino a 10).

La grafite (C) ammette intercalazione di monostrati di materiali CM_1CM_1 con distanze C-C di poco diverse dalla grafite pura ($\sim 3.35\text{\AA}$; se è presente Li intercalato diventa 3.37\AA) e di tripli strati ottenuti dalle sintesi di composti di bi-intercalazione [70] che, a loro volta, possono venir preparati intercalando la specie M_2 in uno stage-2 M_1 -GICs (M_1CCM_1) formando così una sequenza $M_1CM_2CM_1$ (con distanze tra M_2 successivi di $\sim 20\text{\AA}$, in un composto di intercalazione con metallo clorato) ²⁰.

I composti intercalati della grafite (i GICs, sintetizzati per la prima volta da Schaffäutl nel 1841) sono allora particolarmente idonei ad essere studiati attraverso il modello del LEG. Descriveremo brevemente la loro struttura e le loro proprietà elettroniche.

2.5.1 Struttura

Come anticipato le immagini delle frange reticolari dei GICs ottenute con TEM ad alta risoluzione ('Microscopio a Trasmissione Elettronica') mostrano come, si possa avere un alto grado di perfezione nel processo di staging [72] su una scala di $\sim 100\text{\AA}$ ²¹, tanto da poter considerare in prima approssimazione il super-reticolo come una

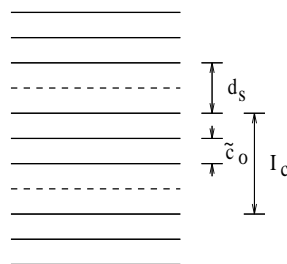


FIGURA 2.15: Modello per uno stage-3 GIC. Le linee tratteggiate rappresentano l'intercalato e quelle continue la grafite.

¹⁹Per alcuni sistemi come $SbCl_5$ -GICs è possibile che il processo di intercalazione provochi una reazione chimica chiamata *disproporzione* [69] che porta alla formazione di specie chimiche nello strato di intercalato diverse da quelle originarie ($SbCl_3$, $SbCl_4^{-5}$, ...). Quando ciò si verifica è in generale possibile provocare un cambiamento di fase ad uno stato disordinato nella struttura interna dell'intercalato spendendo poca energia.

²⁰Questi ultimi composti sono di particolare interesse per la sintesi di quasi 2D sistemi magnetici [71].

²¹Nello stage-3 $SbCl_5$ sono presenti regioni senza difetti, di estensioni minima $200\text{\AA} \times 1000\text{\AA}$, ampie regioni si trovano anche in Br_2 -GICs e KHg -GICs.

sovrapposizione lineare di strati di grafite e di intercalato per cui vale la seguente relazione (vedi figura 2.15):

$$I_c = d_s + (n - 1) \tilde{c}_o \quad . \quad (2.4)$$

Durante l'intercalazione rimangono praticamente inalterati rispetto alla grafite pura, oltre alla spaziatura tra gli strati anche la caratteristica struttura ad alveare sui piani e, come è mostrato in figura 2.14, per indici di stage $n \geq 2$, l'ordine di tipo ...ABAB... nello stacking dei piani di grafite (la disposizione più stabile di tali piani è sempre quella che minimizza il volume dello spazio interlamellare).

Un aspetto importante per la struttura dei composti di intercalazione è la possibilità di subire transizioni di fase²². La presenza di tali transizioni richiede, naturalmente, un opportuno modello per la descrizione del fenomeno di staging, che sia in grado, ad esempio, di spiegare la transizione tra un composto con stage n ad uno con stage $n - 1$ [58, 74]. A questo scopo Daumas e Hèrold [74] hanno suggerito che, almeno per composti con indice di stage $n > 1$, gli intercalati devono essere divisi in domini e gli strati di carbonio riempiti, come in figura 2.16, così da avere identiche concentrazioni di intercalato tra i piani di grafite; la dimensione di tale domini (tra 100 e 1000Å) è essenzialmente dipendente dalla natura dell'intercalato e dalla qualità della grafite ospitante [75].

Poichè la grafite subisce transizione di fase nella struttura solo ad alte temperature ($\sim 4000^\circ C$), è possibile assistere ad una varietà di transizione di fase nella struttura dell'intercalato mantenendo rigida la struttura del materiale ospitante: transizione ordine disordine ($HNO_3 - GICs$) [49], fusione dell'intercalato [49] (può essere utilizzato per studiare il fenomeno della fusione 2D).

Finora ci siamo occupati dell'ordine che la struttura dei GICs presenta lungo l'asse del composto; altrettanto importante è però la struttura nel piano (che presentano grandi regioni senza difetti maggiori di $1000\text{Å} \times 1000\text{Å}$ ad esempio nel KHg-GIC [72] e lunghe distanze di coerenza $\sim 10_4\text{Å}$ nel caso di Br-GICs [76]); queste dividono i GICs in due classi: quelli con l'intercalato commensurato rispetto all'ospitante²³ e quelli con l'intercalato incommensurato rispetto all'ospitante²⁴. Nella struttura commensurata gli atomi dell'intercalato sono in registro con la grafite

²²Queste transizioni sono in generale rivelabili tramite misure di trasporto come la dipendenza da T della resistenza elettrica: si trovano anomalie caratteristiche nelle proprietà di trasporto del composto, alla temperatura critica, rispecchianti cambiamenti nei processi di scattering durante la transizione (informazioni più dettagliate sulla natura e sulla cinetica della transizione di fase della struttura, dei diversi composti, si ricavano da misure di diffrazione: X-ray *in situ* [73], elettroni o neutroni).

²³Quando le correlazioni interstrato intercalato-intercalato mediate dalla grafite ospitante sono sufficientemente a lungo raggio, gli intercalati commensurati sono disposti nel super-reticolo seguendo l'ordine di stacking 3D (illustrato nelle figure 2.14 e 2.17).

²⁴Per alcuni GICs può capitare che due o più diverse disposizioni degli intercalati abbiano circa la stessa energia libera dando luogo così a una consistenza di più fasi di struttura nel composto (si divide in domini con diverse fasi di struttura). Una disposizione ordinata di queste fasi è chiamata struttura modulata e si verifica in molti GICs di metalli alcalini [77] ad alto stage ($n > 2$).

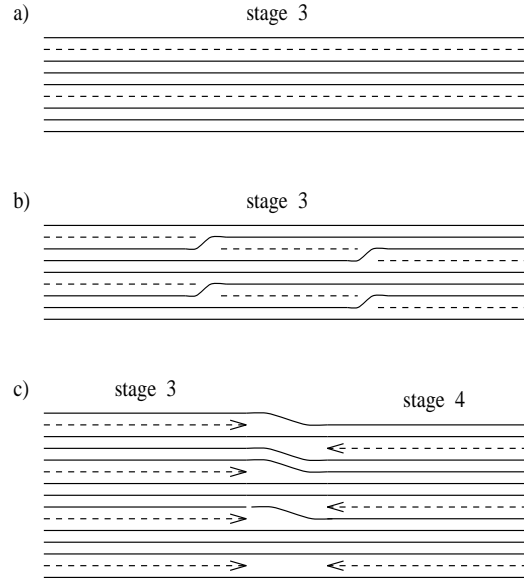


FIGURA 2.16: (a) Modello a singolo-dominio per un composto stage-3; (b) Modello di Daumas-Hérolde per i domini degli intercalati di un composto stage-3; struttura più probabile della (a) pensando lo staging come una competizione tra: la deformazione elastica dell'ospitante da parte dell'intercalato, che provoca una interazione effettiva sul piano a lungo raggio attrattiva, e l'interazione elettrostatica ed elastica interstrato che sono entrambe repulsive; (c) Zona di passaggio tra una regione stage-3 e una stage-4, come si potrebbe creare durante una transizione di fase dello staging.

formando celle unitarie con aree multiple di quelle della cella unitaria della grafite (vedi figura 2.17). La registrazione dell'intercalato tende a spostare l'atomo dell'intercalato in una posizione di minima energia rispetto ai piani di grafite adiacenti (cioè sopra o sotto il centro degli esagoni della grafite così da ottenere la massima densità di impacchettamento [49, 58]; una configurazione di minimo impacchettamento ('close packed') sul piano dell'intercalato, massimizza i suoi legami chimici e minimizza l'energia delle forze elastiche che si creano nel materiale ospitante durante l'intercalazione. Quando si può simultaneamente soddisfare il close-packing e la registrazione dell'intercalato a lungo raggio allora sono favoriti strati di intercalato commensurato; altrimenti prevalgono le configurazioni close-packed e si forma un solido incommensurato.

Poiché l'energia di interazione di interstrato è piccola, l'eccitazione termica a temperatura ambiente è spesso sufficiente a distruggere tali correlazioni producendo così strati di intercalato quasi 2D scorrelati lungo l'asse del super-reticolo (ad esempio stage-4 $C_{28}Br_2$ [76] perde l'ordine di stacking interplanare sopra 325K mentre rimane commensurato fino a 360K).

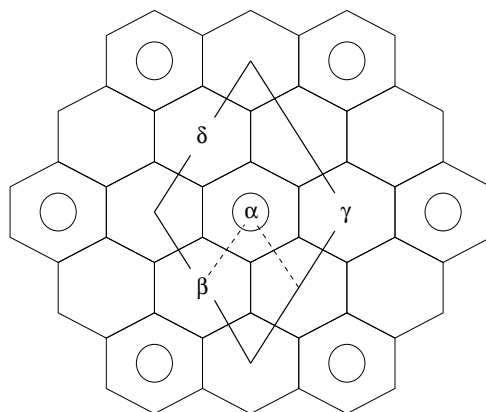


FIGURA 2.17: Diagramma schematico della cella unitaria nel piano per una struttura comensurata del tipo $(2 \times 2)R0^0$, dove la notazione mostra le lunghezze e gli angoli dei vettori base del reticolo dell'intercalato relativamente a quelli del reticolo della grafite pura. Abbiamo atomi di C sugli angoli degli esagoni ed i cerchi vuoti rappresentano la specie intercalata. Nel diagramma gli strati di intercalato e di grafite sono proiettati su un unico piano. Per questa struttura ci sono quattro siti equivalenti per l'intercalato indicati con $\alpha, \beta, \gamma, \delta$. Su ogni strato di intercalato un solo tipo di sito è occupato. Le linee tratteggiate rappresentano la cella unitaria del reticolo planare della grafite pura. Per i composti C_8K e C_8Rb con stage-1 intercalati adiacenti non occupano mai uno stesso tipo di sito (vedi figura 2.14) a causa delle forze di tensione e sono disposti con un ordine di stacking 3D.

2.5.2 Proprietà elettroniche

Le proprietà elettroniche dei GICs, in accordo con le proprietà appena discusse della loro struttura, sono caratterizzate dalla distribuzione periodica di cariche perpendicolarmente agli strati del composto; le proprietà di trasporto sono in gran parte determinate dal processo di trasferimento di carica.

Gli intercalati di un GICs ($\gg 100$ specie) sono in generale classificati in base a come si comportano nel processo di trasferimento di carica se come donori, alzando il livello di Fermi in modo da avere una conduzione dominata dagli elettroni (metalli alcalini K, Rb, Cs, Li, i più usati, meno usati metalli alcalino terrosi lantanidi e diverse leghe metalliche) o come accettori, abbassando il livello di Fermi in modo da far condurre le buche (in generale basati su acidi di Lewis come Br_2 , metalli clorati, bromati, fluorati e alogenati, ossiacidi come N_2, O_5, SO_3 o forti acidi di Bronsted come H_4SO_4 o HNO_3). Il trasferimento di carica nel caso di un intercalato donore è ben schematizzato in figura 2.18. Quando l'atomo donore dell'intercalato si ionizza, cedendo l'elettrone alla grafite circostante, questo si carica positivamente attraendo le cariche negative negli strati di grafite; quindi, la maggior parte di elettroni donati, saranno trasferiti sugli strati di grafite adiacenti all'intercalato. Poiché la concentrazione di portatori nella grafite è molto bassa ($2 \cdot 10^{-4}$ portatori/atomo di C a temperature ambiente e $\sim 6 \cdot 10^{-5}$ portatori/atomo a basse temperature)²⁵ e

²⁵Possiamo stimare che assumendo un trasferimento di carica alla grafite di un solo portatore

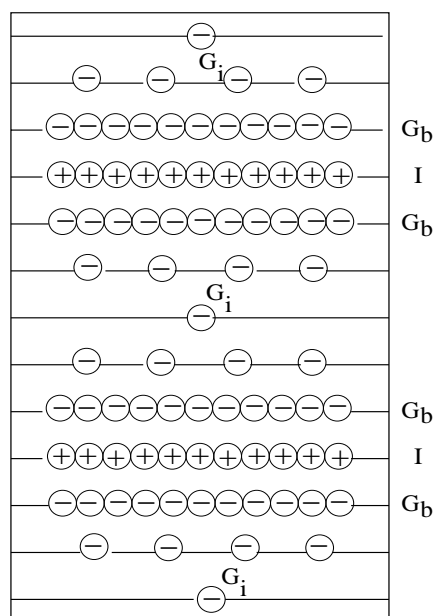


FIGURA 2.18: Rappresentazione schematica del trasferimento di carica nei GICs. Gli strati di intercalato (I), per un composto donore, trasferiscono gran parte degli elettroni agli strati di grafite adiacenti (G_a) e una parte minore agli strati di grafite interni (G_i).

la mobilità della grafite pura è molto alta ($13000\text{cm}^2/\text{V}$ a 300K), si può sintetizzare GICs con una conduttività molto elevata sui piani della grafite e molto bassa su quelli dell'intercalato. Quindi ci aspettiamo che il trasporto elettrico sia dominato da elettroni e buche di ciò che rimane delle bande π della grafite.

Per gli intercalati accettori la situazione è molto meno definita. È generalmente accettato che meno di un elettrone è trasferito dalla grafite a ciascuna unità di intercalato ma non si ha ben chiaro dove tale carica risieda nell'intercalato neppure per il più semplice composto accettore commensurato Br_2 -GICs.

Per quanto riguarda il trasporto elettrico osserviamo che la conduttività elettrica sul piano, σ_a con $\hat{a} \perp \hat{z}$ aumenta in generale,²⁶ rispetto a quella della grafite, di un ordine di grandezza, o più [78]; come mostrato in figura 2.19 per diversi GICs, l'aumento di σ_a dipende dalla specie dell'intercalato e dalla sua concentrazione. In generale σ_a dipende dall'ordine di stage e questo si spiega qualitativamente considerando la conduttanza dell'intero campione come la somma delle conduttanze dei singoli strati pesata rispetto al loro spessore relativo nella celle unitaria [49] (vedi

per unità di intercalato assumendo una concentrazione di intercalato un ordine di grandezza più piccola della concentrazione di grafite, allora avremo un aumento di tre ordini di grandezza nella concentrazione dei portatori.

²⁶Fa eccezione l'intercalato di fluoro ad alte concentrazioni C_xF ($X < 6$); in questo caso σ_a per il GICs è minore di quella della grafite per la possibilità non trascurabile che si formino legami C-F ionici oltre che covalenti.

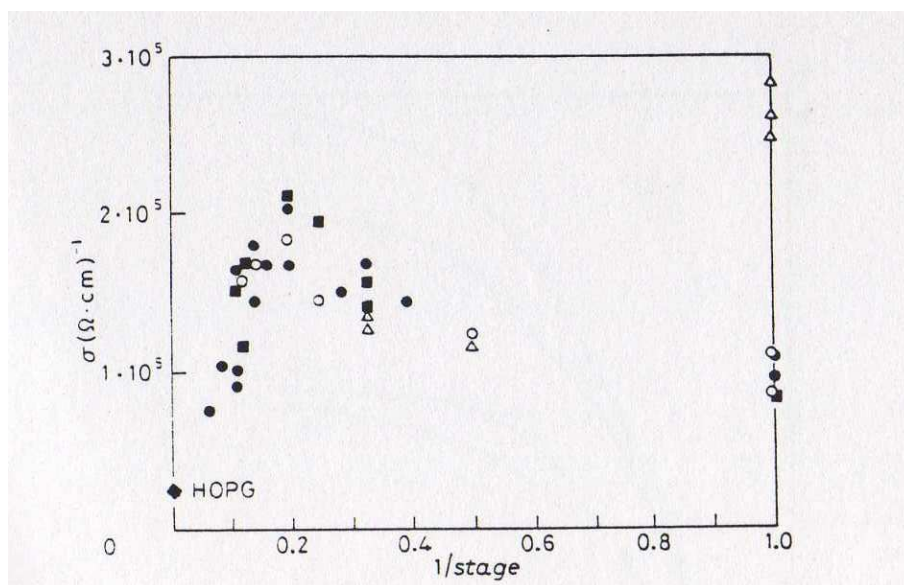


FIGURA 2.19: Dipendenza dall' inverso dell' indice di stage della conduttività sul piano di diversi tipi di GICs di metalli alcalini; i simboli indicano: \circ grafite-Cs, \triangle grafite-Li, \bullet grafite-K, \square grafite-Rb.

figura 2.20). Naturalmente ci aspettiamo, data la presenza dell' intercalato, una

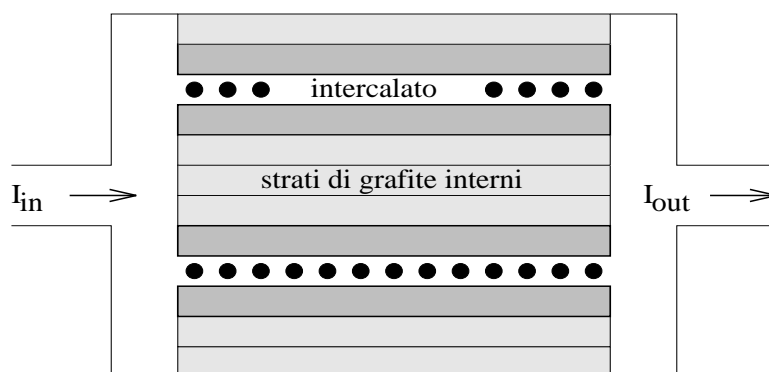


FIGURA 2.20: Modello di conduttività addittiva per la conduttività sul piano dei GICs. Tra i diversi strati della cella unitaria domina il contributo alla conduttività totale degli strati di grafite adiacenti all' intercalato.

maggiore anisotropia nella conduttività $A = \sigma_a / \sigma_z$ dei GICs rispetto alla grafite pura in cui $A \sim 10^3 - 10^4$, a secondo della temperatura [79]; questo è effettivamente il caso per GICs accettori in cui $A \sim 10^6 - 10^7$ [80] e, anche se in minor misura, per la maggior parte dei GICs donori tra i quali fanno eccezione quelli intercalati con metalli alcalini donori²⁷ nei quali A è minore rispetto alla pura grafite (fino a $A \sim 10$

²⁷il metallo alcalino ibridizza l' elettrone π grafiteico poichè contiene elettroni s e p.

per Li-GICs stage-1). Si trova anche per A una forte dipendenza della temperatura e dell'ordine di stage, come mostra figura 2.21.

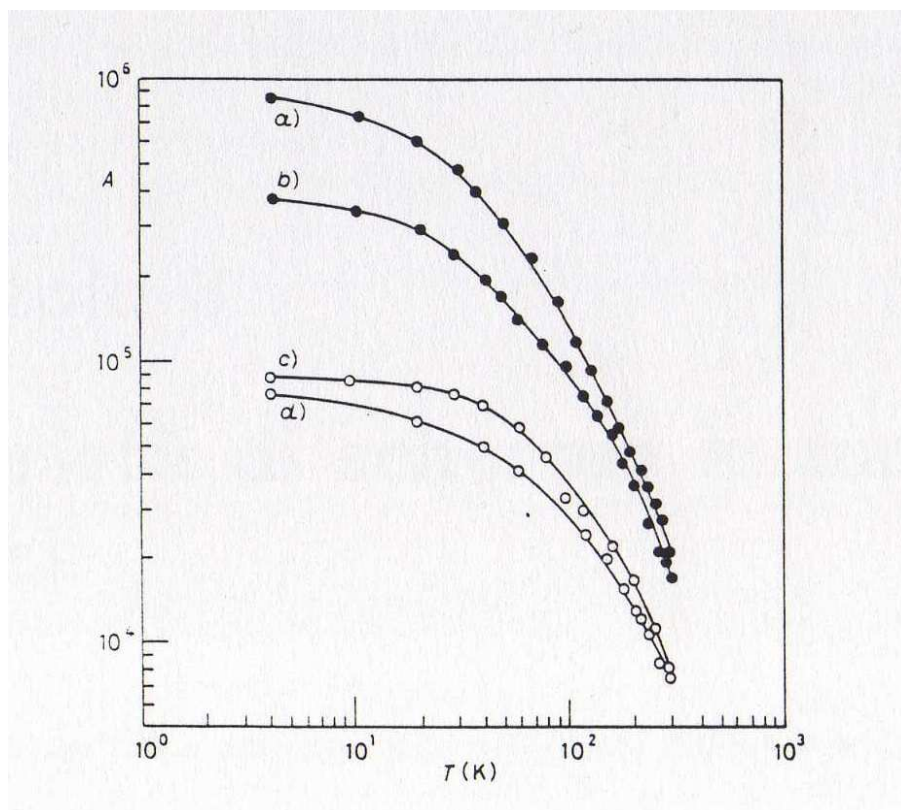


FIGURA 2.21: Dipendenza dall'indice di stage dell'anisotropia della conduttività in KBi-GICs di stage a) $n=5$, b) $n=3$, c) $n=2$, d) $n=4$ [80].

Osserviamo infine che studi sulle proprietà di superficie di GICs semi infiniti in funzione dello stage e della temperatura, hanno mostrato nei primi strati atomici di un GICs donore (accettore), un eccesso (diminuzione) di concentrazione di intercalato. Nonostante ciò la rottura dei GICs a bassa temperatura ($\sim 77\text{K}$) ha dimostrato la possibilità di preparare superfici con concentrazioni di intercalato paragonabili a quelle di volume, per tempi sufficientemente lunghi (minuti) [81].

2.6 Sommario

Con questa rassegna sulle caratteristiche e sulle proprietà dei sistemi di elettroni stratificati esistenti in natura o realizzabili in laboratorio, abbiamo voluto mettere in evidenza l'importanza che può avere lo studio teorico del modello del LEG, soprattutto in connessione coi problemi aperti a cui tali sistemi fisici hanno portato come l'effetto Hall quantistico e la cristallizzazione di Wigner.

Abbiamo presentato il sistema di elettroni legati alla superficie dell'elio liquido come esempio di un 2DEG classico; il sistema dello strato di inversione come esempio

di 2DEG quantistico e di LEG con un numero limitato di piani; le eterogiunzioni a semiconduttori come esempio di 2DEG quantistico, di doppio 2DEG, di LEG con numero di piani molto maggiore di uno (super-reticolo), di 2DEG alternato a strati di buche in 2D; i composti intercalati della grafite essenzialmente come esempi di LEG con elevato numero di piani.

Capitolo 3

Proprietà di schermo in modelli teorici

Le proprietà dei GICs descritte nella precedente sezione mostrano che in prima approssimazione, si può utilizzare il modello del LEG per schematizzare l'insieme degli strati di grafite in un GIC donore a basso stage ¹, con una matrice periodica di gas di elettroni (elettroni delle bande π della grafite ospitante e quelli trasferiti dall'intercalato donatore) confinati in piani geometrici paralleli, uniformemente spazati e contenenti ciascuno una distribuzione uniforme di carica planare di segno positivo che neutralizza la carica totale del sistema rendendolo stabile (fondi neutralizzanti).

Visscher e Falicov, per primi, studiarono il LEG per determinarne le proprietà di schermo, calcolandone la risposta dielettrica ad una carica esterna puntiforme, giacente su uno dei piani. I loro risultati per la funzione dielettrica statica furono ottenuti tramite la 'Random Phase Approximation' (RPA). Tali risultati sono stati usati da Plischke [6] e da Plischke e Leckie [82], nello studio dei GICs $C_{24}Cs$ e $C_{24}K$, per costruire potenziali di coppia effettivi tra gli ioni alcalini degli intercalati. Sulla base di esperimenti di diffrazione a raggi X che mostravano come sia in $C_{24}Cs$ che in $C_{24}K$ gli intercalati non siano in registro con la grafite né ad alta temperatura (fase disordinata), né a bassa temperatura (fase ordinata) ², gli intercalati nella loro fase ad alta temperatura, sono modellizzati con dei liquidi bidimensionali di cariche positive a metà strada tra due successivi strati di grafite.

Miesenböck e Tosi, sempre concentrando la loro attenzione sulla funzione dielettrica statica di schermo del LEG in relazione al potenziale effettivo di coppia negli intercalati, estendono il lavoro di Visscher e Falicov, valutando il contributo dello scambio ("buca di Fermi") e delle correlazioni elettrone-elettrone, intrapiano a corto raggio ("buca di Coulomb") tramite una correzione di campo locale $G(Q)$ ispirata

¹Nel caso di un GIC accettore, in generale più anisotropo di un donore, utilizzando un LHG (layered hole gas), cioè un LEG coi segni delle cariche dei portatori e dei fondi neutralizzanti invertite.

²Le transizioni di fase ordine-disordine negli intercalati sono state studiate e modellizzate, ad esempio, da Plischke e Leckie [82].

all' approccio sviluppato da Singwi ed al. [83, 84] per il gas di elettroni 3D che lega $G(Q)$ al fattore di struttura del gas. Fisicamente la funzione $-(4\pi e^2/Q^2)G(Q)$ può essere interpretato come la correzione di potenziale efficace (attrattiva) dovuta alle correlazioni nello spazio di Fourier e determina la deviazione dalla costante dielettrica in RPA.

Allo scopo della descrizione dei GICs i modelli presentati possono essere migliorati in diversi aspetti.

- Non si considera il potenziale periodico degli atomi di carbonio. Questa interazione modificherebbe certamente il fattore di struttura del liquido, portando probabilmente a distorsioni incommensurate del reticolo della grafite;
- Si usa un modello di elettroni liberi non considerando la struttura a bande della grafite (inclusa nel lavoro di Shung [85] in relazione alla struttura del plasmone in GICs stage-1);
- Si trascurano gli effetti di distorsione del reticolo della grafite nel costruire il potenziale effettivo metallo-metallo;
- Si trascura il tunneling degli elettroni tra strati di grafite [86];
- Si trascura lo spessore degli strati di grafite [87].

Nei modelli teorici che descrivono il sistema ideale del LEG l' omissione più importante è probabilmente quella delle correlazioni interpiano. Per visualizzare meglio tale omissione possiamo dire che, mentre la buca di Fermi è automaticamente resa una buca bidimensionale sul piano dall' ipotesi di mancanza di tunnelling tra i diversi piani del LEG, la buca di Coulomb naturalmente 3D è assunta 2D per semplificare il calcolo della funzione di schermo dielettrico.

Nella prossima sezione presentiamo a partire dagli articoli citati, il problema teorico dello schermo dielettrico del LEG degenerare in parallelo al sistema classico quando possibile, mettendo in luce l' importanza che le regole di somma possono avere nel suo sviluppo. Queste essendo relazioni esatte ed indipendenti dal valore della costante di accoppiamento del sistema, rimangono valide là dove la teoria delle perturbazioni fallisce ($\Gamma > 1$). Esse non solo servono come 'condizioni al contorno' su cui controllare la bontà del modello teorico, ma costituiscono spesso potenti principi guida per trovare funzioni di risposta soddisfacenti nella formulazione teorica del LEG.

3.1 Il gas di elettroni stratificato (LEG)

Seguendo la notazione di Miesnböck e Tosi consideriamo un numero N_p di piani paralleli ed uniformemente spazati di una distanza d tra loro che contengono ciascuno una densità planare n_2 di elettroni di massa m , immersi in un fondo uniforme

neutralizzante. Prendiamo la direzione \hat{z} lungo l'asse del super-reticolo ed imponiamo condizioni periodiche al contorno di Born-von Karman lungo la direzione \hat{z} su una lunghezza $L = N_p d$.

Si ottiene così un sistema il cui stato può essere parametrizzato da sei costanti: m, e, n_2, d, N_p e la temperatura $T = 1/\beta$. In funzione di questi parametri possiamo esprimere la densità di elettroni per unità di volume $n = n_2/d$, la distanza media delle particelle sui piani r_o tale che $\pi r_o^2 n_2 = 1$, a cui spesso ci si riferisce in unità del raggio di Bohr $r_s = r_o/a_B$ ($a_B = \hbar^2/me^2$) e la costante di accoppiamento tra gli elettroni; quest'ultima definita come il rapporto tra l'energia potenziale Coulombiana media e l'energia cinetica media per particella su ciascun piano, è data per un sistema classico, da $\Gamma = \beta e^2/r_o$ ed è proporzionale a $\sqrt{n_2}$, per un sistema quantistico è la stessa $r_s = (m r_o^2/\hbar)(e^2/r_o)$ ed è allora proporzionale a $1/\sqrt{n_2}$.

Tutti i vettori verranno decomposti nella loro componente \hat{z} e in quella planare con la notazione $R \equiv (x, y, z) = (\mathbf{r}, z)$ e $K \equiv (k_x, k_y, k_z) = (\mathbf{k}, k_z)$. Grazie alla periodicità del sistema lungo \hat{z} da ora in poi k_z sarà sempre, dove non specificato altrimenti ristretto alla prima zona di Brillouin ($1^\circ Bz$) $|k_z| \leq \pi/d$ (anche in ogni sommatoria). Inoltre diremo che k_z è consistente con le condizioni al contorno di Born-von Karman quando $k_z = 2\pi n/L$, n intero.

L'introduzione delle condizioni cicliche al contorno semplifica analiticamente lo studio del LEG. Ad esempio esse permettono di trattare più agevolmente le sommatorie tramite le seguenti identità a cui faremo spesso ricorso:

- (i) Per qualunque q_z nella prima zona di Brillouin e consistente con le condizioni al contorno di Born-von Karman

$$\sum_{z_m} e^{iq_z z_m} = N_p \delta_{q_z, 0} \quad , \quad (3.1)$$

dove $z_m = md$ e nella sommatoria l'indice di piano corre su tutti gli N_p piani.

- (ii) Per qualunque $z_m = md$

$$\sum_{q_z} e^{iq_z z_m} = N_p \delta_{m, 0} \quad , \quad (3.2)$$

dove q_z nella somma corre su tutta la prima zona di Brillouin consistentemente con le condizioni al contorno di Born-von Karman.

Visscher e Falicov introdussero l'approssimazione di strati infinitamente sottili e trascurarono il tunnelling di elettroni tra diversi piani. Partiamo dal sistema classico, indicando con

$$\rho_m(\mathbf{r}) = \sum_{i_m=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{i_m}) \quad , \quad (3.3)$$

la densità microscopica degli elettroni puntiformi dell' m -esimo piano, dove l' i_m -esimo elettrone è situato in \mathbf{r}_{i_m} con impulso \mathbf{p}_{i_m} . L' Hamiltoniana corrispondente è (a meno dell' interazione col potenziale che localizza gli elettroni su i piani):

$$H = \sum_{m=1}^{N_p} \sum_{i_m=1}^N \frac{p_{i_m}^2}{2m} + \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \sum_{m,m'} v(\mathbf{r} - \mathbf{r}', m - m') [\rho_m(\mathbf{r}) \rho_{m'}(\mathbf{r}')] \quad (3.4)$$

$$- \rho_m(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{m,m'}] - \frac{N}{A} \sum_{m,m'} \int d\mathbf{r} \rho_m(\mathbf{r}) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}', m - m') \quad . \quad (3.5)$$

Abbiamo supposto di avere N elettroni su ognuno degli N_p piani di area A . Supponendo che la costante dielettrica reticolare della grafite e delle specie intercalate siano circa uguali (~ 1), trascuriamo nell' interazione qualsiasi contributo di potenziale immagine e prendiamo così $v(r, m) = e^2 / \sqrt{r^2 + (md)^2}$.

Indicando con $\rho_m(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \rho_m(\mathbf{r})$ possiamo riscrivere H nella forma

$$H = \sum_{m=1}^{N_p} \sum_{i_m=1}^N \frac{p_{i_m}^2}{2m} + \frac{1}{2A} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{m,m'} v_e(\mathbf{k}, m - m') [\rho_m(\mathbf{k}) \rho_{m'}(-\mathbf{k}) - N \delta_{m,m'}] \quad , \quad (3.6)$$

dove l' interazione effettiva ha la forma

$$v_e(\mathbf{k}, z) = \frac{2\pi e^2}{k} (e^{-k|z|} - \frac{N_p N}{A} \delta(\mathbf{k})) \quad . \quad (3.7)$$

Nell' analogo sistema quantistico chiamiamo $\psi_K(R)$ l' esatta funzione d' onda di particella singola in R con impulso sul piano \mathbf{k} e quasimpulso ortogonale ai piani $q_z \in 1^\circ Bz$, essa si può prendere della forma:

$$\psi_K(R) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \varphi_{k_z, \nu}(z) \quad , \quad (3.8)$$

dove abbiamo indicato con $\varphi_{k_z, \nu}(z)$ le funzioni di Bloch con indice di banda ν che descrivono il moto degli elettroni lungo \hat{z} e che sono soluzioni dell' equazione di Schrödinger con un potenziale periodico scritto come sovrapposizione di buche profonde e strette, centrate su ciascun sito reticolare $\sum_m U(z - md)$. Indichiamo con $\varphi_\nu(z)$ le autofunzioni della singola buca di potenziale $U(z)$ e assumiamo che $U(z)$ sia sufficientemente profonda da poter considerare occupato solo lo stato con energia minore ; questo ci permetterà di trascurare l' indice ν .

Poichè gli elettroni del LEG devono essere localizzati spazialmente sui vari strati nella descrizione dei loro stati di singola particella è utile lavorare, piuttosto che con le funzioni di Bloch con le funzioni di Wannier [88] definite da:

$$a(z - md) = \frac{1}{\sqrt{N_p}} \sum_{k_z} e^{-ik_z md} \varphi_{k_z}(z) \quad , \quad (3.9)$$

che nell' approssimazione di Tight-binding sono identificate con le autofunzioni delle buche di potenziale isolate $U(z - md)$:

$$a(z - md) = \varphi(z - md) . \quad (3.10)$$

Nella rappresentazione di Wannier la funzione d' onda di singola particella diventa:

$$\psi_{\mathbf{k},m}(R) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} a(z - md) . \quad (3.11)$$

Possiamo allora definire l' operatore di campo come:

$$\Psi(R) = \sum_{\mathbf{k},m} \psi_{\mathbf{k},m}(R) a_{\mathbf{k},m} , \quad (3.12)$$

dove abbiamo indicato con $a_{\mathbf{k},m}$ ($a_{\mathbf{k},m}^\dagger$) l' operatore che distrugge (crea) un elettrone localizzato sull' m-esimo piano con impulso \mathbf{k} .

Possiamo allora scrivere la componente di Fourier $\rho_m(\mathbf{q})$ di (3.3) in seconda quantizzazione come :

$$\rho_m(\mathbf{q}) = 2 \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},m}^\dagger a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},m} , \quad (3.13)$$

dove il fattore 2 tiene conto delle orientazioni di spin degli elettroni.

Definendo l' operatore c_K (c_K^\dagger) tramite la relazione $a_{\mathbf{k},m} = \frac{1}{\sqrt{N_p}} \sum_{k_z} e^{ik_z md} c_K$, l' Hamiltoniana corrispondente alla (3.6) in seconda quantizzazione (vedi appendice in [89]) si scrive:

$$H = \sum_K \xi(K) c_K^\dagger c_K + \frac{1}{2AN_p} \sum_{\substack{Q \\ q \neq 0}} v(Q) \sum_{K,K'} c_K^\dagger c_{K'}^\dagger c_{K'+Q} c_{K-Q} . \quad (3.14)$$

L' interazione elettrone-elettrone ha la forma:

$$v(Q) = e^2 \sum_m e^{-iq_z md} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} v(\mathbf{r}, md) \equiv \sum_m e^{-iq_z md} v_m(q) \quad (3.15)$$

$$= e^2 v_{2D}(q) \frac{\sinh(qd)}{\cosh(qd) - \cos(q_z d)} \quad (3.16)$$

$$v_m(q) = e^{-|md|q} e^2 v_{2D}(q) \quad (3.17)$$

$$v_{2D}(q) = \frac{2\pi}{q} . \quad (3.18)$$

L' energia cinetica per elettrone ha la forma seguente.

(i) In assenza di tunneling:

$$\xi(K) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} , \quad (3.19)$$

- (ii) In presenza di tunneling in approssimazione di 'tight binding' e in approssimazione di primi vicini ([86]):

$$\xi(K) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + 2T \cos(k_z d) \quad , \quad (3.20)$$

dove abbiamo indicato con $T = \int dz \varphi^*(z) U(z) \varphi(z \pm d)$ (utilizzando l' approssimazione dei primi vicini [86]).

Nel caso più generale la superficie di Fermi ha una forma a simmetria cilindrica ed un profilo cosinusoidale lungo l' asse \hat{z} , ma il valore dell' energia di Fermi risulta indipendente dal tunneling elettronico ed è dato da $E_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ dove $k_F^2 = 2\pi n_2$, infatti:

$$An_2 = \sum_{k < k_F} 2 = \frac{2A}{(2\pi)^2} \pi k_F^2 \quad . \quad (3.21)$$

3.2 Teoria della risposta lineare nel LEG

Sottoponendo il LEG ad un debole potenziale esterno $\Phi^{est}(\mathbf{r}, z; t)$ *in vacuo* l' Hamiltoniana del sistema è modificata dall' accoppiamento del LEG al potenziale perturbante:

$$H \rightarrow H + H'(t) = H + \int d\mathbf{r} \sum_m \Phi^{est}(\mathbf{r}, md; t) \rho_m(\mathbf{r}) \quad (3.22)$$

$$= H + \frac{1}{AN_p} \sum_Q \bar{\Phi}^{est}(Q; t) \rho(-Q) \quad . \quad (3.23)$$

Tenendo conto della dinamica bidimensionale degli elettroni (vedi (3.29)) nella (3.23) ed anche nel seguito dove non specificato altrimenti, le trasformate di Fourier lungo \hat{z} sono convenientemente rappresentate dalle sommatorie $\sum_m \dots e^{ik_z dm}$. Indicando con $\Phi_m^{est}(\mathbf{q}; t) \equiv \Phi^{est}(\mathbf{q}, md; t)$, ad esempio per il potenziale esterno definiamo:

$$\bar{\Phi}^{est}(Q; t) = \sum_m e^{-iq_z md} \Phi_m^{est}(\mathbf{q}; t) \quad (3.24)$$

$$= \sum_{q'_z} L^{-1} \left(\sum_m e^{i(q_z - q'_z) md} \right) \Phi(\mathbf{q}, q_z; t) = \quad (3.25)$$

$$= \frac{1}{d} \sum_G \Phi^{est}(\mathbf{q}, q_z + G; t) \quad , \quad (3.26)$$

dove $G = 2\pi n/d$, n intero, è il generico vettore del reticolo reciproco del superreticolo e $\Phi^{est}(\mathbf{q}, q_z; t)$ è la trasformata di Fourier rispetto alle coordinate spaziali di $\Phi^{est}(\mathbf{r}, z; t)$. Nell' ultimo passaggio abbiamo usato la (3.1) osservando che $q_z - q'_z$ non è ristretto alla prima zona di Brillouin.

Indicando con $\langle \dots \rangle_o$ la media termica sull' ensemble di equilibrio ³, con $\langle \dots \rangle$ quella sull' ensemble perturbato dal potenziale esterno ⁴ ed infine con $\delta\rho_m(\mathbf{q}; t) = \rho_m(\mathbf{q}; t) - \langle \rho_m(\mathbf{q}; t) \rangle_o$, possiamo introdurre la funzione di risposta lineare di densità del LEG $\chi(\mathbf{q}, z, z'; \omega)$ che mette in relazione la densità di carica indotta $\delta\rho(\mathbf{q}, z = md; \omega) \equiv \langle \delta\rho_m(\mathbf{q}; \omega) \rangle$ al potenziale esterno perturbante $\Phi^{est}(\mathbf{q}, z; \omega)$ tramite:

$$\delta\rho(\mathbf{q}, z; \omega) = \int dz' \chi(\mathbf{q}, z, z'; \omega) \Phi^{est}(\mathbf{q}, z'; \omega) . \quad (3.28)$$

Da ora in poi, per non appesantire ulteriormente la notazione, adotteremo per il campo $\delta\rho(\mathbf{r}, md; t)$ funzione delle coordinate dello spazio fisico \mathbf{r} , md e del tempo t e per la funzione delle coordinate dello spazio delle fasi $\delta\rho_m(\mathbf{r}; t)$ dipendente dai parametri \mathbf{r} , m e t , lo stesso simbolo $\delta\rho_m(\mathbf{r}; t)$ poichè chiaramente identificabili dal contesto in cui vengono usate.

La dinamica bidimensionale degli elettroni determina la seguente dipendenza spaziale della densità di carica indotta:

$$\delta\rho(\mathbf{r}, z; t) = \sum_m \delta(z - md) \delta\rho_m(\mathbf{r}; t) , \quad (3.29)$$

e la risposta del LEG è descritta dalla funzione $\chi_{m-m'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t')$ (vedi appendice 5 in [90]):

$$i\chi_{m-m'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = \theta(t - t') \langle [\delta\rho_m(\mathbf{r}; t), \delta\rho_{m'}(\mathbf{r}'; t')] \rangle_o , \quad (3.30)$$

dove abbiamo indicato con $\theta(t - t')$ la funzione scalino di Heaviside e con $[\dots, \dots]$ il commutatore nel LEG quantistico o le parentesi di Poisson nel LEG classico. Le componenti della densità di carica indotta sono allora legate al potenziale esterno da:

$$\delta\rho_m(\mathbf{q}; \omega) = \sum_{m'} \chi_{m-m'}(\mathbf{q}; \omega) \Phi_{m'}^{est}(\mathbf{q}; \omega) , \quad (3.31)$$

ovvero dalla (3.31) e dalla (3.29) segue:

$$\delta\rho(Q; \omega) = \chi(Q; \omega) \bar{\Phi}^{est}(Q; \omega), \quad (3.32)$$

dove abbiamo indicato con $\chi(Q; \omega) = \sum_m e^{-iq_z md} \chi_m(\mathbf{q}; \omega)$.

In aggiunta a $\chi_{m-m'}(\mathbf{q}; \omega)$ è utile introdurre un' altra funzione di risposta longitudinale del LEG, che chiameremo funzione di risposta schermata ed indicheremo con

³Dato un osservabile microscopico A avremo $\langle A \rangle_o = \text{tr}\{w_o A\}$ con w_o matrice densità del sistema imperturbato. All' equilibrio termodinamico $w_o = e^{-\beta H} / \text{tr}\{e^{-\beta H}\}$.

⁴Dato un osservabile microscopico A avremo $\langle A \rangle = \text{tr}\{w(t) A\}$ con $w(t)$ matrice densità del sistema perturbato definita dalla equazione di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial w(t)}{\partial t} = [H + H'(t), w(t)] \stackrel{\text{linearizzazione}}{\simeq} [H, w(t) - w_o] + [H'(t), w_o] , \quad (3.27)$$

con la condizione al contorno $\lim_{t \rightarrow -\infty} w(t) = w_o$.

$\tilde{\chi}_{m-m'}(\mathbf{q}; \omega)$. Questa lega la densità di carica indotta (3.29) al potenziale schermato o di 'Hartree',

$$\Phi_m^H(\mathbf{q}; \omega) = \Phi_m^{est}(\mathbf{q}; \omega) + \sum_{m'} v_{m-m'}(q) \delta\rho_{m'}(\mathbf{q}; \omega) \quad , \quad (3.33)$$

tramite la relazione :

$$\delta\rho_m(\mathbf{q}; \omega) = \sum_{m'} \tilde{\chi}_{m-m'}(\mathbf{q}; \omega) \Phi_{m'}^H(\mathbf{q}; \omega) \quad , \quad (3.34)$$

ovvero, indicando con $\bar{\Phi}^H(Q; \omega) = \sum_m e^{iq_z md} \Phi_m^H(\mathbf{q}; \omega)$:

$$\delta\rho(Q; \omega) = \tilde{\chi}(Q; \omega) \bar{\Phi}^H(Q; \omega) \quad . \quad (3.35)$$

Il potenziale di Hartree è quello sentito da una carica introdotta nel sistema 'LEG + perturbazione esterna', piuttosto che quello sentito dalle particelle del LEG. Queste ultime sentono anche l'effetto dovuto alla precisa 'buca' che ciascuna di loro tende a 'scavare' intorno a se stessa. Terremo conto di questo effetto nella sottosezione 3.5.1 con le così dette correzioni di campo locale.

Dalla (3.30) prendendo la trasformata di Fourier rispetto alle variabili spaziotemporali è immediato trovare la relazione tra $\chi(Q; \omega)$ e la funzione di struttura dinamica di Van Hove del LEG $S(Q; \omega) = \sum_m e^{-iq_z md} S_m(\mathbf{q}; \omega)$ ⁵ nella forma:

$$Im\chi(Q; \omega) = -\frac{n_2}{2\hbar} [S(Q; \omega) - S(-Q; -\omega)] \quad , \quad (3.36)$$

espressione del *teorema di fluttuazione e dissipazione*. Il principio del bilancio dettagliato per il LEG all'equilibrio termodinamico ci permette di riscrivere la (3.36) nella forma [90]:

$$Im\chi(Q; \omega) = -\frac{n_2}{2\hbar} [1 - \exp(-\hbar\omega/K_B T)] S(Q; \omega) \quad , \quad (3.37)$$

che nei due limiti di interesse di fluido degenere ($T \ll T_F = E_F/K_B$) e di fluido classico ($K_B T \gg \hbar\omega$) all'equilibrio termodinamico si rilegge così:

$$S(Q; \omega) = \begin{cases} -(2/\beta n_2 \omega) Im\chi(Q; \omega) & \text{(classico)} \\ -(2\hbar/n_2)\theta(\omega) Im\chi(Q; \omega) & \text{(degenere)} \end{cases} \quad (3.38)$$

⁵ $S_m(\mathbf{q}; \omega)$ è una funzione fondamentale nello studio sia teorico che sperimentale del LEG (come di qualsiasi sistema a multicorpi). Essa è sperimentalmente accessibile poichè entra (in accordo con la teoria di van Hove dello scattering inelastico di neutroni da liquidi [91]) nell'espressione della sezione d'urto della diffusione anelastica, trattabile in approssimazione di Born, di una particella non relativistica da parte del LEG (o meglio dal suo piano a $z = md$). Questo fa in modo che $S_m(\mathbf{q}; \omega)$ sia legata alla probabilità per unità di volume $P_m(\mathbf{q}; \omega)$ che il piano m assorba un impulso $\hbar\mathbf{q}$ ed una energia $\hbar\omega$ nell'esperimento di diffusione anelastica dalla relazione $P_m(\mathbf{q}; \omega) = n_2 |v_{\mathbf{q}}| S_m(\mathbf{q}; \omega)$, dove $v_{\mathbf{q}}$ è il potenziale di interazione tra la particella incidente e una particella del fluido bidimensionale. D'altra parte $S_m(\mathbf{q}; \omega)$ fornisce direttamente informazioni sulla dinamica dell'insieme di elettroni essendo la trasformata di Fourier spaziotemporale della funzione di correlazione di coppia dipendente dal tempo (vedi sottosezione 4.6.1) $(1/n_2) \langle \delta\hat{\rho}(\mathbf{r}, md; t) \delta\hat{\rho}(\mathbf{r} = 0, m = 0; t = 0) \rangle$

Nel caso del LEG classico il fattore di struttura locale è allora dato da

$$S(Q) \equiv \int \frac{d\omega}{2\pi} S(Q; \omega) = -\frac{K_B T}{n_2} \int \frac{d\omega}{\pi} \omega^{-1} \text{Im} \chi(Q; \omega) \quad , \quad (3.39)$$

dalla relazione di Kramers-Krönig per la funzione di risposta $\chi(Q; \omega)$ finita e causale (vedi (3.30)) ricaviamo:

$$S(Q) = -\frac{K_B T}{n_2} \chi(Q; \omega = 0) \equiv -\frac{K_B T}{n_2} \chi(Q) \quad . \quad (3.40)$$

Un' altra funzione direttamente esprimibile in termini della funzione di risposta di densità lineare è la funzione dielettrica definita, in analogia con l' elettrostatica elementare, come:

$$\frac{1}{\varepsilon(Q; \omega)} = 1 + \frac{\delta\rho(Q; \omega)}{\rho^{est}(Q; \omega)} \quad , \quad (3.41)$$

dove ρ^{est} è legato a Φ^{est} dall' equazione di Poisson:

$$\Phi^{est}(Q; \omega) = 4\pi e^2 (q^2 + q_z^2)^{-1} \rho^{est}(Q; \omega) \quad . \quad (3.42)$$

È importante però osservare che $\varepsilon(Q; \omega)$ ha una espressione semplice solo nel caso in cui $\rho^{est}(Q; \omega)$ possiede la stessa periodicità di $\delta\rho(Q; \omega)$ cioè:

$$\rho^{est}(\mathbf{q}, q_z; \omega) = \rho^{est}(\mathbf{q}, q_z + G; \omega) \quad , \quad (3.43)$$

che equivale [9] a richiedere che la carica esterna sia confinata sui piani del LEG con:

$$\rho^{est}(\mathbf{q}, md; \omega) = \frac{1}{N_p} \sum_{q_z} e^{iq_z md} \rho^{est}(\mathbf{q}, q_z; \omega) \quad . \quad (3.44)$$

In questo caso infatti dalla (3.24) e dalle (3.42), (3.15) ricaviamo:

$$\overline{\Phi}^{est}(Q; \omega) = \frac{4\pi e^2}{d} \sum_G \left[\frac{1}{q^2 + (q_z + G)^2} \right] \rho^{est}(Q; \omega) = v(Q) \rho^{est}(Q; \omega) \quad , \quad (3.45)$$

e quindi dalle (3.41), (3.32) segue la relazione standard:

$$\frac{1}{\varepsilon(Q; \omega)} = 1 + v(Q) \chi(Q; \omega) \quad , \quad (3.46)$$

Possiamo allora scrivere, confrontando (3.32) con (3.35):

$$\chi(Q; \omega) = \frac{\tilde{\chi}(Q; \omega)}{\varepsilon(Q; \omega)} \quad , \quad (3.47)$$

ed anche:

$$\varepsilon(Q; \omega) = 1 - v(Q) \tilde{\chi}(Q; \omega) \quad , \quad (3.48)$$

Riscrivendo $\chi(Q; \omega)$ nella forma dell' equazione (3.47) si tiene conto degli effetti di *lungo raggio* dell' interazione Coulombiana: in particolare notiamo che la risonanza alla frequenza di plasma determinata da $\varepsilon(Q; \omega) = 0$ (vedi (3.119)) è esplicitata nel denominatore di (3.47).

3.2.1 Regola di somma sulla compressibilità

La richiesta che la risposta del sistema ad una perturbazione statica di grande lunghezza d'onda (una compressione uniforme) debba dare la compressibilità che si ottiene termodinamicamente dall'energia dello stato fondamentale nel sistema quantistico degenere, o dall'energia libera nel sistema classico, costituisce una condizione sul comportamento a grandi lunghezze d'onda della funzione di risposta schermata statica.

In generale dalla termodinamica del sistema ricaviamo che il potenziale chimico (livello di Fermi, nel caso degenere) locale dell' m -esimo piano $\mu_m(\mathbf{r}) = \mu(\rho_m(\mathbf{r}))$ varia con $\Phi_m^H(\mathbf{r})$ (definito in (3.33)) in modo tale che la forza con cui il potenziale di Hartree agisce sulle cariche del piano m -esimo, cioè $\nabla_r \Phi_m^H(\mathbf{r})$, sia bilanciata dal gradiente del potenziale chimico del piano considerato $\nabla_r \mu_m(\mathbf{r})$, cioè:

$$\nabla_r \Phi_m^H(\mathbf{r}) = \nabla_r \mu_m(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.49)$$

Usando, per lente variazioni nello spazio, la relazione termodinamica $\delta\mu_m(\mathbf{r}) = (\partial\mu_m/\partial\rho_m)\delta\rho_m(\mathbf{r})$ troviamo la densità di carica elettronica in trasformata di Fourier per $q \neq 0$:

$$\delta\rho_m(\mathbf{q}) = -n_2^2 \mathcal{K}_{2D} \Phi_m^H(\mathbf{q}) \quad (qr_o \ll 1) \quad (3.50)$$

$$\mathcal{K}_{2D}^{-1} = n_2^2 \frac{\partial\mu}{\partial n_2} \quad , \quad (3.51)$$

da cui ricaviamo la regola di somma sulla compressibilità applicata alla polarizzabilità propria del LEG:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \tilde{\chi}_m(\mathbf{q}; 0) = (-n_2^2 \mathcal{K}_{2D}) \delta_{m,0} \quad . \quad (3.52)$$

È importante osservare che nel caso del LEG nel limite termodinamico di $N_p \rightarrow \infty$ e d finito dobbiamo stare attenti nel determinare quale restrizione impone la (4.38) sulla $\chi(\tilde{Q}; \omega) = \sum_m \chi_m(\tilde{q}; \omega) e^{iq_z m d}$. In questo caso non siamo autorizzati a passare il $\lim_{q \rightarrow 0}$ attraverso la sommatoria infinita che definisce la $\chi(\tilde{Q}; \omega)$ indipendentemente dal valore di $q_z \in 1^\circ Bz$; ossia ad ammettere che valga la regole di somma:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \tilde{\chi}(Q; 0) = -n_2^2 \mathcal{K}_{2D} \quad \forall q_z \in 1^\circ Bz \quad . \quad (3.53)$$

Tale regola di somma è infatti in contraddizione con la condizione di elettroneutralità del LEG per cui $S_m(q) \xrightarrow{q \rightarrow 0} 0$ (vedi capitolo 4): considerando la (3.53) valida $\forall q_z \in 1^\circ Bz$ ed utilizzando la (3.40), le (3.47) e (3.48) per $\omega = 0$ ed infine la (3.53) ricaviamo:

$$S(q \rightarrow 0, q_z) = \frac{(1 - \cos(q_z d)) \mathcal{K}_{2D} / \mathcal{K}_{2D}^2}{(1 - \cos(q_z d)) + dq_D \mathcal{K}_{2D} / \mathcal{K}_{2D}^2} + O(q^2) \quad , \quad (3.54)$$

dove $q_D = 2\pi n_2 \beta e^2$ è il numero d' onda di Debye e $\mathcal{K}_{2D}^o = \beta/n_2$ la compressibilità isoteramica di un gas ideale classico. Per $N_p \rightarrow \infty$ e d finito abbiamo:

$$\lim_{q \rightarrow 0} S_o(q) = d \int_{1^o Bz} \frac{dq_z}{2\pi} \lim_{q \rightarrow 0} S(q \rightarrow 0, q_z) \quad (3.55)$$

$$= \frac{d\mathcal{K}_{2D}}{\mathcal{K}_{2D}^o} \left[1 - \frac{q_D d\mathcal{K}_{2D}/\mathcal{K}_{2D}^o}{\sqrt{q_D d\mathcal{K}_{2D}/\mathcal{K}_{2D}^o (2 + q_D d\mathcal{K}_{2D}/\mathcal{K}_{2D}^o)}} \right] \neq 0 \quad , \quad (3.56)$$

che viola l' elettroneutralità del piano in $z = 0$.

Per determinare la forma che la regola di somma sulla compressibilità assume per il fattore di struttura statico $S(Q)$ di un LEG con un numero infinito di piani, osserviamo che tale sistema è 'visto' da una perturbazione statica con $q \rightarrow 0$ e $q_z \rightarrow 0$ ($Q \rightarrow 0$), come un jellium omogeneo in 3D con elettroni vincolati a muoversi ortogonalmente a \hat{z} e quindi incomprimibile lungo la direzione \hat{z} . Tale analogia col jellium in 3D ci suggerisce la seguente forma per la regola di somma sulla compressibilità:

$$\lim_{Q \rightarrow 0} S(q, q_z) = \left(\frac{Q}{Q_D} \right)^2 - \left(\frac{Q}{Q_D} \right)^4 \frac{\mathcal{K}_{2D}^o}{\mathcal{K}_{2D}} \quad , \quad (3.57)$$

dove $Q_D = \sqrt{4\pi\beta n_2 e^2/d}$. Questa condizione diventa la regola di somma sulla compressibilità per il sistema omogeneo in 3D se sostituiamo in essa \mathcal{K}_{2D} (\mathcal{K}_{2D}^o) con la compressibilità del jellium in 3D (del jellium non interagente in 3D). Come vedremo nel corso del lavoro di tesi, questa 'somiglianza' tra il LEG analizzato per mezzo di perturbazioni con $q_z = 0$ e $qd \ll 1$ ed il jellium in 3D omogeneo analizzato a grandi lunghezze d' onda, costituisce una caratteristica tipica di diverse proprietà del LEG (come ad esempio il comportamento a piccoli impulsi trasferiti della frequenza delle oscillazioni collettive di plasma studiato nella sottosezione 3.4.1, le regole di somma multipolari studiate nella sottosezione 4.3, gli andamenti asintotici delle correlazioni trattati nel capitolo 4).

Vediamo adesso come la (3.50) sia sufficiente per dimostrare che l' uso del campo di Hartree porta automaticamente a soddisfare la proprietà dello *schermo perfetto* di carica. A tale scopo è sufficiente ricordarci la definizione del campo di Hartree (vedi (3.33)):

$$\Phi_m^H(\mathbf{q}) = \frac{2\pi e^2}{q} \int dz e^{-q|m d - z|} \rho_{est}(\mathbf{q}, z) + \frac{2\pi e^2}{q} \sum_{m'} e^{-q|m - m'|d} \delta \rho_{m'}(\mathbf{q}) \quad . \quad (3.58)$$

Moltiplicando questa espressione per $q/2\pi e^2$ e prendendo il limite $q \rightarrow 0$ in entrambi i membri ricordandoci della (3.50) (dalla quale ricaviamo che $\Phi_m^H(\mathbf{q}) \xrightarrow{q \rightarrow 0} \text{costante}$ dove *costante* è una funzione del numero di piani ⁶), troviamo che la carica esterna totale è esattamente bilanciata dalla carica totale indotta (*schermo perfetto*):

$$\int d^3 R \rho_{est}(R) = - \sum_m \int d\mathbf{r} \delta \rho_m(\mathbf{r}) \quad . \quad (3.64)$$

⁶Quando le cariche esterne perturbanti stanno su gli N_p piani del LEG con densità $\rho_m^{est}(\mathbf{q})$

Un campo esterno statico, lentamente variabile nello spazio è perfettamente schermato dalle cariche del LEG su una distanza $q_s = 2\pi n_2^2 e^2 \mathcal{K}_{2D}$.

Prima di concludere questa sezione è interessante discutere le approssimazioni di Thomas-Fermi (TFA) per il LEG quantistico e l' analogo approssimazione di Debye-Hückel (DHA) per il LEG classico che come vedremo nella prossima sezione, danno il limite di grandi lunghezze d' onda ($qr_o \ll 1$) delle funzioni di risposta lineare di densità, statiche, del sistema non interagente degenero o classico e note rispettivamente come funzione di Lindhard e funzione di Vlasov.

Per ottenere la TFA o la DHA è sufficiente considerare la (3.50) valida per ogni valore di q dopo che abbiamo sostituito nella \mathcal{K}_{2D} la compressibilità isoterma di un gas ideale in 2D:

$$\mathcal{K}_{2D}^o = \frac{1}{mn_2 s_{2D}^o{}^2}, \quad s_{2D}^o = \begin{cases} v_F/\sqrt{2}, & v_F = \hbar k_F/m \quad (\text{degenero}) \\ \sqrt{K_B T/m} & (\text{classico}) \end{cases} \quad (3.65)$$

dove abbiamo indicato con s_{2D}^o la velocità isoterma del suono in un gas ideale bidimensionale che, quando degenero, ha un numero d' onda di Fermi $k_F = \sqrt{2\pi n_2}$ (vedi (3.21)). Otteniamo quindi:

$$\tilde{\chi}^{TFA,DHA}(Q) = -n_2 \mathcal{K}_{2D}^o = \begin{cases} -q_{TF}/2\pi e^2 & ; q_s = q_{TF} \quad (\text{degenero}) \\ -q_D/2\pi e^2 & ; q_s = q_D \quad (\text{classico}) \end{cases} \quad (3.66)$$

o anche dalla (3.48):

$$\epsilon^{TFA,DHA}(Q) = 1 + v(Q) \frac{q_{TFA,DHA}}{2\pi e^2}, \quad (3.67)$$

combinando la (3.58) con la (3.50) si ricava per $qr_o \ll 1$ che:

$$\delta\rho_m(\mathbf{q})[1 + q/q_s] = -\rho_m^{est}(\mathbf{q}) - \sum_{m'(\neq m)} e^{-|m-m'|qd} [\rho_{m'}^{est}(\mathbf{q}) + \delta\rho_{m'}(\mathbf{q})], \quad (3.59)$$

dove indichiamo con $q_s = 2\pi n_2^2 e^2 \mathcal{K}_{2D}$ l' inverso della distanza di schermo del 2DEG. Dalla (3.58) ricaviamo allora:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Phi_m^H(\mathbf{q}) = \lim_{q \rightarrow 0} \sum_{m'} e^{-|m-m'|qd} \frac{2\pi e^2}{q} [\rho_{m'}^{est}(\mathbf{q}) + \delta\rho_{m'}(\mathbf{q})] \quad (3.60)$$

$$= \sum_{m'} 2\pi e^2 \left(\frac{\rho_{m'}^{est}(0)}{q_s} - \sum_{m''(\neq m')} \left(\frac{\rho_{m''}^{est}(0)}{q_s} - \sum_{m'''(\neq m'')} \left(\frac{\rho_{m'''}^{est}(0)}{q_s} - \dots \right) \right) \right) \quad (3.61)$$

$$= 2\pi e^2 \frac{\rho_{tot}^{est}}{q_s} [1 - A + A^2 - A^3 + A^4 - \dots], \quad \text{con } A = (N_p - 1), \quad (3.62)$$

dove $\rho_{tot}^{est} = \sum_m \rho_m^{est}(q=0)$ è la carica esterna totale ed abbiamo usato il fatto che $\sum_m \sum_{m'(\neq m)} f(m) = (N_p - 1) \sum_m f(m)$ con $f(m)$ una generica funzione dell' indice di piano m . Dalla (3.62) ricaviamo:

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Phi_m^H(\mathbf{q}) = 2\pi e^2 \frac{\rho_T^{est}}{q_s N_P}. \quad (3.63)$$

dove nel caso degenere abbiamo indicato con $q_{TF} = 2/a_B$ l' inverso della lunghezza di schermo di Thomas-Fermi ($a_B = \hbar^2/me^2$ è il raggio di Bohr) e nel caso classico $q_D = 2\pi n_2 e^2 / K_B T$ è l' inverso della lunghezza di schermo di Debye-Hückel.

Una conseguenza sorprendente della (3.50) nel caso di TFA è che troviamo una lunghezza di schermo ($q_{TF} = 2/a_B$) indipendente dalla densità planare n_2 (a differenza del caso tridimensionale dove lo schermo dipende dalla densità del liquido). Questo fa in modo che la TFA diventi una approssimazione cattiva al tendere a zero della densità planare. Naturalmente l' approssimazione TF è diversa dal risultato esatto anche nel limite $q \rightarrow 0$, poichè non tiene conto delle oscillazioni di Friedel di lunghezza d' onda $2\pi/2k_F$, dominanti a grandi distanze [5] e dovute alla discontinuità nella distribuzione degli impulsi alla superficie di Fermi (vedi la sezione successiva) .

3.2.2 Il segno della compressibilità

Il nuovo metodo usato nel 1991 da Eisenstein ed al. [14] per la misura sperimentale del segno e del valore assoluto della compressibilità termodinamica $\mathcal{K}^{-1} = n_2^2(\partial\mu/\partial n_2)$ di un 2DEG, sia in assenza di campo magnetico che nel limite estremamente quantistico di forte campo magnetico ($\nu < 1$), offre un esempio dell' importanza delle correlazioni Coulombiane intrapiano.

L' apparato sperimentale di Eisenstein ed al. è schematicamente mostrato in figura 3.1 e consiste di un elettrodo di alluminio (gate) e di una eterostruttura di

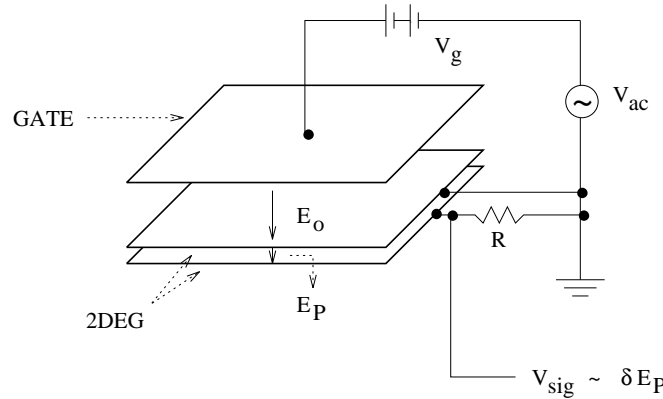


FIGURA 3.1: Schema dell' apparato sperimentale usato da Eisenstein ed al. [14].

GaAs-AlGaAs trattata con drogaggio modulato e ben descrivibile con un sistema di due 2DEG equivalenti, elettricamente isolati tra loro, separati di una distanza $d \sim 375\text{\AA}$ e con densità planari nominali $n_2 \sim 1.5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ e mobilità $\mu \sim 3 \cdot 10^6 \text{ cm}^2/Vs$. Applicando un potenziale (di gate) tra l' elettrodo e il 2DEG superiore si forma tra questi un campo elettrico E_o che parzialmente penetra oltre il 2DEG superiore ⁷.

⁷Un piano di elettroni classici collegato a terra riesce sempre a schermare perfettamente un

Collegando tra loro i due 2DEG con connessioni elettriche esterne che mantengono i potenziali chimici dei due sistemi di cariche uguali, il campo penetrante E_p forzerà gli elettroni a svuotare o riempire il 2DEG superiore al variare del potenziale di gate (per $V_g < -1V$ esso è completamente svuotato), fornendo così un metodo per controllare la densità di carica planare n_2 di un 2DEG. Se assumiamo che la penetrazione di E_o sia debole, l'intensità di corrente che passa nel collegamento tra i due 2DEG (I_{sig}) è direttamente proporzionale all'inverso della compressibilità del 2DEG superiore \mathcal{K}_s^{-1} .

Con questa tecnica Eisenstein ed al. hanno trovato valori negativi di \mathcal{K}_s a $T = 1.2K$ e in assenza di campo magnetico, scendendo sotto la densità critica $N_c = 1.1 \cdot 10^{11} cm^{-2}$. L'andamento di $(\mathcal{K}_s n_{2,s}^2)^{-1}$ osservato in funzione di $n_{2,s}$ è qualitativamente diverso da quello di una costante positiva, atteso per il sistema non interagente.

L'energia per particella dello stato fondamentale ($T = 0$) di un 2DEG si può scomporre nei seguenti termini ⁸:

$$\varepsilon = \varepsilon_{cin} + \varepsilon_p = \varepsilon_{cin}^o + \varepsilon_{sc} + \varepsilon_c \quad (3.70)$$

dove nel secondo membro abbiamo introdotto l'energia cinetica per elettrone del 2DEG interagente, ε_{cin} e l'energia potenziale per elettrone del 2DEG interagente (chiamata anche, nel caso classico, energia interna in eccesso per elettrone),

$$\varepsilon_p = \frac{n_2}{2} \int d\mathbf{r} \frac{e^2}{r} [g(\mathbf{r}) - 1] \quad (3.71)$$

$$= \frac{1}{2A} \sum_q \frac{2\pi e^2}{q} [S(\mathbf{q}) - 1], \quad (3.72)$$

dove $S(\mathbf{q})$ è il fattore di struttura statico del 2DEG e $g(\mathbf{r})$ la funzione di distribuzione radiale intrapiano (vedi la definizione (4.16) e la discussione successiva). Nel terzo membro della (3.70) abbiamo indicato con

$$\varepsilon_{cin}^o = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\mathbf{q}, \sigma \\ |\mathbf{q}| < q_F}} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} = \frac{1}{r_s^2} \left(\frac{e^2}{2a_B} \right) = \frac{1}{2} E_F \quad , \quad (3.73)$$

campo elettrico esterno. Questo è falso per un piano di elettroni quantistico (con densità degli stati finita) in cui il principio di Pauli richiede rispetto al caso classico, una energia aggiuntiva per riempire con elettroni la buca quantistica che forma il piano carico [92].

⁸L'energia cinetica per particella ε_{cin} e quella potenziale per particella ε_p introdotte in (3.70) si possono esprimere in termini dell'energia di correlazione per particella ε_c definita in (3.70) applicando il teorema del viriale in 2D [93]:

$$\varepsilon_{cin} = \varepsilon_{cin}^o - \frac{\partial}{\partial r_s} (r_s \varepsilon_c) \quad (3.68)$$

$$\varepsilon_p = \varepsilon_{sc} + \frac{1}{r_s} \frac{\partial r}{\partial r_s} (r_s^2 \varepsilon_c) \quad (3.69)$$

l'energia cinetica di particella libera (ricavata supponendo gli impulsi delle particelle distribuiti secondo la distribuzioni di Fermi-Dirac) per elettrone dove $r_s \equiv r_o/a_B = me^2/\hbar^2\sqrt{(\pi n_2)}$ ed $E_F = \hbar^2(2\pi n_2)/2m$. Abbiamo indicato con

$$\varepsilon_{sc} = \frac{1}{AN} \sum_{\mathbf{q}} \frac{2\pi e^2}{q} \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ |\mathbf{k}| < q_F, \quad |\mathbf{k}+\mathbf{q}| < q_F}} 1 = -\frac{8\sqrt{2}}{3\pi r_s} \left(\frac{e^2}{2a_B} \right), \quad (3.74)$$

l'energia di scambio di Hartree-Fock per elettrone, ossia quella parte di ε_p che si ricava utilizzando per $[g(\mathbf{r}) - 1]$ la cosiddetta 'buca di Fermi' (vedi ad esempio [90])

$$\frac{9}{2} \left(\frac{j_1(k_F r)}{k_F r} \right)^2 \quad \text{con} \quad j_1(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^2}. \quad (3.75)$$

Ed infine abbiamo definito $\varepsilon_c \equiv \varepsilon - [\varepsilon_{cin}^o + \varepsilon_{sc}]$ l'energia di correlazione per elettrone.

Indicando con P la pressione nel 2DEG, la compressibilità isoterma è definita come:

$$\frac{1}{\mathcal{K}_T} \equiv n_2 \left[\frac{\partial P}{\partial n_2} \right]_{N,T}. \quad (3.76)$$

La pressione a sua volta, è definita da:

$$P \equiv (n_2)^2 \left[\frac{\partial \varepsilon}{\partial n_2} \right]_N. \quad (3.77)$$

Cambiando allora variabili da n_2 ad $r_s \propto n_2^{-1/2}$ ed esprimendo l'energia di correlazione per elettrone in unità di rydbergs ($1Ry = e^2/2a_B$) si ricava per la compressibilità isoterma la seguente espressione:

$$\frac{1}{\mathcal{K}_T} = \frac{n_2 r_s}{4} \left[\frac{8}{r_s^3} - \frac{8\sqrt{2}}{\pi r_s^2} - \frac{\partial \varepsilon_c}{\partial r_s} + r_s \frac{\partial^2 \varepsilon_c}{\partial r_s^2} \right]. \quad (3.78)$$

La compressibilità isoterma di un 2DEG non interagente a temperatura zero è allora:

$$\frac{1}{\mathcal{K}_T^o} = \frac{n_2}{2r_s^2}. \quad (3.79)$$

In approssimazione di Hartree-Fock ($\varepsilon_c = 0$) abbiamo:

$$\frac{\mathcal{K}_T^o}{\mathcal{K}_T} = 4 \left[1 - \frac{\sqrt{2}}{\pi} r_s^2 \right]. \quad (3.80)$$

Quindi \mathcal{K}_T^{-1} decresce linearmente in r_s per $r_s \rightarrow \infty$ (o analogamente diverge $\propto n_2^{-1/2}$ per $n_2 \rightarrow 0$) e diventa negativa per una densità critica $r_s^{HF}_c = \pi/\sqrt{2} \sim 2.221$ o $n_2^{HF}_c = 6.5 \times 10^{10} \text{cm}^{-2}$ per GaAs.

Eisenstein ed al. confrontano i loro risultati con i risultati numerici (da simulazioni di Monte Carlo) di Tanatar e Ceperley [26] per l'energia di correlazione di un 2DEG che portano ad una densità critica del 20% più alta di quella ricavata in approssimazione di Hartree-Fock e ad una compressibilità con una leggera deviazione dalla dipendenza lineare da r_s prevista in tale approssimazione. Essi trovano che i loro dati sono in buono accordo qualitativo con la teoria del 2DEG ideale.

Data la capacità mostrata da tali sistema di mettere in evidenza l'importanza delle correlazioni Coulombiane sulla compressibilità del campione, Eisenstein ed al. lo utilizzano anche per studiare l'andamento della compressibilità di un 2DEG sottoposto a campi magnetici molto alti in funzione del parametro di riempimento di Landau $\nu_s = hn_{2,s}/eB$. Per tale sistema, in cui il livello di Fermi è contenuto nel livello di Landau più basso, essi osservano un drastico cambiamento nell'andamento di $(n_{2,s}^2 \mathcal{K}_s)^{-1}$ rispetto al caso $B = 0$: a $T = 1.2K$ e $B = 7.5T$ (con $\nu \sim 0.8$ costante) $(n_{2,s}^2 \mathcal{K}_s)^{-1}$ ha valori negativi per $0 < \nu_s < 1$, ha un grande picco positivo quando si forma nel sistema lo stato di QHE con $\nu_s = 1$ e presenta due buche, una più profonda, subito dopo $\nu_s \sim 0$, e una meno profonda, subito prima di $\nu \sim 1$. Aumentando $B \sim 12T$ e diminuendo $T = 0.35K$ essi trovano che si sviluppano due netti picchi intorno a $\nu_s = 1/3$ e $\nu_s = 2/3$ che rappresentano una traccia termodinamica dei corrispondenti stati di FQHE e che sono entrambi seguiti e preceduti da dei minimi ben distinti.

Questi andamenti della compressibilità sono in buon accordo qualitativo con le previsioni teoriche esistenti. Eisenstein ed al. osservano che in analogia col caso $B = 0$, nel caso $B = 7.5T$ e $T = 1.2K$, \mathcal{K}_s diventa negativa nel limite estremamente quantistico di $\nu_s < 1$, almeno fino a quando non si sviluppa uno stato incompressibile dovuto all'FQHE, poichè l'energia di interazione Coulombiana predomina su quella cinetica (per il confinamento del moto delle cariche dovuto al campo magnetico); a basse densità $\nu_s \rightarrow 0$ ci si aspetta ancora una divergenza negativa di $(n_{2,s}^2 \mathcal{K}_s)^{-1}$ (che risulta tagliata a causa del riempimento totale della prima orbita di Landau del 2EG superiore). Alzando B e abbassando T ci mettiamo nelle condizioni ideali per osservare il FQHE che si manifesta con i due stati incompressibili aventi fattore di riempimento $1/3$ e $2/3$ (anche in questo caso i 2 picchi sono più deboli delle previsioni teoriche per cui $\mathcal{K}_s^{-1} \rightarrow \infty$. Questo è dovuto, principalmente, al disordine e alla disomogeneità del campione).

La presenza dei minimi che seguono e precedono ciascun picco di $(n_{2,s}^2 \mathcal{K}_s)^{-1}$ in corrispondenza dei fattori di riempimento frazionari, si può considerare come una forte conferma sperimentale (termodinamica) dell'esistenza di gas diluiti di quasiparticelle interagenti tra gli stati fondamentali condensati di FQHE (vedi sottosezione 2.4.1). Tali minimi si spiegano infatti, in completa analogia con le divergenze viste per $n_{2,s} \rightarrow 0$ a $B = 0$ e per $\nu_s \rightarrow 0.1$ in $B \neq 0$, osservando che avvicinandosi agli stati di FQHE, la densità di quasi buche o quasi particelle eccitate diminuisce per la loro condensazione negli stati di FQHE a multicorpi, provocando così una divergenza negativa di $(n_{2,s}^2 \mathcal{K}_s)^{-1}$ (troncata dal rumore che dominerà per densità di quasiparticelle troppo basse).

3.3 Risposta dielettrica del LEG non interagente

La più semplice approssimazione per la funzione di risposta è quella del gas di elettroni non interagenti, che in analogia col caso del gas di elettroni in 3D chiameremo approssimazione di Hartree-Fock (HFA) equivalente al primo ordine in teoria delle perturbazioni e valida, naturalmente, per piccoli valori della costante di accoppiamento (r_s o $\Gamma \rightarrow 0$). Questa si ottiene assumendo che ciascun elettrone reagisca al campo esterno, sul suo piano, con la risposta di un gas di elettroni non interagenti in 2D, cioè:

$$\delta\rho_m(\mathbf{q}; \omega) = \chi_{2D}^o \Phi_m^{est}(\mathbf{q}; \omega) \quad \forall m \quad , \quad (3.81)$$

dove χ_{2D}^o è la funzione di risposta di Lindhard di un 2DEG [3], nel caso del LEG degenerare all'equilibrio termodinamico (con distribuzione degli impulsi discontinua sulla superficie di Fermi) o la funzione di Vlasov di un 2DEG [94], nel caso del LEG classico all'equilibrio termodinamico (con distribuzione Maxwelliana degli impulsi).

Lindhard [95] per primo ha dato la funzione di risposta lineare di densità di un gas ideale di Fermi in 3D in connessione con la teoria dello scattering di particelle cariche dalla materia. L'analogo calcolo su un gas ideale di Fermi in 2D è stato fatto da Stern [3] per trovare il potenziale Coulombiano schermato asintotico e la relazione di dispersione del plasmon nel 2DEG che si forma in uno strato di inversione di tipo n.

2DEG ideale degenerare

Possiamo ritrovare l'espressione standard di χ_{2D}^o in termini della distribuzione degli impulsi sfruttando il teorema di fluttuazione e dissipazione:

$$Im\chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) = -\frac{n_2}{2\hbar} [S_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) - S_{2D}^o(-\mathbf{q}; -\omega)] \quad , \quad (3.82)$$

che lega la funzione di risposta lineare di densità alla funzione di struttura dinamica, o funzione di scattering inelastico S_{2D}^o (vedi nota 5) del 2DEG ideale degenerare. $S_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega)$ è coinvolta in un processo di diffusione in cui si crea una buca con impulso $\hbar\mathbf{k}$ e si aggiunge un elettrone con impulso $\hbar(\mathbf{k}+\mathbf{q})$ fuori dalla circonferenza di Fermi. La probabilità di tale processo è allora $n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}})[1 - n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})]$ in termini della funzione di distribuzione di Fermi-Dirac ($n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ che si riduce ad $e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\mathbf{k}})}$ nel limite classico) e dell'energia di eccitazione $\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}$ con $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar^2\mathbf{k}^2/2m$. Allora la regola d'oro di Fermi dà:

$$S_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) = \frac{2\pi\hbar}{n_2} \theta(\omega) \frac{1}{A} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}}) [1 - n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] \delta(\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad , \quad (3.83)$$

dove A è la superficie occupata dal 2DEG e la somma è estesa a tutti gli stati di singolo elettrone (di impulso \mathbf{k} e spin σ). Utilizzando adesso la (3.82) troviamo:

$$Im\chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) = -\frac{2\pi}{A} \sum_{\mathbf{k}} [n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] \delta(\hbar\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \varepsilon_{\mathbf{k}}) \quad , \quad (3.84)$$

da cui ricordandoci la relazione $(x + i0^+)^{-1} = P(1/x) - i\pi\delta(x)$ (dove P = parte principale di Cauchy e 0^+ = infinitesimo positivo) ritroviamo la definizione standard di χ_{2D}^o :

$$\chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) = \frac{2}{A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega - i\hbar 0^+} . \quad (3.85)$$

Stern ha calcolato tale espressione [3] trovando:

$$Re\chi_{2D}^o = -G\{2z - C_- \sqrt{[(z-u)^2 - 1]} - C_+ \sqrt{[(z+u)^2 - 1]}\}, \quad (3.86)$$

$$Im\chi_{2D}^o = -G\{D_- \sqrt{[1 - (z-u)^2]} - D_+ \sqrt{[1 - (z+u)^2]}\}, \quad (3.87)$$

$$z = q/2k_F, \quad u = \omega/qv_F, \quad G = n_2/mzv_F^2, \quad (3.88)$$

$$C_{\pm} = (z \pm u)/|z \pm u| \quad \text{con} \quad D_{\pm} = 0 \quad \text{per} \quad |z \pm u| > 1, \quad (3.89)$$

$$C_{\pm} = 0 \quad \text{con} \quad D_{\pm} = 1 \quad \text{per} \quad |z \pm u| < 1, \quad (3.90)$$

Conoscendo la funzione di Lindhard, possiamo scrivere la funzione dielettrica del 2DEG degenere, $\varepsilon_{2D} = 1 - e^2 v_{2D} \tilde{\chi}_{2D}$ in RPA, ε_{2D}^{RPA} . A tale scopo è necessario assumere che la funzione di risposta schermata $\tilde{\chi}_{2D}$ coincida con la funzione di risposta di Lindhard χ_{2D}^o . Così facendo si ottiene:

$$\varepsilon_{2D}^{RPA}(q; \omega) = 1 - e^2 v_{2D}(q) \chi_{2D}^o(q; \omega) . \quad (3.91)$$

La relazione di dispersione del plasmon $\omega = \omega_{2D}(q)$ in RPA si ottiene allora risolvendo l'equazione $\varepsilon_{2D}^{RPA}(q; \omega_{2D}(q)) = 0$. A piccoli impulsi trasferiti ($q \rightarrow 0$) si ottiene la seguente soluzione [3]:

$$\omega_{2D}^2(q) = \left(\frac{n_2 q^2}{m} e^2 v_{2D}(q) \right) + 6\varepsilon_{cin}^o \frac{q^2}{2m} + \dots = \quad (3.92)$$

$$= \left(\frac{2\pi n_2 e^2}{m} q \right) + \frac{3}{4} (qv_F)^2 + \dots . \quad (3.93)$$

2DEG ideale classico

La funzione di Vlasov χ_{2D}^o di un 2DEG ideale che obbedisce alla statistica classica, si può derivare prendendo il limite classico di (3.85). Indicando con $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}/m$ la velocità degli elettroni, con $v = |\mathbf{v}|$ e con $f(v) = (m/2\pi K_B T) e^{-mv^2/2K_B T}$ la distribuzione di Maxwell delle velocità normalizzata ad 1⁹ il limite classico si esprime tramite:

$$\frac{1}{A} \sum_{\mathbf{k}} \longrightarrow \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^2 \int d^2\mathbf{v} , \quad (3.94)$$

⁹Ricordiamo che nel caso quantistico avevamo $(1/A) \sum_{\mathbf{k}} n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = n_2$.

$$\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \longrightarrow \hbar(\mathbf{v} \cdot \mathbf{q}) \quad , \quad (3.95)$$

$$2[n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - n_o(\varepsilon_{\mathbf{k}})] \longrightarrow \frac{n_2}{m} \left(\frac{m}{2\pi\hbar} \right)^2 \hbar\mathbf{q} \cdot \frac{\partial f(v)}{\partial \mathbf{v}} \quad . \quad (3.96)$$

Applicando (3.94), (3.95) e (3.96) a (3.85) ricaviamo subito la definizione standard di χ_{2D}^o [94]¹⁰, [96]:

$$\chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) = -\frac{n_2}{m} \int d^2\mathbf{v} \frac{1}{\omega - \mathbf{q} \cdot \mathbf{v} + i0^+} \mathbf{q} \cdot \frac{\partial f(v)}{\partial \mathbf{v}} \quad , \quad (3.97)$$

che viene spesso riscritta [94], [96] utilizzando la *funzione di dispersione di plasma* (o *funzione W*):

$$W(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x e^{-x^2/2}}{x - z - i0^+} \quad , \quad (3.98)$$

come:

$$-e^2 v_{2D} \chi_{2D}^o = \frac{q_D}{q} W \left[\frac{\omega}{q\sqrt{K_B T/m}} \right] \quad . \quad (3.99)$$

Nell' approssimazione di Vlasov (analoga all' RPA ma valida nel limite classico) prendendo la funzione dielettrica del 2DEG ($\varepsilon_{2D} = 1 - e^2 v_{2D} \tilde{\chi}_{2D}$, con $\tilde{\chi}_{2D}$ la funzione di risposta schermata) della forma:

$$\varepsilon_{2D}^{RPA}(q; \omega) = 1 + \frac{q_D}{q} W \left[\frac{\omega}{\omega_{sp}(q)} \right] \quad , \quad (3.100)$$

dove abbiamo indicato con $q_D = 2\pi n_2 e^2 / K_B T$ il numero d' onda di Debye, con $v_{2D} = 2\pi/q$ la solita trasformata di Fourier bidimensionale di $1/r$ e con $\omega_{sp} = q\sqrt{K_B T/m}$ la frequenza caratteristica delle eccitazioni di singola particella.

Dalla funzione di risposta dielettrica (3.100) si ricava la relazione di dispersione del plasmone $\omega = \omega_{2D}(q)$ e lo smorzamento di Landau $\gamma_L(q)$ delle oscillazioni di plasma come [97, 98]:

$$\omega_{2D}(q) = \left(\frac{2\pi n_2 e^2}{m} q \right)^{1/2} \left(1 + \frac{3}{2} \frac{q}{q_D} \right) \quad , \quad (3.101)$$

$$\gamma_L(q) = - \left(\frac{\pi}{8} \right)^{1/2} \left(\frac{q_D}{q} \right)^{3/2} e^{-q_D/2q-3/2} \omega_{2D}(q) \quad , \quad (3.102)$$

¹⁰Su [94] troviamo, per entrambi i casi, il comportamento statico a grandi lunghezze d' onda di χ_{2D}^o ed il suo comportamento ad alte frequenze. Vengono anche riportati i primi momenti di $Im(\chi_{2D}^o)$ rispetto alla frequenza.

nel limite $q \ll q_D$ in cui risulta $|\gamma_L(q)| \ll \omega_{2D}(q)$.¹¹

Totsuji [98] ha calcolato lo smorzamento collisionale del plasmone. Egli ha studiato cioè gli effetti delle collisioni elettrone-elettrone sullo smorzamento dell'oscillazione di plasma ed ha trovato sempre nel limite di piccolo smorzamento, la seguente forma corretta della funzione dielettrica:¹²

$$\varepsilon(q; \omega) = 1 + \frac{q_D}{q} W \left[\frac{\omega}{\omega_{sp}(q)} \right] + i \frac{3\sqrt{\pi}}{8} \left(\frac{2\pi n_2 e^2}{m\omega} q \right)^{5/2} \left(\frac{q}{q_D} \right)^{1/2}, \quad (3.104)$$

da cui si ricava il seguente smorzamento collisionale:

$$\gamma_c(q) = -\frac{3\sqrt{\pi}}{16} \left(\frac{q}{q_D} \right)^{1/2} \omega_{2D}(q). \quad (3.105)$$

L'annullarsi dello smorzamento nel limite di grandi lunghezze d'onda è legato al fatto che le collisioni elettrone-elettrone non influenzano la conduttività $\sigma(\mathbf{q}; \omega)$ ¹³ poichè a grandi lunghezze d'onda la corrente e l'impulso trasportato sono proporzionali. Si vede inoltre come lo smorzamento collisionale (3.105) sia più grande di quello di Landau (3.102) nel dominio in cui l'oscillazione di plasma è un modo collettivo ben definito; essi sono confrontati in figura 3.2 come funzioni di q/q_D .

Nel limite statico $\omega = 0$ le funzioni di Lindhard e di Vlasov si riscrivono:

$$-e^2 v_{2D} \chi_{2D}^o = \begin{cases} q_{TF}/q \{1 - \theta(q - 2k_F) \sqrt{1 - (2k_F/q)^2}\} & \text{(degenere)} \\ q_D/q & \text{(classico)} \end{cases} \quad (3.106)$$

dove nel caso degenere abbiamo indicato con $q_{TF} = 2/a_B$ l'inverso della lunghezza di schermo di Thomas-Fermi e nel caso classico $q_D = 2\pi n_2 e^2 / K_B T$ è l'inverso della lunghezza di schermo di Debye-Hückel.

È facile verificare che la regola di somma sulla compressibilità (3.53) è violata anche per le funzioni di risposta di Lindhard e di Vlasov. Prendendo il limite di $q \rightarrow 0$ nella (3.106) (dove è sufficiente prendere $q < 2k_F$) troviamo infatti, come anticipato (vedi (3.66)):

$$-e^2 v_{2D}(q) \chi_{2D}^o(q; \omega) \xrightarrow{q \rightarrow 0} \begin{cases} q_{TF}/q & \text{(degenere)} \\ q_D/q & \text{(classico)} \end{cases} \quad (3.107)$$

¹¹Tale risultato si ottiene imponendo l'equazione $\varepsilon_{2D}^o(q, \omega_{2D}(q) + i\gamma_L(q)) = 0$ ed osservando che nel limite di piccolo smorzamento $|\gamma_L(q)| \ll \omega_{2D}(q)$ una espansione al primo ordine in $\gamma_L(q)$ disaccoppia la parte reale e quella immaginaria di tale equazione.

¹²Nell'analogo sistema in 3D si trova [99]:

$$\gamma_c(q) = -\frac{2}{15\pi^{3/2}} \left(\frac{q}{q_D} \right)^2 \frac{q_D}{n_3} \ln \left[\left(\frac{q_T}{q_D} \right) 4e^{-C} \right] \omega_p, \quad (3.103)$$

dove $\beta = 1/K_B T$ è l'inverso della temperatura, n_3 la densità del sistema in 3D, $C = 0.56$ la costante di Eulero, $q_D = \sqrt{4\pi e^2 n_3 \beta}$ il numero d'onda di Debye, $q_T = \sqrt{m/\beta \hbar^2}$ il numero d'onda termico di de Broglie ed infine ω_p la frequenza di plasma.

¹³Legata alla funzione di risposta dielettrica da: $\varepsilon(\mathbf{k}; \omega) = 1 + i(2\pi q/\omega)\sigma(\mathbf{q}; \omega)$.

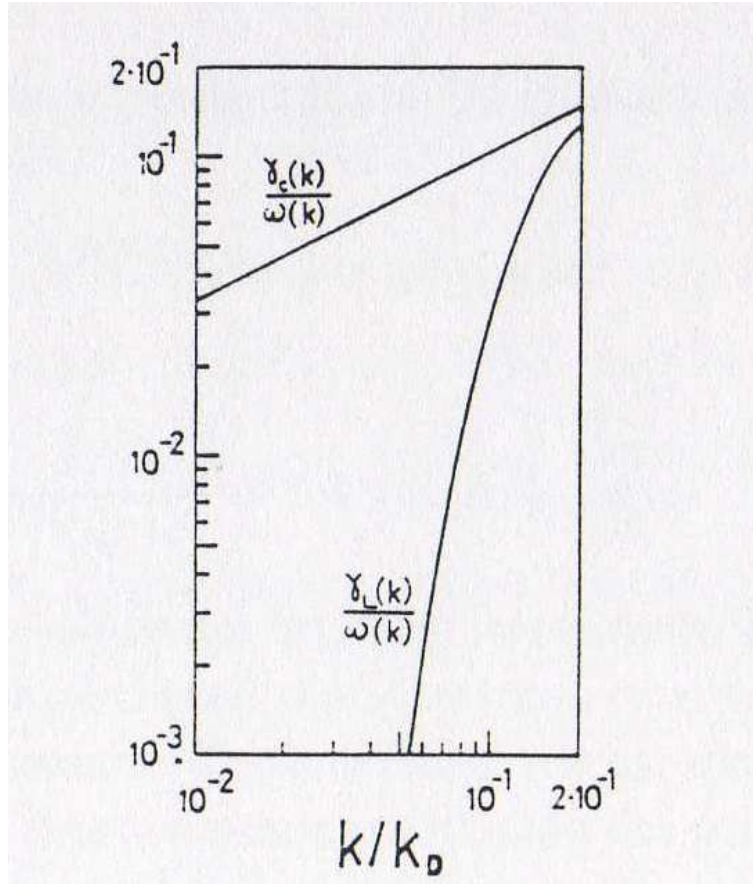


FIGURA 3.2: Mette a confronto lo smorzamento di Landau γ_L con quello collisionale γ_c in un OCP bidimensionale [98].

Inoltre la (3.106) mostra che per il 2DEG ideale degenerare la discontinuità della distribuzione degli impulsi attraverso la superficie di Fermi si riflette sullo schermo statico con una divergenza nella derivata di χ_{2D}^o in $|\mathbf{q}| = 2k_F$ a forma di delta (vedi figura 3.3) ¹⁴. Questa singolarità di χ_{2D}^o si trasmette nella funzione dielettrica longitudinale del 2DEG degenerare $[\varepsilon_{2D}^o(q)]^{-1} = 1 + e^2 v_{2D}(q) \chi_{2D}^o(q)$ e quindi nel potenziale schermato $\Phi^H(q) = \Phi^{est}(q)/\varepsilon_{2D}^o(q)$. La non analiticità di $\Phi^H(q)$ determina il comportamento del potenziale $\Phi^H(r)$ a grandi distanze (vedi teorema 19 in [100]) che risulta essere oscillante (dovuto al fatto che la singolarità è spostata di $2K_F$ rispetto all'origine $q = 0$) con lunghezza d'onda $2\pi/2k_F$ (oscillazioni di Friedel).

Ritornando al LEG in approssimazione di Hartree-Fock, vediamo dalla (3.81) e dalla (3.31) come in questa approssimazione la giusta funzione di risposta lineare di

¹⁴Osserviamo come (vedi figura 3.3) al diminuire della dimensionalità spaziale d del gas di Fermi ideale la funzione di risposta di Lindhard $\chi_d^o(q)$ abbia in $q = 2k_F$ singolarità sempre meno forti: $\partial\chi_3^o(q)/\partial q$ ha una divergenza logaritmica, abbiamo visto che $\partial\chi_2^o(q)/\partial q$ ha una divergenza a delta e $\chi_1^o(q) = -(2m/\pi q) \ln |(q + 2k_F)/(q - 2k_F)|$ ha divergenza logaritmica.

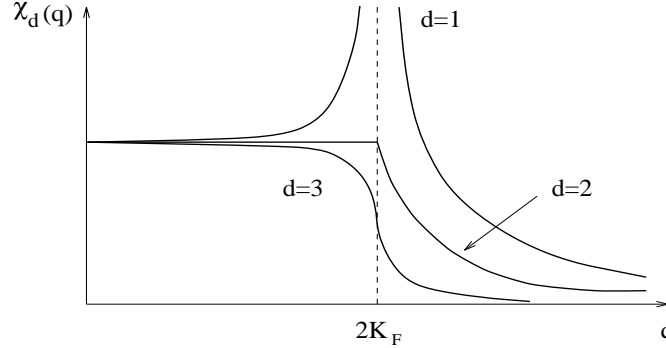


FIGURA 3.3: Singolarità nella funzione di risposta lineare di densità di un gas di Fermi ideale in d dimensioni a due volte l' impulso di Fermi

densità sia:

$$\chi^{HFA}(Q; \omega) = \chi_{2D}^o(q; \omega) \quad , \quad (3.108)$$

da cui:

$$\frac{1}{\varepsilon^{HFA}(Q; \omega)} = 1 + v(Q)\chi_{2D}^o(q; \omega) \quad . \quad (3.109)$$

Questa approssimazione è valida nel limite di basse densità superficiali per il sistema classico e di alte densità superficiali per il sistema quantistico. In tale approssimazione trascurando l' interazione Coulombiana tra gli elettroni, abbiamo particelle completamente scorrelate classicamente e correlate dal principio di Pauli nel sistema quantistico. In ogni caso in un LEG privo di tunnelling tra piani le correlazioni interpiano non possono giocare alcun ruolo in tale approssimazione, ed il sistema si riduce ad una serie infinita di 2DEG isolati.

3.4 Risposta dielettrica in RPA

Andando oltre l' HFA, assumiamo, adesso, che ciascun elettrone reagisca al campo di Hartree, nel suo piano, con la risposta di un gas di elettroni non interagenti in 2D, cioè:

$$\delta\rho_m(\mathbf{q}; \omega) = \chi_{2D}^o\Phi_m^H(\mathbf{q}; \omega) \quad , \quad (3.110)$$

dove, come abbiamo visto nella sezione 3.2, Φ^H contiene il potenziale dovuto alle cariche indotte su tutti i piani e ci permette di tenere conto degli effetti a lungo raggio dell' interazione Coulombiana ¹⁵:

$$\Phi_m^H(\mathbf{q}; \omega) = \Phi_m^{est}(\mathbf{q}; \omega) + \sum_{m'} v_{m-m'}(q)\delta\rho_{m'}(\mathbf{q}; \omega) \quad . \quad (3.111)$$

¹⁵Lo stesso risultato è ottenuto con la formulazione di Ehrenreich e Cohen di campo autoconsistente (SCF "self-consistent-field") da Das Sarma e Quinn [101] nello studio di super-reticoli artificiali a semiconduttori , e da Visscher e Falicov [5] nel caso statico ($\omega = 0$).

In questo caso approssimiamo con χ_{2D}^o la funzione di risposta schermata $\tilde{\chi}(Q; \omega)$ introdotta nella sezione 3.2 che, nel linguaggio della teoria delle perturbazioni a molti corpi viene chiamata polarizzazione 'propria' del sistema e che è data formalmente dalla somma di tutti i diagrammi di polarizzazione propria che non possono essere spezzati in diagrammi separati tagliando una singola linea di interazione Coulombiana. Questo, ricordandoci delle (3.48) e (3.47), porta all'espressione in RPA della funzione di risposta, ancora buona solo nel caso di piccoli valori della costante di accoppiamento del plasma di elettroni nel LEG:

$$\chi^{RPA}(Q; \omega) = \frac{\chi_{2D}^o(q; \omega)}{1 - v(Q)\chi_{2D}^o(q; \omega)} \quad (3.112)$$

da cui ricaviamo la funzione dielettrica di Lindhard, nel sistema degenere, o a quella di Vlasov, nel sistema classico:

$$\varepsilon^{RPA}(Q; \omega) = 1 - v(Q)\chi_{2D}^o(q; \omega) \quad (3.113)$$

In particolare per la funzione dielettrica statica dalle (3.107) e (3.67) ricaviamo:

$$\varepsilon^{RPA}(q; 0) \xrightarrow{q \rightarrow 0} 1 + v(Q) \frac{q_{D,TF}}{2\pi e^2} = \varepsilon^{DHA, TFA}(q) \quad (3.114)$$

che dimostra come la statica del sistema studiato in RPA abbia come condizione al contorno a grandi lunghezze d'onda la TFA o la DHA a seconda che il sistema sia degenere o classico (vedi(3.67)). Per quanto visto nella sezione 3.2 questo è sufficiente per dimostrare che anche l' RPA viola la regola di somma sulla compressibilità.

Sempre dalla sottosezione 3.2 ricaviamo che l' RPA include la proprietà di schermo perfetto in maniera esatta, ma la lunghezza di schermo che entra nella funzione dielettrica RPA è quella appropriata al gas perfetto di fermioni (come nella teoria di TF o di DH nel caso classico): le interazioni elettrone-elettrone sono incluse solo per quanto riguarda l' interazione Coulombiana classica con le cariche di polarizzazione. L' RPA trascura il fatto che nell' interno di ogni piano il campo totale dovrebbe essere ridotto per effetto delle correlazioni Coulombiane nel sistema classico, e di quelle Coulombiane e di scambio nel sistema degenere (come è ben noto per un metallo alcalino 3D [102]).

3.4.1 Eccitazioni collettive in RPA

Le proprietà di anisotropia che, come abbiamo visto nel capitolo 2, caratterizzano sia i CIGs che i super-reticoli artificiali, suggeriscono naturalmente un trasporto di carica di tipo bidimensionale poichè il trasporto lungo la direzione di crescita del super-reticolo è trascurabile rispetto a quello sui piani (supponendo per i super-reticoli una profondità sufficiente delle buche di potenziale localizzanti).

È stato però trovato sperimentalmente (vedi ad esempio [103] per i GICs) che il plasmone in questi materiali ha caratteristiche simili al plasmone in 3D; in particolare, l'energia del plasmone risulta finita a piccoli momenti trasferiti.

Queste osservazioni sono in pieno accordo con gli studi in RPA che si trovano in letteratura (vedi ad esempio [9, 104, 101, 105, 86]) sul plasmone nel modello del LEG con o senza tunneling di elettroni tra diversi piani; anche questi mostrano come, a bassi q , la frequenza del plasmone assuma il solito valore della frequenza di plasma di un gas tridimensionale di elettroni per $q_z = 0$, e come abbia una dispersione lineare in funzione di q per $q_z \neq 0$ ¹⁶.

Questo mette chiaramente in luce il ruolo di primo piano giocato, per questi materiali, dalle correlazioni tra elettroni in strati diversi (interstrato) anche quando assumiamo nullo il tunneling di carica tra i piani.

Riassumiamo adesso, brevemente i risultati dell'analisi del plasmone del LEG in RPA, che troviamo in letteratura, indicando i punti che saranno approfonditi nella seconda parte del lavoro di tesi. Nello schema dell'RPA, combinando le equazioni (3.110) e (3.33) otteniamo:

$$\chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) \phi_m^{est}(\mathbf{q}; \omega) = \delta\rho_m(\mathbf{q}; \omega) - \chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) \sum_{m'} v_{m-m'}(q) \delta\rho_{m'}(\mathbf{q}; \omega) \quad . \quad (3.115)$$

I modi collettivi del sistema sono dati dalle soluzioni di (3.115), per campo esterno nullo, nelle fluttuazioni di densità indotta sui vari piani; la (3.115) per $\Phi_m^{est} = 0$ ha soluzioni non banali se vale:

$$\det[\delta_{m,m'} - \chi_{2D}^o v_{m-m'}] \equiv \det[\varepsilon_{m,m'}] = 0 \quad , \quad (3.116)$$

dove abbiamo definito la matrice dielettrica $\varepsilon_{m,m'}$ del super-reticolo.

Per un sistema con un numero finito di piani N_p (quindi non un superreticolo) l'equazione (3.116) ha N_p modi normali che rappresentano le eccitazioni collettive del sistema. Utilizzando la nota forma della funzione di risposta di Lindhard o di Vlasov per un 2LEG a grandi lunghezze d'onda:

$$\chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) \sim \frac{n_2}{m} \left(\frac{q}{\omega} \right)^2 \quad , \quad \text{per} \quad \omega \gg \begin{cases} qv_F & \text{caso degenere} \\ q\sqrt{K_B T/m} & \text{caso classico} \end{cases} \quad (3.117)$$

troviamo [101] per un sistema di N_p piani in regime di forte accoppiamento $qd \ll 1$ i seguenti comportamenti:

- (i) Il modo più alto in energia (detto plasmone ottico OP) di equazione (3.116) si comporta per $q \rightarrow 0$ come *costante* + $O(q^{1/2})$ col coefficiente di $q^{1/2}$ proporzionale a $\sqrt{N_p n_2}$. Questo modo ha un andamento, quindi, equivalente al plasmone regolare di un singolo strato 2DEG ma con un peso spettrale aumentato del fattore $\sqrt{N_p}$ ed è indipendente dalla distanza tra i piani, d , nei suoi ordini dominanti a $q \rightarrow 0$.

¹⁶Quest'ultimo andamento è stato dimostrato sperimentalmente tramite scattering inelastico di luce su una eterostruttura di tipo GaAs-GaAlAs [106].

- (ii) Gli altri $N_p - 1$ modi sono di natura "acustica" (AP) essendo $O(q)$ nel limite $q \rightarrow 0$. Nel sistema quantistico è necessario osservare che questi modi saranno in generale soggetti allo smorzamento di Landau [107] oltre che ad ogni smorzamento di origine collisionale associato con fononi e impurità che può però essere ridotto lavorando a temperature sufficientemente basse o usando campioni sufficientemente puri; si può mostrare che esiste una separazione spaziale critica tra i piani d_c tale che per $d > d_c$ l' AP esce dal continuo particella-buca (vedi figura 3.4) e, non potendo più decadere in una eccitazione di singola coppia, almeno per q minori di un certo vettore d' onda critico, diventa stabile ed osservabile sperimentalmente ¹⁷ (per soli 2 strati $d_c = 7/2(q_{TF})^{-1}$ [107]; il AP per $d > d_c$ è chiamato plasmone acustico anomalo (AAP)).

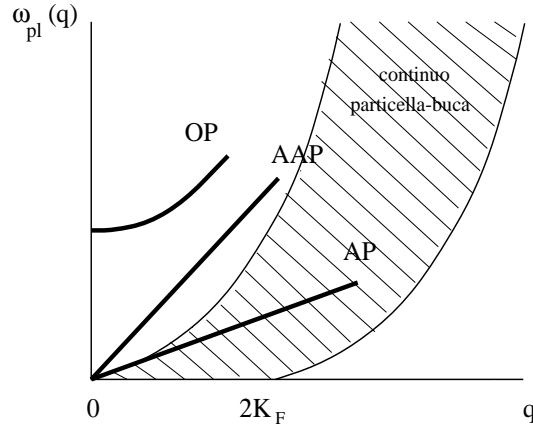


FIGURA 3.4: Mostra schematicamente la dipendenza dai vettori d' onda dei diversi modi collettivi rispetto al continuo particella-buca. Osserviamo come per un dato d solo uno dei due plasmoni acustici possa esistere.

Per un super-reticolo completamente periodico lungo \hat{z} di periodo d , possiamo usare come ansatz per la soluzione di (3.115):

$$\delta\rho_m(\mathbf{q}; \omega) = \delta\rho^o(\mathbf{q}; \omega)e^{iq_zmd}, \quad q_z \in 1^oBz \equiv \left[-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}\right], \quad (3.118)$$

¹⁷Anche se i modi di tipo AP sono stati osservati nei plasmi ionici da più di 28 anni, nei plasmi di stato solido si hanno a causa dello smorzamento di Landau a cui risultano soggetti, molte più difficoltà. I risultati presentati nella referenza [107] indicano come il sistema ideale di stato solido a cui guardare per gli AP sia proprio la eterogiunzione a semiconduttori. Questa mostra come vantaggi la possibilità di controllare la separazione spaziale tra i diversi sistemi di cariche bidimensionali (ed avere così $d > d_c$) e la possibilità di sostenere i AP anche quando i diversi sistemi di cariche bidimensionali sono identici (stessa massa e velocità di Fermi) a differenza di ciò che avviene in un plasma 3D non separato, di volume, in cui è necessaria la presenza di almeno 2 componenti di carica di massa e velocità di Fermi molto diverse. In un plasma 3D di volume, a 2-componenti, nel OP i due portatori oscillano fuori fase (in fase) mentre nei AP oscillano in fase (fuori fase) assumendo che i 2 portatori abbiano carica opposta (uguale).

da cui ricaviamo la seguente equazione per lo spettro delle eccitazioni collettive $\omega_{pl}(\mathbf{q}, q_z)$ che ha la stessa forma che si ottiene nel caso del gas di elettroni omogeneo in 3D:

$$1 = e^2 v_{2D}(q) \chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) \left[\frac{\sinh(qd)}{\cosh(qd) - \cos(q_z d)} \right] \equiv v(Q) \chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega) \quad , \quad (3.119)$$

che definisce un set infinito di modi collettivi etichettati dalla variabile continua $q_z \in 1^\circ Bz$, nei quali il moto delle cariche in piani adiacenti differisce di un fattore di fase:

$$\frac{\delta \rho_{m+1}}{\delta \rho_m} = e^{iq_z d} \quad . \quad (3.120)$$

Possiamo adesso considerare i due limiti di forte ($qd \ll 1$) e debole ($qd \gg 1$) accoppiamento nell' equazione (3.119). Abbiamo riassunto nella tabella 3.1 il comportamento degli ordini dominanti della frequenza di eccitazione collettiva $\omega_{pl}(q, q_z)$, nei due diversi regimi di accoppiamento e nel limite di grandi lunghezze d' onda $q \rightarrow 0$:

	$q_z = 0$ OP	$q_z \neq 0$ AP
$qd \ll 1$	$\left(\frac{4\pi n_2 e^2}{md}\right)^{1/2} + O(q^2)$ (★)	$\left(\frac{2\pi n_2 e^2}{m}\right)^{1/2} (1 - \cos(q_z d))^{-1/2} \sqrt{dq}$ (★★)
$qd \gg 1$	$\left(\frac{2\pi n_2 e^2}{m}\right)^{1/2} \sqrt{q}$ (★★★)	

TABELLA 3.1: Mostra i termini dominanti, nel limite $q \rightarrow 0$, della frequenza delle eccitazioni collettive del LEG, trattato in RPA, nei due regimi di forte e debole accoppiamento tra i piani. Nel regime di debole accoppiamento, il limite di piccoli q , deve essere preso mandando prima $d \rightarrow \infty$ e successivamente $q \rightarrow 0$.

Commentiamo adesso i risultati mostrati in tabella 3.1:

- Nell' espressione (★) il termine dominante ha la stessa forma del plasmone tridimensionale ω_p con $n_3 = n_2/d$ densità tridimensionale effettiva del superreticolo; il termine $O(q^2)$ ha come coefficiente $(3/16)v_F^2/\omega_p$ (come si può verificare portando l' espansione (3.117) fino ad ordini $O(q^4/\omega^4)$ [107]) invece di $(3/10)v_F^2/\omega_p$ come è per il plasmone tridimensionale.
- Per $dq_z = \pi$ l' espressione (★★) rappresenta l' ordine dominante di un plasmone stabile per $d > d_c$ con $d_c \sim 8/7a_B$ [105].
- Dobbiamo infine osservare come per il sistema quantistico con possibilità di tunneling tra piani, le espressioni (★) e (★★) debbono essere sostituite da [86]:

$$\omega_{pl}^2 = \frac{4\pi n_2 e^2}{m} \left[\frac{q}{\sqrt{q^2 + q_z^2}} + 4 \left(\frac{v_T}{v_F}\right) \frac{q_z}{\sqrt{q^2 + q_z^2}} \right] \quad , \quad (3.121)$$

dove abbiamo introdotto la velocità di tunneling $v_t = T_c/\hbar$ (T è definito in sezione 3.1). Si vede come al contrario di ciò che troviamo in (\star) e $(\star\star)$, adesso, la ω_{pl} è finita per ogni angolo formato da $Q \equiv (q, q_z)$ con l'asse \hat{z} : quando includiamo il tunneling il moto degli elettroni acquista carattere tridimensionale.

Dalla tabella si vede come l'interazione elettrostatica tra i piani riesca ad eliminare la degenerazione in q_z dei modi di eccitazione collettiva nel caso di $d \rightarrow \infty$ in cui ogni strato supporta, indipendentemente dagli altri, il suo plasmone bidimensionale; e come sia responsabile, quando $qd \ll 1$, della distribuzione di tali modi a formare una banda (vedi figura 3.5) con ciascun modo indicizzato da q_z .

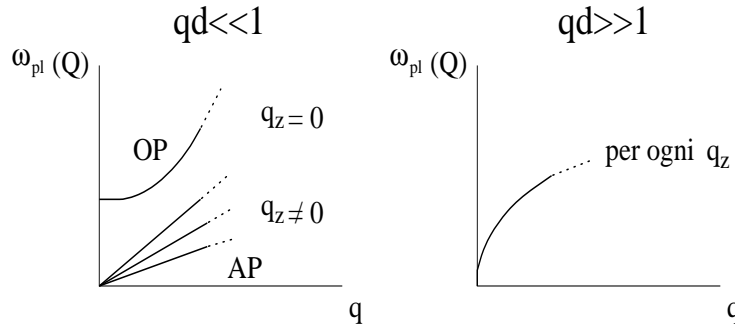


FIGURA 3.5: Mostra qualitativamente gli andamenti asintotici a grandi lunghezze d'onda ($q \rightarrow 0$) delle eccitazioni di plasma $\omega_{pl}(Q)$ del LEG, nei due regimi di forte ($qd \ll 1$) e debole ($qd \gg 1$) accoppiamento tra i piani. I modi di oscillazione caratteristici del regime di debole accoppiamento del LEG sono degeneri (hanno una frequenza indipendente da q_z). L'interazione elettrostatica tra i piani rompe tale degenerazione formando una banda in cui ciascun modo è indicizzato da q_z . Il modo *in fase* ($q_z = 0$) giace in cima alla banda ed è l'unico ad avere un gap finito per $q = 0$ (modo ottico OP). Il modo *fuori fase* ($q_z = \pm\pi/d$) giace in fondo alla banda (modo acustico AP).

Anche se $\omega_{pl}(\mathbf{q}, 0)$ è qualitativamente come una oscillazione di plasma di volume il comportamento per generici (\mathbf{q}, q_z) è piuttosto diverso. Questo si può verificare confrontando il plasmone in RPA del LEG degenerare (per concretezza, ma lo stesso vale nel limite classico):

$$\omega_{pl}(q, q_z) = \left(\frac{4\pi n_2 e^2}{md} \frac{qd \sinh(qd)}{2[\cosh(qd) - \cos(q_z d)]} + \frac{3}{4} v_F^2 q^2 \right)^{1/2}, \quad (3.122)$$

con l'analogo plasmone di volume in RPA (n_3 è la densità di elettroni nel sistema in 3D omogeneo):

$$\omega_{3D}(q, q_z) = \left(\frac{4\pi n_3 e^2}{m} + \frac{3}{5} v_F^2 [q^2 + q_z^2] \right)^{1/2}. \quad (3.123)$$

Se in (3.123) interpretiamo q_z come un indice per i diversi modi di oscillazione sul piano (x, y) vediamo che il modo $q_z = 0$ ha rispetto a quello da (3.122) ancora un

salto di frequenza $\sqrt{4\pi n_3 e^2/m}$ intorno a $q = 0$, ma gli altri modi $q_z \neq 0$ giacciono tutti più alti in frequenza ed hanno una ω_{3D} monotona crescente in q_z . La base fisica di tale differenza risiede nella mancanza di vincoli sulla dinamica degli elettroni nel caso omogeneo in 3D: nel LEG gli elettroni hanno il moto vincolato su i piani, nel sistema omogeneo in 3D hanno una dinamica isotropa. Questa distinzione avrà delle manifestazioni anche nel limite statico studiato nel prossimo capitolo.

Nel prossimo capitolo ritroveremo, nel caso del LEG classico, i comportamenti asintotici appena discussi partendo dalle equazioni dinamiche gerarchiche di equilibrio BBGKY. Mostreremo come si possono ricavare utili informazioni sulla relazione di dispersione delle eccitazioni di plasma a piccoli impulsi scambiati, dal calcolo del terzo momento spettrale della funzione di risposta densità-densità, seguendo il lavoro di Miesenböck e Tosi [89]. In particolare metteremo in evidenza che, se nel caso $q_z = 0$, si ottengono risultati equivalenti a quelli del caso tridimensionale, fatta eccezione per cambiamenti dovuti alla diminuzione della dimensione della dinamica degli elettroni; nel caso $k_z \neq 0$, invece, il plasmone dell' RPA non è sufficiente a soddisfare la regola di somma del terzo momento neanche agli ordini dominanti per grandi lunghezze d' onda, quando possiamo assumere valida, come vedremo, l' approssimazione di singolo-modo (SMA).¹⁸ Faremo vedere come questo si verifichi quando sono non nulli accoppiamenti multipolari tra elettroni di diversi piani. Interpretaremo questo risultato come una possibile spia dell' esistenza di eccitazioni collettive con peso spettrale maggiore rispetto a quelle discusse in RPA e associate con le correlazioni interpiano.

3.5 Scambio e correlazione nella risposta dielettrica del LEG

Possiamo andare oltre l' RPA aggiungendo al campo di Hartree delle correzioni di campo locale statico a 1-corpo, Φ^{xc} , che tengono conto, nell' ambito di una teoria di risposta lineare, delle correlazioni Coulombiane a lungo raggio. Queste possono essere descritte, in maniera formalmente esatta, in termini del formalismo del funzionale-densità di Hohenberg, Kohn e Sham (HKS) [102, 108, 109], come le derivate funzionali rispetto alla densità di quella parte dell' energia libera (o dell' energia dello stato fondamentale nel caso degenere) dovuta alle correlazioni Coulombiane (e di scambio nel caso quantistico) del sistema interagente. Diamo adesso una definizione precisa del potenziale di scambio e correlazione Φ^{xc} nel caso di un OCP

¹⁸Ricordiamo che per un sistema 3D in generale la SMA equivale a prendere un fattore di struttura dinamico della forma:

$$S(Q; \omega) = \pi S(Q) [\delta(\omega - \omega(Q)) + \delta(\omega + \omega(Q))] . \quad (3.124)$$

Nel limite di grandi lunghezze d' onda questa espressione diventa esatta in quanto risulta una riscrittura della conservazione dell' impulso totale nelle collisioni elettrone-elettrone ([102]).

in 3D [96] (per il Jellium in 3D vedi [102]) riservando l' applicazione al LEG alla successiva sottosezione.

L' analogo classico del teorema di Hohenberg e Kohn [108] afferma che 'l' energia libera di un OCP in un potenziale esterno $\Phi^{est}(R)$ (statico) di forza arbitraria è un funzionale del suo profilo di densità $\rho(R)$ '. Scriviamo esplicitamente:

$$F[\rho(R)] = F_o[\rho(R)] + \int dR \Phi^{est}(R) \rho(R) + \frac{e^2}{2} \iint dR dR' \frac{\rho(R) \rho(R')}{|R - R'|} + F_{xc}[\rho(R)] \quad (3.125)$$

dove $F_o[\rho(R)]$ è l'energia libera di un gas di elettroni non interagenti di densità $\rho(R)$ e $F_{xc}[\rho(R)]$ si definisce energia libera di scambio e correlazione.

Il profilo di equilibrio tale che $\int dR \rho(R) = \text{costante}$ soddisfa la condizione $\delta F[\rho(R)]/\delta \rho(R) = \mu$. Dal confronto con l' analogia condizione d' equilibrio per il gas di elettroni non interagente che è $\delta F_o[\rho(R)]/\delta \rho(R) + \Phi^{est}(R) = \mu$ vediamo che esiste una 'mappa' esatta [109] tra il problema a molti corpi interagenti ed il problema di elettroni non interagenti ma soggetti ad un potenziale:

$$\begin{aligned} \Phi(R) &= \Phi^{est}(R) + e^2 \int dR' \frac{\rho(R')}{|R - R'|} + \frac{\delta F_{xc}[\rho(R)]}{\delta \rho(R)} \\ &\equiv \Phi^H(R) + \frac{\delta F_{xc}[\rho(R)]}{\delta \rho(R)} \end{aligned} \quad (3.126)$$

Quando Φ^{est} è sufficientemente debole da poter usare la teoria della risposta lineare di densità possiamo usare:

$$\frac{\delta F_{xc}[\rho(R)]}{\delta \rho(R)} = \int dR' U(R - R') \delta \rho(R'), \quad \text{con} \quad U(R - R') = \left. \frac{\delta^2 F_{xc}[\rho(R)]}{\delta \rho(R) \delta \rho(R')} \right|_{\rho(R)=\rho} \quad (3.127)$$

e in trasformata di Fourier possiamo scrivere, indicando con $v_{3D}(Q) = 4\pi/|Q|^2$ la trasformata di Fourier tridimensionale del potenziale $1/|R|$ e con χ_{3D}^o la funzione di risposta di Vlasov per un gas di elettroni non interagenti:

$$\delta \rho(Q) = \chi_{3D}^o[\Phi^{est}(Q) + e^2 v_{3D}(Q) \delta \rho(Q) + U(Q) \delta \rho(Q)] \quad (3.128)$$

$$\delta \rho(Q) \equiv \chi_{3D}^o[\Phi^H(Q) + U(Q) \delta \rho(Q)] \quad (3.129)$$

equazione che ci permette di dare la definizione esatta per il fattore di campo locale statico:

$$G(Q; 0) = -\frac{U(Q)}{e^2 v_{3D}(Q)} \quad (3.130)$$

3.5.1 Correzione di campo locale

Possiamo scrivere il potenziale di scambio e correlazione nel punto (\mathbf{r}, md) del LEG introducendo il fattore di campo locale statico $G_m(\mathbf{q})$, nel modo seguente [7]:

$$\begin{aligned}\Phi_m^{xc}(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}' \sum_{m'} U_{m-m'} \delta\rho_{m'}(\mathbf{r}') \\ &\equiv - \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r}'' \sum_{m', m''} v_{m-m'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') G_{m'-m''}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') \delta\rho_{m''}(\mathbf{r}'') \quad (3.131)\end{aligned}$$

Aggiungendo il contributo di Φ^{xc} a Φ^H in (3.33) presa nel caso statico $\omega = 0$ abbiamo:

$$\delta\rho_m(\mathbf{q}; \omega = 0) = \chi_{2D}^o(q; \omega = 0) [\Phi_m^H(\mathbf{q}; \omega = 0) + \Phi_m^{xc}(\mathbf{q})] \quad , \quad (3.132)$$

allora la risposta statica $\chi(Q) \equiv \chi(Q; 0)$ e la polarizzazione propria diventano:

$$\chi(Q) = \frac{\chi_{2D}^o(q; 0)}{1 - v(Q)[1 - G(Q)]\chi_{2D}^o(q; 0)}, \quad \tilde{\chi}(Q) = \frac{\chi_{2D}^o(q; 0)}{1 + v(Q)G(Q)\chi_{2D}^o(q; 0)} \quad (3.133)$$

Nel caso del liquido di elettroni 3D degeneri, molti modelli usano questa forma per la funzione di risposta, a partire dai primi lavori di Hubbard [110, 111] e di Singwi, Tosi Land Sjolander (STLS) [83, 84]. Jonson ha studiato lo schema STLS in 2D [87]. Anche per i liquidi di cariche classiche ci sono molti modelli che portano a una funzione di risposta del tipo (3.133) [96, 112].

Tosi e Miesenböck applicano al LEG il modello STLS che dà per il sistema classico e quantistico la stessa forma per $G_m(\mathbf{q})$. Come vedremo dettagliatamente nel prossimo capitolo, un LEG classico si può studiare partendo dalle equazioni gerarchiche dinamiche di Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY), sulle funzioni di distribuzione dello spazio delle fasi ridotte.¹⁹ Tronchiamo le BBGKY, assumendo che le funzioni di distribuzione a due corpi $\rho_{m,m'}^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}'; t)$ (dove le velocità sono vettori perpendicolari a \hat{z}), si possono esprimere in termini di quelle ad un corpo $\rho_m^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t)$ come:

$$\rho_{m,m'}^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; \mathbf{r}', \mathbf{v}'; t) = \rho_m^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}; t) \rho_{m'}^{(1)}(\mathbf{r}', \mathbf{v}'; t) g_{|m-m'|}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad , \quad (3.134)$$

dove come g si usa la funzione di distribuzione radiale statica di equilibrio.²⁰ Risolvendo un problema di risposta lineare di densità nella prima equazione della gerarchia BBGKY, si ricava l'espressione :

$$v(Q)G^{STLS}(Q) = -\frac{1}{NN_p} \sum_{Q'} \frac{\mathbf{q}\mathbf{q}'}{q^2} v(Q') [S(Q - Q') - 1] \quad , \quad (3.135)$$

¹⁹È noto che tale sistema di equazione gerarchiche ha come generalizzazione quantistica, le così dette equazioni del moto, se sostituiamo le funzioni di distribuzione classiche con le funzioni di Wigner [102, 15], queste costituiscono un set infinito di equazioni con esattamente la stessa forma delle BBGKY.

²⁰prendendo $g = 1$, troveremmo l'equazione di Landau-Vlasov

che lega il fattore di struttura statico alla correzione di campo locale. Combinando tale relazione con l'equazione (3.133) e con l'equazione del bilancio dettagliato (3.38) troviamo una equazione integrale autoconsistente per determinare $S(Q)$ o $G(Q)$.

$S_m(q)$ è legata alla funzione di distribuzione radiale $g_m(r)$, che descrive le correlazioni a corto-raggio di coppie di elettroni su piani distanti md , dalla seguente relazione:

$$g_m(r) - 1 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} [S_m(q) - \delta_{m,0}] . \quad (3.136)$$

Considerando trascurabili le correlazioni interpiano, cioè $g_m(r) \sim 1 \quad \forall m \neq 0$ ($\Rightarrow S_m(r) \sim 0$), Miesenböck e Tosi trovano come forma finale della funzione di risposta di densità la seguente espressione:

$$\chi(Q) = \frac{\chi_{2D}^o(q; 0)}{1 - [v(Q) - v_{2D}(q)G(q)]\chi_{2D}^o(q; 0)} , \quad (3.137)$$

col seguente fattore di campo locale :

$$G^{STLS}(q) = -\frac{1}{n_2} \int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^2} \frac{\mathbf{q}\mathbf{q}'}{|\mathbf{q}||\mathbf{q}'|} [S_o(|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|) - \tanh(qd/2)] . \quad (3.138)$$

Questa espressione tiene conto delle correlazioni Coulombiane a corto raggio e delle correlazioni di scambio solo per particelle di uno stesso piano, attraverso il fattore di struttura $S_{m=0}(q)$.

Nell'applicazione del modello ai GIC possiamo trascurare, in buona approssimazione, le correlazioni interstrato grazie ai valori dei parametri di interesse: per ricavare buoni risultati per la descrizione dello schermo a corto raggio nella grafite, è necessario aggiungere alle densità di carica planari del LEG altri elettroni (ad esempio Visscher e Falicov considerano tutti gli elettroni π [5] in modo da avere una densità di un elettrone per atomo) oltre ai portatori liberi; questo fa in modo che, nella maggior parte dei casi di interesse pratico, si verifichi la situazione $d \geq r_o$ per cui i piani $m \neq 0$ influenzano poco il piano $m = 0$ (in Visscher e Falicov troviamo ad esempio $d \sim 6.37$ ed $r_s \sim 1.729$).

In questa approssimazione è allora legittimo sostituire in (3.138) $\tanh(qd)$ con 1 ottenendo così una equazione che ha la stessa forma di quella ottenuta da Jonson [87] per un Jellium bidimensionale. È ben noto, dal lavoro svolto sul Jellium sia in 2D che in 3D, che l'approssimazione STLS, pur fornendo eccellenti valori per l'energia dello stato fondamentale, viola la regola di somma sulla compressibilità. Questo difetto è rilevante nella determinazione del potenziale effettivo e può essere corretto, in gran parte, usando lo schema SSSL [84] sostituendo nella (3.138) il potenziale nudo $v(Q)$ con quello schermato.

3.5.2 Potenziale interionico schermato

Possiamo a questo punto, determinare lo schermo statico di una singola carica, Ze , puntiforme, esterna al LEG e posta in $r = 0$ e $z = z'$ con $z' \in [0, d]$. Questa corrisponde ad un potenziale esterno:

$$\Phi_{est}(Q)|_{z'} = Zv_{2D}(q) \frac{\sinh(q(d-z')) + e^{-iqz'} \sinh(qz')}{\cosh(qd) - \cos(qz'd)} . \quad (3.139)$$

Seguendo Miesenböck e Tosi ricaviamo dalla (3.29), dalla (3.133) e dall'equazione precedente:

$$\delta\rho_m(q) = -\frac{Z\Theta(q)}{F_q - \sqrt{1 - 1/F_q^2}} \{ \sinh(q(d-z')) A_q^{|m|} \quad (3.140)$$

$$+ \sinh(qz') A_q^{|m-1|} \} , \quad (3.141)$$

$$A_q \equiv F_q [1 - \sqrt{1 - 1/F_q^2}] , \quad (3.142)$$

$$F_q \equiv \cosh(qd) + \Theta(q) \sinh(qd) , \quad (3.143)$$

$$\Theta(q) \equiv \frac{Q_o(q)}{1 - G(q)Q_o(q)} , \quad (3.144)$$

$$Q_o(q) \equiv -e^2 v_{2D} \chi_{2D}^o(q; 0) . \quad (3.145)$$

Per ricavare il potenziale indotto è sufficiente usare l'equazione di Poisson (vedi appendice B di [7]):

$$\Phi^{ind}(q, z) = \sum_{m'} v_{2D}(q) e^{-q|z-m'd|} \delta\rho_{m'}(q) . \quad (3.146)$$

In RPA, quandocio $G(q) = 0$ (cioè $\Theta(q) \rightarrow Q_o(q)$), la (3.140) è analoga al risultato di Visscher e Falicov per $z' = 0$ e dà il risultato di Plischke per $z' = d/2$. Un sistema identico a quello utilizzato da Miesenböck e Tosi è stato studiato da A.L.Fetter [16], utilizzando equazioni elettro-idrodinamiche. Il risultato di Fetter per la $\delta\rho_m$ nel caso in cui $z' = 0$ è identico alla (3.140) se sostituiamo a $\Theta(q) \equiv Q_o(q)$ col suo valore a grandi lunghezze d'onda q_s/q , dove nel caso classico $q_s = q_D$ ²¹ ed in quello quantistico $q_s = q_{TF}$.

Miesenböck e Tosi trovano per la lunghezza di schermo:

$$q_s^{-1} = q_{TF}^{-1} - \lim_{q \rightarrow 0} \frac{G(q)}{q} , \quad (3.147)$$

In figura 3.6 sono mostrati gli andamenti che si ottengono per $1/q_s$ quando si utilizza per il calcolo del fattore di campo locale $G(q)$ lo schema STLS [83] e quello

²¹In realtà Fetter trova $q_s = 2q_D$. Questo è dovuto al fatto che Fetter assume empiricamente come termine di pressione del suo modello idrodinamico quello di un gas di Fermi ideale e non quello di un gas ideale classico (vedi nota 31 a pagina 111).

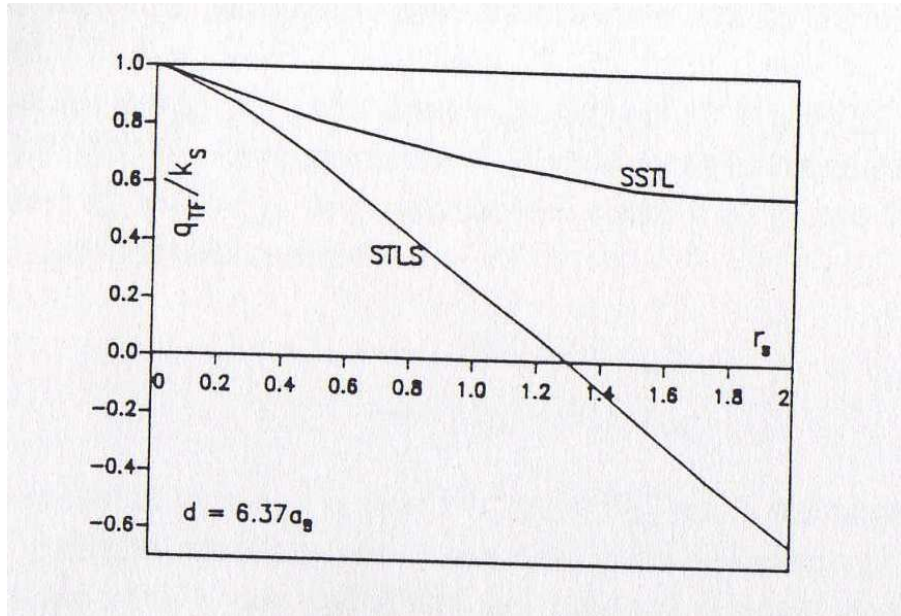


FIGURA 3.6: Inverso della lunghezza di schermo $q_s \equiv k_s$ in funzione di r_s , in STLS ed in SSTL.

SSTL [84]²². A causa dei valori negativi assunti da q_s nella regione dei parametri del modello, d'interesse per lo studio dei GICs ($r_s \geq 1.3$), il potenziale effettivo ricavato in STLS risulta meno repulsivo di quello ricavato in SSTL (vedi figura 3.6). Essi trovano infine che i potenziali effettivi di coppia tra ioni alcalini negli intercalati sono poco sensibili rispetto all'inclusione degli effetti di scambio e correlazione nell'RPA. In particolare il potenziale interionico effettivo rimane repulsivo a tutte le distanze.

3.6 Risposta dielettrica di un sistema a due piani

Recentemente Świerkowski ed al. [8] hanno mostrato come la densità critica per la cristallizzazione di Wigner di un 2DEG quantistico (in assenza di campo magnetico) possa essere aumentata fino ad un fattore 3 rispetto al caso del singolo strato di elettroni per effetto delle correlazioni Coulombiane tra elettroni di diverse buche quantistiche, in opportune strutture di buche quantistiche multiple come ad esempio la struttura a semiconduttori GaAs-AlGaAs descritta nella sezione 2.4. Essi hanno anche verificato come la densità di transizione dipenda sensibilmente dalla spaziatura

²²Miesenböck e Tosi arrivano a tali risultati senza compiere una determinazione del fattore di struttura interpiano, completamente auto consistente. Essi determinano la funzione di distribuzione di coppia $g(r)$ pseudoclassicamente, tenendo conto degli effetti quantistici attraverso l'introduzione di una temperatura effettiva del sistema elettronico e di un'interazione elettrone-elettrone effettiva, che soddisfa i comportamenti asintotici esatti del sistema quantistico. Infine determinano $G(q)$ dallo schema STLS o SSTL.

tra gli strati di elettroni, ma non dal numero di tali strati, dalla forma della funzione di distribuzione degli impulsi $n(\mathbf{p})$ di singola particella del liquido interagente (usata per determinare la funzione di Lindhard) o dallo spessore degli strati.

Quello che accade è che avvicinando a un 2DEG nel suo stato fondamentale un suo doppione a lui parallelo e incapace di scambiare con lui elettroni, provochiamo, a causa delle interazioni Coulombiane interpiano, un aumento dell' energia potenziale media per particella in entrambi i gas, modulabile con la distanza tra essi. Labelliamo con 0 ed 1 i due piani di elettroni. L' energia cinetica media per particella del piano 0 isolato è $\varepsilon_{cin}^0 \propto 1/r_{s,0}^2$ dove $r_{s,0} = (me^2/\hbar^2)/\sqrt{\pi n_{2,0}}$ ed $n_{2,0}$ è la densità elettronica sul 2DEG 0. Analogamente l' energia potenziale media per particella del piano 0 isolato è $\varepsilon_p^0 \propto 1/r_{s,0}$. Avvicinando il piano 1 al piano 0 provochiamo delle variazioni nelle precedenti energie:

$$\varepsilon_p^0 \longrightarrow \varepsilon_p^0 + \beta(d; r_{s,1}) \quad , \quad (3.148)$$

$$\varepsilon_{cin}^0 \longrightarrow \varepsilon_{cin}^0 + \alpha(d; r_{s,1}) \quad , \quad (3.149)$$

dove abbiamo indicato con $r_{s,1} = (me^2/\hbar^2)/\sqrt{\pi n_{2,1}}$ ed α e β sono rispettivamente il contributo all' energia cinetica media per particella del piano 0 isolato e quello all' energia potenziale media per particella del piano 0 isolato, dovuti alle interazioni tra la particella del piano 0 con le particelle del piano 1. Essi sono indipendenti da $r_{s,0}$ per definizione e β è sempre positivo. La dimostrazione di Świerkowski ed al. significa che anche $\beta - \alpha$ è positivo ed è una funzione decrescente di d . Essi dimostrano che per valori sufficientemente piccoli della separazione tra gli strati è possibile alzare notevolmente la densità di transizione rispetto al valore dato da $\Gamma_f \sim 37$ e discusso in sottosezione 2.2.1.

Per quantificare tale argomento essi studiano con la teoria della risposta lineare il sistema del LEG, mostrando che la sua funzione di risposta lineare di densità diverge per vettori d' onda uguali ai vettori del reticolo reciproco del cristallo di Wigner $\mathbf{q} \sim \mathbf{G}$. Non potendo studiare il problema perturbativamente (in HFA, RPA, ecc . . .), Świerkowski ed al. propongono un approccio non perturbativo che tratti in approssimazione di campo medio le interazioni interpiano ed in approssimazione di campo locale le interazioni intrapiano tra gli elettroni. Usando la stessa notazione della sottosezione 3.1 possiamo, seguendo Świerkowski ed al., esprimere la funzione di risposta lineare di densità dell' intero LEG, $\chi_{m,m'}(\mathbf{q}; \omega) \equiv \chi_{m,m'}^{tot}(\mathbf{q}; \omega)$, in termini della funzione di risposta lineare di densità per un piano isolato, $\chi(\mathbf{q}; \omega)$: la densità di elettroni indotta nell' m-esimo piano $\delta\rho_m$ è generata dalla risposta, con la funzione di risposta del piano isolato, del sistema di cariche dell' m-esimo piano al potenziale esterno Φ_m^{est} ed all' interazione con le densità di cariche indotte sugli altri piani, cioè:

$$\delta\rho_m(\mathbf{q}; \omega) = \chi(\mathbf{q}; \omega)[\Phi_m^{est}(\mathbf{q}; \omega) + \sum_{m'(\neq m)} v_{|m-m'|}(\mathbf{q})\delta\rho_{m'}(\mathbf{q}; \omega)] \quad , \quad (3.150)$$

dove $v_{|m-m'|}(\mathbf{q})$ è l' interazione tra elettroni negli strati a $z = md$ ed a $z = m'd$. Świerkowski ed al. assumono trascurabile il tunneling degli elettroni tra gli strati così

che possono prendere come interazione tra elettroni su strati diversi l' interazione Coulombiana nuda per il semiconduttore intrinseco con costante dielettrica ϵ_o :

$$v_{|m-m'|}(\mathbf{q}) = \frac{e^2 v_{2D}(q)}{\epsilon_o} \int dz \int dz' e^{-q|z-z'|} |\zeta(z-md)|^2 |\zeta(z'-m'd)|^2 , \quad (3.151)$$

dove la funzione di involuppo $\zeta(z)$, che descrive il confinamento di un elettrone in uno strato centrato a $z = 0$, è assunta la stessa per tutti gli elettroni; cioè solo la sotto-banda ad energia minore è occupata.

L' equazione (3.150) ci fornisce quindi in accordo con la definizione (3.31) la seguente funzione di risposta totale ²³:

$$[\chi_{m,m'}^{tot}(\mathbf{q}; \omega)]^{-1} = \left(\frac{1}{\chi(\mathbf{q}; \omega)} + v_{|m-m'|}(\mathbf{q}) \right) \delta_{m,m'} - v_{|m-m'|}(\mathbf{q}) , \quad (3.153)$$

dove l' inverso sulla funzione di risposta totale si riferisce alla sua struttura di matrice rispetto agli indici di piano.

Possiamo allora già ricavare delle informazioni utili sulla struttura statica del sistema dall' equazione (3.31) presa nel limite statico $\omega = 0$; questa, in assenza del potenziale esterno, ammette soluzioni statiche non banali nelle densità indotte sui diversi piani, quando:

$$\det[\chi_{m,m'}^{tot}(\mathbf{q}; 0)^{-1}] = 0 . \quad (3.154)$$

Questa situazione può essere interpretata affermando che, quando si verifica la relazione (3.154), un sistema con densità uniforme su ciascun piano risulta instabile ad una transizione di fase in uno stato con densità superficiali non uniformi.

Analizziamo adesso in particolare un sistema di soli due piani di elettroni; sul quale, come abbiamo visto nella sottosezione 3.2.2, si basano recenti tecniche sperimentali per la determinazione del segno e del valore assoluto della compressibilità termodinamica di un 2DEG interagente, che hanno portato all' osservazione di regimi di compressibilità \mathcal{K}_{2D} negativa (che, in accordo con la discussione nella sottosezione (3.2.1), implicano regimi con lunghezze di schermo $q_s = 2\pi n_2^2 e^2 \mathcal{K}_{2D}$ negative) per valori di r_s più bassi di 37 a cui si pensa debba avvenire la cristallizzazione di Wigner del sistema in 2D. Gli andamenti asintotici delle correlazioni interpiano ed intrapiano, del sistema di due 2DEG sia nella fase omogenea , sia in una fase non invariante sotto il gruppo continuo delle traslazioni, saranno inoltre discussi, nel quarto capitolo del lavoro di tesi.

²³Nel caso del super-reticolo infinito, in cui abbiamo a disposizione infiniti piani, introducendo la trasformata di Fourier discreta, nella direzione ortogonale ai piani, otteniamo come funzione di risposta del sistema:

$$\chi^{tot}(\mathbf{q}; q_z) = \frac{\chi(\mathbf{q})}{1 - [v(Q) - v(q)]\chi(\mathbf{q})} \quad (3.152)$$

Diagonalizzando la $\chi_{m,m'}^{tot}(\mathbf{q}; 0)$ nel caso di due piani troviamo, come autovalori:

$$\chi_{\pm}^{tot}(\mathbf{q}) = \frac{\chi(\mathbf{q})}{1 \pm v_{1,2}(q)\chi(\mathbf{q})} \quad , \quad (3.155)$$

dove quello col segno $-$ corrisponde ad una situazione in cui le densità indotte su i due piani hanno la stessa fase: $\delta\rho_1(\mathbf{q}) = \delta\rho_2(\mathbf{q})$, e quello col segno $+$ alla situazione in cui sono sfasate di π : $\delta\rho_1(\mathbf{q}) = -\delta\rho_2(\mathbf{q})$.

Si vede allora che, essendo $\chi(\mathbf{q})$ definita negativa e $v_{1,2}(q)$ positiva, $\chi_{+}^{tot}(\mathbf{q})$ può divergere ²⁴ per valori di $q = q_c$ in cui $\chi(\mathbf{q})$ è finita, cioè quando:

$$v_{1,2} \equiv \frac{2\pi e^2}{q} e^{-qd} = \frac{1}{\chi(q)} \quad . \quad (3.156)$$

Per una struttura GaAs-AlGaAs con buche di spessore $d = a_B^* \simeq 98\text{\AA}$ Swierkowsky ed al. trovano che, quando la densità sui due piani è vicina alla densità critica per la transizione di Wigner per un singolo strato ($r_s \sim 37$) allora $\chi(q)$ diverge per valori di $\mathbf{q} \sim \mathbf{G}$ e $\chi_{+}^{tot}(\mathbf{q})$ può divergere, in un intorno di \mathbf{G} , per una spaziatura d arbitraria dei piani.

Aumentando la densità sui piani per $20 < r_s < 37$ allontanandosi dalla fase solida i picchi di $\chi(q)$ si allargano ed abbassano permettendo la divergenza di $\chi_{+}^{tot}(\mathbf{q})$ per valori finiti della spaziatura dei piani d_c intorno a $q_c/k_F \sim 2.5$. Per quanto riguarda q_c per la transizione di Wigner, ci aspettiamo che, essendo data dalla distanza media tra gli elettroni, essa sia praticamente indipendente dai parametri del sistema.

Aumentando ulteriormente la densità, Swierkowsky ed al. trovano che per $r_s \sim 20$ si sviluppa nella $\chi_{+}^{tot}(\mathbf{q})$, accanto al picco di Wigner, un secondo picco intorno a $q_c/k_F \leq 2.0$. Poichè tale numero d' onda corrisponde ad una modulazione di densità su una scala di lunghezze maggiore della distanza media tra le particelle ($r_o k_F = \sqrt{2}$) essi l' hanno interpretato come un precursore di un' onda di densità di carica bidimensionale sul piano di ogni strato.

Alzando ancora la densità si ha un netto passaggio nella $\chi_{+}^{tot}(\mathbf{q})$ dall' instabilità di Wigner alla transizione di fase all' onda di densità di carica. A densità $r_s \sim 10$ rimane solo il picco dell' onda di densità di carica a $q_c/k_F \sim 1.8$. Per densità ancora maggiori i picchi si ottengono per separazioni tra i piani troppo basse per poter rimanere nell' approssimazione di tunnelling trascurabile.

Per poter osservare il comportamento descritto di $\chi_{+}^{tot}(\mathbf{q})$ al variare di r_s è fondamentale che $\chi(q)$ riproduca fedelmente il comportamento del liquido di elettroni intorno alla transizione di Wigner. Świerkowski ed al. scelgono a tale scopo ²⁵:

$$\chi(\mathbf{q}; \omega) = \frac{\chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega)}{1 - v_o(q)[1 - G(\mathbf{q})]\chi_{2D}^o(\mathbf{q}; \omega)} \quad , \quad (3.157)$$

²⁴ $\chi_{+}^{tot}(\mathbf{q})$ corrisponde a $\chi^{tot}(\mathbf{q}, q_z = \frac{\pi}{d})$, nel senso che le distribuzioni modulate di densità di carica su strati adiacenti sono in entrambi i casi sfasati di π . Swierkowsky ed al. trovano che a parità di r_s (~ 25), la spaziatura tra i piani critica per la transizione di Wigner è leggermente maggiore per il super-reticolo infinito ($d_c/a_B = 19.2$ contro 14.7 per il doppio strato) come è giusto aspettarsi poichè il super-reticolo si avvicina maggiormente al sistema tridimensionale.

²⁵Il risultato non dipende criticamente dal tipo di numeri di occupazione di singola particella

dove $v_o(q) = v_{m,m}(q)$ e $G(\mathbf{q})$ è il fattore di campo locale relativo al singolo piano di elettroni che è determinato dai dati sulla $g(r)$ forniti dalle simulazioni numeriche di Monte Carlo, disponibili per il sistema bidimensionale [26]: $g(r)$ è legata da una trasformata di Fourier a $S(q)$ che a sua volta è legata, dal teorema di fluttuazione e dissipazione, a $Im\chi(q; \omega)$ e quindi tramite la (3.157) a $G(\mathbf{q})$. Unendo allora le due equazioni (3.157) e (3.155), si trova:

$$\chi_{\pm}^{tot}(\mathbf{q}) = \frac{\chi_{2D}^o(\mathbf{q})}{1 - \chi_{2D}^o[v_o(q)(1 - G(\mathbf{q})) \mp v_{1,2}(q)]} , \quad (3.158)$$

da cui vediamo come per $\chi_+^{tot}(\mathbf{q})$ le instabilità osservate possano essere imputate alla cancellazione tra il potenziale effettivo sul piano m -esimo, $v_{m,m}(q)(1 - G(\mathbf{q}))$ ed il potenziale tra piani $v_{1,2}(q)$ ²⁶.

Concludiamo questa sezione mettendo in evidenza le approssimazioni fatte da Świerkowski ed al. nello scrivere l'equazione (3.150) ed utilizzare in essa la (3.157) confrontandola con l'approccio esatto di Miesenböck ed al. trattato nella sottosezione 3.5.1. Dalla (3.132) e dalla (3.131) ricaviamo, omettendo la dipendenza esplicita da \mathbf{q} :

$$\delta\rho_m = \frac{\chi_{2D}^o}{1 - \chi_{2D}^o[v_o(1 - G_o) + \underline{\sum_{m'(\neq m)} v_{m-m'} G_{m'-m}}]} \times \quad (3.159)$$

$$\times \left\{ \Phi_m^{est} + \sum_{m'(\neq m)} v_{m-m'}(1 - G_o)\delta\rho_{m'} + \underline{\sum_{m'(\neq m'')} \sum_{m''(\neq m)} v_{m-m'} G_{m'-m''} \delta\rho_{m''}} \right\} .$$

Si vede subito che trascurando i termini sottolineati in (3.159) si ritrova esattamente l'approccio di Świerkowski ed al. (3.150)+ (3.157). Questi hanno quindi trascurato le correlazioni Coulombiane interpiano prendendo $G_{m-m'} = 0$ per $m \neq m'$ ed inoltre hanno considerato l'interazione Coulombiana tra elettroni su piani diversi come quella 'nuda' $v_{m-m'}$ (vedi (3.151)) ($m \neq m'$) e non quella 'vestita' dalle correlazioni Coulombiane intrapiano a corto raggio $v_{m-m'}(1 - G_o)$.

$n(\mathbf{p})$ usati per calcolare la funzione di Lindhard. Risultati simili sono ottenuti prendendo per $n(\mathbf{p})$ quella del liquido interagente con $r_s = 10$ data dai calcoli di Montecarlo di [26] o quella di Fermi-Dirac ($r_s = 0$).

²⁶Per avere una transizione al cristallo di Wigner il fattore di campo locale deve avere un massimo maggiore di uno.

Capitolo 4

Schermo statico e regole di somma nel LEG classico

4.1 Introduzione

Alcune delle proprietà più significative della materia ordinaria sono la neutralità di carica locale e lo schermo della forza Coulombiana: un sistema in equilibrio termico non tollera disomogenità di carica estese su più di alcune distanze intermolecolari. Questo fatto generale giustifica l'esistenza di specifiche condizioni sulle correlazioni statiche e dinamiche di particelle cariche all'equilibrio termico; queste condizioni, esprimibili mediante regole di somma, derivano dallo schermo e dalla neutralità di carica.

Ad un dato istante temporale, lo stato di equilibrio di un sistema classico composto da N corpi identici (come ad esempio il LEG) è definito da una funzione di distribuzione $F(q, p) = F(x_1, \dots, x_N)$ simmetrica sotto permutazione di due qualunque variabili canoniche $x_i = (q_i, p_i)$, con q_i e p_i rispettivamente la posizione e l'impulso della particella i -esima. Abbiamo indicato con $q = (q_1, \dots, q_N)$ e con $p = (p_1, \dots, p_N)$ ed assumiamo per la F la normalizzazione $\int dq dp F(q, p) = 1$. Una formulazione più compatta ed elegante della meccanica statistica di un sistema a molti corpi si ricava in generale utilizzando le *funzioni di distribuzione ridotte*. Definiamo la funzione di distribuzione ridotta ad n corpi ¹ ($n \leq N$) come:

$$f_n(x_1, \dots, x_n) = \frac{N!}{(N-n)!} \int dx_{n+1} \cdots dx_N F(x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots, x_N) \quad (4.1)$$

Possiamo allora raggruppare insieme le funzioni di distribuzione ridotte nel *vettore delle distribuzioni* N -dimensionale $\mathbf{f} = \{f_0, f_1, \dots, f_N\}$ [15]. La conoscenza di tutte queste funzioni specifica completamente lo stato di equilibrio del sistema. Il vantaggio principale che si ha nell'utilizzare il vettore delle distribuzioni ridotte piuttosto

¹Nelle prossime sezioni useremo come funzioni di distribuzione ridotte quelle che si ottengono integrando le f_n sugli n impulsi: $\rho^{(n)}(q_1, \dots, q_n) = \int f_n(x_1, \dots, x_n) dp_1 \cdots dp_n$ che dipendono solo dalla configurazione spaziale degli n corpi.

che la funzione di distribuzione è dovuto al fatto che sia le funzioni di distribuzione ridotte che le equazioni di equilibrio gerarchiche integrodifferenziali di cui devono essere soluzioni (vedi le BBGKY in (1.10)) non dipendono esplicitamente da N . Questo fatto ci permette di postulare che nel limite termodinamico in cui estendiamo all'infinito il volume del sistema e mandiamo $N \rightarrow \infty$ in modo da tenere costante la densità di particelle, le funzioni di distribuzione ridotte ad n corpi convergano a funzioni finite indipendenti da N e soddisfino le stesse equazioni gerarchiche del sistema finito.

In questa parte del lavoro di tesi, guidati dall' articolo di rassegna di Ph.A.Martin [11], studieremo con gli strumenti della meccanica statistica un certo numero di regole di somma esatte applicate al LEG classico con N_p finito (con particolare attenzione al caso $N_p = 1, 2$ e 3) o infinito (il caso del super-reticolo). Da un punto di vista più fondamentale, vorremmo capire meglio le proprietà del vettore delle distribuzioni ridotte della materia stratificata del tipo di quella descritta nel capitolo 2; in questo senso le regole di somma costituiscono una serie di condizioni caratteristiche della struttura del vettore delle distribuzioni ridotte. Non è necessario ripetere l' importanza delle regole di somma come relazioni esatte in grado di fornire utili informazioni nello studio di fluidi carichi in regime di forte accoppiamento (dove le teorie perturbative falliscono) e come condizioni guida nella costruzione di certi schemi approssimati o nel proporre ansatz per la chiusura di equazioni gerarchiche.

In particolare, supponendo che le funzioni di distribuzione ridotte esistano nel limite termodinamico e soddisfino ad appropriate condizioni di 'cluster' ed alle stesse equazioni di equilibrio soddisfatte nel caso del sistema finito, ricercheremo le condizioni imposte su tali funzioni di correlazione dalla proprietà di lungo-raggio della forza Coulombiana. I risultati che si ottengono in questo modo sono esatti (cioè non derivano da approssimazioni) ma non sono tutti rigorosamente dimostrati; infatti alcune proprietà "ragionevoli" (come lo stesso limite termodinamico, limitazioni sul tipo di andamento asintotico per grandi separazioni spaziali tra gli elettroni sulle funzioni di distribuzione ridotte, ...) sono assunte valide a priori ². Questo tipo di approccio, basandosi sulle solite equazioni integrali non lineari della teoria dei fluidi (le BGY per la statica e le BBGKY per la dinamica), ci permette di usare un linguaggio matematico semplice e di avere un metodo unificato per lo studio della situazione classica, statica e dinamica, e come vedremo nel capitolo conclusivo anche quantistica.

Il sistema del LEG come abbiamo avuto più volte occasione di commentare, costituisce un complesso di particelle cariche dotato di un parametro, la distanza d tra i piani contigui, attraverso il quale è possibile 'spengere' ($d \rightarrow \infty$) o 'accendere' ($d \rightarrow 0$) la terza dimensione spaziale del sistema di cariche. Tale sistema si rivelerà

²Esistono approcci costruttivi e completamente rigorosi a tale problema che si basano sui metodi della teoria di campo per determinare il limite termodinamico dello stato e le proprietà di cluster in determinati domini dei parametri termodinamici. Questo tipo di approccio, tecnicamente complesso (rappresentazione di Sine-Gordon, espansione in cluster), si applica per il momento ad un numero limitato di casi.

quindi particolarmente utile per studiare l' influenza della dimensionalità spaziale dell' insieme di cariche sul tipo di andamenti asintotici di opportune funzioni di correlazioni a n corpi costruite a partire dalle funzioni di distribuzione ridotte (ad esempio per $n = 2$ ci stiamo riferendo, a meno di costanti additive, alla funzione di struttura statica del sistema), intra ed interpiano, tra cariche sempre più distanti tra loro, che chiameremo 'clustering'.

In particolare saremo interessati a determinare sotto quali condizioni il sistema di cariche abbia un clustering che decada esponenzialmente nell' allontanare tra loro due o più gruppi di cariche, andamento che definiremo alla Debye-Hückel (DH). In generale, un fluido di cariche, nel quale i parametri termodinamici sono tali (Γ sufficientemente piccolo) da permettere il clustering esponenziale, diremo che si trova in *fase di plasma* e vedremo che gode dell' importante capacità di schermare multipoli di ordine comunque elevato indotti dall' aver fissato un qualunque numero di cariche del sistema in certi punti del LEG ³.

Prima di cominciare è necessario premettere alcune definizioni di carattere generale: consideriamo una fase omogenea di particelle cariche classiche che si muovono in uno spazio di dimensione $\nu = 1, 2$ o 3 . Possiamo avere s specie di cariche e_α , $\alpha = 1, \dots, s$ che chiameremo componenti, e un fondo neutralizzante fisso con densità di carica uniforme ρ^f . Parleremo di *gas Coulombiano* quando $\rho^f = 0$ e di *Jellium* quando $\rho^f \neq 0$. Un gas Coulombiano ha come minimo 2 componenti di carica opposte; il Jellium può avere varie componenti con cariche dello stesso segno e opposte a quello del fondo. Generalmente il Jellium classico ad un solo componente è abbreviato OCP (One-Component-Classical-Plasma). La forma del potenziale Coulombiano dipende da come sono fatte le linee di forza del particolare sistema di cariche che desideriamo studiare. Se scegliamo di confinarle nello spazio ν -dimensionale in cui è confinata la dinamica delle cariche, la forma del potenziale Coulombiano ϕ_c risulta dipendente da ν e la sua trasformata di Fourier no: $\phi_c(K) \propto K^{-2}$, $\forall \nu$. In questo caso il potenziale Coulombiano è definito come la soluzione della equazione di Poisson in dimensione $\nu = 1, 2$ e 3 cioè, indicando con R la posizione ν -dimensionale di una particella e con: ∇_R il gradiente ν -dimensionale

$$\nabla_R^2 \phi_c(R) = -\epsilon_\nu \delta(R), \quad (4.2)$$

$$\epsilon_1 = 2, \quad \epsilon_2 = 2\pi, \quad \epsilon_3 = 4\pi, \quad (4.3)$$

³ Nel gas Coulombiano 1D interagente con potenziale $\propto -|\mathbf{r}|$ la forma asintotica delle funzioni di correlazione troncate è stata calcolata esplicitamente [113], ed è stato mostrato che è esponenzialmente decrescente. L' esistenza del regime di DH nei sistemi Coulombiani in 2D interagente con potenziale $\propto -\ln |\mathbf{r}|/r_o$ e 3D interagente con potenziale $\propto 1/|R|$ è stata dimostrata da [114] (2D), [115] (3D), [116] (Jellium), a temperatura sufficientemente alta o densità sufficientemente bassa. Infine le correlazione dell' OCP in 2D interagente con potenziale $\propto -\ln |\mathbf{r}|/r_o$ a $\Gamma = 2$ sono state calcolate esplicitamente da [12] dove è stato mostrato che hanno un decadimento gaussiano.

cioè:

$$\phi_c(R) = \begin{cases} 1/|R| & , \nu = 3 \\ -\ln|R|/r_o & , \nu = 2 \\ -|R| & , \nu = 1 \end{cases} \quad (4.4)$$

In 2D la singolarità di $\phi_c(R)$ sull' origine, distrugge la stabilità termodinamica dei sistemi contenenti cariche puntiformi di segni opposti per Γ sufficientemente alta, in 3D questa è distrutta per ogni valore di Γ (collasso classico). In questi casi è necessario introdurre una appropriata regolarizzazione del potenziale in $r = 0$. La regolarizzazione non è necessaria per il Jellium, quando tutte le componenti hanno lo stesso segno, o per l' OCP con cui lavoreremo.

Se scegliamo di lasciare estendere le linee di forza a tutto lo spazio tridimensionale in cui immaginiamo immerso il sistema di cariche ν -dimensionale allora il potenziale Coulombiano risulta $\phi(R) = 1/|R|$, $\forall \nu$. Così facendo spostiamo la dipendenza della dimensione nella trasformata del potenziale che ad esempio in 2D diventa $\phi(k) = 2\pi/k$.

Nel nostro studio del LEG adotteremo quest' ultimo punto di vista in accordo con le situazioni sperimentali presentate nel capitolo 2 nelle quali le cariche del LEG vanno sempre considerate non esattamente ma solo in buona approssimazione confinate in piani bidimensionali che sono distribuiti in modo ordinato nello spazio tridimensionale.

A questo proposito ricordiamo che Jonson [87] ha studiato i possibili effetti dovuti al fatto di descrivere lo strato di inversione di un MOS non col modello matematico del 2DEG ma col modello più realistico del quasi-2DEG in cui si aggiunge uno spessore finito nella terza dimensione allo strato di cariche. Jonson studia l' approssimazione in cui la dinamica degli elettroni è ancora esattamente confinata in 2D ma la funzione d' onda $\Psi(R) = \zeta(z)e^{i(k_x x + k_y y)}$ determina un potenziale bidimensionale effettivo, per mezzo di una media su z pesata dalle distribuzione di cariche $\rho(z) = |\zeta(z)|^2$. Questo potenziale effettivo si riduce a $1/|R|$ per $|R| \rightarrow \infty$ ma tende a $-\ln|R|$ per piccoli $|R|$ così che la principale differenza tra un 2DEG e un quasi-2DEG risulta essere quella di un potenziale tra le cariche meno singolare, per il primo, a distanze piccole rispetto allo spessore dello strato.

4.2 Condizioni di equilibrio

4.2.1 Prime definizioni

Cominciamo col considerare un sistema costituito da N_p piani paralleli posti a $z = 0, \pm d, \pm 2d, \dots, \pm md$. Ciascun piano è di superficie S e contiene un OCP bidimensionale, cioè N particelle di carica e e massa M immerse in un fondo continuo, fisso, con densità di carica neutralizzante, uniforme $\rho^f = -n_2$, dove, in accordo con la notazione dei precedenti capitoli, $n_2 = e \tilde{\rho} = e(N/S)$. Da ora in poi metteremo la

tilde sopra tutto ciò che si riferisce al sistema finito e la toglieremo quando vogliamo riferirci al sistema nel limite termodinamico (T-lim) in cui $N \rightarrow \infty$, $S \rightarrow \infty$ con $\tilde{\rho} = \rho$ e ρ costante. Assumendo la costante dielettrica del mezzo tra i piani uguale ad uno, le forze immagine non esistono e le particelle interagiscono tra loro e con i fondi neutralizzanti con il potenziale Coulombiano tridimensionale in (4.4). Lo stato degli N_p OCP bidimensionali è caratterizzato dalla sua temperatura T (o da $\beta = 1/K_B T$ con K_B costante di Boltzmann), e la sua densità superficiale media $\tilde{\rho}$ che determina la distanza media tra gli elettroni sul piano $a = (\pi\rho)^{1/2}$. La costante di accoppiamento dei singoli piani è definita dal rapporto dell' energia potenziale media per particella con l' energia cinetica media per particella: $\Gamma = \beta e^2/a$.

Gli effetti quantistici sono legati alla lunghezza d' onda termica di de Broglie $\lambda_{dB} = (2\pi\hbar^2\beta/M)^{1/2}$. In questa parte del lavoro di tesi studieremo il sistema descritto in **regime classico**, cioè assumeremo una temperatura sufficientemente alta ed una densità sufficientemente bassa affinché si possa considerare gli elettroni come pacchetti d' onda la cui estensione spaziale sia piccola rispetto alla distanza media tra le particelle a . Affinchè questo si realizzi la lunghezza d'onda termica di de Broglie deve essere molto più piccola della separazione media tra gli elettroni:

$$\lambda_{dB}/a \ll 1. \quad (4.5)$$

Sotto tale condizione ciascun elettrone si può considerare una particella classica con una posizione ed un impulso ben definiti. Inoltre due elettroni si possono considerare distinguibili.

Poichè l' analisi che faremo dello stato di equilibrio del LEG classico è direttamente basata sullo studio delle equazioni gerarchiche di equilibrio valide indipendentemente dai valori dei parametri termodinamici del sistema, essa ha come unica restrizione sul dominio di tali parametri solo la condizione (4.5). Tale analisi risulterà allora particolarmente interessante quando i piani del LEG contengono un plasma classico fortemente accoppiato $\Gamma \gg 1$ ⁴

Scegliamo di indicare con $R^i \equiv (\mathbf{r}_i, m_i d)$, la posizione della particella classica puntiforme i -esima ($1 \leq i \leq NN_p$) sul piano $z = m_i d$ ⁵; indichiamo con $R_m \equiv (\mathbf{r}, md)$ e con $\nabla_R \equiv (\nabla_r, \partial/\partial z) \equiv (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$; infine dato un generico vettore tridimensionale \mathbf{V} indichiamo con \mathbf{V}_{\parallel} la sua componente parallela ai piani del LEG

⁴Nel corso dell' analisi tratteremo con particolare enfasi il caso di forte accoppiamento tra i piani.

⁵per $m_i = m$ fissato allora $1 \leq i \leq N$, ed R^i indica la posizione della particella i -esima del piano $z = md$

e con \mathbf{V}_\perp quella ortogonale. Il sistema appena descritto ha una energia potenziale

$$U(R^1, \dots, R^{N_p N}) = e^2 \left[\sum_{m=-h}^h \sum_{\substack{i < j \\ m_i = m_j = m}}^N \phi(R^i - R^j) \right. \\ \left. + \sum_{-h \leq m < n \leq h} \sum_{\substack{i, j \\ m_i = m, m_j = n}}^N \phi(R^i - R^j) + \tilde{\rho} \sum_{-h \leq m, n \leq h} \sum_{m_i = m}^N \int_S d\mathbf{r} \phi(R^i - R_n) + \gamma \right] . \quad (4.6)$$

Dove abbiamo indicato con $R^i \equiv (\mathbf{r}_i, m_i d)$, con $\phi(R) = 1/(r^2 + z^2)^{1/2}$ il potenziale coulombiano per unità di carica elettrica e con γ l' energia potenziale dell' interazione tra i fondi.

Possiamo adesso introdurre le funzioni di distribuzione ridotte ad n corpi dell' insieme canonico del LEG come:

$$\rho^{(n)}(R^1, \dots, R^n) = \frac{N!}{(N-n)!} \frac{\int_S \dots \int_S e^{-\beta U(R^1, \dots, R^{N_p N})} \prod_{i=n+1}^{N_p N} d\mathbf{r}_i}{Z} , \quad (4.7)$$

dove abbiamo indicato con Z la funzione di partizione canonica del LEG:

$$Z = \int_S \dots \int_S e^{-\beta U(R^1, \dots, R^{N_p N})} \prod_{i=1}^{N_p N} d\mathbf{r}_i . \quad (4.8)$$

Le funzioni di distribuzioni ridotte del LEG finito $\tilde{\rho}^{(n)}(R^1, \dots, R^n)$ (trascureremo (n) nella notazione ove non ambiguo) dell' insieme canonico o di quello gran canonico associate con l' energia (4.6) soddisfano ad un insieme di N equazioni gerarchiche di equilibrio analoghe a quelle della gerarchia BGY (Born-Green-Yvon) per i sistemi omogenei [117, 118] e che chiameremo appunto equazioni BGY ⁶

$$(\beta e^2)^{-1} \nabla_{r_1} \tilde{\rho}(R^1, \dots, R^n) = (\mathbf{F}_\parallel^f(R^1) + \sum_{i=2}^n \mathbf{F}_\parallel(R^1 - R^i)) \tilde{\rho}(R^1, \dots, R^n) \\ + \sum_{m=-h}^h \int_S d\mathbf{r} \mathbf{F}_\parallel(R^1 - R_m) \tilde{\rho}(R^1, \dots, R^n, R_m) , \quad (4.9)$$

dove $n = 1, \dots, N$. In (4.9) abbiamo definito

$$\mathbf{F}_\parallel(R) = -\nabla_r \phi(R), \quad (4.10)$$

la componente parallela ai piani della forza tra due elettroni e

$$\mathbf{F}_\parallel^f(R) = \tilde{\rho} \sum_{m'=-h}^h \int_S d\mathbf{r}' \mathbf{F}_\parallel(R - R'_{m'}), \quad (4.11)$$

⁶Le equazioni BGY (4.9) si ricavano sviluppando $(\beta e^2)^{-1} \nabla_{r_1} \ln[\tilde{\rho}(R^1, \dots, R^n)]$ [119].

la forza elettrica che i fondi neutralizzanti esercitano sulla particella in R .

Le funzioni di distribuzione introdotte soddisfano la seguente condizione di normalizzazione:

$$\int_S \dots \int_S d\mathbf{r}_{i_1} \dots d\mathbf{r}_{i_n} \tilde{\rho}(R^{i_1}, \dots, R^{i_n}) = d_{i_1 \dots i_n} \quad (4.12)$$

$$d_{i_1 \dots i_n} = \prod_{m=\{m_{i_1} \dots m_{i_n}\}} \prod_{i=0}^{n_m} (N - i) \quad ,$$

dove $n_m =$ numero di particelle i_α con $1 \leq \alpha \leq n$ che stanno sul piano $z = md$. Inoltre, esse sono legate tra loro dalle seguenti relazioni integrali:

$$\int_S d\mathbf{r}_{i_1} \tilde{\rho}(R^{i_1}, \dots, R^{i_n}) = \frac{d_{i_1 \dots i_n}}{d_{i_2 \dots i_n}} \tilde{\rho}(R^{i_2}, \dots, R^{i_n}) \quad . \quad (4.13)$$

Procedendo sarà più utile lavorare con altri due diversi tipi di funzioni di correlazione che adesso descriviamo e che come vedremo nella sezione sul limite termodinamico saranno le sole a conservare un valore finito e quindi un significato fisico nel limite di un sistema coi piani estesi all'intero \mathbf{R}^2 ; data la densità microscopica di particelle:

$$N(R) = \sum_i \delta(R - R^i) \quad , \quad (4.14)$$

e indicando con $\langle \dots \rangle$ la media termica, canonica, alla temperatura inversa β , che non tiene conto degli effetti di dimensione finita dei piani del sistema descritto, definiamo [11] densità di particelle in eccesso (d.p.e.) in R_m quando ci sono n particelle fissate in R^1, \dots, R^n con $R^1 \neq \dots \neq R^n$, la funzione ⁷:

$$\begin{aligned} \rho_e(R_m | R^1, \dots, R^n) &= \\ &= \langle N(R)N(R^1) \dots N(R^n) \rangle - \langle N(R_m) \rangle \langle N(R^1), \dots, N(R^n) \rangle \quad (4.15) \\ &= \rho(R_m, R^1, \dots, R^n) - \rho(R_m)\rho(R^1, \dots, R^n) + \sum_i \delta(R_m - R^i)\rho(R^1, \dots, R^n) \quad , \end{aligned}$$

dove ricordiamo che le funzioni di distribuzione ad n punti sono definite da:

$$\rho(R^1, \dots, R^n) \equiv \rho(R^1) \dots \rho(R^2) g^{(n)}(R^1, \dots, R^n) \quad (4.16)$$

$$= \langle [N(R^1) \dots N(R^n)]_{DP} \rangle \quad , \quad (4.17)$$

$$g^{(1)}(R^1) = 1 \quad . \quad (4.18)$$

Il simbolo $[\]_{DP}$ indica che dalla somma di prodotti di funzioni delta dentro le parentesi quadrate dobbiamo scartare quelli che contengono più di una funzione

⁷Generalmente, la densità di particelle in eccesso condizionata, correttamente normalizzata, viene definita come la (4.15) divisa per $\rho(R^1, \dots, R^n)$; a noi risulterà conveniente la definizione (4.15)

delta riferita ad una stessa particella e dobbiamo tenere solo quelli con funzioni delta riferite a Diverse Particelle.

Nella (4.16) abbiamo anche definito le funzioni di correlazione ad n corpi, $g^{(n)}$, spesso più convenienti da usare. Tra queste la funzione di correlazione di coppia $g^{(2)}(R^1, R^2)$, ha un ruolo particolarmente importante: nel caso in cui abbiamo fluidi omogenei sui vari piani, e prendendo l'origine su una delle particelle della coppia, ad esempio sulla 2, indicheremo $g^{(2)}(R^1, O) \equiv g_{m_1}^{(2)}(r_1)$ e ci convinciamo facilmente, guardando la sua definizione, che $\rho g_m^{(2)}(r) dr$ è la probabilità di osservare una seconda carica in un dr intorno ad \mathbf{r} sul piano m , o che, analogamente, il numero medio di cariche sul piano $z = md$ che si trovano tra la circonferenza di raggio r e quella di raggio $r + dr$ è $\rho g_m^{(2)}(r) 2\pi r dr$. Si vede, quindi, come la funzione $g_m^{(2)}(r)$ abbia le proprietà della funzione di distribuzione radiale $g_m(r)$, che si può ottenere da esperimenti di scattering su un campione di LEG, e che è legata in modo banale alla funzione di struttura statica del sistema (vedi la relazione (4.28) al termine della sezione).

Oltre alle d.p.e. un'altro insieme di funzioni che useremo spesso sono le funzioni di correlazione troncate (f.c.t.); queste sono così definite:

$$\rho_T(R^1, Q) = \rho(R^1, Q) - \rho(R^1)\rho(Q) \quad , \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \rho_T(R, R^1, Q) &= \rho(R, R^1, Q) - \rho(R)\rho_T(R^1, Q) \\ &\quad - \rho(R^1)\rho_T(R, Q) - \rho(Q)\rho(R, R^1) \quad , \end{aligned} \quad (4.20)$$

dove abbiamo indicato con $Q \equiv (R^2, \dots, R^n)$. Nel caso in cui Q consista di un solo punto la (4.19) si riduce alla definizione della funzione di correlazione di Ursell (che sono definite in appendice A) a due punti $u^{(2)}$ e la (4.20) alla definizione della funzione di correlazione di Ursell a tre punti $u^{(3)}$. È importante osservare che in generale $\rho_T(R^1, R^2)$ deve essere una funzione decrescente nella variabile $|R^1 - R^2|$.

Concludiamo questa sezione osservando come tra tutte le d.p.e. quella a due corpi sia particolarmente importante poichè coincidente con la funzione di struttura statica, e commentando alcune banali proprietà della funzione di struttura statica di un sistema con un numero infinito di piani. La funzione di struttura statica di un sistema a molti corpi con densità microscopica $N(R)$ (ricordiamo che indichiamo con $R \equiv (\mathbf{r}, z)$ e con $K \equiv (\mathbf{k}, k_z)$) è definita come:

$$\begin{aligned} S(R|R') &= \langle N(R)N(R') \rangle_T \\ &= \langle N(R)N(R') \rangle - \langle N(R) \rangle \langle N(R') \rangle \\ &= \rho_e(R|R') \quad . \end{aligned} \quad (4.21)$$

Prendendo l'origine del sistema di riferimento $O = (\mathbf{r} = 0, z = 0)$ su R' e specificandoci al sistema del LEG, tenendo quindi conto della dinamica bidimensionale degli elettroni sui diversi piani, la funzione di struttura statica assume la seguente dipendenza spaziale:

$$S(R|O) = \sum_m S_m(\mathbf{r}|O)\delta(z - md) \quad , \quad (4.22)$$

dove:

$$S_m(\mathbf{r}|O) = S(R_m|O) = \rho_T(R_m, O) + \rho\delta_{m,0}\delta(\mathbf{r}) \quad . \quad (4.23)$$

Se tutti gli OCP bidimensionali del LEG sono omogenei allora avremo che: $S_m(\mathbf{r}|O) = S_m(\mathbf{r} + \mathbf{r}_o|\mathbf{r}_o)$, $\forall \mathbf{r}_o$. Se tutti gli OCP bidimensionali del LEG hanno simmetria azimutale allora scriveremo: $S_m(\mathbf{r}|O) = S_m(r|O)$. Essendo tutti i piani identici tra loro deve anche essere $S_m = S_{|m|}$.

Indicando con $S(K|O) = \int dR e^{-iKR} S(R|O)$ e con $S_m(\mathbf{k}|O) = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} S_m(r|O)$ abbiamo ⁸ :

$$S(\mathbf{k}, z|O) = \sum_m S_m(\mathbf{k}|O) \delta(z - md) \quad , \quad (4.24)$$

$$S(\mathbf{k}, k_z|O) = \int dz e^{-ik_z z} S(\mathbf{k}, z|O) = \sum_m S_m(\mathbf{k}|O) e^{-ik_z md} \quad . \quad (4.25)$$

Osserviamo come $S_m(\mathbf{k}|O)$ differisca dal fattore di struttura $S_m(\mathbf{k})$ più volte usato nei precedenti capitoli per un fattore di normalizzazione ⁹ ρ : $S_m(\mathbf{k}|O) = S_m(\mathbf{k})\rho$.

Quest' ultima definizione mostra come i contributi alla funzione di struttura statica dai vari piani $S_m(k|O)$, costituiscano, nel caso di un LEG con $N_p = \infty$ e $d < \infty$, i coefficienti dello sviluppo in serie di Fourier rispetto alla variabile k_z di $S(\mathbf{k}, k_z|O)$ che è una funzione periodica, in k_z , di periodo $2\pi/d$ (la (4.24) è infatti banalmente periodica di periodo d in z); possiamo allora scrivere:

$$S_m(\mathbf{k}|O) = \frac{2\pi}{d} \int_{1^\circ Bz} dk_z S(K|O) e^{ik_z dm} \quad , \quad (4.27)$$

dove come al solito indichiamo con $1^\circ Bz$ la prima zona di Brillouin: $k_z \in [-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}]$.

Osserviamo infine come valga la seguente relazione tra $S_m(\mathbf{k}|O)$ e la funzione di distribuzione radiale dell' m-esimo piano $g_m(r) = \rho_m(r)/\rho^2 = \rho(R_m, O)/\rho^2$ che come abbiamo già visto, descrive le correlazioni tra cariche in piani separati di md :

$$g_m(r) - 1 = \frac{1}{\rho} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \left[\frac{S_m(\mathbf{k}|O)}{\rho} - \delta_{m,0} \right] \quad . \quad (4.28)$$

⁸Anche se per la simmetria azimutale e l' omogeneità dei diversi OCP bidimensionali $S_m(\mathbf{k})$ dipende da \mathbf{k} solo attraverso il suo modulo k conserviamo la scrittura di \mathbf{k} come vettore per sottolineare il significato di $S_m(\mathbf{k})$ come funzione di scattering in cui $\hbar\mathbf{k}$ rappresenta il momento trasferito al fluido del piano m-esimo.

⁹ Il fattore di struttura statico di van Hove nello spazio delle coordinate $S(R)$ di un fluido in 3D omogeneo di densità n_3 è definito come [91]

$$S(R) \equiv \frac{1}{N} \int dR' \langle N(R'; t' = 0) N(R' + R; t = 0) \rangle_{T=0} = \frac{\langle N(R) N(O) \rangle}{n_3} \equiv \frac{S(R|O)}{n_3} \quad ; \quad (4.26)$$

in questo capitolo risulterà più comoda la funzione $S(R|O)$ grazie alla sua definizione (4.21) che la lega direttamente alle d.p.e..

4.2.2 Limite termodinamico

Nel modello del LEG possiamo distinguere tra due diversi limiti termodinamici: (i) quello in cui estendiamo i piani su cui si muovono gli elettroni all' infinito, a cui ci eravamo già riferiti con T-lim, (ii) quello in cui prendiamo un LEG con un numero infinito di piani a cui ci riferiremo da ora in poi con T-lim $_{N_p}$. Durante l' analisi svolta in questo capitolo sulle regole di somma ed il comportamento asintotico delle correlazioni del LEG classico, studieremo il modello del LEG nel T-lim. Uno degli scopi fondamentali dell' analisi svolta sarà quello di capire come la finitezza del sistema lungo la direzione ortogonale ai piani influenzi regole di somma ed andamenti asintotici delle correlazioni del LEG. In altre parole confronteremo i risultati ottenuti nello studio del LEG con N_p finito e quello nel T-lim $_{N_p}$.

In questa sottosezione eseguiamo il T-lim sulle BGY del LEG finito (4.9) rimandando alla sottosezione 4.4.2 per il calcolo del T-lim $_{N_p}$ sulle BGY che adesso ricaveremo (vedi (4.36)). Immaginiamo quindi di estendere all' infinito le superfici dei piani mantenendo la densità media di particelle su ciascuno di essi costante $\lim_{S \rightarrow \mathbf{R}^2} \tilde{\rho} = \rho$ (da ora in poi toglieremo la tilde dalle grandezze che si riferiscono al sistema nel T-lim); otterremo così un sistema *inomogeneo*, semi-infinito, (secondo la definizione dell' introduzione della sezione 'Inhomogeneous Fluids' in [11]) le cui funzioni di correlazioni sono ottenute da quelle del sistema finito prendendo il limite $S \rightarrow \mathbf{R}^2$. Ammetteremo (vedi la discussione al par. 'thermodynamic limit' in [11]) che le correlazioni del sistema semi-infinito soddisfino ad equazioni gerarchiche ottenute prendendo formalmente il limite termodinamico delle BGY per il sistema finito. A tale scopo è utile riscrivere tali BGY utilizzando il campo elettrico dovuto a tutte le cariche (fondi e particelle)

$$\tilde{\mathbf{E}}(\mathbf{R}) = \sum_{m=-h}^h \int_S d\mathbf{r}' \mathbf{F}(R - R'_m) \tilde{C}(R_m) , \quad (4.29)$$

dove abbiamo usato la carica totale per piano

$$\tilde{C}(R_m) = (\tilde{\rho}(R_m) - \tilde{\rho}) . \quad (4.30)$$

Le BGY si riscrivono:

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} \nabla_{r_1} \tilde{\rho}(R^1, \dots, R^n) &= [\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(R^1) + \sum_{i=2}^n \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R^i)] \tilde{\rho}(R^1, \dots, R^n) \\ &+ \sum_{m=-h}^h \int_S d\mathbf{r} \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R_m) [\tilde{\rho}(R^1, \dots, R^n, R_m) - \tilde{\rho}(R_m) \tilde{\rho}(R^1, \dots, R^n)] . \end{aligned} \quad (4.31)$$

Nel limite termodinamico otteniamo un sistema inomogeneo con le seguenti simmetrie:

(S1) Traslazioni continue lungo $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$ (nel caso $N_p = \infty$ traslazioni di passo d lungo $\hat{\mathbf{z}}$)

(S2) Rotazioni continue attorno a $\hat{\mathbf{z}}$

(S3) Rotazione di π attorno ad una qualunque retta del piano $m = 0$ (nel caso $N_p = \infty$ rotazione di π attorno ad una qualunque retta di un qualunque piano).

Dalla (S1) ricaviamo la neutralità locale del sistema ¹⁰, cioè per ogni m ,

$$\lim_{S \rightarrow \mathcal{R}^2} \tilde{C}(R_m) = C(R_m) = 0. \quad (4.32)$$

Allora per le $\rho(R^1, \dots, R^n) = \lim_{S \rightarrow \mathcal{R}^2} \tilde{\rho}(R^1, \dots, R^n)$ otteniamo le seguenti equazioni di equilibrio

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} \nabla_{\mathbf{r}_1} \rho(R^1, \dots, R^n) &= \sum_{i=2}^n \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R^i) \rho(R^1, \dots, R^n) \\ + \sum_{m=-h}^h \int d\mathbf{r} \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R_m) &[\rho(R_m, R^1, \dots, R^n) - \rho\rho(R^1, \dots, R^n)] \quad , \end{aligned} \quad (4.33)$$

dove ammettiamo la convergenza assoluta dell'ultimo integrale assumendo la seguente condizione di clustering:

$$|\rho(R, R^1, \dots, R^n) - \rho\rho(R^1, \dots, R^n)| \leq \frac{M}{|R|^\eta} \quad \text{con } \eta > 0 \quad .. \quad (4.34)$$

Considerando le cariche $1, \dots, n$ fisse in R^1, \dots, R^n ci aspettiamo naturalmente che quando la carica in R si allontana dai punti R^1, \dots, R^n essa si scorreli dalle cariche fissate. In particolare nel caso in cui il fluido *inomogeneo* è in una fase di plasma, ossia, in una fase in cui i parametri termodinamici sono tali da provocare un clustering esponenziale delle correlazioni, la condizione (4.34) che da ora in poi assumeremo valida *a priori*, è sicuramente verificata ¹¹. Un punto importante che metteremo però in evidenza studiando le BGY del LEG con un numero finito di piani è che, indipendentemente dal valore dei parametri termodinamici del sistema, le correlazioni del fluido inomogeneo con le simmetrie (S1),(S2) ed (S3) esibiscono un decadimento lento (non esponenziale) muovendo le particelle parallelamente ai piani.

¹⁰Prendendo il limite termodinamico della (4.31) per $n = 1$, tenendo conto dell'antisimmetria della forza $\mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R^2) = -\mathbf{F}_{\parallel}(R^2 - R^1)$ e osservando che per le simmetrie (S1) ed (S2) $\rho^{(1)}(R^1) = \rho$ è costante e $\rho^{(2)}(R^1, R^2)$ è una funzione di $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ otteniamo consistentemente

$$\lim_{S \rightarrow \mathcal{R}^2} \tilde{E}(R_m) = E(R_m) = 0$$

¹¹Per una descrizione dei sistemi Coulombiani in cui tale condizione è verificata esattamente per determinati domini dei parametri termodinamici vedi la nota 3 ed i punti (b)(c) ed (e) nella sottosezione IIA2 di Ref. [11].

Riscriviamo adesso le (4.33) utilizzando le f.c.t. ed il campo elettrico in R^1 generato dalla d.p.e. quando fissiamo $n - 1$ particelle in $Q \equiv (R^2, \dots, R^n)$ [11]:

$$\mathbf{E}(R^1|Q) = \sum_{m=-h}^h \int d\mathbf{r} \mathbf{F}(R^1 - R_m) \rho_e(R_m|Q) . \quad (4.35)$$

Questo campo è generalmente chiamato il campo elettrico in eccesso e sarà studiato in appendice B. In tale appendice si offre una definizione elettrostatica standard di $bfE(R^1|Q)$. Esso si può definire come il campo elettrico generato in R^1 dalla densità di carica $[\rho(R_m, Q) - \rho(Q)]\rho$ di uno stato disomogeneo (se $n > 2$, omogeneo nel caso $n = 2$) e da $n - 1$ cariche puntiformi, esterne, di carica $\rho(Q)$, situate nei punti di Q . È possibile definire un potenziale in eccesso attraverso la solita relazione $\mathbf{E}(R|Q) = -\nabla_R \phi(R|Q)$. Sempre in appendice B diamo uno sviluppo multipolare del potenziale in eccesso generato dalle d.p.e. a 2 punti nel caso del singolo piano.

Possiamo così riscrivere le (4.33):

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} \nabla_{r_1} \rho_T(R^1, Q) &= \rho \mathbf{E}_{\parallel}(R^1|Q) + \sum_{i=2}^n \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R^i) \rho_T(R^1, Q) \\ &+ \sum_{m=-h}^h \int d\mathbf{r} \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R_m) \rho_T(R_m, R^1, Q) . \end{aligned} \quad (4.36)$$

Concludiamo ricavando alcune proprietà soddisfatte dalle f.c.t. e dalle d.p.e. del LEG nel T-lim.

- Utilizzando la sola condizione di normalizzazione (4.13) otteniamo:

$$\int d\mathbf{r} \rho_e(R|R^1, \dots, R^n) = 0 , \quad (4.37)$$

a cui ci riferiremo, nel seguito, con *regola di somma di carica* di ordine n (in quanto abbiamo fissato n particelle in R^1, \dots, R^n). Per concretezza scriviamo la regola di somma di carica di ordine 2 in termini del fattore di struttura statico (la funzione di van Hove, vedi nota 9):

$$S(\mathbf{k}, 0) = \sum_m S_m(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} \frac{1}{\rho} \sum_m \int d\mathbf{r} \rho_e(R_m|O) = 0 . \quad (4.38)$$

- Dalla definizione (4.19) di $\rho_T^{(2)}$ ricaviamo utilizzando ancora la sola condizione di normalizzazione (4.13):

$$\int d\mathbf{r}_1 \rho_T(R_{m_1}, R_{m_2}) = \begin{cases} -\rho & m_1 = m_2 \\ 0 & m_1 \neq m_2 \end{cases} \quad (4.39)$$

- Utilizzando le proprietà di invarianza (S1) e (S2), abbiamo $\rho(R^1, R^2) = \rho(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|, |m_1 - m_2|)$, da cui ricaviamo:

$$\int d\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_1 \rho_T(R_{m_1}, R_{m_2}) = \begin{cases} -\mathbf{r}_2 \rho & m_1 = m_2 \\ 0 & m_1 \neq m_2 \end{cases} \quad (4.40)$$

usando, allora, la (4.15):

$$\int d\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_1 \rho_e(R_{m_1}|R_{m_2}) = 0 \quad , \quad (4.41)$$

a cui ci riferiremo nel seguito come *regola di somma di dipolo* del primo ordine (in quanto abbiamo fissato una sola particella in R^2 ; la prima regola di somma non banale di ordine maggiore è la regola di somma di dipolo quando fissiamo due particelle).

4.3 Regole di somma multipolari

Abbiamo visto nella sottosezione 4.2.2 come la regola di somma di carica valga sotto la sola condizione di clustering integrabile. Seguendo lo stesso criterio dimostriamo ora una proposizione che lega il tipo di clustering alle regole di somma multipolari di ordine superiore [120, 121, 11]. Fissando $n - 1 = 1, 2, \dots$ punti in $Q \equiv (R^2, \dots, R^n)$ e per $l = 0, 1, 2, \dots$ tali regole di somma si scrivono:

$$\sum_m \int d\mathbf{r} \rho_e(R_m|Q) \left[(R_m \nabla_R)^l \frac{R \cdot \hat{\mathbf{u}}}{R^3} \right]_{R=\hat{\mathbf{u}}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}} \perp \hat{\mathbf{z}} \quad . \quad (4.42)$$

Chiameremo la condizione (4.42) per un dato l ed un dato n interi, *regola di somma di multipolo* (l, n) [11].

Proposizione 1 Consideriamo un LEG costituito da N_p piani nel T -lim. Supponiamo che le funzioni di correlazione del suo stato di equilibrio soddisfino le BGY e godano della seguente condizione di clustering:

$$|D^n \rho_T(R^1, R^2, \dots, R^n)| \leq M < \infty, \quad D = \sup_{i,j} (|R^i - R^j|) \quad (4.43)$$

$$\eta > \begin{cases} 2 + l_o & N_p < \infty \\ 3 + l_o & N_p = \infty \end{cases} \quad (4.44)$$

con $n = 2, \dots, n_o + 1$; allora valgono le regole di somma di multipolo (l, n) per $l \leq l_o$ ed $n \leq n_o$.

Dimostrazione: Studiamo il comportamento asintotico delle BGY:

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} \nabla_{\mathbf{r}_1} \rho_T(R^1, Q) &= \rho \mathbf{E}_{\parallel}(R^1|Q) + \sum_{i=2}^n \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R^i) \rho_T(R^1, Q) \\ &+ \sum_{m=-h}^h \int d\mathbf{r} \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R_m) \rho_T(R^1, R_m, Q) \end{aligned} \quad (4.45)$$

con $n = 2, \dots, n_o + 1$,

nel portare all' infinito lungo un piano $m = 0$ la particella in R^1 . A tale scopo poniamo $R^1 = (\mathbf{r}_\lambda = \lambda \hat{\mathbf{u}}, 0)$ con $\hat{\mathbf{u}}$ versore ortogonale a $\hat{\mathbf{z}}$, e prendiamo $\lambda \rightarrow \infty$. Integrando il lato sinistro della (4.45) su un cerchio $C(\lambda \hat{\mathbf{u}}, r_o)$ di raggio r_o centrato in $\lambda \hat{\mathbf{u}}$ e sfruttando l' ipotesi di clustering (4.43) troviamo:

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} \int_{C(0, r_o)} d\mathbf{y} \nabla_{r_\lambda} \rho_T(\lambda \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{y}, Q) &= (\beta e^2)^{-1} \oint_{\partial C(0, r_o)} \hat{n} dl \rho_T(\lambda \hat{\mathbf{u}} + \mathbf{y}, Q) \\ &= (\beta e^2)^{-1} |\partial C(0, r_o)| O(1/\lambda^\eta) \quad , \quad (4.46) \end{aligned}$$

dove η è dato da (4.44) ed abbiamo indicato con $\oint_{\partial C(0, r_o)} \hat{n} dl$ l' integrale sul contorno $\partial C(0, r_o)$ di $C(0, r_o)$ (\hat{n} è la normale alla circonferenza $\partial C(0, r_o)$). Si verifica immediatamente che per la condizione di clustering (4.43) il secondo termine del membro di destra decade più velocemente di $1/\lambda^\eta$. Per stimare l' andamento asintotico dell' ultimo termine del membro di destra osserviamo che, dal momento che Q è fisso, l' ipotesi di clustering della proposizione implica che sia $|D^\eta \rho_T(R^1, R_m, Q)| \leq M < \infty$ con $D = \sup(|R^1|, |R_m|)$ e con η dato da (4.44). Possiamo sfruttare allora il lemma 1 di appendice C per affermare che $\lim_{\lambda \rightarrow \infty} \lambda^{2+l_o} |\sum_{m'} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_\parallel(|\lambda \hat{\mathbf{u}} - R'_{m'}|) \rho_T(\lambda \hat{\mathbf{u}}, R'_{m'}, Q)| = 0$.

Concludiamo così, confrontando gli andamenti asintotici per $\lambda \rightarrow \infty$ della (4.45) integrata su $C(\lambda \hat{\mathbf{u}}, r_o)$ che pure $\mathbf{E}_\parallel(\lambda \hat{\mathbf{u}}|Q)$ deve decadere per $\lambda \rightarrow \infty$ più velocemente di $1/\lambda^{2+l_o}$. Riscrivendo il campo elettrico in eccesso così:

$$\mathbf{E}(R|Q) = \int d^3 R' \frac{R - R'}{|R - R'|^3} C(R', Q) \quad ,$$

dove $C(R', Q) = \sum_m \delta(z' - md) \rho_T(R'|Q)$, ci accorgiamo che, pensando Q fisso e sfruttando l' ipotesi di clustering della proposizione, deve essere $C(R', Q) = O(1/|R'|^\eta)$; allora $\mathbf{E}(\lambda \hat{\mathbf{u}}|Q)$ ha una espansione multipolare fino ad ordine l_o (dal lemma 1 dell' appendice C di [120]):

$$E_j(\lambda \hat{\mathbf{u}}|Q) = \sum_{l=0}^{l_o} \frac{(-1)^l}{l!} \frac{G_j^l(\hat{\mathbf{u}}|Q)}{\lambda^{l+2}} + o\left(\frac{1}{\lambda^{l_o+2}}\right) \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned} G_j^l(\hat{\mathbf{u}}|Q) &= \sum_{i_1, \dots, i_l=1}^3 (\partial_{i_1} \dots \partial_{i_l}) \left(-\partial_j \frac{1}{|R|} \right) \Big|_{R=\hat{\mathbf{u}}} \times \\ &\times \sum_m \int d\mathbf{r} (R_m)_{i_1} \dots (R_m)_{i_l} \rho_T(R_m|Q) \quad , \quad (4.48) \end{aligned}$$

dove $j = 1, 2$ e stiamo indicando con $(R)_i$ la componente cartesiana i -esima del vettore R e con ∂_i la derivata parziale rispetto a tale componente; poichè nelle ipotesi della proposizione abbiamo visto che deve essere $\mathbf{E}_\parallel(\lambda \hat{\mathbf{u}}|Q) = o(1/\lambda^{2+l_o})$ dobbiamo avere che $G_j^l(\hat{\mathbf{u}}|Q) = 0$ per $l \leq l_o$ e $\forall \hat{\mathbf{u}}$ ortogonale a $\hat{\mathbf{z}}$. Devono cioè valere le regole di somma di multipolo (l, n) per $l \leq l_o$ ed $n \leq n_o$.

Commentiamo il risultato ottenuto.

- (i) Scriviamo le regole di somma di multipolo (l, n) più esplicitamente in alcuni casi particolari (immaginiamo di fissare in Q un numero n qualunque di punti distinti):

$$\bullet \text{ per } l = 0 \text{ ed } n \text{ qualunque} \implies \sum_m \int_{\mathbf{R}^2} d\mathbf{r} \rho_e(R_m|Q) = 0 \quad (4.49)$$

$$\bullet \text{ per } l = 1 \text{ ed } n \text{ qualunque} \implies \sum_m \int_{\mathbf{R}^2} d\mathbf{r} \mathbf{r} \rho_e(R_m|Q) = 0 \quad (4.50)$$

Queste relazioni verranno spesso utilizzate nelle prossime sezioni.

- (ii) Dal confronto della proposizione 1 con la proposizione 2.2 di Ref. [11], risulta che:

- Il LEG con $N_p = \infty$ (d finito ¹²) ha un comportamento simile a quello di un OCP in 3D.
- Il LEG con $N_p \leq \infty$ ha un comportamento simile a quello di un OCP in 2D interagente con potenziale Coulombiano $\propto -\ln|\mathbf{r}|/r_o$.

Per 'comportamento simile' intendiamo in entrambi i casi, che il LEG e l' OCP hanno le stesse condizioni di clustering necessarie per la validità delle proprie regole di somma di multipolo (l, n) (adattate alla particolare geometria del sistema) per determinati valori di l ed n .

- (iii) La proposizione appena dimostrata nel caso di un LEG con piani omogenei e con simmetria azimutale vale anche per il LEG con piani disomogenei se aggiungiamo l' ipotesi che le densità superficiali di elettroni su i piani rimangono finite andando all' infinito lungo il piano (vedi [120]). Questa generalizzazione della proposizione appena dimostrata sarà utilizzata nella sezione 4.5.

4.4 Comportamento asintotico delle correlazioni

4.4.1 Numero finito di piani

Lo scopo di questa sottosezione è quello di studiare come e con quali conseguenze l' analisi svolta da Alastey e Martin [10] sul tipo di clustering compatibile con le equazioni gerarchiche di equilibrio nei fluidi classici, si applica al sistema di nostro interesse: il gas di elettroni stratificato. A tale scopo premettiamo una breve rassegna dei risultati noti nel caso dell' OCP in 2D omogeneo con un potenziale di interazione tra le particelle di tipo $1/r$.

¹²Vedi lemma 1 in appendice C.

Un piano

Alastuey e Martin [10] hanno studiato il comportamento asintotico delle correlazioni che definiscono gli stati di equilibrio di un OCP in 2D, infinitamente esteso (nel T-lim), omogeneo e con interazione Coulombiana tra le particelle di tipo $1/r$. Essi dimostrano che le f.c.t. soluzioni della gerarchia BGY non possono avere un decadimento esponenziale per grandi separazioni tra le cariche. In particolare trovano che $S(r) = \rho_e(r|O)/\rho = [\rho_T(r, O) + \rho\delta(\mathbf{r})]/\rho = \rho[g(r) - 1] + \delta(\mathbf{r})$ deve decadere come $1/r^{3-\epsilon}$ con $\epsilon \geq 0$ ($\epsilon < 1$ per assicurare l' integrabilità del decadimento all' infinito).

Ripercorriamo brevemente la loro dimostrazione. Immaginiamo di avere fissato una carica nell' origine O sul piano. Chiamiamo $\rho_e(r) \equiv \rho_e(r|O)$ ed analogamente $\rho_T(r) \equiv \rho_T(r, O)$. La BGY che lega la f.c.t. a 2 punti con quella a 3 punti si scrive proiettata lungo $\hat{\mathbf{r}}$ ¹³:

$$(\beta e^2)^{-1} \frac{d\rho_T(r, O)}{dr} = -\rho \frac{d\phi_e(r, z=0)}{dr} + \frac{1}{r^2} \rho_T(r, O) + \int d\mathbf{r}' \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \rho_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', O) \quad (4.51)$$

$$= -\rho \int d\mathbf{r}' \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} [\rho_T(r, O) + \delta(\mathbf{r}')\rho] + \int d\mathbf{r}' \frac{\hat{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} [\rho_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', O) + \delta(\mathbf{r}')\rho_T(r, O)] \quad , \quad (4.52)$$

dove $\phi_e(r, z)$ è il potenziale in eccesso generato dalla d.p.e. a 2 punti (di cui uno fissato nell' origine O). Il potenziale in eccesso soddisfa l' equazione di Poisson:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \phi_e(r, z) \right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi_e(r, z) = -4\pi\rho_e(r)\delta(z), \quad (4.53)$$

che in trasformata di Fourier rispetto alle variabili planari \mathbf{r} si scrive

$$\phi_e(k, z) = \rho v_{2d}(k) e^{-k|z|} \left[\frac{\rho_T(k)}{\rho} + 1 \right] = \rho v_{2d}(k) e^{-k|z|} S(k) \quad . \quad (4.54)$$

dove $v_{2D}(k) = 2\pi/k$ è la trasformata di Fourier bidimensionale del potenziale $1/r$. Passando in trasformata di Fourier rispetto alle variabili planari \mathbf{r} nella BGY (4.52) si ottiene:

$$(\beta e^2)^{-1} k \rho_T(k) = -\rho k \phi_e(k, z=0) + \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} + \int d\mathbf{r}' \frac{\hat{\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} [\rho_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', O) + \delta(\mathbf{r}')\rho_T(r, O)] \quad , \quad (4.55)$$

ricordandosi la relazione tra il fattore di struttura statico $S(k)$ e la f.c.t. a 2 punti ed utilizzando l' equazione di Poisson (4.54) la BGY si riscrive:

$$(\beta e^2)^{-1} (S(k) - 1) = -\rho v_{2D}(k) S(k) + 2\pi\rho\Delta(k) \quad , \quad (4.56)$$

¹³Dalla seconda equazione (quella per $n = 2$) della gerarchia BGY (4.36) presa per $N_p = 1$

dove abbiamo definito ¹⁴:

$$\Delta(k) = -\frac{i}{2\pi\rho^2k} \int d\mathbf{r}' \frac{\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r}'}{r'^3} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \quad (4.57)$$

$$c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \rho_e(\mathbf{r}|\mathbf{r}', O) - \rho\rho_e(\mathbf{r}|\mathbf{r}') \quad . \quad (4.58)$$

Studiamo le proprietà della funzione $\Delta(k)$ in termini delle regole di somma multipolari ricavate in sezione 4.3.

- (i) Se le d.p.e. a 2 e 3 punti sono integrabili abbiamo dimostrato nella sottosezione 4.2.2 (vedi equazione (4.37)) che esse soddisfano la regola di somma di carica:

$$\int d\mathbf{r} \rho_e(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = 0 \quad \text{ovvero} \quad \lim_{k \rightarrow 0} S(k) = 0 \quad (4.59)$$

$$\int d\mathbf{r}' \rho_e(\mathbf{r}|\mathbf{r}', O) = 0 \quad , \quad (4.60)$$

da cui ricaviamo per la $c(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$:

$$\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int d\mathbf{r} (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} - 1) c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sim k^\epsilon \quad (4.61)$$

$$\text{con} \quad \epsilon > 0 \quad \text{per} \quad k \rightarrow 0 \quad , \quad , \quad (4.62)$$

ovvero per la $\Delta(k)$:

$$\Delta(k) \sim 1/k^{1-\epsilon} \quad \text{con} \quad \epsilon > 0 \quad \text{per} \quad k \rightarrow 0 \quad . \quad (4.63)$$

- (ii) Se le f.c.t. a 2, 3 e 4 punti soddisfano la condizione di clustering

$$|D^\eta \rho_T(R^1, R^2, \dots, R^n)| \leq M < \infty, \quad D = \sup_{i,j} (|R^i - R^j|) \quad (4.64)$$

per $\eta > 3(= 2 + 1)$ ed $n = 2, 3$ e 4 allora la proposizione dimostrata in sezione 4.3 ci assicura che valgono:

- La regola di somma di carica sulle d.p.e. a 2 ed a 3 punti utilizzate in (i).
- Le regole di somma di dipolo sulle d.p.e. a 2 (sempre valida in un sistema omogeneo se assumiamo la d.p.e. a 2 punti integrabile) e 3 punti (vedi (4.50)):

$$\int d\mathbf{r} \mathbf{r} \rho_e(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = 0 \quad (4.65)$$

$$\int d\mathbf{r}' \mathbf{r}' \rho_e(\mathbf{r}|\mathbf{r}', O) = 0 \quad , \quad (4.66)$$

¹⁴Nella scrittura del termine $\Delta(k)$ dalla (4.51) abbiamo usato: l'antisimmetria della forza Coulombiana, l'omogeneità del piano di cariche e la definizione delle d.p.e. (4.15). Infine abbiamo assunto di poter scambiare i due integrali in \mathbf{r} ed in \mathbf{r}' (vedi proposizione 6 in Ref. [10]).

da cui ricaviamo per la $c(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$:

$$\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int d\mathbf{r} (e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} - 1 + i\mathbf{k}\mathbf{r}) c(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \sim k^{1+\epsilon} \quad (4.67)$$

$$\text{con } \epsilon > 0 \quad \text{per } k \rightarrow 0 \quad , \quad (4.68)$$

ovvero per la $\Delta(k)$:

$$\Delta(k) \sim 1/k^\epsilon \quad \text{con } \epsilon > 0 \quad \text{per } k \rightarrow 0 \quad . \quad (4.69)$$

Dall' analisi precedente ricaviamo le seguenti informazioni:

1. Dalle ipotesi del punto (ii) e dalla BGY in (4.56) otteniamo per la $S(k)$ il seguente comportamento¹⁵ a piccoli k :

$$\lim_{k \rightarrow 0} v_{2D}(k) \rho S(k) = (\beta e^2)^{-1}. \quad (4.70)$$

Il termine dominante a piccoli k di $S(k)$ non è analitico in \mathbf{k} a $\mathbf{k} = 0$. Tale singolarità di ordine k in $k \rightarrow 0$ induce [100] un termine di ordine¹⁶. $|\mathbf{r}|^{-3}$ nello sviluppo asintotico di $S(r)$ intorno a $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. *Questo è in contraddizione con le ipotesi di partenza del punto (ii)*. Abbiamo allora dimostrato che il clustering non può essere del tipo assunto in (4.64). Le f.c.t. a 3 ed a 4 corpi devono decadere a zero non più lentamente di quella a 2 quando mandiamo all' infinito la separazione tra due particelle che le tre f.c.t. hanno in comune. Concludiamo che $S(r)$ deve decadere come $1/r^{3-\epsilon}$ con $\epsilon \geq 0$.

2. Partendo dalle ipotesi del punto (i) ricaviamo dalla BGY in (4.56):

$$S(k \rightarrow 0) \sim k \left[\frac{1}{k_D} + \Delta(k \rightarrow 0) \right] \quad , \quad (4.71)$$

dove $K_D = 2\pi\rho\beta e^2$ è l' inverso della lunghezza di schermo di Debye in un gas di elettroni bidimensionale e come abbiamo visto al punto (i) $\Delta(k \rightarrow 0) \sim 1/k^{1-\epsilon}$ con $\epsilon > 0$. Dall' analisi al punto (ii) (vedi equazione (4.67)) si vede che $\epsilon = 1$ quando il momento di dipolo sulla d.p.e a tre punti è finito ($\neq 0$). Si vede allora che $S(k)$ continua ad avere un andamento lineare in k a piccoli k se supponiamo che il dipolo sulla d.p.e. a tre punti sia finito.

Commentiamo il risultato ottenuto: (a) confrontando il comportamento dell' OCP in 2D e dell' OCP in 3D interagenti con potenziale Coulombiano $1/|R|$; (b) analizzando il modello idrodinamico dell' OCP in 2D studiato da Fetter [16] alla luce dei risultati "esatti" dell' analisi di Alastuey e Martin appena esposti.

¹⁵Tale tipo di comportamento si ottiene di solito (vedi ad esempio Ref. [112]) dall' argomento euristico di prendere l' andamento a piccoli k della funzione di correlazione diretta $c(k) = [1 - \frac{1}{S(k)}]/\rho$ come dato da $-(\beta e^2)v_{2D}(k)$.

¹⁶La trasformata di Fourier bidimensionale di $|\mathbf{k}|$ è $-1/2\pi|\mathbf{r}|^3$.

a. Confronto con l' OCP in 3D

Nel caso dell' OCP in 3D interagente con un potenziale $1/|R|$ si trova che $S(K)$ non è singolare in $K = 0$ ed il risultato (4.70) è la relazione di Stillinger-Lovett (una derivazione analoga è data da Martin nella sottosezione II.D.1 di Ref. [11]).

In questo caso data l' analiticità di $S(K)$ in $K = 0$ non è possibile dedurre la presenza di termini algebrici nello sviluppo a grandi $|R|$ di $S(|R|)$, come avevamo fatto per l' OCP in 2D.

Alastuey e Martin [10] hanno dimostrato che nella classe di sistemi di cariche confinate in uno spazio ν -dimensionale ($\nu = 2$ o 3) ed interagenti con potenziali algebrici, il caso Coulombiano con le linee di forza confinate nel sistema ν -dimensionale gioca un ruolo eccezionale: tale tipo di potenziale rende compatibile con la struttura delle BGY, una legge di decadimento a zero delle f.c.t. per grandi separazioni tra le cariche, più veloce di una qualunque potenza inversa delle separazioni.

La ragione fondamentale per cui si verifica questa situazione risiede nel fatto che per tali sistemi (l' OCP in 3D con potenziale d' interazione $1/|R|$ e l' OCP in 2D con potenziale d' interazione $-\ln(r/r_o)$) l' equazione di Poisson è una equazione differenziale locale che impone al campo (in eccesso) un decadimento più lento di quello della densità di carica (in eccesso) quando quest' ultimo sia algebrico. Martin dimostra che tale condizione è incompatibile con quella che si ottiene dal confronto degli andamenti asintotici dei vari termini delle BGY.

Ad esempio in 3D abbiamo la seguente situazione. L' equazione di Poisson si scrive:

$$\nabla_R \mathbf{E}(|R||0) = \frac{1}{|R|^2} \frac{d}{d|R|} [|R|^2 \mathbf{E}(|R||0)] = 4\pi e \rho S(|R|) \quad . \quad (4.72)$$

La BGY proiettata lungo R si scrive:

$$(\beta e^2)^{-1} \frac{d}{d|R|} \rho [S(|R|) - \delta(R)] = \rho E(|R||0) + W(R) \quad , \quad (4.73)$$

dove $W(R)$ è una opportuna combinazione di f.c.t. a 2 ed a 3 corpi.

Assumiamo per $S(|R|)$ un andamento asintotico per $|R| \rightarrow \infty$ del tipo $A/|R|^p + o(1/|R|^p)$ per qualche $p > 3$.

- Integrando l' equazione di Poisson (4.72) e sfruttando la regola di somma di carica $\int dR S(|R|) = 0$ troviamo che $E(|R||O)$ deve avere un andamento asintotico $\propto A/|R|^{p-1} + o(1/|R|^{p-1})$ per $|R| \rightarrow \infty$.
- Assumendo una opportuna limitazione sulla f.c.t. a 3 punti (vedi l' ipotesi (iii) della proposizione 1 a pagina 116 o l' ipotesi (ii) della proposizione 1 di Ref. [10]) si trova che $W(R)$ è trascurabile rispetto ad $E(|R||O)$ a grandi $|R|$.

Questi due risultati sono inconsistenti con la struttura delle BGY. Infatti integrando la BGY (4.73) tra $|R|$ ed ∞ per $|R| \rightarrow \infty$ ricaviamo che $S(|R|)$ deve avere un

andamento asintotico $\propto A/|R|^{p-2} + o(1/|R|^{p-2})$ per $|R| \rightarrow \infty$. Ricordandoci l'ipotesi iniziale sul decadimento della $S(|R|)$, questo porta a concludere $A = 0$. Cioè è vietato assumere per $S(|R|)$ un decadimento del tipo potenza inversa di $|R|$ per $|R| \rightarrow \infty$.

Alastuey e Martin in realtà dimostrano una proposizione ancora più forte (proposizione 2 in [10]) per la quale il decadimento deve essere più veloce di una qualunque potenza inversa quando si assume: (i) un decadimento monotono all'infinito per $S(|R|)$ e (ii) si utilizza una ragionevole limitazione sulla funzione a tre punti. In entrambi i casi l'ipotesi di monotonicità gioca un ruolo essenziale e non si può escludere un decadimento oscillante perchè in tal caso il campo e la densità di carica sarebbero dello stesso ordine ad infinito. Tutto il ragionamento è generalizzabile alle funzioni di correlazione ad un numero di punti maggiore di due (vedi proposizione 4 in [10]).

Nella sottosezione 4.4.2 a pagina 115 ripeteremo questo tipo di ragionamento per un LEG nel limite $d \rightarrow 0$, cioè continuo lungo \hat{z} .

b. Il modello idrodinamico di Fetter

Abbiamo trovato che in un OCP in 2D con potenziale di interazione $1/r$ la trasformata di Fourier del fattore di struttura $S(r)$ deve decadere a zero come o più lentamente di $1/r^3$ per r grande. Questo risultato è in accordo col modello elettro-idrodinamico usato da Fetter [16] per studiare tale sistema che nel caso statico coincide con l'approssimazione di Debye-Hückel (vedi sottosezione 5.2.1 in [112]).

Per confrontare i risultati di Alastuey e Martin col modello di Fetter è utile la seguente rilettura elettrostatica delle varie funzioni di correlazione introdotte. Diremo che l'espressione $\rho[g(r) - 1]$ rappresenta la variazione nella densità superficiale in numero di elettroni, dal suo valore medio ρ , che si forma come schermo elettrostatico alla carica del fluido fissata sull'origine. Interpretiamo quindi la $\rho_e(r)/\rho = \rho_T(r)/\rho + 1 = \rho(g(r) - 1) + \delta(\mathbf{r})$ come la densità in numero di elettroni sul piano, totale: composta da quella del sistema elettronico senza la carica fissata sull'origine $\rho g(r)$, da quella del fondo neutralizzante $-\rho$ e dalla carica fissata sull'origine $\delta(\mathbf{r})$. La regola di somma di carica sulla $\rho_e(r)$ ($\int d\mathbf{r} \rho_e(r) = 0$) si rilegge come la condizione per cui la nuvola di carica schermante $\rho(g(r) - 1)$ controbilancia esattamente la carica fissata sull'origine.

Fetter combina l'equazione di Poisson per il potenziale in eccesso (4.54):

$$\phi_e(k, z) = \frac{2\pi\rho}{k} e^{-k|z|} \left[\frac{\rho_T(k)}{\rho} + 1 \right] ,$$

con l'equazione di Eulero per il sistema statico. Quest'ultima si ottiene dalla BGY in (4.55) trascurando l'ultimo termine del membro di destra (il termine $\Delta(k)$ in (4.56):)¹⁷:

$$(\beta e^2)^{-1} \mathbf{k} \rho_T(\mathbf{k}) = -\mathbf{k} \rho \phi_e(\mathbf{k}, z) . \quad (4.74)$$

¹⁷Osserviamo che il termine trascurato (il secondo termine del secondo membro della (4.52))

Risolvendo il sistema tra l' equazione di Poisson (presa per $z=0$) e l' equazione di Eulero in $\rho_T(k)/\rho = [S(k) - 1]$ si ricava ¹⁸:

$$\frac{1}{\rho}\rho_T(k) = -\frac{K_D}{k + K_D} \quad \text{ovvero} \quad S(k) = [1 + K_D/k]^{-1} , \quad (4.75)$$

avendo indicato con K_D l' inverso della lunghezza di schermo di Debye per un sistema Coulombiano bidimensionale $2\pi\rho\beta e^2$. Passando dallo spazio \mathbf{k} allo spazio \mathbf{r} nella (4.75) ed indicando con $J_0(x)$ la funzione di Bessel di ordine zero, si ricava infine ¹⁹:

$$\frac{1}{\rho}\rho_T(r) = \rho[g(r) - 1] = -\frac{K_D}{2\pi} \int_0^\infty dk \frac{k}{k + K_D} J_0(kr) \quad (4.76)$$

$$= -\frac{K_D}{2\pi r} + \frac{K_D^2}{2\pi} I(K_D r, 0, 1) \quad (4.77)$$

$$\text{dove} \quad I(a, b, c) = \int_0^\infty dx \frac{e^{-bx}}{x + c} J_0(ax) . \quad (4.78)$$

Seguendo le notazioni di Fetter, abbiamo definito in (4.78) la funzione $I(a, b, c)$ i cui andamenti asintotici sono studiati in appendice B di [16]. La soluzione trovata per la nuvola di carica schermante è integrabile e soddisfa la regola di somma di carica: il suo integrale esteso a tutto il piano è -1 . Cioè la carica schermante totale controbilancia esattamente la carica fissata nell' origine.

La densità di schermo ha i seguenti andamenti asintotici:

$$\rho[g(r) - 1] \sim -\frac{K_D}{2\pi r} \quad \text{per} \quad K_D r \ll 1 \quad (4.79)$$

$$\rho[g(r) - 1] \sim -\frac{1}{2\pi K_D r^3} \quad \text{per} \quad K_D r \gg 1 . \quad (4.80)$$

L' andamento asintotico a grandi r rientra tra quelli previsti da Alastuey e Martin [10] e discussi all' inizio di questa sottosottosezione.

In questa approssimazione in cui si trascura il termine $\Delta(k)$ nelle BGY in (4.56), ricaviamo dalle BGY così troncate che $S(k) \sim k$ per k piccoli, indipendentemente dal valore dei momenti di dipolo sul piano delle d.p.e. (è sufficiente la neutralità di carica $\lim_{k \rightarrow 0} S(k) = 0$, che come abbiamo visto è soddisfatta dal modello).

Per ricavare il potenziale $\phi_e(r, z)$ è sufficiente sostituire la (4.76) nell' equazione di Poisson (4.54) e ritornare alle variabili spaziali. Così facendo si trova per il

ha la stessa struttura del campo in eccesso (il primo termine del secondo membro della (4.52)) ma contiene f.c.t. di ordine superiore ($\rho_T^{(3)}, \rho_T^{(2)}$ al posto di $\rho_T^{(2)}, \rho_T^{(1)}$). Questo ci assicura che la chiusura delle equazioni gerarchiche proposta da Fetter ha senso.

¹⁸La riscrittura in termini di $S(k)$ mostra come l' approssimazione che stiamo studiando si possa ottenere prendendo come funzione di correlazione diretta $c_{DH}(k) = -K_D/k$.

¹⁹Nel derivare la (4.77) dalla (4.76) usiamo la proprietà $\int_0^\infty dx J_0(x) = 1$.

potenziale i seguenti andamenti asintotici (vedi [16]):

$$\phi_e(r, 0) \sim \frac{\rho}{K_D^2 r^3} \quad \text{per } K_D r \gg 1 \quad (4.81)$$

$$\phi_e(0, z) \sim \frac{\rho}{K_D z^2} \quad \text{per } K_D |z| \gg 1 \quad (4.82)$$

Quindi il potenziale in eccesso è anisotropo.

Tali andamenti asintotici si possono ricavare come segue:

- L' andamento a grandi r del potenziale in eccesso sul piano, si ottiene dall' andamento della densità di schermo (4.80) sfruttando l' equazione di Eulero (4.74). Riscrivendo tale equazione nello spazio \mathbf{r} ed integrandola tra r ed ∞ si ricava infatti che:

$$\phi_e(r) = -\frac{3\pi}{K_D} \rho_T(r) \quad , \quad (4.83)$$

dove abbiamo sfruttato le condizioni al contorno $\rho_T(\infty) = \phi_e(\infty) = 0$.

Confrontando l' andamento asintotico (4.81) con l' andamento asintotico (B.17) ricavato in appendice B da uno sviluppo multipolare del potenziale in eccesso osserviamo che la densità di carica in eccesso ha un momento di quadrupolo $M_2 = -2\rho/K_D^2$ finito ($\neq 0$).

- Confrontando allo stesso modo (4.81) e (B.17) ricaviamo che la densità di carica in eccesso ha un momento di dipolo M_1 finito ($\neq 0$). Dalla (4.75) effettivamente abbiamo:

$$M_1 = \left. \frac{\partial}{\partial k} \rho_T(k) \right|_{k=0} = \frac{\rho}{K_D} \quad , \quad (4.84)$$

Nella prossima sottosezione applicheremo il metodo di Alastuey e Martin al LEG con un numero finito di piani per determinare il tipo di clustering compatibile con le equazioni gerarchiche di equilibrio.

Nella sottosezione 4.4.2 cercheremo di capire come e perchè le cose cambiano nel LEG con un numero infinito di piani.

Due piani

Consideriamo il caso di due piani: il piano $m = 0$ a $z = d/2$ ed il piano $m = 1$ a $z = -d/2$. Vogliamo capire quali informazioni possiamo ricavare dalle BGY (vedi le (4.36) con la \sum_{-h}^h sostituita da \sum_0^1) sull' andamento asintotico di $\rho_e(R|Q)$ dove $Q \equiv (0, 0, -d/2)$, come in figura 4.4.1 , per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Dimostreremo che sotto la debole ipotesi di clustering integrabile (e quindi considerando valida la regola di somma di carica), o le correlazioni troncate interpiano $\rho_T(R_1, Q)$, o quelle intrapiano

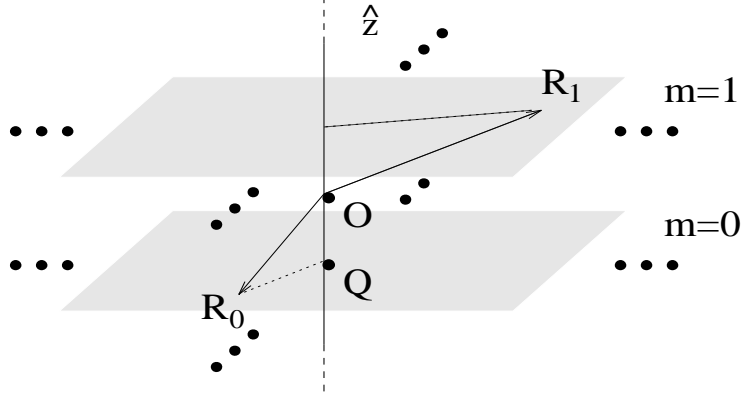


FIGURA 4.1: Mostra un diagramma schematico di un LEG con $N_p = 2$ in cui si illustra parte della notazione utilizzata nel testo.

$\rho_T(R_0, Q)$, devono avere un'andamento asintotico decrescente come o più lentamente di $1/|\mathbf{r}|^3$ per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$.

Riscriviamo l'equazione che si ricava per $n = 2$ dalle equazioni di equilibrio gerarchiche (4.36):

$$(\beta e^2)^{-1} \nabla_r \rho_T(R_m, Q) = \rho \mathbf{E}_{\parallel}(R_m|Q) + \mathbf{W}_m(\mathbf{r}) \quad , \quad (4.85)$$

dove $m = 0, 1$ ed abbiamo definito:

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_0(\mathbf{r}) &= \int d\bar{\mathbf{r}} \left[\frac{\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}}{|\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}|^3} [\rho_T(R_0, \bar{R}_0, Q) + \delta(\bar{\mathbf{r}}) \rho_T(R_0, Q)] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}}{(|\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}|^2 + d^2)^{3/2}} \rho_T(R_0, \bar{R}_1, Q) \right] \\ \mathbf{W}_1(\mathbf{r}) &= \int d\bar{\mathbf{r}} \left[\frac{\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}}{(|\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}|^2 + d^2)^{3/2}} [\rho_T(R_1, \bar{R}_0, Q) + \delta(\bar{\mathbf{r}}) \rho_T(R_1, Q)] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}}{|\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}|^3} \rho_T(R_1, \bar{R}_1, Q) \right] . \end{aligned}$$

Nel seguito assumeremo per le f.c.t., un decadimento integrabile all'infinito, cioè:

$$|\rho_T(R^1, \dots, R^n)| \leq \frac{M}{D^p} \quad , \quad (4.86)$$

con $D = \sup_{i,j} |R^i - R^j|$ per qualche $p > 2$; più avanti verranno utilizzate delle ipotesi di clustering più specifiche.

Sfruttando le simmetrie del sistema (vedi (S1), (S2) e (S3) nella sottosezione 4.2.2) e facendo il cambiamento di variabili $\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}} = \mathbf{r}'$ ricaviamo le seguenti proprietà

di simmetria per le f.c.t. a 3 punti:

$$\rho_T(R_0, \bar{R}_0, Q) \stackrel{(i)}{=} \rho_T((o, -\frac{d}{2}), (-\mathbf{r}', -\frac{d}{2}), (-\mathbf{r}, -\frac{d}{2})) \stackrel{(ii)+(iii)}{=} \rho_T(R_0, R'_0, Q) \quad (4.87)$$

$$\rho_T(R_0, \bar{R}_1, Q) \stackrel{(i)}{=} \rho_T((o, -\frac{d}{2}), (-\mathbf{r}', +\frac{d}{2}), (-\mathbf{r}, -\frac{d}{2})) \stackrel{(ii)+(iii)}{=} \rho_T(R_0, R'_1, Q) \quad (4.88)$$

$$\rho_T(R_1, \bar{R}_1, Q) \stackrel{(i)}{=} \rho_T((o, +\frac{d}{2}), (-\mathbf{r}', +\frac{d}{2}), (-\mathbf{r}, -\frac{d}{2})) \stackrel{(ii)+(iii)}{=} \rho_T(R_1, R'_0, Q) \quad (4.89)$$

$$\rho_T(R_1, \bar{R}_0, Q) \stackrel{(i)}{=} \rho_T((o, +\frac{d}{2}), (-\mathbf{r}', -\frac{d}{2}), (-\mathbf{r}, -\frac{d}{2})) \stackrel{(ii)+(iii)}{=} \rho_T(R_1, R'_1, Q) \quad , \quad (4.90)$$

dove nelle ultime uguaglianze delle prime due relazioni abbiamo sfruttato l' invarianza del sistema sotto rotazioni di π attorno a \hat{z} e nelle ultime uguaglianze delle ultime due relazioni abbiamo sfruttato l' invarianza del sistema sotto la simmetria centrale di centro O.

Sfruttando queste relazioni possiamo così riscrivere i \mathbf{W}_m :

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_0(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}' \left[\frac{\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}'|^3} [\rho_T(R_0, R'_0, Q) + \delta(\mathbf{r}')\rho_T(R_0, Q)] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mathbf{r}'}{(|\mathbf{r}'|^2 + d^2)^{3/2}} \rho_T(R_0, R'_1, Q) \right] \\ \mathbf{W}_1(\mathbf{r}) &= \int d\mathbf{r}' \left[\frac{\mathbf{r}'}{(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 + d^2)^{3/2}} [\rho_T(R_1, R'_1, Q) + \delta(\mathbf{r}')\rho_T(R_1, Q)] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}'|^3} \rho_T(R_1, R'_0, Q) \right] , \end{aligned}$$

che possono essere riscritte in forma più sintetica:

$$\mathbf{W}_m(\mathbf{r}) = \sum_{m'=0}^1 \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'} - Q) c(R_m, R'_{m'}, Q) \quad , \quad (4.91)$$

dove abbiamo indicato con $c(R, R', Q)$:

$$c(R'_{m'}, R_m, Q) = \rho_T(R'_{m'}, R_m, Q) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{m,m'} \rho_T(R_m, Q) \quad . \quad (4.92)$$

Ricordandoci la definizione di campo in eccesso (4.35), la relazione (4.23) tra $S_m(r|O)$ e $\rho_T(R_m, O)$ e la definizione di fattore di struttura statico di ciascun piano $S_m(\mathbf{r}) = S(R_m|Q)/\rho$ possiamo riscrivere le (4.85) in trasformata di Fourier rispetto alle variabili planari ²⁰:

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} [S_m(k) - \delta_{m,0}] &= -\rho v_{2D}(k) [e^{-|m|kd} S_0(k) + e^{-|m-1|kd} S_1(k)] \\ &\quad + 2\pi \rho \Delta_m(k) \end{aligned} \quad (4.94)$$

²⁰In termini della funzione di struttura statica $S_m(k|Q)$ avremmo trovato:

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} [S_m(k|O) - \rho \delta_{m,0}] &= -\rho v_{2D}(k) [e^{-|m|kd} S_0(k|O) + e^{-|m-1|kd} S_1(k|O)] \\ &\quad + 2\pi \rho^2 \Delta_m(k) \end{aligned} \quad (4.93)$$

dove $m = 0, 1$

dove $v_{2D}(k) = 2\pi/k$, $S_m(k)$ è la trasformata di Fourier bidimensionale di $S_m(r)$ ed abbiamo indicato con $\Delta_m(\mathbf{k})$ la trasformata di Fourier rispetto alle variabili planari \mathbf{r} di $(-i\mathbf{k}/2\pi\rho^2k^2) \mathbf{W}_m(\mathbf{r})$. Le equazioni (4.93) si possono riscrivere in forma più esplicita nel modo seguente (ricordandoci la definizione di vettore d' onda di Debye $K_D = 2\pi\rho\beta e^2$):

$$\begin{pmatrix} (1 + k/K_D) & e^{-kd} \\ e^{-kd} & (1 + k/K_D) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_1/k \\ S_0/k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_0 + 1/K_D \end{pmatrix} . \quad (4.95)$$

Che risolte rispetto ad S_m danno:

$$\frac{S_0(k)}{k} = \frac{(1 + k/K_D)(\Delta_0 + 1/K_D) - \Delta_1 e^{-kd}}{(1 + k/K_D)^2 - e^{-2kd}} , \quad (4.96)$$

$$\frac{S_1(k)}{k} = \frac{(1 + k/K_D)(\Delta_1) - (\Delta_1 + 1/K_D)e^{-kd}}{(1 + k/K_D)^2 - e^{-2kd}} . \quad (4.97)$$

Osserviamo che, dalla regola di somma di carica (4.37), risulta:

$$\lim_{k \rightarrow 0} S_m(k) = 0 \quad \forall m , \quad (4.98)$$

e quindi dalle (4.93):

$$\lim_{k \rightarrow 0} (\Delta_0(k) + 1/K_D) = \lim_{k \rightarrow 0} \Delta_1(k) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\sum_{m=0}^1 S_m(k)}{k} = \mathcal{L} , \quad (4.99)$$

da cui abbiamo anche:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \lim_{k \rightarrow 0} [\Delta_1(k) + (\Delta_0(k) + 1/K_D)] = \frac{1}{2K_D} + \frac{1}{2} \lim_{k \rightarrow 0} \sum_{m=0}^1 \Delta_m(k) , \quad (4.100)$$

e quindi dalle (4.96), (4.97):

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{S_m(k)}{k} = \frac{\mathcal{L}}{2} \quad \forall m . \quad (4.101)$$

Seguendo [10] per il caso del singolo piano dimostriamo ora che $\sum_{m=0}^1 \Delta_m(k) = o(1)$ per $k \rightarrow 0$ sotto opportune ipotesi di clustering sulle f.c.t..

Lemma 1 *Assumiamo che: (i) per $|x|$ grande $|x| \int dy |\rho(x, y, Q)| \leq M < \infty$ (dove x ed $y \in \mathcal{D}$ con \mathcal{D} il sottospazio di \mathbf{R}^3 costituito dai due piani); (ii) la condizione (4.86) valga per $p > 3$ e $n = 2, 3, 4$.*

Allora abbiamo che:

$$\sum_{m=0}^1 \Delta_m(\mathbf{k}) = o(1) \quad \text{per} \quad |\mathbf{k}| \rightarrow 0 . \quad (4.102)$$

Dimostrazione. Per l' ipotesi (i) possiamo scambiare gli integrali nei $\Delta_m(k)$ e riscriverli in termini delle d.p.e. come:

$$\Delta_m(k) = -i \frac{\mathbf{k}}{2\pi\rho^2k^2} \sum_{m'=0}^1 \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'} - Q) \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(R_m, R'_{m'}, Q) \quad . \quad (4.103)$$

Poichè dovremmo utilizzare le regole di somma multipolari che, come abbiamo mostrato nella sezione 4.3, si esprimono in modo semplice tramite le d.p.e., è utile riscrivere $c(R, R', Q)$ in termini delle d.p.e.. A questo scopo ridefiniamo $c(R, R', Q)$ aggiungendogli un termine che data l' asimmetria della forza $\mathbf{F}_{\parallel}(|R_m - R'_{m'}|) = \mathbf{F}_{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', |m - m'|) = -\mathbf{F}_{\parallel}(\mathbf{r}', \mathbf{r}, |m - m'|)$, non contribuisce ai \mathbf{W}_m

$$c(R_m, R'_{m'}, Q) = \rho_T(R_m, R'_{m'}, Q) + \delta_{m-m',0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_T(R_m, Q) + \delta_{m,0} \delta(\mathbf{r}) \rho_T(R'_{m'}, Q) \quad . \quad (4.104)$$

In generale, per $x, y \in \mathbf{R}^3$ vale:

$$\begin{aligned} c(x, y, O) &= \rho_T(x, y, O) + \delta(x - y) \rho_T(x, O) + \delta(x - O) \rho_T(y, O) = \\ &= \rho_T(x|y, O) - \rho \rho_T(x|y) - \rho \rho_T(x|O) \quad . \end{aligned} \quad (4.105)$$

Possiamo allora riscrivere l' ultimo integrale in (4.103) in questa forma:

$$\int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} [\rho_e(R_m|R'_{m'}, Q) - \rho \rho_e(R_m|R'_{m'}) - \rho \rho_e(R_m|Q)] \quad . \quad (4.106)$$

Ci rendiamo subito conto che per la regola di somma di carica (4.37) il primo termine dello sviluppo di Taylor per piccoli $|\mathbf{k}|$ di $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ non contribuisce a tale termine e quindi per l' ipotesi (i) neanche ad \mathcal{L} , cioè:

$$\int d\mathbf{r} \mathbf{W}_m(r) = \sum_{m'=0}^1 \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(|R'_{m'} - Q|) \int d\mathbf{r} c(R_m, R'_{m'}, Q) = 0 \quad \forall m \quad . \quad (4.107)$$

Per determinare il contributo ad \mathcal{L} del secondo termine dello sviluppo di Taylor per piccoli $|\mathbf{k}|$ di $e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, cioè:

$$-i \frac{\mathbf{k}}{2\pi\rho^2k^2} \sum_{m'=0}^1 \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'} - Q) \sum_{m=0}^1 \int d\mathbf{r} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} c(R_m, R'_{m'}, Q) \quad , \quad (4.108)$$

dobbiamo specificare ulteriormente il tipo di clustering del sistema. Utilizzando i risultati della proposizione 1 di sezione 4.3 (vedi anche Ref. [120]) ricaviamo che ammettendo secondo l' ipotesi (ii) del lemma 1, i seguenti andamenti:

$$|\rho_T(R^1, \dots, R^n)| \leq \frac{M}{D^p} \quad (4.109)$$

con $D = \sup_{i,j} |R^i - R^j|$ per qualche $p > 3$ ed $n = 2, 3$ e 4 , allora oltre alle regole di somma sulle funzioni di correlazione a 2 ed a 3 corpi è verificata la seguente regola di somma di dipolo di ordine 2²¹:

$$\sum_{m=0}^1 \int d\mathbf{r} \mathbf{r} \rho_e(R_m | R', Q) = 0 \quad , \quad (4.110)$$

da cui utilizzando la (4.104) (e anche la (4.41)) è immediato ricavare la seguente identità:

$$\sum_{m=0}^1 \int d\mathbf{r} \mathbf{r} c(R_m, R', Q) = 0 \quad . \quad (4.111)$$

Abbiamo allora dimostrato come al tendere di $k \rightarrow 0$ valga:

$$\sum_{m=0}^1 \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(R_m, R'_{m'}, Q) = o(k) \quad . \quad (4.112)$$

Per l' ipotesi (i) del lemma questo implica che:

$$\sum_{m'=0}^1 \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'} - Q) \sum_{m=0}^1 \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(R_m, R'_{m'}, Q) = o(k) \quad , \quad (4.113)$$

da cui segue l' asserto del lemma.

Possiamo adesso utilizzare il lemma dimostrato per calcolare il limite \mathcal{L} (vedi (4.100)):

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sum_{m=0}^1 \Delta_m(k) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathcal{L} = \frac{1}{2K_D} \quad . \quad (4.114)$$

Concludendo osserviamo che partendo dall' ipotesi di clustering:

$$|\rho_T(R^1, \dots, R^n)| \leq \frac{M}{D^p} \quad , \quad (4.115)$$

con $D = \sup_{i,j} |R^i - R^j|$ per qualche $p > 3$ ed $n \leq 4$, abbiamo dimostrato sfruttando le regole di somma di carica e di dipolo, che vale (vedi (4.101)):

$$\rho_T(k, d(m - \frac{1}{2}), Q) = \rho[S_m(k) - \delta_{m,0}] \xrightarrow{k \rightarrow 0} \rho \left[\frac{\mathcal{L}}{2} |\mathbf{k}| - \rho \delta_{m,0} \right] \quad \forall m \quad . \quad (4.116)$$

Da questa singolarità di ordine k per $k \rightarrow 0$ ricaviamo [100] che $\rho_T(R_m, Q)$ ha un termine di ordine $|\mathbf{r}|^{-3}$ nel suo sviluppo asintotico intorno a $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ ²². *Questo é in contraddizione con l'ipotesi di partenza (l' ipotesi (ii) del lemma 1).*

²¹Oltre a quella banale di ordine 1: $\sum_{m=0}^1 \int d\mathbf{r} \mathbf{r} \rho_e(R_m | Q) = 0$, vedi (4.41)

²²La trasformata di Fourier bidimensionale di $|\mathbf{k}|$ é $-1/2\pi|\mathbf{r}|^3$.

Abbiamo allora dimostrato che il clustering non può essere più veloce di $|\mathbf{r}|^{-3}$ per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, per almeno una tra le f.c.t. a 2, 3 e 4 corpi. Sfruttando il fatto che le f.c.t. a 3 ed a 4 corpi, è ragionevole pensare che decadano non più lentamente di quella a 2, concludiamo che il clustering per la funzione di correlazione troncata a due corpi non può essere più veloce di $1/r^3$.

Abbiamo così raggiunto il nostro scopo dimostrando che se assumiamo un clustering integrabile, cioè $|r^2 \rho_T(R_m, Q)| < M < \infty$ con $\forall m$ (e se vale la debole ipotesi (i) del lemma 1), allora $\rho_T(R_m, Q)$ (e quindi $S_m(r)$) deve decadere per $m=0$ e/o per $m=1$, come o più lentamente di $1/r^3$. Aggiungiamo inoltre che quando $\forall m$, $\lim_{k \rightarrow 0} \sum_{m=0}^1 \Delta_m(k) < \infty (\neq 0)$, lo sviluppo asintotico a grandi $|\mathbf{r}|$ di $S_m(r)$, contiene termini $\propto 1/r^3, \forall m$. In tal caso infatti (4.100) e (4.101) danno $\lim_{k \rightarrow 0} S_m(k)/k < \infty$.

Per quanto dimostrato nella sottosezione 4.4.1 sappiamo che [10] se eliminiamo il piano $m = 1$ allora $S_o(r)$ deve decadere come o più lentamente di $1/r^3$; questo fatto ci può suggerire che in presenza di entrambi i piani, il piano che necessariamente deve presentare un clustering non più veloce di $1/r^3$, sia quello su cui è fissata la carica ($m = 0$). Nel caso del singolo piano, a temperature sufficientemente alte (o densità sufficientemente basse) perchè valga l' approssimazione di Debye-Hückel, l' andamento asintotico per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ delle correlazioni intrapiano è proprio $1/|\mathbf{r}|^3$ ²³.

Tre piani

Analizziamo come abbiamo fatto nel caso dei due piani, un sistema composto da tre piani ($m = -1, 0, +1$). Vogliamo capire le conseguenze delle BGY (vedi le (4.36) con la \sum_{-h}^h sostituita da \sum_{-1}^1) sull' andamento asintotico di $\rho_T(R, Q)$ dove $Q \equiv (0, 0, 0) \equiv O$ per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Ci accorgeremo che, per quanto riguarda tale andamento, questo sistema è del tutto identico al sistema dei due piani; la differenza principale tra i due sistemi risiede nella maggiore simmetria di quello che ci accingiamo ad analizzare.

Procedendo esattamente come nel caso dei due piani scriviamo le equazioni gerarchiche in trasformata di Fourier rispetto alle variabili planari:

$$(\beta e^2)^{-1} [S_m(k) - \delta_{m,0}] = 2\pi \rho \Delta_m(k) - \rho v_{2D}(k) [e^{-|m+1|kd} S_1(k) + e^{-|m|kd} S_0(k) + e^{-|m-1|kd} S_1(k)] \quad , \quad (4.117)$$

$$m = -1, 0, 1$$

, dove, come al solito, abbiamo indicato con $v_{2D}(k) = 2\pi/k$ la trasformata di Fourier del potenziale $1/r$ non coulombiano per un sistema bidimensionale, con $S_m(k)$ la trasformata di Fourier rispetto alle coordinate planari del fattore di struttura statico

²³Il fattore di struttura statico $S(k)$, di un OCP in 2D studiato in RPA [97, 4], ha un termine di ordine dominante a grandi lunghezze d' onda uguale a quello del fattore di struttura ricavato in approssimazione di Debye-Hückel: $[1 + K_D/k]^{-1}$ dove $K_D = 2\pi\beta\rho e^2$ è l' inverso della lunghezza di schermo.

$S_m(r) = S(R_m|O)/\rho$ del sistema (vedi sottosezione 4.2.1) ed infine:

$$\Delta_m(k) = -i \frac{\mathbf{k}}{2\pi\rho^2 k^2} \sum_{m'=-1}^1 \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'}) \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(R_m, R'_{m'}, Q) \quad (4.118)$$

$$c(R'_{m'}, R_m, Q) = \rho_T(R'_{m'}, R_m, Q) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta_{m,m'} \rho_T(R_m, Q) \quad . \quad (4.119)$$

Le equazioni gerarchiche (4.117) si possono riscrivere in forma più esplicita nel modo seguente (ricordandoci che $K_D = 2\pi\rho\beta e^2$):

$$\begin{pmatrix} (1 + k/K_D) & e^{-kd} & e^{-2kd} \\ e^{-kd} & (1 + k/K_D) & e^{-kd} \\ e^{-2kd} & e^{-kd} & (1 + k/K_D) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} S_1/k \\ S_0/k \\ S_{-1}/k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \Delta_0 + K_D^{-1} \\ \Delta_{-1} \end{pmatrix} \quad (4.120)$$

Osserviamo che, dalla regola di somma di carica (4.37), risulta:

$$\lim_{k \rightarrow 0} S_m(k) = 0 \quad \forall m \quad , \quad (4.121)$$

e quindi dalle (4.117):

$$\mathcal{L} = \lim_{k \rightarrow 0} \Delta_{-1}(k) = \lim_{k \rightarrow 0} (\Delta_0(k) + 1/K_D) = \lim_{k \rightarrow 0} \Delta_1(k) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{\sum_{m=-1}^1 S_m(k)}{k} \quad (4.122)$$

da cui abbiamo anche:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{3} \lim_{k \rightarrow 0} [\Delta_{-1}(k) + (\Delta_0(k) + \rho/K_D) + \Delta_1(k)] = \\ &= \frac{1}{3K_D} + \frac{1}{3} \lim_{k \rightarrow 0} \sum_{m=-1}^1 \Delta_m(k) \quad . \end{aligned} \quad (4.123)$$

Risolvendo il sistema (4.120) rispetto alle $S_m(k)$ ci accorgiamo che il determinante della matrice dei coefficienti ha uno sviluppo asintotico a piccoli k che inizia con termini di ordine k^2 e non lineari in k come avevamo trovato nel caso dei due piani²⁴. Nonostante questo, procedendo come per i due piani troviamo ancora che i fattori di struttura statici parziali per ogni piano hanno un andamento proporzionale a k nel limite di grandi lunghezze d' onda. In particolare deve essere:

$$\frac{S_m(k)}{k} \xrightarrow{k \rightarrow 0} \alpha_m \mathcal{L} \quad , \quad (4.124)$$

dove gli α_m sono costanti diverse da zero²⁵ e tali che $\sum_{m=-1}^1 \alpha_m = 1$ è ancora una costante diversa da zero (tale proprietà è indipendente dall' aver fissato una carica

²⁴In generale, per N_p piani, tale sviluppo per $k \rightarrow 0$ inizia da termini di ordine k^{N_p-1} .

²⁵In particolare troviamo:

$$\alpha_1 = \alpha_{-1} = \frac{[1/K_D^2 + 3d/K_D + 2d^2]}{3/K_D^2 + 8d/K_D + 4d^2} \quad , \quad \alpha_0 = \frac{[1/K_D^2 + 2d/K_D]}{3/K_D^2 + 8d/K_D + 4d^2} \quad . \quad (4.125)$$

sul piano centrale, avremmo ottenuto lo stesso risultato prendendo $Q \equiv (0, 0, \pm 1)$ come si può facilmente intuire osservando il sistema in forma matriciale (4.120)).

Ripetendo gli argomenti usati nello studio del sistema di due piani, possiamo concludere, allora, che, anche in questo caso, per almeno un m (-1, 0, 1), $\rho_i(R_m, Q)$ non può decrescere per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ più rapidamente di $1/|\mathbf{r}|^3$. In altre parole anche per un sistema di tre piani l' unica regola di somma di multipolo che vale, è la prima, quella di carica; la regola di somma di dipolo di ordine maggiore di uno non può essere verificata.

Aumentando il numero di piani tale proprietà deve continuare a valere per sistemi con N_p comunque grande purchè **finito** (ed in assenza di condizioni al contorno cicliche sul primo e sull' ultimo piano). Questo fatto che vale indipendentemente dal valore dei parametri del sistema (ρ , β e d), e pertanto anche quando i fluidi di elettroni su i vari piani si trovano in fase di plasma, può essere spiegato osservando come, all' origine di tali lenti decadimenti, debbano esserci gli effetti provocati dalla limitatezza del sistema di cariche sullo schermo elettrostatico che si forma intorno alle cariche fissate: la mancanza di cariche oltre l' ultimo piano e prima del primo può far in modo che le cariche fissate abbiano, insieme alla loro nuvola di cariche schermanti, un momento di dipolo non nullo; in tal caso la proposizione 1 ci suggerisce un lento decadimento delle correlazioni di coppia.

4.4.2 Numero infinito di piani

Sia nel caso di due che in quello di tre piani abbiamo dimostrato come $S_m(k)$ abbia, per ogni m, un andamento lineare in k a piccoli k quando $\lim_{k \rightarrow 0} \sum_{m=0}^1 \Delta_m(k) < \infty$ e come presenti, quindi, una singolarità non analitica in $k = 0$. Nel caso dell' OCP in 3D sappiamo che $S(K)$ ha un comportamento analitico in $K = 0$ dovendo valere la regola di somma di Stillinger e Lovett [122, 123, 11] $\lim_{|K| \rightarrow 0} S(K) = |K|^2/4\pi\rho\beta e^2$, che equivale alla proprietà dell' inverso della funzione dielettrica $\varepsilon^{-1}(K)$ di annullarsi nel limite di piccoli numeri d' onda, ossia alla capacità del sistema di schermare completamente una qualunque distribuzione di carica esterna ²⁶.

Studieremo adesso il caso del LEG con $N_p = \infty$ o quello, che mostreremo essere equivalente, di un sistema con $N_p < \infty$ in cui si introducono condizioni al contorno periodiche nella direzione \hat{z} , su una lunghezza $L = N_p d$ (condizioni cicliche di Born-von Karman). Vogliamo mostrare come in questo caso sia possibile passare dal tipo di comportamento caratteristico dell' OCP in 2D, a quello caratteristico dell' OCP in 3D, quando passiamo da $d \rightarrow \infty$ a $d \rightarrow 0$ ($d \neq 0$).

A tale scopo analizzeremo i comportamenti delle funzioni di correlazione del sistema suddetto, sia nello spazio K nel limite di grandi lunghezze d' onda, che

²⁶Nella teoria della risposta lineare del fluido in 3D ad una carica esterna, abbiamo:

$$\varepsilon^{-1}(K) = 1 - 4\pi\rho\beta e^2 \frac{S(K)}{|K|^2} = 1 - \frac{K_D^2}{|K|^2} S(K) \quad (4.126)$$

nello spazio R nel limite di grandi separazioni tra le cariche.

Studiando il comportamento a piccoli numeri d'onda della BGY che lega la funzione di correlazione a due punti con quella a tre punti daremo una precisa interpretazione fisica della sua separazione in una parte contenente solo f.c.t. a 2 punti ed in un termine aggiuntivo $\Delta(K)$ contenente una opportuna combinazione delle f.c.t. a 2 ed a 3 corpi; separazione che abbiamo già incontrato nello studio del LEG con un numero finito di piani (vedi ad esempio l'equazione (4.93)) e che diventa naturale scrivendo le BGY in termini delle f.c.t.. Vedremo che trascurando il termine $\Delta(K)$ si ottiene per il fattore di struttura statico una espressione approssimata che in accordo con la regola di somma f (che sarà ricavata nella sezione 4.6 dalle equazioni dinamiche del sistema) riproduce esattamente i termini di ordine dominante a piccoli $|\mathbf{k}|$ dei modi di eccitazione collettiva del LEG trattato in RPA (vedi capitolo 3). Dimosteremo inoltre che quando nel sistema sono soddisfatte le regole di somma di carica e di dipolo (vedi sezione 4.3) $\Delta(K)$ non contribuisce al termine dominante di ordine k^2 nello sviluppo asintotico a piccoli k (d finito) di $S(k, 0)$. In questo caso ritroviamo per il LEG di infiniti piani una regola di somma analoga alla condizione di Stillinger-Lovett dei sistemi omogenei. Quando $k_z \neq 0$ vedremo che l'operazione di trascurare il termine $\Delta(K)$ non è giustificabile da opportune regole di somma e porta ad una violazione della regola di somma di elettroneutralità del LEG. Concluderemo osservando che il termine $\Delta(K)$ deve contenere contributi dalle correlazioni interpiano tra gli elettroni (e come vedremo nella sezione 4.6 dalle collisioni intrapiano tra le cariche).

Nello studio del LEG con un numero infinito di piani nello spazio R abbiamo trovato risultati esatti per il tipo di clustering soltanto nei due casi limite di $d \rightarrow \infty$ e $d \rightarrow 0$ con $d \neq 0$. Nel primo caso il LEG si riduce ad una serie di OCP in 2D isolati già trattati all'inizio della sottosezione 4.4.1. Nel secondo caso il LEG occupa tutto lo spazio in 3D e diventa un OCP in 3D con la dinamica delle cariche vincolata a rimanere ortogonale all'asse \hat{z} . Per il clustering in questo sistema dimosteremo che vale una proposizione simile a quella dimostrata da Alastuey e Martin in [10] che vieta il clustering di tipo algebrico nell'OCP in 3D omogeneo ed isotropo.

Le equazioni di equilibrio nel limite di $N_p = \infty$

Cerchiamo adesso la relazione di equilibrio che le BGY impongono al fattore di struttura statico del gas di elettroni stratificato $S(K) = \sum_m^{N_p} e^{-ik_z md} S_m(\mathbf{k})$ ²⁷; riscriviamo per il sistema del LEG la (4.36) per $n = 2$ dove immaginiamo di aver fissato una sola particella nell'origine O (cioè $Q \equiv O$):

$$(\beta e^2)^{-1} \nabla_{r_1} \rho_T(R^1, O) = \rho \mathbf{E}_{\parallel}(R^1|O) + \sum_m^{N_p} \int d\mathbf{r} \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R_m) [\rho_T(R^1, R_m, O) + \delta_{m,0} \delta(\mathbf{r}) \rho_T(R^1, O)] \quad (4.127)$$

²⁷Da ora in poi useremo $\sum_m^{N_p}$ per indicare la somma presa con l'indice m che scorre su tutti gli N_p piani del LEG. Il piano m -esimo sarà quello situato in $z = md$

Prendendo la trasformata di Fourier rispetto alle variabili planari \mathbf{r}_1 e ricordandoci la definizione di campo elettrico in eccesso (4.35) e il legame tra il contributo del piano m -esimo al fattore di struttura statico del sistema e la funzione di correlazione troncata a due punti (vedi (4.23) e nota 9), otteniamo:

$$(\beta e^2)^{-1}(S_m(k) - \delta_{m,0}) = -\rho v_{2D}(k) \sum_{m'}^{N_p} e^{-|m-m'|kd} S_{m'}(k) + 2\pi\rho\Delta_m(k) \quad . \quad (4.128)$$

Dove abbiamo chiamato $v_{2D}(k) = 2\pi/k$ la trasformata di Fourier del potenziale $1/r$ per un sistema bidimensionale ed abbiamo definito:

$$\Delta_m(k) = -i \frac{\mathbf{k}}{2\pi\rho^2 k^2} \sum_{m'}^{N_p} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'}) \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(R_m, R'_{m'}) \quad (4.129)$$

$$c(R_m, R'_{m'}) = \rho_T(R_m, R'_{m'}, O) + \delta_{m-m',0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_T(R_m, O) \quad . \quad (4.130)$$

Nello scrivere $\Delta_m(k)$ dalla (4.130) abbiamo usato le simmetrie del sistema ed il cambiamento di variabili $m - m_1 = m'$ e $\mathbf{r} - \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}'$, per riscrivere le funzioni di correlazione nel modo seguente: $\rho(R^1, R_m, O) = \rho(O, -R'_{m'}, -R^1) = \rho(R^1, R'_{m'}, O)$.

Possiamo naturalmente ridefinire $c(R, R')$ come:

$$c(R_m, R'_{m'}) = [\rho_T(R_m, R'_{m'}, O) + \delta_{m-m',0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_T(R_m, O)] + \delta_{m,0} \delta(\mathbf{r}) \rho_T(R'_{m'}, O) \quad , \quad (4.131)$$

infatti per la proprietà $\mathbf{F}_{\parallel}(|R_m - R'_{m'}|) = \mathbf{F}_{\parallel}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', |m - m'|) = -\mathbf{F}_{\parallel}(\mathbf{r}', \mathbf{r}, |m - m'|)$ e le simmetrie del sistema, il termine aggiunto non contribuisce a Δ_m . Questo è utile perchè ci permette di ricavare facilmente la seguente riscrittura di $c(R, R')$ in termini delle d.p.e. (attraverso le quali vengono facilmente espresse varie regole di somma):

$$c(R_m, R'_{m'}) = \rho_e(R_m | R'_{m'}, O) - \rho \rho_e(R_m | R'_{m'}) - \rho \rho_e(R_m | O) \quad . \quad (4.132)$$

Tornando alla (4.128) con $N_p = \infty$ è importante osservare come adesso, a differenza di quanto abbiamo fatto per il caso di due e tre piani, non siamo più autorizzati a passare attraverso la sommatoria infinita del primo termine del secondo membro quando prendiamo il limite $k \rightarrow 0$ di tale equazione. Questa differenza, tra il sistema con $N_p < \infty$ e quello con $N_p = \infty$, risulterà evidente se riusciamo a deconvolvere la sommatoria rispetto agli indici di piano; a tale scopo prendiamo la trasformata di Fourier anche lungo \hat{z} della (4.128) che, nel LEG, dove la dinamica delle particelle è vincolata sui vari piani, equivale ad applicare alla (4.128) l'operatore $\sum_m e^{-ik_z m d} \dots$. Questa operazione si può compiere in due modi diversi che portano però allo stesso risultato:

a. *Limite termodinamico sul numero dei piani.*

Consideriamo la (4.128) valida per il sistema finito di N_p piani. Applichiamo ad entrambi i membri l'operatore $\sum_m^{N_p} e^{-ik_z md}$, scambiamo le sommatorie finite nel primo e nel secondo termine del membro di destra e successivamente prendiamo il limite di $N_p \rightarrow \infty$ con $d = L/N_p$ costante finita diversa da zero (T-lim $_{N_p}$). Si ottiene così:

$$(\beta e^2)^{-1}(S(K) - 1) = -\rho \sum_{m=-\infty}^{\infty} v_{2D}(k) \Gamma_m(\mathbf{k}, k_z) S_m(\mathbf{k}) + 2\pi\rho\Delta(\mathbf{k}, k_z) \quad , \quad (4.133)$$

dove abbiamo definito (vedi (4.129)):

$$\begin{aligned} \Delta(K) &= \text{T-lim}_{N_p} \left[\sum_m^{N_p} e^{-ik_z md} \Delta_m(\mathbf{k}) \right] \\ &= -i \frac{\mathbf{k}}{2\pi\rho^2 k^2} \sum_{m'=-\infty}^{\infty} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'}) \left[\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-ik_z md} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(R_m, R_{m'}) \right] . \end{aligned} \quad (4.134)$$

Infine abbiamo definito:

$$\Gamma(K; \bar{z}) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-ik_z dm} e^{-k|md-\bar{z}|} = \frac{\sinh(k(d-\bar{z})) + e^{-ik_z d} \sinh(k\bar{z})}{\cosh(kd) - \cos(k_z d)} \quad , \quad (4.135)$$

$$\Gamma_m(K) \equiv \Gamma_m(\mathbf{k}, k_z) \equiv \Gamma(K; md) \quad . \quad (4.136)$$

Riconosciamo (vedi equazione (3.139)) allora in $v_{2D}(k)\Gamma(K; \bar{z})$ la trasformata di Fourier tridimensionale del potenziale dovuto ad una carica puntiforme di carica unitaria inserita nel LEG a $\mathbf{r} = 0$ e $z = \bar{z}$ (cioè $v(R) = \sum_m^{N_p} \delta(z - md) 1/(r^2 + (md - \bar{z})^2)^{-1/2}$); data la periodicità di $\Gamma(K, \bar{z})$ in z si può restringere \bar{z} all'intervallo $[0, d]$.

Nella (4.128) siamo riusciti a disaccoppiare completamente i vettori \mathbf{k} , ma i potenziali sui vari piani rimangono accoppiati dalla sommatoria nel primo termine del membro di destra; per disaccoppiarli usiamo la seguente identità [100, 16, 9]:

$$\Gamma(K; \bar{z}) = \frac{2k}{d} e^{-ik_z \bar{z}} \sum_Q e^{-iQz} \frac{1}{k^2 + (k_z + Q)^2} \quad (4.137)$$

$$Q = \frac{2\pi n}{d} \quad , \quad n \text{ intero qualunque} \quad ,$$

da cui ricaviamo che:

$$\Gamma_m(K) v_{2D}(k) = \Gamma(K; 0) v_{2D}(k) e^{-ik_z md} = v(K) e^{-ik_z md} \quad , \quad (4.138)$$

dove nell'ultimo termine ritroviamo il potenziale di singola particella $v(K)$ usato nel capitolo 3 per scrivere l'Hamiltoniana del LEG ²⁸:

$$v(K) = v_{2D}(k) \left(\frac{\sinh(kd)}{\cosh(kd) - \cos(k_z d)} \right) \quad . \quad (4.139)$$

²⁸Osserviamo come valgano per $v(K)$ i seguenti limiti caratteristici del LEG:

- (i) $v(K) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} v_{2D}(k)$; $v(K) \xrightarrow{d \rightarrow \infty} v_{2D}(k)$
- (ii) $v(K) \xrightarrow{|K| \rightarrow 0} v_{3D}(K)/d = 4\pi/(|K|^2 d)$

Possiamo allora riscrivere il primo termine del secondo membro della (4.133), così:

$$-\rho v_{2D}(k)\Gamma(K;0)\sum_{m=-\infty}^{\infty}e^{-ik_zmd}S_m(\mathbf{k})\equiv-\rho v_{2D}(k)\Gamma(K;0)S(\mathbf{k},k_z)\quad (4.140)$$

Indicando con $K_D = 2\pi\rho\beta e^2$ il vettore d'onda di Debye, la (4.133) si riscrive allora nel T-lim $_{N_p}$:

$$v(K)S(K) = 2\pi\left(\frac{1}{K_D} - \frac{S(K)}{K_D} + \Delta(\mathbf{k},k_z)\right)\quad (4.141)$$

b. Condizioni cicliche di Born-von Karman lungo \hat{z} .

Imponiamo adesso le condizioni al contorno periodiche lungo \hat{z} su una lunghezza $L = N_p d$. In questo caso avremo:

$$v_{2D}e^{-|z|k} = \frac{1}{L}\sum_{k_z}e^{ik_z z}\frac{4\pi}{k^2+k_z^2}\quad (4.142)$$

dove k_z include tutte le onde piane con $k_z = 2\pi n/L$ ed n qualunque intero. Applicando al primo termine del secondo membro della (4.128) la trasformata $\sum_m^{N_p}e^{-ik_zmd}$, e sfruttando la (4.142) si ottiene:

$$\sum_m^{N_p}\sum_{m'}^{N_p}e^{-ik_z(m-m')d}[v_{2D}e^{-|m-m'|kd}]e^{-ik_zm'd}S_{m'}(\mathbf{k}) = \quad (4.143)$$

$$= \frac{1}{L}\sum_{k'_z}^{N_p}\sum_m^{N_p}\sum_{m'}^{N_p}\left[e^{i(k'_z-k_z)(m-m')d}\frac{4\pi}{k^2+k'_z{}^2}\right]e^{-ik_zm'd}S_{m'}(\mathbf{k}) \quad (4.144)$$

$$= \frac{1}{L}\sum_{k'_z}^{N_p}\left[\sum_m^{N_p}e^{i(k'_z-k_z)md}\right]S(\mathbf{k},k'_z)\frac{4\pi}{k^2+k'_z{}^2}\quad (4.145)$$

dove $k'_z = (2\pi/L)p$ con p intero ed abbiamo usato $S(\mathbf{k},k_z) \equiv \sum_m^{N_p}e^{-ik_zmd}S_m(\mathbf{k})$. La somma su m tra parentesi quadrate è diversa da zero solo se $k'_z - k_z$ è un vettore del reticolo reciproco $Q = (2\pi/d)q$ con q intero (nel qual caso vale esattamente N_p), inoltredalla definizione del fattore di struttura statico risulta $S(\mathbf{k},k_z+Q) = S(\mathbf{k},k_z)$ per un generico vettore del reticolo reciproco Q . Allora dalla (4.145) ricaviamo:

$$(4.145) = \frac{N_p}{L}\sum_Q\sum_{k'_z}\delta_{k'_z,k'_z}S(\mathbf{k},k'_z)\frac{4\pi}{k^2+k'_z{}^2} \quad (4.146)$$

$$= \frac{4\pi}{d}\left(\sum_Q\frac{1}{k^2+(k_z+Q)^2}\right)S(\mathbf{k},k_z) \quad (4.147)$$

$$= v_{2D}(k)\Gamma(K;0)S(\mathbf{k},k_z)\quad (4.148)$$

dove nell' ultimo passaggio abbiamo usato la (4.137). Chiaramente (4.148) ci riporta alla (4.141).

È noto che i sistemi fisici reali consistono di un numero finito di piani ed hanno pertanto piani-liberi al contorno, ossia piani su cui non è imposta alcuna speciale condizione. Quanto appena dimostrato ci autorizza, comunque, ad utilizzare, indifferentemente, il caso più realistico del sistema con piani-liberi al contorno nel limite termodinamico sul numero di piani, o quello, artificiale, ma più conveniente matematicamente [9], in cui si immagina il primo piano coincidente con l' ultimo [104].

Per tornare, infine, alla differenza tra il LEG con infiniti piani e quello con un numero finito di piani, possiamo, ad esempio, osservare come per $k_z = 0$ si ricavi dalla (4.141):

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{4\pi}{d} \left[\frac{S(\mathbf{k}, 0)}{k^2} \right] = \frac{2\pi}{K_D} + \lim_{k \rightarrow 0} 2\pi[\Delta(\mathbf{k}, 0) - S(\mathbf{k}, 0)] \quad . \quad (4.149)$$

L' analoga espressione per un sistema composto da un numero finito N_p di piani, che è stata utilizzata nello studio del LEG a due ed a tre piani, risulta:

$$\lim_{k \rightarrow 0} 2\pi N_p \left[\frac{S(\mathbf{k}, 0)}{k} \right] = \frac{2\pi}{K_D} + \lim_{k \rightarrow 0} 2\pi[\Delta(\mathbf{k}, 0) - S(\mathbf{k}, 0)] \quad . \quad (4.150)$$

Concludiamo osservando che la (4.149) sarà utilizzata nella prossima sezione per determinare la *regola di somma di Stillinger-Lovett* per il LEG con infiniti piani.

Limite di grandi lunghezze d' onda

Vedremo adesso, quali informazioni possiamo ricavare dalla (4.141), sull' andamento asintotico della $S(K)$ a grandi lunghezze d' onda. In particolare analizzeremo la (4.141) a grandi lunghezze d' onda nei due regimi in cui $kd \ll 1$ o in cui $kd \gg 1$.

Nel caso in cui $kd \ll 1$ studieremo i due casi $k_z = 0$ con $k \rightarrow 0$ e $k_z \neq 0$ con $k \rightarrow 0$ *prima* e k_z piccolo *dopo* e riusciremo ad isolare da $S(K)$ rispettivamente il contributo del plasmone ottico e di quello acustico caratteristici del LEG trattato in RPA (vedi tabella 3.1 nel capitolo 3).

Questo tipo di andamenti asintotici della funzione di struttura statica del sistema sono previsti dalla *regola di somma f*, che per il LEG classico, con una funzione di struttura dinamica $S(K; \omega)$, si scrive (vedi l' analisi sulla dinamica del sistema nella sezione 4.6):

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega^2 S(K; \omega) = \frac{k^2}{\beta m} \quad . \quad (4.151)$$

Quando possiamo assumere che la (4.151) è soddisfatta a piccoli k dalla sola eccitazione del plasmone $\omega_o(K)$ e cioè che $S(K; \omega)$ si può approssimare in questo limite con:

$$S(K; \omega) = \pi S(K) [\delta(\omega - \omega_o(K)) + \delta(\omega + \omega_o(K))]. \quad (4.152)$$

Come sappiamo questa approssimazione (che esprime l' assenza di smorzamento e quindi la conservazione delle correnti sui vari piani, per $k \rightarrow 0$; e se considerata valida ad ogni k costituisce quella che viene chiamata la approssimazione di singolo modo, SMA) è giustificata nel LEG quantistico (vedi Ref. [7]) dove gli effetti di scattering multiplo (che coinvolgono più di una coppia elettrone-buca e contribuiscono alla regola di somma f ad ordini $\propto k^4$) [94] sui piani ed i plasmoni di energia maggiore di quelli previsti dall' RPA [89] non sono rilevanti agli ordini più bassi in k per k piccolo.

Nel caso del LEG classico tale approssimazione è corretta solo nel caso $k_z = 0$ con $kd \ll 1$. In questo caso ci aspettiamo dallo studio delle eccitazioni collettive nel LEG in RPA (vedi capitolo 3) un plasmone ottico con un termine dominante nel limite di piccoli k costante in k , e quindi di un ordine superiore rispetto alla costante di smorzamento collisionale del plasmone (la larghezza di riga γ_c dell' eccitazione di plasma discussa nella sezione 3.3)²⁹ che come sappiamo è $\propto k$ per $k \rightarrow 0$. Nel regime in cui $kd \ll 1$ gli effetti delle collisioni elettrone-elettrone diventano importanti quando $k_z \neq 0$. In tal caso infatti γ_c ed il plasmone acustico sono dello stesso ordine a piccoli k [98, 124].

Isolando i termini dei plasmoni previsti dall' RPA, in $S(K)$, vedremo come la correzione a tali termini, che contiene, inevitabilmente, i contributi delle funzioni di correlazione a tre corpi (ed è costituita essenzialmente dalla $\Delta(K)$ definita in (4.134)), si annulli, nel caso di $k_z = 0$ e $k \rightarrow 0$, se supponiamo valide le regole di somma di carica e di dipolo sulle d.p.e. a due ed a tre corpi.

In sezione 4.6 ci accorgeremo però, che appena il vettore d' onda K ha una componente ortogonale ai piani finita, tale correzione, in cui sono nascosti gli accoppiamenti multipolari tra gli elettroni in piani diversi, ci suggerisce l' esistenza di eccitazioni a frequenza diversa dei comuni plasmoni acustici previsti dall' RPA. In sezione 4.6 dimostreremo che in questo caso i plasmoni dell' RPA insieme alle eccitazioni collisionali ed alle eccitazioni di singola particella non sono sufficienti a soddisfare contemporaneamente la regola di somma f (cioè il primo momento dello spettro di dissipazione densità-densità) ed il primo momento dello spettro di dissipazione corrente-corrente, agli ordini dominanti nel limite di grandi lunghezze d' onda.

Nel caso, meno interessante, in cui $kd \gg 1$ troviamo che nel limite di grandi lunghezze d' onda, ottenuto mandando prima $d \rightarrow \infty$ e poi $k \rightarrow 0$, ogni piano si scorre da gli altri e tende a comportarsi come un OCP in 2D isolato.

a. Il limite $kd \ll 1$

Riscriviamo la (4.141) isolando il contributo della regola di somma f, nel modo seguente:

$$S(k, k_z) = \frac{k^2}{m\beta\omega_o^2(k, k_z)} + \frac{2\pi e^2 k^2 \Delta(k, k_z)}{\omega_o^2(k, k_z)}, \quad (4.153)$$

²⁹La costante di smorzamento di Landau non contribuisce agli ordini dominanti in $k \rightarrow 0 \forall k_z$ poichè come abbiamo visto in sezione 3.3 decade esponenzialmente in tale limite

con:

$$\omega_o^2(k, k_z) = \omega_p^2 \frac{(kd)}{2} \left(\frac{\sinh(kd)}{\cosh(kd) - \cos(k_z d)} \right) + k^2 s^2 \quad (4.154)$$

$$= \bar{\omega}_o^2 + k^2 s^2, \quad (4.155)$$

dove abbiamo chiamato $\omega_p = \sqrt{4\pi\rho e^2/dm}$ la frequenza di plasma di un gas di elettroni in 3D, omogeneo, con densità ρ/d ; $\bar{\omega}_o^2 = (\rho e^2/m)k^2 v(K)$ ³⁰, come si verifica facilmente ricordandosi la definizione (4.139); ed infine abbiamo indicato con $s = \sqrt{1/\beta m}$ la velocità isoterma del suono in un gas ideale classico, in parziale accordo con il modello elettro-idrodinamico con cui Fetter affronta il LEG in [9] ³¹.

Nel regime $kd \ll 1$ valgono i seguenti sviluppi asintotici:

$$\bar{\omega}_o(k \rightarrow 0, k_z = 0) = \omega_p \left(1 + \frac{1}{24}(kd)^2 + \dots \right) \quad (4.156)$$

$$\bar{\omega}_o(k \rightarrow 0, k_z \neq 0) = \omega_p k \sqrt{\frac{d^2/2}{1 - \cos(k_z d)}}. \quad (4.157)$$

Questi mostrano come, nel limite di grandi lunghezze d'onda, il termine $\bar{\omega}_o(K)$ (4.155) isolato da $S(K)$ abbia esattamente gli stessi andamenti asintotici previsti dall' RPA per il plasmone ottico $\omega_{pl}(k, k_z = 0)$ e per il plasmone acustico $\omega_{pl}(k, k_z \neq 0)$ del LEG nel regime in cui $kd \ll 1$, mostrati in tabella 3.1. Il primo termine isolato nel membro di destra di (4.153) coincide, nel limite $k \rightarrow 0$ con la regola di somma sulla compressibilità (3.57) quando si prende come compressibilità \mathcal{K} del sistema interagente, quella del sistema non interagente \mathcal{K}^o .

Vediamo adesso quando e sotto quali condizioni, l' ipotesi di poter trascurare, nella (4.153), il termine contenente $\Delta(K)$, è accettabile o meno:

a. Caso $k_z = 0$.

Vediamo quali sono le informazioni che possiamo ricavare sull' andamento a grandi lunghezze d'onda del termine correttivo in (4.153) ossia della funzione $\Delta(K)$, dalle regole di somma multipolari. Ricordandoci la definizione (4.132) per la $c(R, R')$ abbiamo:

³⁰Questa relazione di dispersione è stata trovata da Olego ed al. [106] in buono accordo con i loro risultati sperimentali sulla frequenza di plasma come funzione di kd per due valori vicini di k_z

³¹ Il parziale accordo deriva dal fatto che Fetter trova un' espressione per il plasmone nel LEG uguale alla (4.154) se mettiamo al posto di s la velocità del suono adiabatica. Un gas bidimensionale di fermioni di massa m e spin- $\frac{1}{2}$ con densità ρ , pressione p , temperatura T ed entropia S , ha una velocità del suono isoterma s data da $s^2 = m^{-1}(\partial p/\partial \rho)_T$ che acquista, ad alte e basse temperature, i valori limiti, rispettivamente, $\sqrt{1/\beta m}$ e $\rho\pi\hbar^2/m^2 = v_F^2/2$. La velocità del suono adiabatica s_S è data analogamente da $s_S^2 = m^{-1}(\partial p/\partial \rho)_S$ e risulta $s_S = 2p/\rho m$; nei limiti di alta temperatura $s = s_S/2$ mentre nel limite di bassa temperatura $s = s_S$.

Come abbiamo avuto già modo di osservare, la teoria idrodinamica (in generale ci aspettiamo il comportamento idrodinamico nel limite di $\omega \rightarrow 0$ e $k \rightarrow 0$) dà risultati equivalenti all' RPA se la compressibilità del fluido o il termine di pressione idrodinamica è scelto empiricamente; Fetter assume come termine di pressione quello di un gas di Fermi ideale.

(i) La regola di somma di carica sulle d.p.e. a due e tre corpi (4.37) ci dice che:

$$\sum_m \int d\mathbf{r} c(R_m, R'_m) = 0 \quad . \quad (4.158)$$

(ii) La regola di somma di dipolo sulle d.p.e. a due e tre corpi (4.41) ci dice che:

$$\sum_m \int d\mathbf{r} \mathbf{r} c(R_m, R'_m) = 0 \quad . \quad (4.159)$$

(iii) Le regole di somma di carica e di dipolo insieme, ci dicono che per $k \rightarrow 0$:

$$\sum_m \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} c(R_m, R'_m) = \sum_m \int d\mathbf{r} [e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} - 1 + i\mathbf{k}\mathbf{r}] c(R_m, R'_m) = o(k) \quad (4.160)$$

Da tali proprietà, ricordandoci la definizione della $\Delta(K)$ in funzione della $c(R, R', 0)$ ricaviamo che:

$$\Delta(\mathbf{k}, 0) = \sum_m \Delta_m(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} 0 \quad . \quad (4.161)$$

Questa proprietà ci permette di determinare per il LEG di infiniti piani una regola di somma analoga alla condizione di Stillinger-Lovett dei sistemi omogenei³². Dalla (4.149) sfruttando le (4.38), (4.160) ricaviamo:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \left[\frac{S(\mathbf{k}, 0)}{k^2} \right] = l_D^2 \quad , \quad (4.162)$$

dove abbiamo indicato con l_D la lunghezza di Debye definita come il rapporto della velocità termica v_{te} degli elettroni e della frequenza di plasma ω_p del sistema tridimensionale con densità equivalente ρ/d , cioè $l_D = v_{te}/\omega_p = \sqrt{(1/\beta m)(dm/4\pi\rho e^2)}$. Chiamando $S_{tot}(\mathbf{r}) = \sum_m S_m(\mathbf{r})$ l'antitrasformata di $S(\mathbf{k}, 0)$ rispetto alle variabili planari, ci accorgiamo allora che S_{tot} soddisfa una regola di somma identica (a parte per la costante moltiplicativa $2/d$ nel primo membro della (4.149)) a quella soddisfatta dalla funzione di struttura di un OCP bidimensionale con interazione tra le particelle $\propto -\ln(|\mathbf{r}_{i,j}|/r_o)$ (dove r_o è una costante con le dimensioni di una lunghezza). Tale regola di somma è nota sotto il nome di *condizione di Stillinger-Lovett sul secondo-momento* [122, 123, 11]. La regola di somma (4.162) può essere riscritta in altre due forme equivalenti. La prima si ricava dalla (4.162) attraverso il teorema di convoluzione delle trasformate di Fourier:

$$-\frac{2\rho\beta e^2}{d} \int d\mathbf{r}' \int d\mathbf{r} \ln\left(\frac{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|}{r_o}\right) S_{tot}(\mathbf{r}') = 1 \quad . \quad (4.163)$$

³²Carnie e Chan hanno generalizzato la condizione di Stillinger-Lovett sul secondo momento a sistemi inomogenei [125, 126]; noi continueremo comunque a chiamare tale condizione, anche per il sistema inomogeneo del LEG, come *regola di somma di Stillinger-Lovett sul secondo-momento*.

Alternativamente, espandendo $S(\mathbf{k}, 0)$ al secondo ordine in \mathbf{k} per k piccolo ed usando la simmetria cilindrica, per cui $S_{tot}(\mathbf{r}) = S_{tot}(r)$ (o anche $S(\mathbf{k}, 0) = S(k, 0)$), possiamo scrivere:

$$\rho\beta e^2 \int d\mathbf{r} |r^j|^2 S_{tot}(\mathbf{r}) = \frac{\rho\beta e^2}{2} \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}|^2 S_{tot}(\mathbf{r}) = -\frac{d}{2\pi} \quad , \quad j = 1, 2 \quad . \quad (4.164)$$

Dove abbiamo indicato con r^j la componente cartesiana j -esima ($j = 1, 2$) di \mathbf{r} . Questa ultima riscrittura della condizione di Stillinger-Lovett giustifica la definizione *condizione di secondo-momento* fornendo per il secondo-momento della S_{tot} il valore universale $-d/2\pi$.

Una qualunque delle equazioni (4.162)-(4.164) è equivalente alla proprietà, dell'inverso della funzione dielettrica $\varepsilon^{-1}(\mathbf{k})$, di annullarsi nel limite di piccole lunghezze d'onda. Questo segue dalla ben nota relazione tra la funzione dielettrica e quella di struttura ottenuta dalla risposta lineare di un fluido ad una debole perturbazione esterna, che nel caso del sistema che stiamo studiando si può scrivere:

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{k}) = 1 - 2\pi\beta e^2 \frac{2 S(\mathbf{k}, 0)}{d |\mathbf{k}|^2} \quad . \quad (4.165)$$

Possiamo osservare a questo punto come le due regole di somma di carica e di Stillinger-Lovett, siano soggette a diverse interpretazioni fisiche: la regola di somma di carica che, come abbiamo visto al primo capitolo, vale sotto l'ipotesi di clustering integrabile delle ρ_T , si può interpretare come la capacità di schermo di una particella test presa tra quelle costituenti il sistema. La condizione di Stillinger-Lovett invece riguarda le proprietà di schermo di cariche prova diverse dalle cariche del sistema. Utilizzando la teoria della risposta lineare si può dimostrare come tale condizione sia certamente soddisfatta da sistemi capaci di schermare una qualunque distribuzione di carica esterna. Ci aspettiamo che la condizione di Stillinger-Lovett fallisca per quei sistemi incapaci di schermare una qualunque distribuzione di carica esterna (vedi il caso dei due, tre piani).

b. Caso $k_z \neq 0$

In questo caso il limite di grandi lunghezze d'onda deve essere preso mandando prima $k \rightarrow 0$ e dopo $k_z \rightarrow 0$. In questo limite le regole di somma multipolari non ci danno nessuna informazione sull'andamento di $\Delta(K)$.

È importante osservare però che l'approssimazione di trascurare $\Delta(K)$ in (4.153) $\forall k_z$ nel limite di $k \rightarrow 0$ porta nel LEG classico alla violazione della regola di somma di carica: trascurando $\Delta(K)$ e ricordandoci la (4.27), possiamo determinare ad esempio $S_o(k \rightarrow 0)$:

$$S_o(k \rightarrow 0) = \frac{k^2}{\beta m} \int_{-\pi/d}^{-\pi/d} \frac{dk_z}{2\pi/d} \omega_0(\mathbf{k}, k_z)^{-2} \quad (4.166)$$

$$= 1 - \frac{(d\omega_p)^2}{\sqrt{(d\omega_p)^2(4s^2 + (d\omega_p)^2)}} + O(k^2) \quad . \quad (4.167)$$

Questo risultato mostra come $S_o(k)$ violi la regola di somma di carica poichè $S_o(k \rightarrow 0) \neq 0$ ³³ rendendo inaccettabile l' ipotesi di poter trascurare nel limite di grandi lunghezze d'onda il termine $\Delta(K)$ in (4.153).

Nel caso del LEG degenerare possiamo assumere che la (4.151) sia soddisfatta agli ordini dominanti in k per k piccolo dal solo contributo del plasmone (4.152). La regola di somma di carica in questo caso non è violata se calcoliamo $S_o(k \rightarrow 0)$ dalla (4.27) prendendo $S(k \rightarrow 0, k_z) = (k^2/2m)\omega_{deg}^{-1}(K)$ con $\omega_{deg}^2(k, k_z)$ dato da (4.154) con $s = (3/4)v_F^2$. Con tale calcolo Miesenböck e Tosi [7] hanno trovato per il fattore di struttura del singolo piano $S_o(k)$ un andamento lineare in k a piccoli k del tutto analogo a quello dell' OCP bidimensionale con interazioni $1/r$. Ricordiamo a questo proposito che il comportamento di un OCP bidimensionale con interazioni $1/r$ in approssimazione di Debye-Hückel [112] (che sarà discusso a pag. 90) è:

$$S^{2D}(k \rightarrow 0) = \frac{k}{2\pi\rho\beta e^2} = \frac{k}{K_D} . \quad (4.168)$$

Osserviamo inoltre che studiando la dinamica del sistema troveremo che il primo termine del secondo membro di (4.153), non è in grado, da solo, di esaurire la *regola di somma sul terzo momento* della funzione di struttura dinamica rispetto alla frequenza.

Queste osservazioni ci suggeriscono allora, in accordo con [89], che il termine $\Delta(K)$ potrebbe portare un contributo non banale agli ordini dominanti della funzione di struttura statica nel limite di grandi lunghezze d' onda, determinando così la nascita di modi di eccitazioni collettive, in aggiunta al plasmone acustico $\bar{\omega}_o(K)$ di (4.157), sostenuti dalle interazioni tra elettroni di piani diversi (interplanari).

Osserviamo infine che per $k_z \neq 0$, come anticipato nell' introduzione a questa sottosezione e come dimostreremo nella sottosezione 4.6, trascurare $\Delta(K)$ nel limite di grandi lunghezze d' onda in (4.153) (ossia assumere che il comportamento a grandi lunghezze d' onda del fattore di struttura statico si possa determinare considerando la regola di somma f (4.151) soddisfatta esattamente a piccoli k dall' eccitazione del plasmone (4.152) con ω_o dato da (4.154)) significa trascurare gli effetti delle collisioni elettrone-elettrone sui piani del LEG.

b. Il limite $kd \gg 1$

Poichè il potenziale generato sul generico piano m da un elettrone fissato sul piano $m = 0$ è dato da $v_{2D}e^{-|m|kd}$, è chiaro che, nel regime che stiamo studiando, ciascun piano sarà poco influenzato dalla presenza degli altri. Questo fatto è messo bene in evidenza dal fatto che, prendendo il limite $kd \gg 1$ nella (4.128), la sommatoria al secondo membro che accoppiava tra loro i diversi piani tramite il potenziale di coppia, si disaccoppia completamente dando per ogni m :

$$(\beta e^2)^{-1}(S_m(k) - \delta_{m,0}) = -\rho v_{2D}(k)S_m(k) + 2\pi\rho\Delta_m(k) . \quad (4.169)$$

³³Ricordiamo che nel LEG la condizione di elettroneutralità si scrive: $\rho \int d\mathbf{r}(g_m(r) - 1) = -\delta_{m,0}$ da cui ricaviamo $S_m(k) - \delta_{m,0} = \rho \int d\mathbf{r}(g_m(r) - 1)e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \xrightarrow{k \rightarrow 0} -\delta_{m,0}$ da cui infine $S_m(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} 0 \forall m$.

Per determinare da queste equazioni l'andamento a piccoli k dei fattori di struttura statici dei vari piani, utilizziamo la regola di somma di carica per cui $S_m(k \rightarrow 0) = 0$, $\forall m$; troviamo così:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \frac{S_m(k)}{k} = \delta_{m,0} \frac{1}{K_D} + \Delta_m(k) \quad . \quad (4.170)$$

Dal confronto con la (4.168) ci accorgiamo che per $m = 0$, il primo termine del membro di destra coincide con quello che avremmo ottenuto nello stesso limite per la funzione di struttura statica di un OCP bidimensionale classico con interazione $1/r$ in approssimazione di Debye-Hückel.

Naturalmente ci aspettiamo che le correzioni dalle funzioni di correlazione a più di due corpi in $\Delta_m(k)$ si comportino nel limite di grandi lunghezze d'onda (in cui per rimanere nel regime di interesse siamo costretti a prendere $d \rightarrow \infty$) come nel caso del singolo piano per il quale vale la (4.168). Possiamo dire allora in generale che:

$$\Delta(k) \xrightarrow{k \rightarrow 0} C \quad , \quad (4.171)$$

dove $C = 0$ ad alte temperature, quando vale l'approssimazione di Debye-Hückel e $C \neq 0$ quando il piano ha un dipolo non nullo rispetto alle d.p.e. a due ed a tre corpi (come si vede dalla (4.129) e dalla (4.132)).

Tipo di clustering compatibile con le equazioni di equilibrio

Per il LEG nel T-lim, nel T-lim $_{N_p}$ e nel limite $kd \ll 1$ abbiamo trovato che $S(k, 0)$ soddisfa la condizione di Stillinger-Lovett (4.162) (se ammettiamo la validità delle regole di somma di carica e di dipolo). In tal caso data l'analiticità di $S(k, 0)$ in \mathbf{k} a $k = 0$ non è possibile dedurre (come avevamo precedentemente fatto nel caso di un numero finito di piani ³⁴) la presenza di termini algebrici nello sviluppo di $S_{tot}(r)$ a grandi r .

Allo scopo di ricavare condizioni su i comportamenti asintotici degli $S_m(r)$ a grandi r per fissato m , compatibili con le BGY, è allora conveniente lavorare sullo spazio diretto. A questo scopo seguiremo un procedimento analogo a quello usato da Ph.A.Martin [10] per il caso particolare di un OCP in 3D con particelle interagenti con potenziale Coulombiano ³⁵. In questo caso la località dell'equazione di Poisson determina un decadimento a grandi $|R|$ della componente radiale del campo più lento di quello della densità di carica quando quest'ultimo si supponga algebrico. Martin dimostra che tale condizione è incompatibile con quelle che si ricavano confrontando

³⁴Dal confronto delle (4.149) e (4.150) ricaviamo come la regola di somma di Stillinger-Lovett si modifica passando dal LEG con un numero finito di piani a quello con un numero infinito di piani.

³⁵La particolarità del caso Coulombiano (con le linee di forza confinate nello spazio dove è confinata la dinamica delle cariche) risiede nel fatto che il Coulombiano è l'unico potenziale a lungo raggio a rendere compatibile con la struttura delle BGY, una legge di decadimento a grandi r delle correlazioni più veloce di una qualunque potenza inversa di r .

gli andamenti asintotici a grandi $|R|$ dei vari termini delle BGY. Egli conclude allora che le f.c.t a grandi $|R|$ devono decadere più velocemente di qualunque potenza inversa di $|R|$ (vedi proposizione 1 in [10]).

In questa sottosezione applicheremo tale metodo al LEG nel T-lim nel T-lim $_{N_p}$ quando $d \rightarrow 0$ ($d \neq 0$). In tal caso infatti a differenza del caso di d finito qualunque, ritroviamo una equazione di Poisson locale.

Il LEG con $d \rightarrow \infty$ si comporta come una serie di piani disaccoppiati (isolati). Nella sottosezione 4.4.1 abbiamo visto che è possibile dimostrare da una analisi delle BGY nello spazio dei \mathbf{k} [10] che le funzioni di correlazione di un OCP in 2D devono decadere per $r \rightarrow \infty$ come o più rapidamente di $1/r^3$.

Il clustering in un LEG con $d \neq 0$ e finito sarà studiato nella prossima sottosezione su un modello specifico.

Consideriamo adesso il sistema del LEG nel T-lim nel T-lim $_{N_p}$ e con $d \rightarrow 0$ ($d \neq 0$). Dimosteremo nella prossima proposizione che in tale sistema non si può assumere che le f.c.t. a due punti $\rho_T(r, z)$ tra una particella nell' origine ed una particella in (\mathbf{r}, z) (siano integrabili e) decrescano come una potenza inversa di $|R|$ per $r \rightarrow \infty$ e $\forall z$.

Proposizione 1 *Assumiamo che:*

(i) *il LEG abbia una spaziatura tra i piani $d \rightarrow 0$ ma non nulla;* (ii) *Per $|R| \rightarrow \infty$ $\rho_T(\mathbf{r}, z) = A/|R|^p + o(1/|R|^p)$, $\forall z$;* (iii) *Per $|R|$ sufficientemente grande prendiamo³⁶ $|\rho_T(R, R', O)| \leq M(t)|\rho_T(R)|$ con $t = \min(|R - R'|, |R'|)$ e $\lim_{t \rightarrow \infty} M(t) = 0$. Allora $A = 0$ per ogni $p > 3$*

Dimostrazione: Cominciamo con l' osservare che per $d \rightarrow 0$ ($d \neq 0$) il LEG costituisce un sistema di cariche che riempie tutto lo spazio 3D. Esso è omogeneo, con simmetria azimutale ma non isotropo. La f.c.t. a due punti è una funzione di $|\mathbf{r}|$ e di z .

In tale sistema allo scopo di avere una equazione di Poisson locale è conveniente usare piuttosto che $\rho_T(r, z)$ la:

$$\rho_{T_{tot}}(r) = \lim_{d \rightarrow 0} d \sum_{m=-\infty}^{\infty} \rho_{T_m}(r) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \rho_T(r, z) \quad . \quad (4.172)$$

L' ipotesi (ii) della proposizione impone a $\rho_{T_{tot}}$ il seguente andamento asintotico a grandi r :

$$\begin{aligned} \rho_{T_{tot}}(r) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{A}{r^{p-1}} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{1}{\sqrt{1+z^2}^p} + o\left(\int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{1}{|R|^p}\right) = \\ &= \frac{Ac_p}{r^{p-1}} + o\left(\frac{1}{r^{p-1}}\right) \quad , \quad (4.173) \end{aligned}$$

³⁶Questa condizione richiede che la funzione di Ursell a tre punti non decada più lentamente di quella a due e in più prevede un suo ulteriore decadimento se portiamo all' infinito una seconda particella, tenendo la terza fissa nell' origine. In appendice A di [10] è mostrato come tale limitazione sia compatibile con risultati esatti noti e come sia soltanto una debole forma di limitazione indicata dalle espansioni perturbative (vedi espansioni in cluster [127]).

dove $c_p = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{1+x^{2p}}} < \infty$ ($p > 2$).

In modo analogo definiamo $\mathbf{E}_{tot}(r) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \mathbf{E}(r, z|O)$ e $\phi_{tot}(r) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \phi(r, z)$. Integrando l'equazione di equilibrio (4.127) su z_1 da $-\infty$ a ∞ si ottiene lungo \hat{r} :

$$(\beta e^2)^{-1} \frac{d\rho_{Ttot}(r)}{dr} = \rho E_{tot}(r) + \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{r}{(r^2 + z^2)^{3/2}} \rho_T(r, z) + \int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int d\mathbf{r}' F_{\parallel}(R - R') \rho_T(R, R', O) . \quad (4.174)$$

L'equazione di Poisson in trasformata di Fourier tra $\phi_{tot}(k)$ e $\rho_{Ttot}(k, z)$ si scrive allora ³⁷:

$$\phi_{tot}(k) = \int \phi(k, z) dz = \int dz \int dz' v_{2D}(k) e^{-|z-z'|k} [\rho_T(k, z') + \delta(z')\rho] , \quad (4.177)$$

da cui:

$$k^2 \phi_{tot}(k) = 4\pi \left[\int dz' \rho_{Ttot}(k, z') + \rho \right] \equiv 4\pi C_{tot}(k) , \quad (4.178)$$

ovvero:

$$\nabla_r^2 \phi_{tot}(r) = -4\pi C_{tot}(r) , \quad (4.179)$$

che per la simmetria azzimutale del problema si riscrive:

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \phi_{tot}(r) \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r E_{tot}(r)) = 4\pi C_{tot}(r) . \quad (4.180)$$

Integrando tale equazione si ricava per $r \neq 0$:

$$E_{tot}(r) = \frac{4\pi}{r} \int_0^r [\rho_{Ttot}(r) + \delta(\mathbf{r})\rho] r dr - \frac{2\pi}{r} \int_r^{\infty} \rho_{Ttot}(r) r dr \quad (4.181)$$

$$\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{2\pi}{p-3} \frac{M}{r^{p-2}} + o\left(\frac{1}{r^{p-2}}\right) , \quad (4.182)$$

dove abbiamo usato la (4.173) e la regola di somma di carica (sicuramente valida per l'ipotesi (ii)). Ricaviamo allora che:

$$E_{tot}(r) = -\frac{4\pi}{p-3} \frac{M}{r^{p-2}} + o\left(\frac{1}{r^{p-2}}\right) . \quad (4.183)$$

³⁷ Per d finito qualunque avremmo avuto:

$$\phi_m(k) = \sum_{m'} e^{-|m-m'|kd} \frac{2\pi}{k} [\rho_{Tm'}(k) + \delta_{m',0}\rho] , \quad (4.175)$$

prendendo la somma $\sum_{m=-\infty}^{\infty}$ e scambiando nel secondo membro di destra le sommatorie:

$$k \tanh\left(\frac{kd}{2}\right) \phi_{tot}(k) = 2\pi [\rho_{Ttot}(k) + \rho] = 2\pi C_{tot}(k) , \quad (4.176)$$

dove la presenza della \tanh rende non locale l'equazione riscritta nello spazio \mathbf{r}

Per l' ipotesi (ii) e dalla (4.173) il membro di sinistra di (4.174) è:

$$\frac{d\rho_{Ttot}(r)}{dr} = O\left(\frac{1}{r^p}\right) . \quad (4.184)$$

Il secondo termine del membro di destra è naturalmente:

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{r}{(r^2 + z^2)^{3/2}} \rho_T(r, z) \right| \leq \frac{\rho_{Ttot}(r)}{r^2} = O\left(\frac{1}{r^{p+1}}\right) . \quad (4.185)$$

Come mostrato in appendice D ³⁸ l' ultimo termine sotto la condizione (iii) è:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int d\mathbf{r}' F_{\parallel}(R - R') \rho_T(R, R', O) = o\left(\frac{1}{r^{p-2}}\right) . \quad (4.187)$$

Inserendo questi andamenti nella (1.70) ricaviamo allora:

$$o\left(\frac{1}{r^{p-2}}\right) = \frac{4\pi}{p-3} \frac{Ac_p}{r^{p-2}} , \quad (4.188)$$

da cui ricaviamo la tesi $A = 0$.

È importante osservare che la proposizione appena dimostrata non vieta un andamento asintotico delle f.c.t. di tipo oscillante (nel qual caso il campo ϕ_{tot} e la densità di carica C_{tot} avrebbero lo stesso ordine all' infinito) ³⁹. Essa può inoltre essere generalizzata a f.c.t. a più di due punti come e' mostrato in Ref. [10] nel caso di un OCP in 3D omogeneo ed isotropo. Per d finito il metodo usato nella dimostrazione della precedente proposizione non si può applicare poichè l' equazione di Poisson non è più locale (vedi nota 37). In questo caso riusciamo a determinare il tipo di clustering soltanto di soluzioni approssimate per le funzioni di correlazione. Una di tali approssimazioni è descritta nella prossima sottosezione.

4.4.3 Una particolare chiusura delle BGY ed il tipo di clustering corrispondente

Come abbiamo fatto per il singolo piano nella sottosezione 'Un piano' a pagina 90, studiamo per il LEG nel T-lim con condizioni periodiche al contorno, l' approssimazione che si ottiene per le f.c.t. a due punti quando chiudiamo la gerarchia delle BGY trascurando in (4.133) il termine $\Delta(K)$ definito in (4.134).

Riassumiamo nei seguenti punti la situazione generale.

³⁸In appendice si dimostra la formula più generale valida per d finito:

$$\sum_{m,m'} \int d\mathbf{r}' F_r(R_m - R'_{m'}) \rho_T(R_m, R'_{m'}, O) = o\left(\frac{1}{r^{p-2}}\right) . \quad (4.186)$$

³⁹Mentre è possibile estendere la dimostrazione al caso in cui sostituiamo l' ipotesi (ii) con l' ipotesi più debole di un decadimento monotono a zero delle $\rho_{Tm}(r)$ per $|R_m| \rightarrow \infty$ (vedi Ref. [10]).

- Nel caso del singolo piano tale approssimazione porta all' espressione per la $g(r)$ in approssimazione di Debye-Hückel (4.76) (vedi sottosezione 5.2.1 in Ref. [112]) che coincide con quella trovata da Fetter [16] attraverso un modello elettro-idrodinamico dell' OCP in 2D. Tale espressione ha un decadimento algebrico $\propto 1/r^3$ a grandi r in accordo con le condizioni "esatte" previste da Alastuey e Martin in [10] e discusse all' inizio della stessa sottosezione. Abbiamo Interpretato $\rho(g(r) - 1)$ come la variazione nella densità superficiale in numero di elettroni, dal suo valore medio ρ , che si forma come schermo elettrostatico alla carica del fluido fissata sull' origine. In accordo con Fetter abbiamo trovato che il potenziale generato dalla densità di carica in eccesso $\rho_e(r) = \rho(g(r) - 1) + \delta(\mathbf{r})$ ha un comportamento anisotropo: varia asintoticamente $\propto 1/z^2$ lungo $\hat{\mathbf{z}}$ e $\propto 1/r^3$ sul piano (x,y).
- Nel caso del LEG dimostreremo che tale approssimazione coincide con quella ottenuta da Fetter [9] (vedi le equazioni (4.191) e (4.193)) attraverso un modello idrodinamico del LEG. Con tale approssimazione riusciamo a dare i comportamenti asintotici della f.c.t. $\rho_{T_m}(r)$, tra una carica nell' origine ed una carica in (\mathbf{r}, md) lungo l' asse $\hat{\mathbf{z}}$ (cioè per $md \gg r$) e sul piano xy (cioè per $md \ll r$). Il clustering sul piano risulta in accordo con la proposizione 1 in sottosezione 'Tipo di clustering compatibile con le equazioni di equilibrio' a pagina 115.

Questi risultati mostrano che le informazioni date dalle funzioni di correlazione statiche a tre ed a più punti non sono necessarie per costruire approssimazioni per le funzioni di correlazione a due punti che rispettino le condizioni *esatte* (cioè ricavate immaginando di conoscere l' intero vettore delle distribuzioni ridotte del sistema) sul tipo di clustering di cui disponiamo. È importante ricordare che questo fatto diventa falso se studiamo ad esempio la dinamica di un OCP in 3D classico. In questo caso Martin (vedi sottosezione IV.B.1 in Ref. [11]) ha mostrato [13] attraverso un dettagliato studio dell' espansione a piccoli tempi della funzione di struttura dinamica, che $S(K; t)$ non è mai analitica in $k = 0$ quando $t \neq 0$. Questo è qualitativamente diverso dalle previsioni della teoria di campo medio (approssimazione di Vlasov) che dà un $S(K; t)$ analitico in K . Da questo punto di vista l' effetto delle correlazioni a tre ed a più punti non può essere trascurato.

Il modello idrodinamico di Fetter

Consideriamo un LEG con $N_p = (L/d)$ e condizioni periodiche al contorno nella direzione $\hat{\mathbf{z}}$ su una distanza L . Seguendo lo stesso schema utilizzato nel caso del singolo piano trascuriamo nelle (4.127) l' ultimo termine del membro di destra contenente una combinazione di $\rho_T^{(3)}$ e di $\rho_T^{(2)}$. Così facendo la BGY (4.127) contiene solo f.c.t. a 2 punti ed in particolare lega il gradiente rispetto ad \mathbf{r} della $\rho_{T_m}(r) = \rho_T(R_m, O)$ con il gradiente rispetto ad \mathbf{r} del potenziale $\phi(r, z)$ generato dalle densità di particelle in eccesso a due punti (di cui uno fissato nell' origine O sul

piano $m = 0$) di ciascun piano. Combiniamo la trasformata di Fourier rispetto ad \mathbf{r}_1 dell'equazione della gerarchia BGY di ordine $n = 2$ così troncata, con l'equazione di Poisson per il potenziale $\phi(r, z)$, nel seguente sistema:

$$\begin{cases} \rho^{-1} s^2 \mathbf{k} \rho_{T_m}(k) = em^{-1} \mathbf{k} \phi(k, md) \\ \left(\frac{d^2}{dz^2} - k^2 \right) \phi(k, z) = 4\pi(\rho_{ext}(k) + \rho_{in}(k)) \end{cases} \quad (4.189)$$

dove abbiamo indicato con $s = \sqrt{1/\beta m}$ la velocità del suono isotermica (a differenza di Fetter che usa quella adiabatica (vedi nota 31)) del sistema classico, ed abbiamo indicato in accordo con le notazioni di Fetter, con $\rho_{ext} = -e\rho\delta(z)$ la densità di particelle esterne e con $\rho_{in}(k) = -e \sum_m \rho_{T_m}(k) \delta(z - md)$ la densità di particelle indotte.

A.L.Fetter [9] ha trovato la soluzione di tale sistema:

$$\begin{aligned} -e\rho_{T_m}(r) &= \rho e \frac{2\pi\rho e^2 d}{m} \frac{1}{L} \sum_{k_z \in 1^\circ Bz} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} e^{ik_z md} \\ &\times \frac{\sinh(kd)}{(\cosh(kd) - \cos(k_z d))s^2 k^2 + \frac{2\pi\rho e^2}{m} k \sinh(kd)} \quad , \end{aligned} \quad (4.190)$$

dove nella sommatoria abbiamo che $k_z = 2\pi n/L$ con n intero e $|k_z| < \pi/d$.

Fetter trova per la precedente soluzione i seguenti andamenti asintotici alla Yukawa:

$$\bullet \quad \mathbf{r} \text{ fisso, } m \rightarrow \infty \quad \rho_{T_m}(r) \propto \frac{e^{-md/\zeta_1}}{md} \quad , \quad (4.191)$$

dove la lunghezza di schermo $\zeta_1 = \frac{d}{\text{arcosh}(1+K_D d)}$ (con $K_D = 2\pi\rho e^2/ms^2$ la costante di schermo di Debye per un singolo piano) ha i seguenti comportamenti limite:

$$\zeta_1 \simeq \begin{cases} (d/2K_D)^{1/2} & K_D d \ll 1, \\ d/\ln(2K_D d) & K_D d \gg 1. \end{cases} \quad (4.192)$$

$$\bullet \quad m \text{ fisso, } r \rightarrow \infty \quad \rho_{T_m}(r) \propto \frac{e^{-r/\zeta_2}}{r} \quad , \quad (4.193)$$

dove la lunghezza di schermo è $\zeta_2 = d/v_o$ con v_o la prima radice dell'equazione $v/dK_D = \cot(v/2)$, ed ha i seguenti comportamenti limite:

$$\zeta_2 \simeq \begin{cases} (d/2K_D)^{1/2} & K_D d \ll 1, \\ d/\pi & K_D d \gg 1. \end{cases} \quad (4.194)$$

Osserviamo che il secondo andamento asintotico (4.193) è in accordo con la proposizione 1 che abbiamo dimostrato per un LEG nel T-lim nel T-lim $_{N_p}$ con $d \rightarrow 0$ ($d \neq 0$). Confrontando (4.192) e (4.194) si vede che nel caso $K_D d \gg 1$ lo schermo è anisotropo. Per $1 \ll K_D d < e^\pi$, lo schermo sul piano (x, y) è più forte di quello lungo la normale.

4.5 Comportamento asintotico delle correlazioni in un LEG con piani cristallizzati

È noto che la rottura spontanea di un gruppo continuo di simmetria (come ad esempio quello delle traslazioni spaziali) nello stato di equilibrio di un sistema a molti corpi a temperatura diversa da zero è accompagnata in generale, dallo svilupparsi di un ordine spaziale a lungo raggio, che si manifesta con un decadimento lento (non esponenziale) delle correlazioni.

Questo comportamento generale (caratteristico di sistemi in qualunque dimensione con interazione a corto o a lungo raggio) è una manifestazione del teorema di Goldstone ⁴⁰: il clustering non esponenziale è in generale dovuto all' esistenza di eccitazioni con energie piccole a piacere.

Prima di studiare come il teorema di Goldstone si manifesta nel LEG, descriviamo brevemente i risultati che si conoscono sull' OCP in 2D con interazione $v(r) \sim 1/r$ tra le particelle. Come abbiamo visto nel capitolo 2 la transizione di Wigner classica ad una fase solida è stata osservata sperimentalmente in un sistema di elettroni quasi bidimensionale in accordo con le simulazioni numeriche. Ci chiediamo allora, da un punto di vista puramente teorico, se questa fase 'solida' bidimensionale abbia o meno un ordine cristallino a lungo raggio; ossia se nel limite termodinamico il sistema infinito bidimensionale di elettroni abbia una densità microscopica di particelle $\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ con trasformata di Fourier $\rho(\mathbf{k})$ diversa da zero per almeno un vettore del reticolo reciproco \mathbf{k} non nullo. Per rispondere a questa domanda è utile capire quali restrizioni imponga sul tipo di clustering, l' ipotesi dell' esistenza di un ordine cristallino a lungo-raggio nell' OCP in 2D nel limite termodinamico, per poi confrontarle con quelle sul clustering nell' analogo sistema omogeneo. Se tali restrizioni sono indipendenti dai valori dei parametri termodinamici del sistema ed impongono un diverso clustering al solido (con *ordine a lungo raggio*) e al liquido (*omogeneo*) ⁴¹, allora dobbiamo concludere l' assenza di una transizione di fase liquido-solido.

È importante ricordare i risultati riportati nella sottosezione 4.4.1 sul tipo di clustering compatibile con le BGY relative allo stato di equilibrio di un OCP in 2D omogeneo: Alastuey e Martin [10] hanno trovato, che per tale sistema $\rho_e(\mathbf{r}|O) = S(\mathbf{r}|O) = \rho(\rho h(\mathbf{r}) + \delta(\mathbf{r}))$ deve decadere come o più lentamente di $|\mathbf{r}|^{-3}$. Sempre nella sottosezione 4.4.1 abbiamo mostrato che nel limite di alti T e/o basse n , o meglio quando la approssimazione di Debye-Hückel (DHA) è una buona approssimazione, allora $S^{DHA}(\mathbf{r}|O) \propto |\mathbf{r}|^{-3}$ [112] per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ (inoltre dalle Ref. [4, 97] ricaviamo che lo stesso tipo di clustering vale in RPA).

Nell' OCP in 2D interagente con $\propto 1/r$ si può arrivare a dimostrare la presenza

⁴⁰Per le relazioni tra il teorema di Goldstone ed il clustering di sistemi a temperature diversa da zero con interazioni a corto raggio vedi [128] ed anche [129]. Alcuni sistemi con interazioni a lungo raggio saranno studiati, con tale prospettiva, nella presente sezione.

⁴¹Come avviene ad esempio nel caso di un OCP in 3D con interazione $1/R$ o nell' OCP in 2D con interazione $\propto -\ln r/r_o$ [130]

di un clustering lento (non esponenziale) in una fase che rompe spontaneamente le trasformazioni continue sia prendendo come punto di partenza la disuguaglianza di Bogoliubov sia analizzando la gerarchia BGY per le correlazioni. Gruber e Martin [130] (vedi anche [131]) partono dalla gerarchia BBGKY sulle funzioni di correlazioni che definiscono lo stato di equilibrio di un OCP in 2D nel limite termodinamico. Essi dimostrano che se lo stato di equilibrio ha un clustering del tipo $|\rho_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)| = O(1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{3+\epsilon})$ con $\epsilon > 0$,⁴² allora lo stato di equilibrio è invariante sotto traslazioni. Questo risultato non vieta l'esistenza di una coesistenza tra stato omogeneo e stato con ordine a lungo raggio (in entrambi i casi le correlazioni non possono decadere più velocemente di $|\mathbf{r}|^{-3}$).

Questo limite inferiore è stato migliorato e probabilmente ottimizzato da Requardt e Wagner [132] attraverso una estensione al potenziale $1/|\mathbf{r}|$ a lungo raggio dell'argomento di Mermin [133, 134] per dimostrare l'assenza della rottura di simmetria in un sistema di particelle classiche interagenti con potenziali a corto raggio in 1D e 2D. Essi immaginano di rompere l'invarianza traslazionale di un OCP in 2D con interazione $\propto 1/r$, introducendo un potenziale a un corpo, localizzante $\alpha\phi^{est}(x)$ con $\alpha < 0$ e con picchi sui siti di un generico reticolo cristallino. Successivamente prendono *prima* il limite termodinamico del sistema e *poi* mandano $\alpha \rightarrow 0$. Dimostrano così attraverso la disuguaglianza di Mermin (o la così detta disuguaglianza di Bogoliubov) estesa al sistema di elettroni, che l'ordine cristallino a lungo raggio è incompatibile con un clustering del tipo $|\rho_T(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)| = O(1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{1/2+\epsilon})$ con $\epsilon > 0$. Questa affermazione vieta l'esistenza di una transizione di fase liquido-solido quando si assume che lo stato liquido abbia funzioni di correlazione troncate integrabili su tutto il piano⁴³.

4.5.1 Le equazioni WLMB

Partendo dalle prime due identità della gerarchia BGY (4.31) per il sistema finito con N_p piani di area A ricaviamo la generalizzazione dell'equazione di Wertheim [135], Lovett, Mou e Buff [136] per il sistema di cariche del LEG. L'equazione WLMB, che come vedremo è utile per lo studio di fluidi inomogenei, ha come caratteristica particolare quella di non coinvolgere esplicitamente le forze elettrone-elettrone; essa lega il gradiente della densità di elettroni ad un integrale della forza esterna sulle funzioni di correlazione di coppia inter ed intrapiano più il contributo

⁴²Più in generale

$$|d^\eta \rho_T(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)| \leq M < \infty \quad \text{con } d = \sup_{i,j} |R^i - R^j| \quad \text{e } \eta > 3 \quad . \quad (4.195)$$

⁴³In particolare la dimostrazione di Requardt e Wagner esclude l'esistenza di una transizione solido-liquido ad alte temperature; dove lo studio in RPA o DHA dello stato omogeneo impone: $g(|\mathbf{r}|) - 1 \propto |\mathbf{r}|^{-3}$ a grandi $|\mathbf{r}|$.

del contorno ∂A della superficie dei piani del LEG:

$$(\beta e^2)^{-1} \nabla_{r_1} \tilde{\rho}(R^1) = \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^f(R^1) \tilde{\rho}(R^1) + \sum_m \int_A d\mathbf{r} \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^f(R) \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) - (\beta e^2)^{-1} \sum_m \oint_{\partial A} \hat{n} dl \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) . \quad (4.196)$$

Nel sistema disomogeneo che stiamo trattando il campo elettrico in R $\tilde{\mathbf{E}}(R)$ dovuto a tutte le cariche non è nullo: $\tilde{\mathbf{E}}(R) = \tilde{\mathbf{E}}^f(R) + \tilde{\mathbf{E}}^{se}(R)$ (vedi (4.29)). $\tilde{\mathbf{E}}^{se}(R) = -\sum_{m'} \int_A d\mathbf{r}' \mathbf{F}(R - R') \tilde{\rho}(R')$ è la parte del campo generata dal sistema elettronico ed $\tilde{\mathbf{E}}^f(R) = -\sum_{m'} \int_A d\mathbf{r}' \mathbf{F}(R - R') \tilde{\rho}^f(R')$ è la parte del campo generata dai fondi neutralizzanti. Naturalmente se $\tilde{\rho}^f(R')$ è costante (fondi uniformi) allora $\tilde{\mathbf{E}}^f(R) = 0$. Abbiamo inoltre indicato con $\oint_{\partial A} \hat{n} dl \dots$ l' integrale sul perimetro di A (\hat{n} è il versore ortogonale al contorno di A).

Ricaviamo adesso la (4.196) dalla gerarchia BGY (4.31). Ricordandoci la definizione di campo in eccesso (4.35) e ricordandoci la definizione delle f.c.t. (4.19) ed (4.20), otteniamo per $n = 2$:

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} \nabla_r \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) &= \tilde{\rho}(R_m) \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(R_m | R^1) \\ &+ [\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(R_m) + \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R^1)] \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) \\ &+ \sum_{m'} \int_A d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R^1) \tilde{\rho}_T(R_m, R', R^1) . \end{aligned} \quad (4.197)$$

Applicando ad entrambi i membri della precedente identità l' operazione $\sum_m \int_A d\mathbf{r} \dots$ si ottiene:

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} \sum_m \oint_{\partial A} \hat{n} dl \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) &= \sum_m \int_A d\mathbf{r} \tilde{\rho}(R_m) \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(R_m | R^1) \\ &+ \sum_m \int_A d\mathbf{r} [\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(R_m) + \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R^1)] \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) , \end{aligned} \quad (4.198)$$

poichè l' integrale doppio:

$$\int_A d\mathbf{r} \int_A d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R') \tilde{\rho}_T(R_m, R', R^1) = 0 , \quad (4.199)$$

si annulla grazie all' antisimmetria della componente planare della forza elettrone-elettrone $\mathbf{F}(R' - R_m) = -\mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R')$ ammettendo che la regolarizzazione di $\mathbf{F}(R)$ per $|R| \sim 0$ sia tale da assicurare la convergenza di (4.199) e quindi la possibilità di scambio dei due integrali. Ricordandoci la definizione di campo in eccesso (4.35) e quella di densità di particelle in eccesso (4.15) possiamo riscrivere il primo termine del membro di destra della (4.198) così:

$$\begin{aligned} &\sum_m \int_A d\mathbf{r} \tilde{\rho}(R_m) \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(R_m | R^1) \\ &= \sum_m \int_A d\mathbf{r} \tilde{\rho}(R_m) \sum_{m'} \int_A d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R') \tilde{\rho}_e(R' | R^1) . \end{aligned} \quad (4.200)$$

Ammettendo ancora che la regolarizzazione di $\mathbf{F}(R)$ per $|R| \sim 0$ sia tale da assicurare la convergenza di (4.200) e quindi la possibilità di scambio dei due integrali otteniamo:

$$\begin{aligned}
(4.200) &= - \sum_{m'} \int d\mathbf{r}' \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^{se}(R') \tilde{\rho}_e(R'|R^1) \\
&= - \sum_{m'} \int d\mathbf{r}' [\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(R') - \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^b(R')] [\tilde{\rho}_T(R', R^1) \\
&\quad + \tilde{\rho}(R^1) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_1) \delta_{m', m_1}] \quad , \quad (4.201)
\end{aligned}$$

che sostituito in (4.198) porta a:

$$\begin{aligned}
(\beta e^2)^{-1} \sum_m \oint_{\partial A} \hat{n} dl \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) &= \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^f(R^1) \tilde{\rho}(R^1) \\
+ \sum_m \int_A d\mathbf{r} \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^f(R_m) \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) &- [\tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}(R^1) \tilde{\rho}(R^1) \\
&\quad + \sum_m \int_A d\mathbf{r} \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R_m) \tilde{\rho}_T(R_m, R^1)] \quad , \quad (4.202)
\end{aligned}$$

$$+ \sum_m \int_A d\mathbf{r} \mathbf{F}_{\parallel}(R^1 - R_m) \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) \quad , \quad (4.203)$$

è allora sufficiente osservare che grazie alla BGY (4.31) per $n = 1$ possiamo sostituire i due termini tra le parentesi quadrate con $(\beta e^2)^{-1} \nabla_{r_1} \tilde{\rho}(R^1)$, per ottenere la WLMB in (4.196) che si può riscrivere:

$$\begin{aligned}
(\beta e^2)^{-1} \nabla_{r_1} \tilde{\rho}(R^1) &= \sum_m \int_A d\mathbf{r} \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^f(R_m) \tilde{\rho}_T(R_m | R^1) \\
&\quad - (\beta e^2)^{-1} \sum_m \oint_{\partial A} \hat{n} dl \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) \quad . \quad (4.204)
\end{aligned}$$

Possiamo infine osservare come dalla derivazione formale proposta [11] risulti che la (4.196) sia la prima di una gerarchia di equazioni di WLMB che per $Q \equiv (R^1, \dots, R^n)$ si scrive:

$$\begin{aligned}
(\beta e^2)^{-1} \sum_{j=1}^n \nabla_{r_j} \tilde{\rho}(Q) &= \sum_{j=1}^n \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^f(R^j) \tilde{\rho}(R^j) + \sum_m \int_A d\mathbf{r} \tilde{\mathbf{E}}_{\parallel}^f(R_m) \tilde{\rho}_T(R_m, Q) \\
&\quad - (\beta e^2)^{-1} \sum_m \oint_{\partial A} \hat{n} dl \tilde{\rho}_T(R_m, Q) \quad (4.205)
\end{aligned}$$

4.5.2 Clustering compatibile con la rottura dell' invarianza traslazionale dei piani del LEG

Vogliamo determinare le restrizioni sul comportamento asintotico delle funzioni di correlazioni inter ed intrapiano in un LEG con un numero $N_p < \infty$ di piani (così che non avremo problemi di commutatività tra le sommatorie sugli indici di piano) di area $A = \mathbf{R}^2$ che nello stato di equilibrio presentano un ordine cristallino a lungo raggio ⁴⁴.

⁴⁴Ossia piani che rompono spontaneamente l' invarianza sotto il gruppo delle traslazioni spaziali presentando $\forall m$ una $\rho(R_m)$ con periodicità non banale in \mathbf{r} .

Gli *stati di equilibrio* sono descritti, come al solito, dal set di funzioni di correlazione $\rho(R^1, \dots, R^n)$ su \mathbf{R}^{2n} . Essi sono definiti come le soluzioni della gerarchia BGY (4.31) presa formalmente nel limite termodinamico in cui $A = \mathbf{R}^2$ e $\tilde{\rho}(R_m) = \rho(R_m)$ e $\tilde{\rho}^f(R_m) = \rho^f$ costante. A differenza di come procedemmo nella sezione 4.2.2 non imponiamo adesso nessun tipo di simmetria alle funzioni di correlazione.

Assumiamo adesso di prendere uno stato di equilibrio del LEG del tipo appena descritto e che possieda, inoltre, le proprietà di clustering necessarie per giustificare rigorosamente la validità della WLMB (4.196) (ossia la sua derivazione dalle BGY) nel limite di $A \rightarrow \mathbf{R}^2$; cioè necessarie per giustificare gli scambi di integrazione eseguiti in (4.199) e (4.200) nelbibtex tesi ricavare (4.196) nella precedente sottosezione. Per tale stato di equilibrio la gerarchia WLMB (4.205) si ridurrebbe formalmente a:

$$\sum_{j=1}^n \nabla_{r_j} \rho(R^1, \dots, R^n) = 0 \quad , \quad (4.206)$$

poichè il campo elettrico dei fondi infinitamente estesi è naturalmente ortogonale ai piani del LEG ($\mathbf{E}_{\parallel}^f = 0$) ed inoltre è ragionevole considerare nullo il contributo dell' integrale sul perimetro di A ⁴⁵. La (4.206) significa che tutte le funzioni di correlazione del LEG sono invarianti sotto traslazioni parallele ai piani e quindi in particolare anche che tutti gli N_p OCP bidimensionali sono omogenei.

Le proprietà di clustering affinché questo si verifichi sono stabilite dalla seguente proposizione che costituisce un' applicazione al caso del LEG della proposizione (II.A) di Ref. [130] valida per un singolo piano del LEG e che abbiamo presentato nell' introduzione alla presente sezione.

Proposizione 1 *Supponiamo che il LEG sia in uno stato di equilibrio in cui valgono le seguenti proprietà di clustering:*

- (i) $\int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 |\rho(R^1, R^2, \dots, R^n)| < \infty, \forall m_1, m_2, \dots, m_n$
 - (ii) $|D^n \rho_T(R^1, \dots, R^n)| \leq M < \infty, D = \sup_{i,j} |R^i - R^j|$ ed $\eta > 3$
- allora vale (4.206).

Dimostrazione: La condizione (i) assicura la convergenza uniforme dell' integrale doppio in (4.199) e quindi permette lo scambio dell' ordine di integrazione necessario per poterlo considerare nullo.

Lo scambio degli integrali in (4.200) si giustifica nel modo seguente. Limitiamo l' integrale in \mathbf{r} ad un superficie finita A lasciando l' integrale in \mathbf{r}' esteso a tutto

⁴⁵Per avere $\lim_{A \rightarrow \mathbf{R}^2} \oint_{\partial A} \hat{n} dl \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) = 0$ è sufficiente richiedere un clustering del tipo:

$$\rho_T(R, R^1) = O\left(\frac{1}{|R|^{1+\epsilon}}\right), \quad \text{con } \epsilon > 0 \quad (4.207)$$

\mathbf{R}^2 . Si deve dimostrare che il limite:

$$\begin{aligned} & \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R') \rho(R_m) \rho_T(R'|R^1) \\ &= \lim_{A \rightarrow \mathbf{R}^2} \int d\mathbf{r}' \left\{ \int_A d\mathbf{r} [\mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R') - \mathbf{F}_{\parallel}(R_m)] \rho(R_m) \right\} \rho_T(R'|R^1) \quad , (4.208) \end{aligned}$$

esiste e dà l'espressione (4.201). Il termine aggiunto nelle parentesi graffe del secondo membro di (4.208) non contribuisce nell'integrale in \mathbf{r}' di (4.208) grazie alla regola di somma di carica (4.37) che vale sotto l'ipotesi (ii) ed ha lo scopo di migliorare la convergenza dell'integrale in \mathbf{r} . Dal lemma 1 e 4 di [130]⁴⁶ risulta infatti che $\int_{A \rightarrow \mathbf{R}^2} d\mathbf{r} |[\mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R') - \mathbf{F}_{\parallel}(R_m)] \rho(R_m)|$ esiste ed è $O(|\mathbf{r}'|)$. *Questo, unito all'ipotesi (ii) ci autorizza, grazie al teorema della convergenza dominata, a passare in (4.208) il $\lim_{A \rightarrow \mathbf{R}^2}$ dentro l'integrale su \mathbf{r}' .* Naturalmente deve essere:

$$\begin{aligned} \lim_{A \rightarrow \mathbf{R}^2} \int_A d\mathbf{r} [\mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R') - \mathbf{F}_{\parallel}(R_m)] \rho(R_m) &= -[\mathbf{E}_{\parallel}^{se}(R') + \mathbf{E}_{\parallel}^{se}(0)] \\ &= -\mathbf{E}_{\parallel}(R') + [\mathbf{E}_{\parallel}^f(R') - \mathbf{E}_{\parallel}^{se}(0)] \quad , \quad (4.209) \end{aligned}$$

che utilizzato nella (4.208) porta, ripetendo gli stessi passaggi fatti per arrivare da (4.201) a (4.204), alla seguente equazione:

$$\begin{aligned} (\beta e^2)^{-1} \nabla_{r_1} \rho(R^1) &= \sum_m \int d\mathbf{r} [\mathbf{E}_{\parallel}^f(R_m) - \mathbf{E}_{\parallel}^{se}(0)] \rho_T(R_m|R^1) \\ &\quad - (\beta e^2)^{-1} \sum_m \oint_{\partial(A \rightarrow \mathbf{R}^2)} \hat{n} dl \tilde{\rho}_T(R_m, R^1) \quad , \quad (4.210) \end{aligned}$$

dove l'integrale sul contorno di $A \rightarrow \mathbf{R}^2$ si annulla grazie all'ipotesi (ii); il campo elettrico generato da fondi uniformi infinitamente estesi deve essere ortogonale ad essi dando $\mathbf{E}_{\parallel}^f = 0$; infine per la regola di somma di carica valida grazie all'ipotesi (ii) la costante $\mathbf{E}_{\parallel}^{se}(0)$ è moltiplicata per 0. Dalla (4.210) si ricava allora:

$$\nabla_r \rho(R_m) = 0 \quad , \quad \forall m \quad , \quad (4.211)$$

ed utilizzando le equazioni successive della gerarchi WLMB (4.205) si ricava la (4.206) $\forall n$.

Concludiamo osservando che anche per il LEG come per l'OCP in 2D interagente con potenziale $\propto 1/r$, partendo dalle BGY siamo stati in grado di stabilire che, sia nello stato di equilibrio omogeneo che, in quello con ordine cristallino, il clustering possibile nel limite termodinamico è quello che viola la condizione

$$\begin{aligned} |D^n \rho_T(R^1, \dots, R^n)| &\leq M < \infty \quad , \quad D = \sup_{i,j} |R^i - R^j| \quad , \quad \eta > 3 \quad (4.212) \\ &\forall m_1, \dots, m_n \quad . \end{aligned}$$

Molto probabilmente, trattando il problema partendo dalla disuguaglianza di Bogoliubov è possibile migliorare tale limitazione per lo stato cristallino (come avviene nel caso del Jellium di superficie in 2D) rallentando ulteriormente il clustering compatibile con la rottura di simmetria.

⁴⁶Vedi anche l'appendice C in [131].

4.6 Dinamica

Abbiamo visto nelle precedenti sezioni, che la proprietà dell' interazione $1/|R|$ di essere a lungo raggio determina tutta una serie di condizioni che le funzioni di correlazione statiche del sistema devono soddisfare. In generale anche la dinamica di un fluido carico possiede una serie di regole di somma: quando una qualunque causa esterna causa uno sbilanciamento di carica nel fluido, questo tende a ristabilire la propria neutralità. È importante osservare che in generale la nuvola di carica coinvolta in tale processo dinamico avrà multipoli in conseguenza degli effetti di inerzia e di collisione tra le particelle. Ci aspettiamo così che le correlazioni dipendenti dal tempo non mostrino un clustering esponenziale nello spazio. Solo un numero limitato di regole di somma rimarrà vero. Il quadro generale per le proprietà dinamiche di un OCP in 3D è riassunto nel primo capitolo. Per il LEG classico estrarremo dalle equazioni dinamiche BBGKY il valore dei primi due coefficienti non nulli dell' espansione a piccoli tempi della funzione di struttura dinamica (la funzione di van Hove): calcoleremo esplicitamente il primo (la regola di somma f o regola di somma del primo momento) ed imiteremo il secondo (regola di somma sul secondo momento) da quello calcolato esplicitamente per il LEG degenerare in Ref. [89].

Concluderemo il capitolo con un' analisi (simile a quella svolta in Ref. [124] per un OCP in 3D) del contributo dato a grandi lunghezze d' onda e per $k_z \neq 0$, alle regole di somma sui momenti del fattore di struttura dinamico rispetto alla frequenza, dalle eccitazioni nel LEG: le oscillazioni di plasma, le eccitazioni di singola particella, le eccitazioni collisionali.

4.6.1 Definizioni

Indichiamo con $R^i(t) \equiv (\mathbf{r}_i(t), m_i d)$ e con $V^i(t) \equiv (\mathbf{v}_i(t), v_z = 0)$, rispettivamente, la posizione e la velocità, al tempo t , della i -esima particella (vincolata, nel suo moto, a rimanere sul piano $z = m_i d$) soggette all' evoluzione temporale classica. È chiaro che nel nostro sistema, le velocità delle particelle avranno come uniche componenti variabili non nulle le due parallele ai piani.

la funzione di correlazione carica-carica dipendente dalle posizioni e dagli impulsi (la funzione di struttura generalizzata) che, come abbiamo visto nel capitolo 3, giuoca un ruolo importante nella teoria della risposta lineare è definita da:

$$S(R, V; t | R', V') = \langle N(R, V; t) N(R', V'; 0) \rangle - \langle N(R, V; t) \rangle \langle N(R', V'; 0) \rangle \quad (4.213)$$

Nella definizione abbiamo indicato con:

$$N(R, V; t) = \sum_i \delta(R - R^i(t)) \delta(V - V^i(t)) \quad , \quad (4.214)$$

la densità microscopica di particelle al tempo t dello spazio delle fasi e con $\langle \dots \rangle$ la media termica sulle condizioni iniziali $R^i(t=0) = R^i$, $V^i(t=0) = V^i$. Integrando

la (4.213) sulle velocità si ottiene la funzione di struttura dinamica, comunemente chiamata funzione di van Hove ⁴⁷:

$$S(R; t|R') = \int d\mathbf{v} \int d\mathbf{v}' S(R, V; t|R', V') \quad . \quad (4.215)$$

In seguito ometteremo, nelle funzioni di correlazione, le variabili di velocità su cui integriamo. È importante a questo proposito che le funzioni di correlazione integrate su tutte le variabili di velocità, diventano pari sotto inversione temporale o, analogamente, essendo esse funzioni reali e pari in t , le loro componenti di Fourier di frequenza ω devono essere reali e pari in ω .

Più in generale, introduciamo le funzioni di correlazione $\rho(R, V; R', V'; \dots; t|Q)$ tra un gruppo di particelle con posizioni e velocità $R, V; R', V'; \dots$ al tempo t e un altro gruppo di particelle $Q \equiv (R^1, V^1; \dots; R^n, V^n)$ al tempo 0, date da:

$$\begin{aligned} \rho(R, V; R', V'; \dots; t|Q) = & \quad (4.216) \\ = \langle [N(R, V; t)N(R', V'; 0) \dots]_{DP} [N(R^1, V^1) \dots N(R^n, V^n)]_{DP} \rangle . & \end{aligned}$$

Quando Q è vuoto, le funzioni di correlazione dinamiche (4.216) diventano indipendenti dal tempo e si riducono alle funzioni di correlazione statiche con delle distribuzioni Maxwelliane delle velocità fattorizzate:

$$\rho(R, V; R', V'; \dots) = \varphi(V)\varphi(V') \dots \rho(R, R', \dots) \quad (4.217)$$

$$\varphi(V) = \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{3/2} \exp\left(-\beta \frac{m|\mathbf{v}|^2}{2}\right) \delta(v_z) \quad . \quad (4.218)$$

Dalla stazionarietà dello stato di equilibrio, indicando con P e Q due insiemi di velocità e posizioni di due gruppi di particelle, abbiamo la seguente relazione di simmetria:

$$\rho(P; t|Q) = \rho(Q; -t|P) \quad . \quad (4.219)$$

In termini di queste funzioni di correlazione, la funzione di struttura generalizzata (4.213) si riscrive:

$$S(R, V; t|R', V') = \rho(R, V; t|R', V') - \rho(R, V)\rho(R', V') = \rho_T(R, V; t|R', V') \quad (4.220)$$

Come generalizzazione dinamica delle d.p.e. statiche avremo:

$$\rho_T(R; t|Q) = \int d\mathbf{v} [\rho(R, V; t|Q) - \rho(R, V)\rho(Q)] = \int d\mathbf{v} \rho_T(R, V; t|Q) \quad . \quad (4.221)$$

E si ha naturalmente:

$$\rho_T(R; 0|Q) = \left(\prod_{i=1}^n \varphi(V^i)\right) \rho_T(R|R^1 \dots R^n) \quad . \quad (4.222)$$

⁴⁷Come abbiamo già osservato nella nota 9 della sezione 4.2.1, la funzione di van Hove è definita come la (4.215) divisa per ρ ; essa si ricava, infatti, dividendo la (4.215), per N ed integrandola su tutte le possibili posizioni della particella in R' che è stata invece fissata nella definizione (4.215).

Assumeremo, come già fatto nel caso statico, che, nel limite termodinamico in cui i piani sono estesi all' infinito, le funzioni di correlazione (4.216) esistano ⁴⁸ e che la loro dinamica sia governata dalle equazioni gerarchiche BBGKY rigorosamente valide nel caso del sistema finito [15].

Per il nostro sistema di N_p OCP classici bidimensionali paralleli tra loro e spazati di una distanza d lungo \hat{z} , con densità dei fondi uniformi neutralizzanti su ciascun piano ρ^f , la prima equazione della gerarchia BBGKY si scrive:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(R_m, V; t|Q) = -\mathbf{v} \nabla_r \rho(R_m, V; t|Q) - \frac{e^2}{m} \mathbf{E}_{\parallel}(R_m) \nabla_v \rho(R_m, V; t|Q) \quad (4.223)$$

$$- \frac{e^2}{m} \sum_{m'}^{N_p} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R'_{m'}) \nabla_v [\rho(R_m, V; R'; t|Q) - \rho(R') \rho(R_m, V; t|Q)] \quad , \quad (4.224)$$

dove \mathbf{F}_{\parallel} è la componente della forza Coulombiana parallela alla superficie dei piani ed il campo elettrico statico per unità di carica elettrica \mathbf{E} , dovuto a tutte le cariche del sistema, si deve naturalmente annullare nel limite termodinamico in cui la densità superficiale di elettroni su ciascun piano diventa costante $\rho(R_m) = \rho$, $\forall m$ ed è soddisfatta la relazione di neutralità locale $\rho = \rho^f$:

$$\mathbf{E}(R_m) = \sum_{m'}^{N_p} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R'_{m'}) [\rho(R') - \rho^f] = 0 \quad . \quad (4.225)$$

Come nel caso statico è conveniente riscrivere la (4.223) in termini delle f.c.t. e del campo elettrico in eccesso generato dalla d.p.e. al tempo t , definito, in analogia al caso statico:

$$\mathbf{E}(R_m; t|Q) = \sum_{m'}^{N_p} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R'_{m'}) \rho_T(R'; t|Q) \quad . \quad (4.226)$$

Le funzioni di correlazione troncate rispetto alle particelle (R, V) , (R', V') e l' insieme Q sono definite come in (4.19) e (4.20). Le equazioni (4.223) diventano:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_T(R_m, V; t|Q) = -\mathbf{v} \nabla_r \rho_T(R_m, V; t|Q) - (\beta e^2) \rho \varphi(V) \mathbf{v} \mathbf{E}_r(R_m; t|Q) \quad (4.227)$$

$$- \frac{e^2}{m} \sum_{m'}^{N_p} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R'_{m'}) \nabla_v [\rho(R_m, V; R'; t|Q) - \rho(R') \rho(R_m, V; t|Q)] \quad , \quad (4.228)$$

dove abbiamo anche sfruttato come nel caso di OCP omogenei sui piani valga $\rho(R_m, V) = \varphi(V) \rho$.

⁴⁸L' esistenza delle funzioni di correlazione dinamiche, nel limite termodinamico, è stata dimostrata, rispetto all' esistenza delle correlazioni statiche, per un numero di sistemi molto più piccolo. Un esempio è rappresentato dal gas Coulombiano in 1D.

4.6.2 Comportamento a piccoli tempi

Adesso che abbiamo definito gli oggetti di maggior interesse per studiare la dinamica del sistema, cerchiamo di trovare, come abbiamo fatto nel caso statico, una serie di valori limite, condizioni al contorno e regole di somma. Iniziamo mettendo in evidenza la dipendenza del comportamento a piccoli tempi delle funzioni di correlazione dipendenti dal tempo, dalle proprietà statiche del sistema.

Un primo esempio di questo fatto é costituito dalla relazione tra il fattore di struttura dinamico e quello statico:

$$S(K; t = 0|O) = S(K|O) , \quad \text{o anche} \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} S(K; \omega|O) = S(K|O) , \quad (4.229)$$

dove abbiamo fissato una particella nell' origine O. Più in generale ci si convince facilmente del fatto che iterando più volte le (4.227), possiamo esprimere ⁴⁹, in termini delle correlazioni statiche, i coefficienti dell' espansione di Taylor a piccoli tempi di $S(K, V; t|O)$ ⁵⁰:

$$S(K, V; t|O, V') = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} a_n(K, V, V') , \quad (4.230)$$

coefficienti a cui spesso ci si riferisce come momenti, rispetto alla frequenza, di $S(K, V; \omega|O, V')$, essendo anche:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} (-i\omega)^n S(K, V; \omega|O, V') = a_n(K, V, V') = \left. \frac{\partial S(K, V; t|0, V')}{\partial t^n} \right|_{t=0} . \quad (4.231)$$

Naturalmente integrando gli $a_n(K, V, V')$ su tutte le variabili di velocità troviamo, dalla, (4.229), che $a_0(K) = S(K|O)$ e dal commento all' equazione (4.215) risulta che $a_n(K) = 0$ per n dispari.

Ci proponiamo adesso di ricavare $a_2(K)$ mostrando che la sua espressione, più comunemente nota come regola di somma f, non é altro che una riscrittura della conservazione del numero di particelle su ogni piano. Infine daremo l' espressione per a_4 , la regola di somma sul quarto momento di S , e mostreremo, seguendo [89], che essa fornisce evidenze per l' esistenza di eccitazioni collettive di frequenza superiore a quella dei comuni modi acustici del plasmon del LEG quando il vettore d' onda ha una componente, ortogonale ai piani, non nulla e le correlazioni interpiano, a corto raggio, portano un contributo specifico ad a_4 .

Regola di somma f.

⁴⁹Le espressioni, che come é noto diventano, al crescere di n , rapidamente complicate e composte da inaccessibili funzioni di correlazione a più corpi, sono state ricavate, in letteratura, per un OCP classico in 3D, fino all' ordine $n = 6$ (vedi (4.230)) e si possono trovare riassunte nella sezione 4 della rassegna di Baus ed Hansen [112].

⁵⁰Avremo che a_4 si riscrive tramite la funzione di correlazione di coppia, a_6 tramite la funzione di correlazione a tre punti, ecc. . . .

Integrando sulle variabili di velocità l'equazione (4.227), si ottiene l'equazione di continuità per il LEG ⁵¹:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_T(R_m; t|Q) + \nabla_r \int d\mathbf{v} \mathbf{v} \rho_T(R_m, V; t|Q) = 0 \quad . \quad (4.232)$$

Se integriamo tale equazione di continuità su \mathbf{r} esteso a tutto \mathbf{R}^2 e assumiamo che $\rho_T(R_m, V; t|Q)$ decada più velocemente di $1/r$ per Q fissato ⁵², il termine col gradiente non dà alcun contributo e otteniamo:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int d\mathbf{r} \rho_T(R_m; t|Q) = 0 \quad , \quad (4.233)$$

che con la condizione iniziale (4.37) porta alla generalizzazione della regola di somma di carica ad ogni tempo e per ogni valore delle velocità e delle posizioni delle particelle iniziali:

$$\int d\mathbf{r} \rho_T(R_m; t|Q) = 0 \quad . \quad (4.234)$$

Ci specifichiamo adesso al caso in cui Q contenga una sola particella fissata nell'origine O . Prendendo, adesso, la derivata parziale rispetto al tempo della (4.232) ed utilizzando la (4.227) si ricava:

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_T(R_m; t|O) \right|_{t=0} = \int d\mathbf{v} (\mathbf{v} \nabla_r)^2 \varphi(V) \rho_T(R_m; t|O) - \frac{(\beta e^2)}{\beta m} \rho \nabla_r \mathbf{E}_r(R_m|O) \quad (4.235)$$

$$- \frac{e^2}{m} \nabla_r \sum_{m'} \int d\mathbf{r}' \rho_T(R_m, R_{m'}|O) \quad , \quad (4.236)$$

dove l'ultimo termine del membro di destra è stato ricavato integrando per parti il termine col gradiente sulla velocità della (4.227), ed il coefficiente del secondo termine si ricava da $\int d\mathbf{v} v^2 \varphi(v) = 2/\beta m$. Utilizzando l'equazione che si ottiene applicando ∇_{r_1} alla BGY (4.36) insieme alla definizione delle f.c.t. (4.19) e (4.20) statiche, per cui $\rho_T(R, R'|O) = \rho_T(R, R', O) + \delta(R') \rho_T(R, O)$, si ottiene infine:

$$\left. \frac{\partial}{\partial t} \rho_T(R_m; t|O) \right|_{t=0} = \frac{\rho}{\beta m} \nabla_r^2 [\delta(\mathbf{r})] \delta_{m,0} \quad , \quad \forall m \quad . \quad (4.237)$$

Prendendo la trasformata di Fourier rispetto alle variabili planari e la serie di Fourier rispetto all'indice di piano m , troviamo:

$$a_2(\mathbf{k}, k_z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega^2 S(\mathbf{k}, k_z; \omega|O) = \frac{\rho}{\beta m} k^2 \quad , \quad (4.238)$$

che è l'espressione della regola di somma f per il LEG anticipata nella (4.151).

⁵¹Al tempo $t = 0$ la distribuzione di velocità è gaussiana. Qui assumiamo che tale distribuzione, al tempo t , sia decrescente a grandi v più velocemente di $1/v^4$ in modo da assicurare l'esistenza dell'energia cinetica media e l'annullarsi dell'ultimo termine del membro di destra della (4.227)

⁵²Durante lo studio della dinamica del sistema assumeremo sempre valida questa debole ipotesi di clustering.

Discussione di $a_4(K)$

Miesenböck e Tosi in [89] hanno calcolato $a_4(K)$, per il modello del LEG degenero; noi applicheremo i loro risultati al LEG classico.

Seguendo le notazioni di [89] ricordiamo che la funzione di risposta lineare di densità del LEG (vedi (3.30)) è definita da:

$$i\chi_{m-m'}(k; t) = \frac{1}{d}\theta(t)\langle[(N(k; t) - \rho), (N(-k; t) - \rho)]\rangle, \quad (4.239)$$

con $\chi(k, k_z) = \sum_m \chi_m e^{-ik_z m d}$. All' equilibrio termodinamico il teorema di fluttuazione ed dissipazione ci dice che:

$$S(k, k_z) = -\frac{2}{\beta\rho\omega} \text{Im}\chi(k, k_z; \omega), \quad (4.240)$$

questa relazione lega i coefficienti $a_n(k)$ da noi introdotti come momenti di S rispetto ad ω , ai momenti $M^{(n)}(K)$ rispetto ad ω dello spettro di dissipazione associato con χ ed utilizzati da Miesenböck e Tosi:

$$M^{(2n-1)}(K) = -\int \frac{d\omega}{\pi} \omega^{2n-1} \text{Im}\chi(k, k_z; \omega) = \frac{\rho\beta}{d} \int \frac{d\omega}{2\pi} \omega^{2n} S(k, k_z) \quad (4.241)$$

$$= (-)^n \frac{\rho\beta}{d} a_{2n}(K). \quad (4.242)$$

Essi trovano per $M^{(3)}$ ⁵³:

$$M^{(3)}(\mathbf{k}, k_z) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \omega^3 \text{Im}[\chi(\mathbf{k}, k_z; \omega)] = \rho\beta \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \omega^4 S(\mathbf{k}, k_z; \omega) \quad (4.243)$$

$$= \frac{\rho k^2}{m} \left[\bar{\omega}_o^2(\mathbf{k}, k_z) + 3E_c \frac{k^2}{m} + J(\mathbf{k}, k_z) + \right], \quad (4.244)$$

dove $\bar{\omega}_o$ è stato definito in (4.155) inoltre abbiamo indicato con $E_c = K_B T$ l' energia cinetica media per particella di un 2DEG e con:

$$J(\mathbf{k}, k_z) = \frac{1}{m} \int \frac{d^3 K}{(2\pi)^3} \left\{ \left[\frac{\mathbf{k}(\mathbf{k} + \mathbf{k}')}{k} \right]^2 dv(K + K') - \left[\frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{k} \right]^2 dv(K') \right\} \quad (4.245)$$

$$\times (S(K) - 1). \quad (4.246)$$

Nel limite di grandi lunghezze d' onda abbiamo:

$$J(\mathbf{k}, k_z) \xrightarrow{k, k_z \rightarrow 0} \eta \frac{k_z^2}{m} + \left(\frac{5}{8} E_p + \alpha \right) \frac{k^2}{m}, \quad (4.247)$$

⁵³Prendendo il limite $d \rightarrow \infty$ in (4.243) si ritrova l' $M^{(3)}$ di un 2DEG [94] come mostrato in [89].

dove E_p è l' energia potenziale esatta del sistema elettronico interagente per particella (spesso chiamata energia interna in eccesso per particella):

$$E_p = \frac{\rho}{2} \sum_m \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} v_{2D}(k) e^{-|m|kd} (S_m(k) - 1) , \quad (4.248)$$

e le due costanti η ed α sono:

$$\alpha = \frac{1}{2} \rho \sum_m \int d\mathbf{r} [g_m(r) - 1] \left[m \frac{\partial}{\partial m} + \frac{3}{8} \left(m \frac{\partial}{\partial m} \right)^2 \right] v_m(r) \quad (4.249)$$

$$\eta = \frac{1}{2} \rho d^2 \sum_m \int d\mathbf{r} [g_m(r) - 1] \left(m \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 v_m(r) , \quad (4.250)$$

dove, come al solito, $v_m(r) = 1/\sqrt{r^2 + (md)^2}$ e $g_m(r)$ è la solita funzione di distribuzione di coppia elettrone-elettrone che descrive le correlazioni a corto raggio tra due elettroni su piani separati lungo \hat{z} di md .

Possiamo allora scrivere tenendo conto dei diversi risultati:

$$a_4(k \rightarrow 0, k_z \rightarrow 0) = \frac{k^2}{\beta m} \left[\bar{\omega}_o^2(k \rightarrow 0, k_z \rightarrow 0) + \frac{k^2}{m} \left(3E_c + \frac{5}{8} E_p + \alpha \right) \right] \quad (4.251)$$

$$+ \eta \frac{k_z^2}{m} \quad , \quad (4.252)$$

e dalla (4.155) $\bar{\omega}_o^2(k \rightarrow 0, k_z \rightarrow 0) = \omega_p k^2 / (k^2 + k_z^2)$ dove $\omega_p = \sqrt{4\pi\rho e^2/dM}$

4.6.3 Analisi delle eccitazioni nel LEG a grandi lunghezze d' onda dalle regole di somma sui momenti

Il fattore di forma dinamico $S(K; \omega)$, o analogamente lo spettro di dissipazione associato a $\chi(K; \omega)$, nel limite di grandi lunghezze d' onda, si può scrivere come la sovrapposizione di tre contributi: quello dovuto alle oscillazioni di plasma, quello dovuto alle eccitazioni di singola particella e quello dovuto alle eccitazioni collisionali:

$$S(Q; \omega) = \pi X(Q) [\Delta(\omega, \omega(Q), \gamma(q)) + \Delta(\omega, -\omega(Q), \gamma(q))] + Y(Q) \frac{y(\omega/\omega_L)}{\omega_L} + Z(Q) \frac{z(\omega/\omega_c)}{\omega_c} , \quad (4.253)$$

dove $\omega(Q)$, $\omega_L(q) = \sqrt{q^2/\beta m}$, ed $\omega_c(q) \sim \sqrt{(2\pi n_2 e^2/m)q}$ sono rispettivamente le funzioni caratteristiche dell' oscillazione di plasma (eccitazioni collettive) del LEG, delle eccitazioni di singola particella del singolo piano (ricavata dalla funzione di risposta di Vlasov (3.97)) e delle eccitazioni collisionali (studiate da H. Totsuji in Ref. [98] e descritte in sottosezione 3.3).

Nel seguito trascureremo le eccitazioni di singola particella e collisionali interpi-
ano ⁵⁴. Potremo così utilizzare per entrambe i risultati per il singolo piano discussi
in sezione 3.3. Per l' eccitazione di plasma supporremo valida l' espressione ricavata
in RPA nel limite di grandi lunghezze d' onda (4.154).

Le funzioni spettrali $y(\omega/\omega_L)$ e $z(\omega/\omega_c)$ sono normalizzate in modo tale che:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} y(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} z(x) = 1 \quad . \quad (4.254)$$

Definiamo anche i loro momenti:

$$y_{l+1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} x^{l+1} y(x) \quad \text{e} \quad z_{l+1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{2\pi} x^{l+1} z(x) \quad , \quad (4.255)$$

dove se assumiamo ad esempio che la funzione spettrale collisionale abbia una forma
gaussiana, abbiamo che $z_2 = 1/2$, $z_4 = 3/4$, $z_6 = 15/8$, ecc ...

Le funzioni $Y(Q)$ e $Z(Q)$ rappresentano allora le ampiezze delle rispettive ecci-
tazioni.

Le oscillazioni collettive hanno vita media finita a causa dello smorzamento di
Landau $\gamma_L(q)$ e dello smorzamento collisionale $\gamma_c(q)$ (vedi sottosezione 3.3). La
forma delle linee spettrali del plasmone si allarga rispetto a quelle della $\delta(\omega \pm \omega(Q))$ e
può essere descritta dalla funzione $\Delta(\omega, \omega(Q), \gamma(q))$ usata in (4.253) con uno smorza-
mento $\gamma(q)$ del plasmone $\omega(Q)$. Nel caso di una forma gaussiana della riga:

$$\Delta(\omega, \omega(Q), \gamma(q)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\gamma^2(q)}} \exp\left(-\frac{(\omega - \omega(Q))^2}{2\gamma^2(q)}\right) \quad , \quad (4.256)$$

valgono le seguenti condizioni:

$$\begin{aligned} \lim_{\gamma(q) \rightarrow 0} \Delta(\omega, \omega(Q), \gamma(q)) &= \delta(\omega - \omega(Q)) & (4.257) \\ \int d\omega \omega^l \Delta(\omega, \omega(Q), \gamma(q)) &= \\ &= \begin{cases} \omega^l(Q) + \frac{l(l-1)}{2} \omega^{l-2}(Q) \gamma^2(q) + O(\gamma^4(q)) & l > 0 \\ 1 & l = 0 \end{cases} & (4.258) \end{aligned}$$

Poichè $\gamma_L(q)$ decade a zero con legge esponenziale per $q \rightarrow 0$ (vedi (3.102)) l' allarga-
mento spettrale proveniente dallo smorzamento di Landau non influenza l' analisi
delle regole di somma nel dominio di grandi lunghezze d' onda. Prenderemo al-
lora $\gamma(q) = \gamma_c(q)$. La funzione $X(Q)$ rappresenta naturalmente l' ampiezza delle
eccitazioni collettive.

Sostituendo (4.253) in (3.57), in (4.238) ed in (4.251) si ottiene rispettivamente:

$$X(Q) + Y(Q) + Z(Q) = \left(\frac{Q}{Q_D}\right)^2 + \dots \quad \text{per} \quad Q \rightarrow 0 \quad , \quad (4.259)$$

⁵⁴Per quanto riguarda le eccitazioni collisionali, trascureremo tutte e sole le collisioni che non
soddisfano la conservazione dell' impulso.

$$(\omega^2(Q) + \gamma_c^2(q) + \dots)X(Q) + \omega_L^2(q)Y(Q)y_2 + \omega_c^2(q)Z(Q)z_2 = \frac{q^2}{\beta m} \quad \forall Q \quad (4.260)$$

$$\begin{aligned} & (\omega^4(Q) + 6\omega^2(Q)\gamma_c^2(q) + \dots)X(Q) + \omega_L^2(q)Y(Q)y_4 + \omega_c^4(q)Z(Q)z_4 = \\ & = \frac{q^2}{\beta m} \left[q^2 \left(\frac{\omega_p^2}{q^2 + q_z^2} + \frac{5E_p}{8m} + \frac{3E_c}{m} + \frac{\alpha}{m} \right) + \eta \frac{q_z^2}{m} \right] \quad \text{per } Q \rightarrow 0 \quad (4.261) \end{aligned}$$

Vogliamo adesso studiare il caso di grandi lunghezze d' onda con $q_z \neq 0$. A tale scopo dobbiamo prendere il limite $Q \rightarrow 0$ mandando *prima* $q \rightarrow 0$ e *dopo* $q_z \rightarrow 0$. Guidati dalla (4.259) espandiamo nel dominio di grandi lunghezze d' onda:

$$X(Q) = X_o \left(\frac{Q}{Q_D} \right)^2 + X_1 \left(\frac{Q}{Q_D} \right)^4 + \dots \quad (4.262)$$

$$Y(Q) = Y_o \left(\frac{Q}{Q_D} \right)^2 + Y_1 \left(\frac{Q}{Q_D} \right)^4 + \dots \quad (4.263)$$

$$Z(Q) = Z_o \left(\frac{Q}{Q_D} \right)^2 + Z_1 \left(\frac{Q}{Q_D} \right)^4 + \dots \quad (4.264)$$

Guidati dai risultati in RPA possiamo espandere la frequenza caratteristica delle oscillazioni collettive nel solito limite di grandi lunghezze d' onda con $q_z \neq 0$ come:

$$\omega(Q) \xrightarrow{Q \rightarrow 0} \omega_p \frac{q}{\sqrt{q^2 + q_z^2}} = \omega_p \frac{q}{|Q|} \quad (4.265)$$

Sostituendo le espansioni (4.262) - (4.265) in (4.259) - (4.261) si ottengono le seguenti informazioni:

(i) Confrontando i termini proporzionali a q in (4.260) ricaviamo:

$$Z_o \left(\frac{q_z}{Q_D} \right)^2 + Z_1 \left(\frac{q_z}{Q_D} \right)^4 + \dots = 0 \quad (4.266)$$

(ii) Confrontando i termini proporzionali a q^2 in (4.261) ricaviamo:

$$\left[Z_o \left(\frac{q_z}{Q_D} \right)^2 + Z_1 \left(\frac{q_z}{Q_D} \right)^4 + \dots \right] z_4 \left(\frac{2\pi n_2 e^2}{m} \right)^2 = \eta \frac{q_z^2}{\beta m^2} \quad (4.267)$$

(iii) Dal primo termine del membro di sinistra di (4.260) ci rendiamo conto che $\omega(Q)$ e $\gamma_c(q)$ contribuiscono entrambi alla regola di somma f con termini proporzionali a q^2 nel limite $q \rightarrow 0$. Il LEG si comporta quindi in modo diverso dall' OCP in 3D [124] in cui il contributo del plasmon esaurisce da solo, l' intera ampiezza del fattore di forma dinamico nel limite di grandi lunghezze d' onda.

L' incompatibilità tra (i) e (ii) per $\eta \neq 0$ (ricordiamo che siamo a $q_z \neq 0$), potrebbe indicare l' esistenza di altri modi collettivi diversi dal plasmone in RPA e con andamento asintotico a grandi lunghezze d' onda diverso da (4.265): modi collettivi associati con le interazioni interplanari (le correlazioni interplanari a corto raggio che rendono η diverso da zero). Una situazione analoga si trova nel LEG degenere ed è discussa in Ref. [89].

Infine dalla (iii) ricaviamo in accordo con l' analisi svolta nella sottosottosezione 'Limite di grandi lunghezze d' onda' a pagina 109, che il termine $\Delta(K)$ nella BGY in (4.153) tiene conto anche degli effetti delle collisioni elettrone-elettrone sui piani del LEG. Nel limite di grandi lunghezze d' onda con $q_z \neq 0$, trascurare $\Delta(K)$ equivale ad affermare che in tale regime il comportamento del fattore di struttura statico si può determinare assumendo la regola di somma f (4.151) soddisfatta esattamente a piccoli k dalla sola eccitazione del plasmone (4.152) con ω_o dato da (4.154). L' osservazione (iii) dimostra che tale assunzione non è corretta poichè lo smorzamento collisionale delle eccitazioni collettive ed il plasmone (4.154) contribuiscono alla regola di somma f nel limite di grandi lunghezze d' onda e per $q_z \neq 0$, con termini dello stesso ordine in q .

Capitolo 5

Conclusioni

Il lavoro di tesi si divide in tre parti distinte che abbiamo raggruppato nei capitoli 2, 3 e 4 ed in cui abbiamo presentato rispettivamente, alcuni aspetti della fenomenologia, della modellistica e delle regole di somma di un LEG.

Nel capitolo 2 abbiamo presentato alcuni sistemi di elettroni stratificati esistenti in natura o realizzabili in laboratorio mettendo in evidenza l'importanza che può avere lo studio teorico del modello del LEG, soprattutto in connessione coi problemi aperti a cui tali sistemi fisici hanno portato, come l'effetto Hall quantistico e la cristallizzazione di Wigner.

Abbiamo presentato il sistema di elettroni legati alla superficie dell'elio liquido come esempio di un 2DEG classico; il sistema dello strato di inversione come esempio di 2DEG quantistico; le eterogiunzioni a semiconduttori come esempio di 2DEG quantistico, di doppio 2DEG, di LEG con numero di piani molto maggiore di uno (super-reticolo) e di 2DEG alternato a strati di buche in 2D; i composti intercalati della grafite essenzialmente come esempi di LEG con elevato numero di piani.

Nel capitolo 3 abbiamo presentato il problema dello schermo dielettrico del LEG degenerare in parallelo, quando possibile, con l'analogo sistema classico, a partire da alcuni modelli teorici nell'ambito della teoria della risposta lineare sviluppati in Letteratura:

- Il LEG non interagente; per il quale abbiamo introdotto la funzione di risposta di Lindhard di un 2DJ e quella di Vlasov dell'analogo sistema classico.
- Il LEG in RPA [5, 6]; del quale abbiamo descritto anche le eccitazioni collettive mettendo in evidenza l'analogia qualitativa tra il LEG nel limite $kd \ll 1$ (ricordiamo che la trasformata di Fourier rispetto alle variabili planari del potenziale di coppia tra elettroni separati di md lungo $\hat{\mathbf{z}}$ è $\propto (2\pi/k)e^{-|m|kd}$) e l'OCP in 3D omogeneo: quando K non ha componenti $\parallel \hat{\mathbf{z}}$ allora l'energia del plasmone del LEG è finita a piccoli momenti k trasferiti.
- Le correzioni di campo locale nel LEG; che sono state trattate con i seguenti modelli:

- (i) La STLS e la SSTL [7], per trovare il potenziale interionico schermato da gli elettroni su i piani di grafite dei GICs.
- (ii) Il modello di Świerkowski ed al. [8], per dimostrare che la densità critica per la cristallizzazione di Wigner in un 2DJ isolato è inferiore a quella di un 2DJ inserito in un LEG, per effetto delle interazioni interstrato tra gli elettroni.

Nella discussione di tali modelli ci siamo preoccupati di sottolineare l'importanza delle regole di somma ed in particolare l'approssimazione caratteristica di ciascuno modello presentato, di trascurare (a vari livelli di 'precisione' nei diversi modelli) le correlazioni Coulombiane a corto raggio interplanari.

Nella sottosezione 3.2.1 abbiamo dato una derivazione termodinamica (e valida quindi nel caso classico come in quello quantistico) della regola di somma sulla compressibilità per il LEG in teoria della risposta lineare. Nella sottosezione 3.2.2 abbiamo presentato il metodo sperimentale con cui Eisenstein ed al. [14] utilizzando un LEG con $N_p = 2$, determinano la compressibilità termodinamica di un 2DJ. Abbiamo sottolineato l'importanza delle correlazioni Coulombiane intraplanari per l'interpretazione dei valori negativi della compressibilità.

Gran parte dei contributi originali del lavoro di tesi si trovano nel capitolo 4. In esso abbiamo applicato al LEG **classico** alcune regole di somma tipiche dei fluidi carichi in 2D ed in 3D riassunte nel lavoro di rassegna di Martin [11]. Abbiamo inoltre utilizzato il sistema del LEG classico per studiare l'influenza della dimensionalità spaziale sul comportamento asintotico delle funzioni di correlazione troncate di un sistema Coulombiano, per grandi separazioni spaziali tra le cariche, cioè sul clustering.

Riassumiamo brevemente i risultati ottenuti nel quarto capitolo.

Nella sezione 4.2 abbiamo definito il tipo di funzioni di correlazione utilizzate in tutta l'analisi successiva: le funzioni di correlazione troncate (f.c.t.) (definite in (4.19) e (4.20)) e le densità di particelle in eccesso (d.p.e.) (definite in (4.15)).

Abbiamo messo in evidenza che il punto di vista adottato in tutto il capitolo è quello di supporre *a priori* che le funzioni di correlazione di un LEG con piani infinitamente estesi (nel T-lim), all'equilibrio termodinamico esistano (finite) e soddisfino equazioni integrodifferenziali statiche identiche a quelle della gerarchia dovuta a Born-Green-Yvon (BGY) per l'analogo sistema a volume finito (4.36).

Nella sottosezione 4.2.2 abbiamo dimostrato che nel LEG nel T-lim la regola di somma di carica per le d.p.e. ad un numero di punti qualunque (4.37) è soddisfatta se assumiamo le d.p.e. integrabili. Sotto la stessa condizione, la regola di somma di dipolo per le d.p.e. a due punti (4.41) risulta una conseguenza delle simmetrie del sistema (omogeneità dei piani e simmetria azimutale).

Nella proposizione 1 della sezione 4.3 abbiamo trovato le regole di somma multipolari per il LEG con $N_p < \infty$ o $N_p = \infty$, con piani omogenei, mettendole in relazione col tipo di clustering. Confrontando tale proposizione con quella analoga per un OCP in ν -dimensioni ($\nu = 2$ o 3) interagente con un potenziale Coulombiano

con linee di forza confinate nello spazio ν -dimensionale (vedi proposizione 2.2 in Ref. [11]), troviamo che:

- (i) Il LEG con $N_p = \infty$ ha un comportamento simile a quello di un OCP in 3D.
- (ii) Il LEG con $N_p \leq \infty$ ha un comportamento simile a quello di un OCP in 2D interagente con potenziale Coulombiano $\propto -\ln |\mathbf{r}|/r_o$ (dove r_o ha le dimensioni di una lunghezza).

Per “comportamento simile” intendiamo in entrambi i casi, che il LEG e l’ OCP hanno le stesse condizioni di clustering necessarie per la validità delle proprie regole di somma di multipolo (l, n) (adattate alla particolare geometria del sistema) per determinati valori di l ed n .

Nella sottosezione 4.4.1 abbiamo studiato il tipo di clustering compatibile con le equazioni di equilibrio di un LEG nel T-lim con un numero finito di piani. Nella sottosezione ‘Un piano’ a pagina 90, abbiamo cominciato col riportare i risultati noti per l’ OCP in 2D omogeneo. Per tale sistema il risultato rilevante è l’ incompatibilità del clustering esponenziale con la struttura delle equazioni BGY dimostrata da Alastuey e Martin [10]. Essi hanno dimostrato che nel limite di grandi lunghezze d’ onda il fattore di struttura statico $S(k)$ è legato al potenziale di interazione dalla solita relazione $S(k) \rightarrow [\beta v_{2D}(k)]^{-1}$. Quindi le correlazioni di coppia non possono decadere più velocemente di r^{-3} . Nelle sottosezioni successive abbiamo ripetuto la dimostrazione di Alastuey e Martin per un sistema composto da più piani. Abbiamo esplicitamente dimostrato nel caso di $N_p = 2$ e 3 e soltanto affermato nel caso di $N_p > 3$ finito, che sotto la debole ipotesi di clustering integrabile (che assicura la validità della regola di somma di carica), le funzioni di correlazione troncate a due punti interpiano e/o quelle intrapiano, devono avere un andamento asintotico decrescente come o più lentamente di $1/|\mathbf{r}|^3$ per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Le proprietà note [10] del clustering di un OCP in 2D nel T-lim suggeriscono che tale comportamento sia caratteristico delle correlazioni intrapiano. A temperature sufficientemente alte (o densità sufficientemente basse) perchè valga l’ approssimazione di Debye-Hückel l’ andamento asintotico per $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ delle correlazioni intrapiano è proprio $1/|\mathbf{r}|^3$ (vedi sottosezione 4.4.3)¹. La mancanza del clustering esponenziale è un effetto della limitatezza spaziale del sistema di cariche (lungo $\hat{\mathbf{z}}$) nel quale la regola di somma di carica rimane l’ unica regola di somma multipolare soddisfatta.

Nella sottosezione 4.4.2 abbiamo studiato il comportamento asintotico delle funzioni di correlazione di un LEG con $N_p = \infty$ o con $N_p < \infty$ con condizioni periodiche al contorno lungo la direzione $\hat{\mathbf{z}}$ su una lunghezza $L = N_p d$, sia nello spazio K nel limite di grandi lunghezze d’ onda che nello spazio R nel limite di grandi separazioni tra le cariche.

¹Il fattore di struttura statico $S(k)$ di un OCP in 2D studiato in RPA [97, 4], ha un termine di ordine dominante a grandi lunghezze d’ onda uguale a quello del fattore di struttura ricavato in approssimazione di Debye-Hückel: $[1 + K_D/k]^{-1}$ dove $K_D = 2\pi\beta\rho e^2$ è l’ inverso della lunghezza di schermo di Debye.

Nella sottosottosezione 'Limite di grandi lunghezze d' onda' a pagina 109 abbiamo analizzato la BGY che lega il fattore di struttura statico alle correlazioni a tre punti (vedi equazione (4.141)) a grandi lunghezze d' onda, nei due regimi di $kd \ll 1$ e di $kd \gg 1$. A questo scopo è stato utile separare la BGY (4.141) in un termine $\Delta(K)$ contenente una particolare combinazione delle f.c.t. a 2 ed a 3 corpi integrata sulla forza Coulombiana e nel resto contenente solo f.c.t. a due punti². Con tale separazione abbiamo dimostrato che trascurando il termine $\Delta(K)$ si ottiene per il fattore di struttura statico $S(K)$ una espressione approssimata che in accordo con la regola di somma f (ricavata nella sezione 4.6 dalle equazioni dinamiche del sistema) riproduce esattamente i termini di ordine dominante a piccoli $|\mathbf{k}|$ dei modi di eccitazione collettiva del LEG trattato in RPA (vedi capitolo 3). Analizzando il comportamento di $\Delta(K)$ a grandi lunghezze d' onda abbiamo ricavato le seguenti proprietà:

- Per $kd \ll 1$:
 1. Quando $k_z = 0$ se assumiamo valide le regole di somma di carica e di dipolo sulle d.p.e. a 2 ed a 3 punti abbiamo che:

$$\lim_{k \rightarrow 0} \Delta(k, 0) = 0 \quad .$$

2. Quando $k_z \neq 0$ trascurare $\Delta(K)$ nel limite di grandi lunghezze d' onda non è giustificabile da opportune regole di somma e porta alla violazione della regola di somma di carica del LEG. In questo caso trascurare $\Delta(K)$ significa trascurare gli effetti delle collisioni elettrone-elettrone sui piani del LEG (vedi sezione 4.6.3) e parte delle interazioni elettrone-elettrone interplanari (vedi l' espressione del terzo momento del fattore di struttura dinamico rispetto alla frequenza (4.251)).

- Per $kd \gg 1$ il limite di grandi lunghezze d' onda si ottiene prendendo *prima* $d \rightarrow \infty$ e *poi* $k \rightarrow 0$. In questo caso il LEG diventa una serie infinita di OCP in 2D isolati tra loro.

Da questa analisi e dall' equazione (4.153) abbiamo ricavato che $\Delta(K)$ non contribuisce al termine dominante di ordine k^2 nello sviluppo asintotico a piccoli k (d finito) di $S(k, 0)$. In questo caso ritroviamo per il LEG di infiniti piani una regola di somma analoga alla condizione di Stillinger-Lovett dei sistemi omogenei (vedi equazioni (4.162), (4.163) e (4.164). Dal confronto delle (4.149) e (4.150) ricaviamo come la regola di somma di Stillinger-Lovett si modifica nel caso del LEG con un numero finito di piani).

Nella sottosottosezione a pagina 115, abbiamo studiato il tipo di clustering compatibile con le equazioni di equilibrio BGY del LEG nel T-lim, nel T-lim $_{N_p}$ quando

²Separazione che abbiamo già incontrato nello studio del LEG con un numero finito di piani (vedi ad esempio l' equazione (4.93)) e che diventa naturale scrivendo le equazioni gerarchiche BGY in termini delle f.c.t. (vedi sottosezione 4.2.2) nella forma proposta da Martin in Ref. [11].

$d \rightarrow 0$ ($d \neq 0$). In tal caso il LEG copre tutto lo spazio tridimensionale diventando un OCP in 3D con la dinamica degli elettroni vincolata a rimanere ortogonale a $\hat{\mathbf{z}}$. Abbiamo dimostrato una proposizione (vedi proposizione) per cui in tale sistema non si può assumere che le f.c.t. a due punti $\rho_T(r, z)$ tra una particella nell' origine ed una particella in (\mathbf{r}, z) (siano integrabili e) decrescano come una potenza inversa di $|R|$ per $r \rightarrow \infty, \forall z$. In tali condizioni il LEG si comporta come un OCP in 3D; in esso è possibile avere un clustering esponenziale delle f.c.t.. Come sappiamo dalla proposizione dimostrata in sezione 4.3, questo assicura la validità delle regole di somma multipolari (l, n) di ordine l comunque elevato: tutti i multipoli sono schermati. Naturalmente nel limite opposto in cui $d \rightarrow \infty$ il LEG si comporta come un insieme di OCP in 2D isolati. Alastuey e Martin [10] hanno dimostrato che il clustering esponenziale delle funzioni di correlazione di equilibrio di un OCP in 2D è incompatibile con le BGY.

Nella sottosezione 4.4.3 abbiamo studiato nello spazio R le conseguenze della particolare chiusura delle BGY che si ottiene trascurando $\Delta(K)$ nella (4.141) sul tipo di clustering in un OCP in 2D e nel LEG con condizioni periodiche al contorno. Abbiamo trovato i seguenti risultati:

- Nel caso del singolo piano tale chiusura porta all' espressione per la $g(r)$ in approssimazione di Debye-Hückel (4.76) (vedi sottosezione 5.2.1 in Ref. [112]) che coincide con quella trovata da Fetter [16] attraverso un modello elettro-idrodinamico dell' OCP in 2D. La traduzione del risultato di Fetter nel nostro formalismo si ottiene interpretando $\rho(g(r) - 1)$ come la variazione nella densità superficiale in numero di elettroni, dal suo valore medio ρ , che si forma come schermo elettrostatico ad una carica del fluido fissata sull' origine. Nel modello di Fetter tale “nuvola schermante” ha un decadimento algebrico $\propto 1/r^3$ a grandi r , in accordo con quello esatto previsto da Alastuey e Martin in [10] discusso all' inizio della sezione 4.4.1. In accordo con Fetter abbiamo trovato che il potenziale generato dalla densità di carica in eccesso $\rho_e(r) = \rho[\rho(g(r) - 1) + \delta(\mathbf{r})]$ ha un comportamento anisotropo: varia asintoticamente $\propto 1/z^2$ lungo $\hat{\mathbf{z}}$ e $\propto 1/r^3$ sul piano (x, y) . Il piano di Fetter contiene cioè un momento di dipolo finito. In particolare si trova che tale momento di dipolo è dato dalla lunghezza di schermo di Debye.
- Nel caso del LEG tale approssimazione coincide con quella ottenuta da Fetter [9] (vedi le equazioni (4.191) e (4.193)) attraverso un modello idrodinamico del LEG. Con tale approssimazione riusciamo a dare i comportamenti asintotici delle f.c.t. parziali $\rho_{T_m}(r)$, tra una carica nell' origine ed una carica in (\mathbf{r}, md) lungo l' asse $\hat{\mathbf{z}}$ (cioè per $md \gg r$) e sul piano (x, y) (cioè per $md \ll r$). In entrambi i casi il clustering ha un decadimento alla Yukawa. Per separazioni tra i piani tali che $k_D d \gg 1$ la lunghezza di schermo lungo $\hat{\mathbf{z}}$ è diversa da quella sul piano (x, y) ; lo schermo è anisotropo. Il clustering sul piano risulta in accordo con la proposizione 1 in sottosezione 'Tipo di clustering compatibile con le equazioni di equilibrio' a pagina 115.

Nella sezione 4.5 abbiamo dimostrato che per un LEG con un numero finito di piani infinitamente estesi e con ordine cristallino a lungo raggio nello stato di equilibrio termodinamico, il clustering compatibile con le BGY (o meglio con le WLMB da esse dedotte) è quello che viola la condizione (4.212). Questa condizione significa che se abbiamo su i piani del LEG una rottura dell' invarianza sotto il gruppo continuo delle traslazioni $\perp \hat{\mathbf{z}}$ allora in essi il clustering (interpiano o/e intrapiano) deve essere lento (non esponenziale). In particolare indicando con D la distanza tra due gruppi di elettroni, il clustering deve andare come o più lentamente di $1/D^3$ per $D \rightarrow \infty$. Questo coincide esattamente col tipo di clustering che ci aspettiamo per un LEG con un numero finito di piani omogenei (vedi sottosezione 4.4.1) e pertanto non esclude l' esistenza di una transizione di fase tra il LEG omogeneo ed il LEG cristallizzato in accordo con i risultati di Ref. [8] presentati in sezione 3.6. Il confronto con i risultati noti nel caso $N_p = 1$ [132] mostra che prendendo come punto di partenza per lo studio del clustering, relazioni tra le funzioni di correlazione diverse dalla gerarchia BGY (come ad esempio la disuguaglianza di Bogoliubov), è possibile rallentare ulteriormente il clustering compatibile con la rottura di simmetria.

Nella sezione 4.6 abbiamo ricavato dalle BBGKY l' espressione a piccoli tempi della funzione di struttura dinamica (la funzione di van Hove): abbiamo calcolato esplicitamente il primo (la regola di somma f o regola di somma del primo momento) ed imitato il secondo (regola di somma sul secondo momento) da quello calcolato esplicitamente per il LEG degenerare in Ref. [89].

Abbiamo concluso il capitolo 4 con un' analisi (simile a quella svolta in Ref. [124] per un OCP in 3D) del contributo dato a grandi lunghezze d' onda e per $k_z \neq 0$, alle regole di somma sui momenti del fattore di struttura dinamico rispetto alla frequenza, dalle eccitazioni nel LEG: le oscillazioni di plasma, le eccitazioni di singola particella e le eccitazioni collisionali.

5.1 Prospettive

Argomento centrale del lavoro di tesi è stato lo studio del tipo di comportamento asintotico a grandi separazioni spaziali tra le particelle delle funzioni di correlazione (ossia delle proprietà di schermo) di un sistema Coulombiano **classico** in funzione della dimensione dello spazio in cui è confinata la dinamica delle cariche. In particolare abbiamo analizzato la compatibilità con le condizioni di equilibrio termodinamico (BBGKY) del clustering esponenziale in funzione della dimensionalità spaziale.

È interessante studiare il problema analogo per un sistema Coulombiano **quantistico**. In questo caso però il punto importante, piuttosto che la dipendenza del clustering esponenziale dalla dimensionalità spaziale, è che le correlazioni statiche del gas Coulombiano quantistico non hanno clustering esponenziale nemmeno quando i parametri termodinamici sono quelli corrispondenti al regime di Debye classico. Solo poche regole di somma rimangono vere.

Le caratteristiche dello schermo statico del sistema quantistico sono comparabili

con quelle dello schermo dinamico del sistema classico presentate nel capitolo introduttivo: in entrambi i casi l' intervento combinato delle distribuzioni delle configurazioni spaziali degli elettroni e quelle delle loro velocità (per la non commutatività nel caso quantistico) induce un decadimento algebrico delle correlazioni [13].

Diamo brevemente il quadro di ciò che si conosce sul problema dell' assenza del clustering esponenziale per le funzioni di correlazione quantistiche statiche di un fluido carico a temperatura diversa da zero, mettendo in evidenza i problemi aperti con particolare riferimento al fluido degenerare a temperatura zero.

Prendiamo come sistema di riferimento un jellium tridimensionale quantistico composto da N elettroni in un volume Ω . Le quantità rilevanti per lo studio di tale sistema e le equazioni di equilibrio che esse devono soddisfare sono descritte in appendice E. La notazione usata nella prossima sottosezione è illustrata in tale appendice.

5.1.1 Clustering e regole di somma nel jellium omogeneo tridimensionale

Alastuey e Martin [13, 137] mostrano che il decadimento a grandi $|\mathbf{r}|$ della funzione di correlazione di equilibrio carica-carica $S(\mathbf{r})$ del jellium tridimensionale omogeneo a temperatura diversa da zero dovrebbe essere:

- (i) Di tipo algebrico $S(\mathbf{r}) \propto 1/|r|^n$.
- (ii) Con $6 \leq n \leq 10$.

Essi studiano il jellium in regime semiclassico. Nel calcolo del termine proporzionale ad \hbar^4 (con \hbar costante di Planck) nell' espansione di Wigner-Kirkwood [138] di $S(\mathbf{r})$ con la statistica di Boltzmann ³ trovano:

$$S(\mathbf{r}) = S_o(\mathbf{r}) + \hbar^2 S_2(\mathbf{r}) + \hbar^4 S_4(\mathbf{r}) + \dots \quad , \quad (5.1)$$

dove $S_o(\mathbf{r})$ è la funzione di correlazione carica-carica del sistema classico all' equilibrio termodinamico. Anche S_2, S_4, \dots sono esprimibili tramite funzioni di correlazione dell' OCP corrispondente. Le funzioni di correlazione dell' OCP tridimensionale omogeneo, come sappiamo, hanno un clustering esponenziale nel regime di Debye. Il termine $S_2(\mathbf{r}) = (\beta/12m)\nabla^2 S_o(\mathbf{r})$ ha un decadimento esponenziale a grandi $|\mathbf{r}|$ ma il termine $S_4(\mathbf{r})$ (ed i successivi [137]) ha un comportamento asintotico algebrico ⁴:

$$\frac{7}{16\pi^2} \left[\frac{\beta e}{m} \right]^2 \frac{1}{|\mathbf{r}|^{10}} \quad \text{per} \quad |\mathbf{r}| \rightarrow \infty \quad . \quad (5.2)$$

³I termini di scambio che provengono dalla statistica di Fermi sono esponenzialmente piccoli nel limite classico ($\hbar \rightarrow 0$) [119]: la ragione per questo è che le particelle libere possono essere scambiate solo quando sono ad una distanza dell' ordine della lunghezza d' onda termica di de Broglie $\lambda_{dB} = \sqrt{2\pi\hbar^2\beta/m}$ che è piccola nel limite $\hbar \rightarrow 0$; nel sistema interagente la repulsione Coulombiana si oppone fortemente a tale avvicinamento.

⁴Questo comportamento significa che $S(\mathbf{k})$ non può essere analitica in $\mathbf{k} = 0$ (ma deve avere un termine $\propto |\mathbf{k}|^7$ nel suo sviluppo a piccoli $|\mathbf{k}|$.)

Questa è una forte indicazione del fatto che nel jellium tridimensionale non c'è il clustering esponenziale (la convergenza della serie (5.1) non è stata controllata) neanche quando i parametri termodinamici provocherebbero, nell' analogo sistema classico, una fase di plasma.

Per trovare un limite superiore al decadimento di $S(\mathbf{r})$ Alastuey e Martin analizzano il tipo di clustering spaziale compatibile con la gerarchia delle equazioni per le correlazioni all' equilibrio termodinamico ⁵ ed arrivano a dimostrare (utilizzando la KMS e la località) che le code algebriche sono limitate da $1/|\mathbf{r}|^6$:

$$|S_\tau(\mathbf{r})| \leq \frac{M(\tau)}{|\mathbf{r}|^6} \quad \text{per} \quad |\mathbf{r}| \rightarrow \infty \quad \text{con} \quad 0 \leq \tau \leq \beta \quad , \quad (5.3)$$

questa dimostrazione è non perturbativa e valida per la statistica di Fermi, ma si basa su un certo numero di assunzioni considerate valide *a priori* (come l' esistenza del limite termodinamico, l' ipotesi di comportamenti asintotici monotoni per le correlazioni, l' esistenza per tutte le funzioni di correlazione troncate di espansioni in potenze della distanza tra le particelle che partono da termini $\propto 1/|\mathbf{r}|^3$ dovuti alle interazioni dipolo-dipolo, al tendere del punto \mathbf{r} all' infinito, ...).

L' assenza del clustering esponenziale dimostrato da Alastuey e Martin per le correlazioni di equilibrio quantistiche del jellium deve valere per qualunque valore dei parametri termodinamici (ad eccezione che per $T = 0$): lo schermo di Debye non esiste nella materia reale.

Questo si può capire nel modo seguente: in un sistema classico tutti i momenti di multipolo della nuvola di cariche schermanti si annullano nel regime di Debye [121]. In un sistema quantistico il monopolio (cioè la carica totale) si annulla, ma i multipoli di ordine superiore rimangono, in generale, non nulli poichè le *fluttuazioni quantistiche intrinseche* impediscono una organizzazione perfetta di carica nella nuvola schermante.

Riassumiamo le regole di somma per la funzione di risposta e per le funzioni di correlazione simmetrizzate statiche e dinamiche del sistema quantistico, che rimangono valide (rispetto al caso classico)[137]:

a. Statica

(i) Regola di somma di carica.

$$\int d\mathbf{r} \langle c_\tau(\mathbf{r})A \rangle_{T=0} = 0 \quad \text{con} \quad 0 \leq \tau \leq \beta \quad , \quad (5.4)$$

dove A è un generico osservabile locale. Da tale regola di somma si ricava la regola di somma di carica per la funzione di risposta (E.22) e per la funzione di correlazione

⁵Con lo stesso punto di vista adottato nel nostro studio del LEG classico, essi assumono che il limite termodinamico delle funzioni di Green con tempo immaginario, $\langle A_\tau B \rangle$, del jellium esista per osservabili locali A e B e che le funzioni risultanti siano soluzioni delle equazioni di equilibrio con la stessa forma di quelle del sistema a volume finito.

statica simmetrizzata (E.26):

$$\int d\mathbf{r}\chi(\mathbf{r}|A) = 0 \quad \text{e} \quad \int d\mathbf{r}c[\mathbf{r}|A] = 0 \quad , \quad (5.5)$$

(ii) Regola di somma di dipolo.

$$\int d\mathbf{r}\mathbf{r} \langle c_\tau(\mathbf{r})A \rangle_T = \frac{1}{2} \left[\frac{e^{\hbar\omega_p\tau}}{e^{\hbar\omega_p\beta} - 1} - \frac{e^{-\hbar\omega_p\tau}}{1 - e^{-\hbar\omega_p\beta}} \right] \int d\mathbf{r}\mathbf{r} \langle [A, c(\mathbf{r})] \rangle_T \quad (5.6)$$

con $0 \leq \tau \leq \beta$

dove A è un generico osservabile locale, $\omega_p = \sqrt{4\pi\rho e^2/m}$ è la frequenza di plasma e ρ è la densità di elettroni. Si vede quindi che le ITGF soddisfano alla regola di somma di dipolo solo quando A dipende soltanto dalla configurazione spaziale degli elettroni (in tal caso il membro di destra della (5.6) si annulla). Dalla (5.6) si ricava:

$$\int d\mathbf{r}\mathbf{r}\chi(\mathbf{r}|A) = 0 \quad \text{e} \quad \int d\mathbf{r}\mathbf{r}c[\mathbf{r}|A] = 0 \quad . \quad (5.7)$$

Si trova dall' espansione in potenze della costante di Planck che la funzione $\langle c(\mathbf{r})A \rangle_T$ non obbedisce a regole di somma multipolari di ordine maggiore.

(iii) Condizione sul secondo momento di Stillinger-Lovett.

$$\int d\mathbf{r}|\mathbf{r}|^2 \langle c_\tau(\mathbf{r})c(0) \rangle_T = -\frac{3}{2\pi\beta} \frac{\hbar\omega_p\beta}{2} \left[\frac{e^{\hbar\omega_p\tau}}{e^{\hbar\omega_p\beta} - 1} + \frac{e^{-\hbar\omega_p\tau}}{1 - e^{-\hbar\omega_p\beta}} \right] \quad , \quad (5.8)$$

da cui si ricava:

$$\int d\mathbf{r}|\mathbf{r}|^2\chi(\mathbf{r}|0) = -\frac{3}{2\pi} \quad \text{e} \quad \int d\mathbf{r}|\mathbf{r}|^2S(\mathbf{r}|0) = -\frac{3}{2\pi\beta} \frac{\hbar\omega_p\beta}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega_p\beta}{2}\right) \quad . \quad (5.9)$$

b. Dinamica

Nella dinamica del jellium valgono delle regole di somma di carica di dipolo e di Stillinger-Lovett analoghe a quelle del caso statico. Esse si ricavano prendendo la continuazione analitica delle (5.4), (5.6) e (5.8) a $\tau = it/\hbar$. Un altro set di regole di somma di cui disponiamo nello studio della dinamica del jellium sono le regole di somma su i momenti rispetto alla frequenza della funzione di struttura dinamica (nel caso di un jellium degenere queste sono descritte nell' appendice 7 di [90]).

5.1.2 Problemi aperti

Come abbiamo già osservato (nel capitolo 1) per il caso della dinamica classica di un OCP tridimensionale omogeneo, anche nel caso statico quantistico del jellium tridimensionale omogeneo, l' assenza di un clustering esponenziale non è prevista dalle teorie di campo medio (RPA per il caso quantistico ed approssimazione di Vlasov per il caso classico.). Queste non tengono conto in modo appropriato delle

fluttuazioni quantistiche intrinseche e prevedono un clustering esponenziale (vedi appendice H in [137]) per temperature $T \neq 0$. A temperature $T = 0$ le correlazioni ricavate in RPA decadono con le oscillazioni algebriche ($\propto 1/|\mathbf{r}|^3$) di Friedel [139]. Mentre le oscillazioni di Friedel a $T = 0$ si possono far risalire alla singolarità della distribuzione di Fermi-Dirac all' impulso di Fermi (vedi sezione 3.3), le code algebriche (comprese tra $1/|\mathbf{r}|^6$ e $1/|\mathbf{r}|^{10}$) a $T \neq 0$ sono dovute alle fluttuazioni quantistiche intrinseche del sistema.

Per quanto riguarda i meccanismi di schermo ci si aspetta che a $T = 0$ le fluttuazioni quantistiche intrinseche debbano avere un peso non inferiore rispetto al caso $T \neq 0$ (il coefficiente delle code algebriche (5.2) divergono a $T = 0$).

Il fattore di struttura di un gas libero di Fermi nel suo stato fondamentale ha un termine $\propto |\mathbf{k}|$ dovuto ai termini di scambio [139]. Questo provoca un decadimento $\propto 1/|\mathbf{r}|^4$. Inoltre il potenziale effettivo nell' RPA per il gas Coulombiano a $T = 0$ ha le oscillazioni di Friedel a lungo raggio $\cos(2K_F|\mathbf{r}|)/|\mathbf{r}|^3$. Ci aspettiamo che le fluttuazioni quantistiche intrinseche provochino code algebriche di ordine maggiore e pertanto completamente nascoste a grandi $|\mathbf{r}|$ dalle code più lunghe provocate dall' esistenza della superficie di Fermi.

Cornu e Martin [140] usando la teoria delle perturbazioni a molti corpi a temperatura finita (vedi [141]) e la statistica di Fermi, hanno trovato dei diagrammi (i diagrammi a scala descritti in figura 3 e 4 in [140]) non inclusi nella somma ad anello dell' RPA che portano ad un decadimento $\propto 1/|\mathbf{r}|^{10}$ della funzione di correlazione carica-carica ($S(x)$). Essi vedono che l' introduzione della statistica di Fermi non modifica qualitativamente il risultato semiclassico dei lavori precedenti [13, 137] fino a quando ci limitiamo allo studio di tutta la classe dei diagrammi a scala. Infine Cornu e Martin trovano che $S_{RPA}(x)$ soddisfa la regola di somma di Stillinger-Lovett (5.8) se in essa sostituiamo ρ (che entra nella definizione di ω_p) con la densità del gas non interagente. Questo non è più vero quando teniamo conto anche solo del primo dei diagrammi a scala.

Concludiamo il lavoro di tesi indicando alcuni problemi aperti sollevati dall' analisi sul tipo di clustering delle funzioni di correlazioni del jellium tridimensionale omogeneo.

- (i) Trovare un modello consistente per $S(\mathbf{r})$ che soddisfi simultaneamente le regole di somma fondamentali dovute allo schermo insieme con il comportamento asintoticamente algebrico.
- (ii) Studiare la transizione a basse temperature tra i due diversi tipi di comportamenti asintoticamente algebrici delle correlazioni: quello dovuto alla discontinuità della distribuzione di Fermi-Dirac a $T = 0$ (dovuta all' esistenza della statistica di Fermi) e quello dovuto alle fluttuazioni quantistiche intrinseche a $T \neq 0$ (dovuto essenzialmente allo schermo Coulombiano).
- (iii) Studiare in dettaglio il caso del sistema a $T = 0$ cercando di separare dalle code algebriche delle correlazioni il contributo dovuto alla statistica di Fermi e quello

dovuto alle fluttuazioni quantistiche intrinseche del sistema di elettroni.

Appendice A

Le funzioni di correlazione di Ursell

In questa appendice ricordiamo la definizione delle funzioni di Ursell $u^{(n)}$ ad n punti (spesso chiamate anche funzioni di cluster o irriducibili), in termini delle funzioni di distribuzione ridotte $\rho^{(n)}$ definite per il LEG in (4.7). Indicando la posizione dell' m -esimo corpo R^m con m abbiamo:

$$\rho^{(1)}(1) = u^{(1)}(1) \quad , \quad (\text{A.1})$$

$$\rho^{(2)}(1, 2) = u^{(2)}(1, 2) + \rho^{(1)}(1)\rho^{(1)}(2) \quad , \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} \rho^{(3)}(1, 2, 3) = & u^{(3)}(1, 2, 3) + u^{(2)}(1, 2)\rho^{(1)}(3) + u^{(2)}(1, 3)\rho^{(1)}(2) \\ & + u^{(2)}(2, 3)\rho^{(1)}(1) + \rho^{(1)}(1)\rho^{(1)}(2)\rho^{(1)}(3) \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \rho^{(4)}(1, 2, 3, 4) = & u^{(4)}(1, 2, 3, 4) + u^{(3)}(1, 2, 3)\rho^{(1)}(4) + u^{(3)}(1, 2, 4)\rho^{(1)}(3) \\ & + u^{(3)}(1, 3, 4)\rho^{(1)}(2) + u^{(3)}(2, 3, 4)\rho^{(1)}(1) \\ & + u^{(2)}(1, 2)u^{(2)}(3, 4) + u^{(2)}(1, 3)u^{(2)}(2, 4) + u^{(2)}(1, 4)u^{(2)}(2, 3) \\ & + u^{(2)}(1, 2)\rho^{(1)}(3)\rho^{(1)}(4) + u^{(2)}(1, 3)\rho^{(1)}(2)\rho^{(1)}(4) \\ & + u^{(2)}(1, 4)\rho^{(1)}(2)\rho^{(1)}(3) + u^{(2)}(2, 3)\rho^{(1)}(1)\rho^{(1)}(4) \\ & + u^{(2)}(2, 4)\rho^{(1)}(1)\rho^{(1)}(3) + u^{(2)}(3, 4)\rho^{(1)}(1)\rho^{(1)}(2) \\ & + \rho^{(1)}(1)\rho^{(1)}(2)\rho^{(1)}(3)\rho^{(1)}(4) \quad , \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

...

Osserviamo che le $u^{(n)}$ come le $\rho^{(n)}$ sono simmetriche sotto una qualunque permutazione di particelle. Inoltre, osservando che nel limite termodinamico (T-lim) $N \rightarrow \infty$ $S \rightarrow \infty$ $\tilde{\rho} = \rho$ vale:

$$\frac{d_{i_1, \dots, i_n}}{N^n} \xrightarrow{\text{T-lim}} 1 \quad , \quad (\text{A.5})$$

ricaviamo subito la seguente condizione di normalizzazione che introduce una differenza intrinseca importante tra le funzioni di correlazione vere (4.16) e le funzioni di Ursell appena descritte:

$$\text{T} - \lim \left[N^{-n} \int dR^1 \cdots dR^n u^{(n)}(R^1 \cdots R^n) = 0 \right] , \quad (\text{A.6})$$

cioè l'intera normalizzazione di $\rho^{(n)}(R^1 \cdots R^n)$ è contenuta nel termine scorrelato della rappresentazione in cluster (A.1), ..., (A.4), ...

Al posto delle funzioni di Ursell è spesso più conveniente usare un'altro set di funzioni, generalmente chiamate anch'esse funzioni di correlazione ad $n \geq 2$ corpi, legate ad esse da:

$$h^{(n)}(R^1, \dots, R^n) = \frac{u^{(n)}(R^1, \dots, R^n)}{\rho(R^1) \cdots \rho(R^n)} , \quad (\text{A.7})$$

avremo così dalla (A.2) $h^{(2)} = g^{(2)} - 1$ ecc ...

Appendice B

Sviluppo multipolare del campo elettrico in eccesso di un 2DJ

Consideriamo un sistema composto da un numero finito di piani di OCP; definiamo campo elettrico in eccesso il campo elettrico generato in $R \equiv (\mathbf{r}, z)$ dalla d.p.e. quando abbiamo fissato n particelle in $Q \equiv (R^1, \dots, R^n)$ (vedi (4.35)):

$$\mathbf{E}(R|Q) = \mathbf{E}^e(\mathbf{r}, z) = -\nabla_R \phi^e(\mathbf{r}, z) = -\nabla_R \phi(R|Q) \quad (\text{B.1})$$

$$= \int d^3 R' \frac{R - R'}{|R - R'|^3} \sum_{m'} \delta(z' - m'd) \rho_T(R'_{m'}|Q) \quad (\text{B.2})$$

dove abbiamo definito \mathbf{E}^e e ϕ^e rispettivamente il campo ed il potenziale in eccesso. Ricordandoci la definizione delle d.p.e. di ordine $n + 1$:¹

$$\rho_T(R_m|Q) = \rho(Q) [\rho \bar{h}(R_m) + \sum_{i=1}^n \delta_{m,m_i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)] \quad (\text{B.3})$$

$$\bar{h}(R_m) = \frac{\rho(R_m, Q)}{\rho \rho(Q)} - 1 \quad (\text{B.4})$$

può essere utile, allo scopo di avere una definizione elettrostatica standard di $\mathbf{E}^e(\mathbf{r}, z)$, rileggerlo come il campo elettrico generato in R dalla densità di carica $\rho(Q) \rho \bar{h}(R_m)$ di uno stato disomogeneo (se $n > 1$, omogeneo nel caso $n = 1$) e da n cariche puntiformi, esterne, di carica $\rho(Q)$ situate nei punti di Q . Naturalmente ciò che entra nelle BGY è:

$$\mathbf{E}_{\parallel}(R_m|Q) = \sum_{m'} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R'_{m'}) \rho_T(R'_{m'}|Q) \quad (\text{B.5})$$

$$\mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R'_{m'}) = -\nabla_r \frac{1}{(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2 + |m - m'|^2)^{1/2}} \quad (\text{B.6})$$

¹Dove quando Q consiste di un unico punto ($n = 1$) su cui poniamo l'origine del sistema di riferimento, allora $\bar{h}(R_m) + 1 = g_m(r)$ in cui g_m è la distribuzione radiale dell'OCP sull' m -esimo piano.

Come abbiamo fatto al termine della sottosezione 4.2.1 discutiamo adesso per concretezza, il caso del campo elettrico in eccesso generato dalla d.p.e. a 2 punti nel caso del singolo piano e in quello di un numero N_p di piani. In particolare vogliamo determinare per $\mathbf{E}^e(R)$ i seguenti sviluppi asintotici: \mathbf{r} fisso con $z \rightarrow \infty$ e z fisso con $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$.

Un piano

Cominciamo col caso di un solo piano (il piano $m = 0$) con $Q \equiv (0, 0, 0) \equiv O$. Data la simmetria azimutale del problema abbiamo che il campo elettrico in eccesso soddisfa l'equazione di Poisson nella forma:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r E_r^e(\mathbf{r}, z)) + \frac{\partial}{\partial z} E_z^e(\mathbf{r}, z) = 4\pi \delta(z) \rho_e(r) = 4\pi \delta(z) [\rho_T(r) + \delta(\mathbf{r})\rho] \quad (\text{B.7})$$

dove abbiamo indicato con $\rho_e(r) = \rho_e(R_0|O)$ e con $\rho_T(r) = \rho^2[g(r) - 1] = \rho_T(R_0|O)$ rispettivamente la densità di particelle in eccesso e la funzione di correlazione troncata a 2 corpi con simmetria azimutale. Determiniamo subito le conseguenze delle simmetrie del sistema di cariche descritto sul potenziale in eccesso definito dalla (B.1) (che sappiamo essere continuo ovunque meno che sulla carica fissata in O):

- (i) Per la simmetria azimutale (S2): $\phi^e(\mathbf{r}, z) = \overline{\phi^e(r, z)}$, e quindi: $\mathbf{E}_r^e(\mathbf{r}, z) \propto \mathbf{r}$.
- (ii) Per l'invarianza sotto ribaltamento rispetto al piano in questione (S3): $\phi^e(\mathbf{r}, z) = \phi^e(\mathbf{r}, |z|)$, e quindi: \mathbf{E}_x^e ed \mathbf{E}_y^e sono pari in z mentre \mathbf{E}_z^e è dispari.

Isolando nel potenziale in eccesso il contributo dovuto alla carica fissata sull'origine ricaviamo:

$$\phi^e(r, z) = \phi_o(r, z) + \frac{\rho}{|R|} \quad (\text{B.8})$$

Preoccupandoci solo del termine incognito ϕ_o è conveniente riscriverlo in termini della trasformata di Fourier rispetto alle variabili planari \mathbf{r} della distribuzione superficiale di cariche $\rho_T(r)$ da cui è generato:

$$\phi_o(r, z) = \int_0^\infty dk r e^{-k|z|} \rho_T(k) J_o(kr) \quad (\text{B.9})$$

dove abbiamo

$$\rho_T(k) = 2\pi \int_0^\infty dr \rho_T(r) r J_o(kr) \quad (\text{B.10})$$

Nelle due precedenti espressioni abbiamo indicato con J_o la funzione di Bessel di ordine zero ².

²Con la rappresentazione integrale $J_o(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{ix \cos \theta} d\theta$

Dalla espressione (B.9) risulta chiaro come $\rho_T(k)$ e le sue derivate in $k = 0$ siano legate all' andamento asintotico del potenziale: per r o z grandi le rapide oscillazioni di $J_o(kr)$ e/o il rapido decadimento di $e^{-k|z|}$ fanno sì che l' integrale (B.9) riceva i contributi maggiori dalla regione intorno a $k = 0$. Supponendo che $\rho_T(k)$ possa essere sviluppato in serie di Taylor in un intorno di $k = 0$ ricaviamo:

$$\phi_0(r, z) = \sum_{l=0}^{\infty} \left. \frac{d^l \rho_T(k)}{dk^l} \right|_{k=0} B_l(r, z) \quad (\text{B.11})$$

con:

$$B_l = \frac{1}{l!} \left(-\frac{d}{d|z|} \right)^l \int_0^{\infty} dk e^{-k|z|} J_o(kr) = \frac{1}{l!} \left(-\frac{d}{d|z|} \right)^l \left(\frac{1}{\sqrt{r^2 + z^2}} \right) \quad (\text{B.12})$$

$$= \frac{P_l(|\cos \theta|)}{|R|^{l+1}} \quad (\text{B.13})$$

dove $\cos \theta = z/|R|$ e P_l è il polinomio di Legendre di ordine l . Chiamiamo:

$$M_l = \left. \frac{d^l \rho_T(k)}{dk^l} \right|_{k=0} \quad (\text{B.14})$$

Il coefficiente M_0 è la *carica totale*. Il coefficiente M_1 è il *momento di dipolo* lungo $\hat{\mathbf{z}}$, e così via. Abbiamo così ottenuto in (B.11) uno sviluppo in multipoli del potenziale ϕ_o . Ammettendo l' integrabilità su \mathbf{R}^2 di $\rho_T(r)$ possiamo utilizzare la regola di somma di carica per determinare il primo momento di multipolo:

$$M_0 = \rho_T(k)|_{k=0} = \int_{\mathbf{R}^2} d\mathbf{r} \rho_T(r) = -\rho \quad (\text{B.15})$$

Questo dimostra come in ϕ il primo termine dello sviluppo in multipoli di ϕ_o si cancelli esattamente con il contributo al potenziale della carica fissata sull' origine portando a:

$$\phi^e(r, z) = \sum_{l=1}^{\infty} M_l \frac{P_l(|\cos \theta|)}{|R|^{l+1}} \quad (\text{B.16})$$

In generale dalla conoscenza dei coefficienti M_l ricaviamo le seguenti informazioni sugli andamenti asintotici del potenziale:

- $z = 0, r \rightarrow \infty \implies$ se $M_l < \infty (\neq 0)$ $\phi^e(r, 0) \sim M_l \frac{P_l(0)}{r^{l+1}}$ (B.17)

- $\mathbf{r} = 0, z \rightarrow \infty \implies$ se $M_l < \infty (\neq 0)$ $\phi^e(r, z) \sim M_l \frac{P_l(1)}{z^{l+1}}$ (B.18)

dove $P_l(0) \neq 0$ solo per l pari, $P_{2n}(0) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(n\pi) \frac{\Gamma((2n+1)/2)}{n+1}$ ed i polinomi di Legendre sono normalizzati in modo che $P_l(1) = 1$. Per la componente parallela ai piani del campo in eccesso abbiamo:

$$\mathbf{E}_{\parallel}^e(r, z) = -\nabla_r \phi^e(r, z) = -\partial \phi^e(r, z) / \partial r \quad (\text{B.19})$$

N_p piani

Il caso di un numero finito N_p di piani si ricava facilmente dal singolo piano osservando che adesso il potenziale in eccesso $\phi_{N_p}^e$ sarà la somma di tutti i potenziali di singolo piano ϕ_1^e generato ciascuno dalla propria $\rho_{e_m}(r)$ di equilibrio:

$$\phi_{N_p}^e(r, |z|) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \phi_1^e(r, |z - md|) = \quad (\text{B.20})$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} M_l \frac{P_l\left(\frac{|z-md|}{\sqrt{r^2+(z-md)^2}}\right)}{\sqrt{r^2+(z-md)^2}^{l+1}} \quad (\text{B.21})$$

dove ricordiamo che abbiamo già sfruttato la regola di somma di carica per cui deve essere (vedi (4.39)) $\rho_{T_m}(k)|_{k=0} = 0$ per $m \neq 0$ e $\rho_{T_0}(k)|_{k=0} = -\rho$.

Appendice C

Andamento asintotico del termine a (n+1) corpi nelle BGY - 1 -

In questa appendice applichiamo i lemmi dell' appendice C della Ref. [120] al particolare sistema inomogeneo che stiamo studiando: N_p piani omogenei di OCP nel T-lim con N_p finito o infinito e con le proprietà di invarianza (S1),(S2) ed (S3) descritte nella sezione 4.2.2. Nel lemma seguente dimostreremo che sotto la condizione di clustering (4.43), il termine ad (n+1) corpi nelle BGY (4.45) decade più velocemente di $\lambda^{-(l_o+2)}$ quando $R_1 = (\lambda\hat{u}, 0)$ con $\lambda \rightarrow \infty$ indipendentemente dal numero di piani. Poichè le particelle in Q sono fissate nel prendere il limite, è sufficiente esaminare il comportamento del termine a tre corpi.

Lemma 1 Sia $F(R) = R/|R|^3$ e ammettiamo la seguente condizione di clustering: $|D^\eta \rho_T(R_m, R'_{m'}, O)| \leq M < \infty$ con $D = \sup(|R_m|, |R'_{m'}|)$ ed

$$\eta > \begin{cases} 2+l & N_p \text{ finito} \\ 3+l & N_p \text{ infinito} \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Allora:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{2+l} \left| \sum_{m'} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_0 - R'_{m'}) \rho_T(R_0, R'_{m'}, O) \right| = 0 \quad . \quad (\text{C.2})$$

Dimostrazione: Osserviamo che utilizzando le simmetrie del sistema possiamo scrivere:

$$\sum_{m'} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R_m - R'_{m'}) \rho_T(R_m, R'_{m'}, O) = \sum_{m'} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'}) \rho_T(R_m, R'_{m'}, O) \quad (\text{C.3})$$

Specificandoci al caso $m = 0$ ed usando la condizione di clustering ipotizzata, ricaviamo nei due casi di LEG con $N_p < \infty$ e con $N_p = \infty$ (vedi (C.1)):

- (i) $N_p < \infty$ ed $\eta > 2 + l$.

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{m'} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'}) \rho_T(R_0, R'_{m'}, O) \right| \leq \\ & \sum_{m' \neq 0} \int d\mathbf{r}' \left| \frac{\mathbf{r}'}{|R'_{m'}|^3} \right| \left| \frac{M}{[\sup(r, |R'_{m'}|)]^\eta} \right| + \int d\mathbf{r}' \frac{1}{r'^2} |\rho_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', O)| \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Usando, adesso, il lemma 2 dell' appendice C della Ref. [120] ricaviamo che:

$$\int d\mathbf{r}' \frac{1}{r'^2} |\rho_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', O)| = o\left(\frac{1}{r^{2+l}}\right) \quad (\text{C.5})$$

Abbiamo allora, da C.4 :

$$\begin{aligned} & \left| \sum_{m'} \int d\mathbf{r}' \mathbf{F}_{\parallel}(R'_{m'}) \rho_T(R_0, R'_{m'}, O) \right| \leq \\ & \leq \sum_{m' \neq 0} \int_{r' \geq |m'|d} d\mathbf{r}' \frac{1}{r'^2} \left| \frac{M}{[\sup(r, r')]^\eta} \right| + o\left(\frac{1}{r^{2+l}}\right) = o\left(\frac{1}{r^{2+l}}\right) \end{aligned} \quad (\text{C.6})$$

infatti si verifica facilmente che per $m \neq 0$:

$$\int_{r' \geq |m'|d} d\mathbf{r}' \frac{1}{r'^2} \left| \frac{M}{[\sup(r, r')]^\eta} \right| = o\left(\frac{1}{r^{2+l}}\right) \quad (\text{C.7})$$

dalla C.6 segue l' asserto del lemma.

(i) $N_p = \infty$ ed $\eta > 3 + l$.

Ripetiamo gli stessi passaggi fatti nel caso precedente per arrivare alla (C.6), poi osserviamo che:

$$\begin{aligned} & 2 \sum_{m'=1}^{\infty} \int_{r' \geq |m'|d} d\mathbf{r}' \frac{1}{r'^2} \left| \frac{M}{[\sup(r, r')]^\eta} \right| = \\ & = 4\pi \sum_{m'=1}^{[r/d]} \left[\frac{1}{r^\eta} \int_{m'd}^r dr' \frac{1}{r'} + \int_r^{\infty} dr' \frac{1}{r'^{\eta+1}} \right] + \sum_{m'=[r/d]+1}^{\infty} \int_{m'd}^{\infty} dr' \frac{1}{r'^{\eta+1}} = \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

$$= o\left(\frac{1}{r^{2+l}}\right) \quad (\text{C.9})$$

dove abbiamo indicato con $[r/d]$ la parte intera di r/d e nell' ultima uguaglianza abbiamo sfruttato il fatto che per $r \rightarrow \infty$ $r \gg d$ e possiamo sostituire $\sum_m \dots$ con $(r/d) \int d(md/r) \dots$ ¹.

¹Nel limite $r \rightarrow \infty$ $\sum_m f(m\frac{d}{r}) = \frac{r}{d} \sum_n f(n) \Delta n$ con $n = m\frac{d}{r}$ e $\Delta n = \frac{d}{r} \rightarrow 0$ e tale somma (se $f(x)$ non varia apprezzabilmente per x in Δn) tende a $\frac{r}{d} \int dx f(x)$.

Appendice D

Andamento asintotico del termine a (n+1) corpi nelle BGY - 2 -

In Questa appendice dimostriamo che assumendo valida le ipotesi (ii) e (iii) della proposizione 1 nella sottosezione 'Tipo di clustering compatibile con le equazioni di equilibrio' a pagina 115 abbiamo:

$$\sum_{m,m'} \int d\mathbf{r}' F_r(R_m - R'_{m'}) \rho_T(R_m, R'_{m'}, O) = o\left(\frac{1}{r^{p-2}}\right) . \quad (\text{D.1})$$

Concluderemo l' appendice con l' applicazione della dimostrazione al caso del singolo piano.

Dimostrazione: Divido lo spazio nei tre seguenti domini:

$$\mathcal{D}_1 = \{|y| \leq |x|, |y| \leq |y - x|\} \quad (\text{D.2})$$

$$\mathcal{D}_2 = \{|y - x| \leq |x|, |y - x| \leq |y|\} \quad (\text{D.3})$$

$$\mathcal{D}_3 = \{|x| \leq |y|, |x| \leq |y - x|\} \quad (\text{D.4})$$

$$(\text{D.5})$$

dove $x = R_m \equiv (\mathbf{r}, md)$. Avremo allora che:

$$\sum_{m'=-\infty}^{\infty} \int d\mathbf{r}' \dots = \sum_{i=1}^3 \sum_{m' \in \mathcal{D}_i} \int_{\mathcal{D}_i} d\mathbf{r}' \dots \quad (\text{D.6})$$

Iniziamo da \mathcal{D}_1 (che è uguale al caso di \mathcal{D}_2):

$$\left| \sum_{m' \in \mathcal{D}_1} \int_{\mathcal{D}_1} d\mathbf{r}' F(R_m - R'_{m'}) \rho_T(R_m, R'_{m'}, O) \right| \leq \quad (\text{D.7})$$

$$\leq \sum_{m' \in \mathcal{D}_1} \int_{\mathcal{D}_1} d\mathbf{r}' \frac{|\rho_T(R_m, R'_{m'}, O)|}{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 + (m - m')^2 d^2} \leq \quad (\text{D.8})$$

$$\leq \sum_{m' \in \mathcal{D}_1} \int_{\mathcal{D}_1} d\mathbf{r}' \frac{M(|R'_{m'}|) \rho_{Tm}(r)}{|R'_{m'} - R_m|^2} \leq \quad (\text{D.9})$$

$$\leq \frac{A}{|R_m|^p} \sum_{m' \in \mathcal{D}_1} \int_{\mathcal{D}_1} d\mathbf{r}' \frac{M(|R'_{m'}|)}{|R'_{m'} - R_m|^2} \leq \quad (\text{D.10})$$

$$\leq \frac{A}{|R_m|^p} \sum_{m' \in \mathcal{D}_1} \int_{\mathcal{D}_1} d\mathbf{r}' \frac{M(|R'_{m'}|)}{|R'_{m'}|^2} \leq \quad (\text{D.11})$$

$$\leq \frac{A}{|R_m|^p} \int_{|R'| \leq |R_m|} d^{(3)}R' \frac{M(|R'|)}{|R'|^2} \quad (\text{D.12})$$

Poichè $M(t)$ va a zero per $t \rightarrow \infty$ allora:

$$\int_{|R'| \leq |R_m|} d^{(3)}R' \frac{M(|R'|)}{|R'|^2} = o(|R_m|) \quad (\text{D.13})$$

quindi ricaviamo:

$$\sum_{m' \in \mathcal{D}_1} \int_{\mathcal{D}_1} d\mathbf{r}' F(R_m - R'_{m'}) \rho_T(R_m, R'_{m'}, O) \leq o\left(\frac{1}{|R_m|^{p-1}}\right) \quad (\text{D.14})$$

Otteniamo così la (D.1) osservando che nel limite $r \rightarrow \infty$ abbiamo:

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} o\left(\frac{1}{|R_m^{p-1}|}\right) = o\left(\frac{1}{r^{p-2}}\right) \quad (\text{D.15})$$

Su \mathcal{D}_3 avremo :

$$|\rho_T(R_m, R'_{m'}, O)| \leq M(|R_m|) \rho_T(|R'_{m'} - R_m|) \quad (\text{D.16})$$

Allora per $R_m \in \mathcal{D}_3$ e $|R'_{m'} - R_m|$ grande avremo:

$$\left| \sum_{m' \in \mathcal{D}_3} \int_{\mathcal{D}_3} d\mathbf{r}' F(R_m - R'_{m'}) \rho_T(R_m, R'_{m'}, O) \right| \leq \quad (\text{D.17})$$

$$\leq M(|R_m|) \sum_{m' \in \mathcal{D}_3} \int_{\mathcal{D}_3} d\mathbf{r}' \frac{1}{|R_m - R'_{m'}|^{p+2}} \leq \quad (\text{D.18})$$

$$\leq M(|R_m|) \int_{|R| > |R_m|} d^3R' \frac{1}{|R'|^{p+2}} = \quad (\text{D.19})$$

$$= \frac{4\pi M(|R_m|)}{(p-1)|R_m|^{p-1}} = o\left(\frac{1}{|R_m^{p-1}|}\right) \quad (\text{D.20})$$

Nel caso particolare di un solo piano ricaviamo dalla precedente analisi che sotto le seguenti ipotesi:

(i) Per r grande $\rho_T(r) = A/r^p + o(1/r^p)$ e $\rho_T(r)$ integrabile sul piano (con $p > 2$).

(ii) Per r grande:

$$|\rho_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', O)| \leq M(t) |\rho_T(r)|, \quad t = \min(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|, |\mathbf{r}|) \quad (\text{D.21})$$

$$\text{con } \lim_{t \rightarrow \infty} M(t) = 0, \quad (\text{D.22})$$

Allora troviamo:

$$\int_{\mathbf{R}^2} d\mathbf{r}' \mathbf{F}_r(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \rho_T(\mathbf{r}, \mathbf{r}', O) \propto o\left(\frac{\log r}{r^p}\right) \quad (\text{D.23})$$

Dalle BGY per il 2DJ tra la funzione di correlazione a due ed a tre corpi ricaviamo allora che il campo elettrico in eccesso per il sistema del singolo piano deve avere un andamento asintotico a grandi r del tipo $o\left(\frac{\log r}{r^p}\right)$.

Appendice E

Formalismo utile per l' approccio al jellium quantistico

Prendiamo come sistema di riferimento un jellium tridimensionale quantistico composto da N elettroni in un volume Ω . Vogliamo definire le quantità rilevanti per lo studio di tale sistema e le equazioni di equilibrio che esse devono soddisfare. A tale scopo useremo la rappresentazione della seconda quantizzazione in cui indichiamo con $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ e $\psi_\sigma(\mathbf{r})$ gli operatori rispettivamente di creazione e di distruzione di un elettrone di spin σ situato nel punto dello spazio tridimensionale $\mathbf{r} \equiv (x, y, z)$ che soddisfano le regole di anticommutazione caratteristiche dei fermioni:

$$[\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'), \psi_\sigma(\mathbf{r})]_+ = \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\psi_\sigma(\mathbf{r}) + \psi_\sigma(\mathbf{r})\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}') = \delta_{\sigma',\sigma}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad , \quad (\text{E.1})$$

$$[\psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}'), \psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r})]_+ = [\psi_{\sigma'}(\mathbf{r}'), \psi_{\sigma'}(\mathbf{r})]_+ = 0 \quad . \quad (\text{E.2})$$

Gli operatori di creazione e di distruzione di un elettrone nello stato con impulso $\mathbf{p} \equiv (p_x, p_y, p_z)$ e spin σ , rispettivamente $a_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger$ e $a_{\mathbf{p},\sigma}$, sono legati ai precedenti da una trasformata di Fourier:

$$\psi_\sigma(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{p},\sigma} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (\text{E.3})$$

$$a_{\mathbf{p},\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{\Omega} d\mathbf{r} \psi_\sigma(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad , \quad (\text{E.4})$$

ed analogamente per gli Hermitiani coniugati. Adotteremo inoltre la convenzione di sottointendere una somma su tutti gli stati di spin quando è omissa l' indice di spin. Possiamo così introdurre per il sistema di elettroni puntiformi di massa m e carica e la densità in numero ¹:

$$N(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{q}}_i) = \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \quad \text{ovvero} \quad N_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}+\mathbf{p}} \quad , \quad (\text{E.5})$$

¹L' operatore numero di elettroni nello stato con impulso \mathbf{p} verrà indicato con $n_{\mathbf{p}} = a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{p}}$

la densità di corrente:

$$J(\mathbf{r}) = \sum_i \frac{e}{2m} [\hat{\mathbf{p}}_i \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{q}}_i) + \delta(\mathbf{r} - \hat{\mathbf{q}}_i) \hat{\mathbf{p}}_i] \quad \text{ovvero} \quad J_{\mathbf{p}} = \sum_{\mathbf{q}} \frac{\mathbf{q}}{m} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}+\mathbf{p}} \quad (\text{E.6})$$

$$= \frac{i\hbar}{2m} [(\nabla\psi^\dagger(\mathbf{r}))\psi(\mathbf{r}) - \psi^\dagger(\mathbf{r})(\nabla\psi(\mathbf{r}))] \quad , \quad (\text{E.7})$$

dove stiamo indicando con $\hat{\mathbf{q}}_i$ e $\hat{\mathbf{p}}_i$ per $i = 1, \dots, N$ gli osservabili impulso e posizione degli N elettroni.

L' Hamiltoniana H del sistema è la somma dell' energia cinetica K e dell' energia potenziale U . Abbiamo:

$$K = \int_{\Omega} d\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \psi(\mathbf{r}) \quad \text{ovvero} \quad K = \sum_{\mathbf{q}} \frac{\hbar^2 q^2}{2m} a_{\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \quad , \quad (\text{E.8})$$

$$U = \frac{1}{2} \int_{\Omega} d\mathbf{r} \int_{\Omega} d\mathbf{r}' \phi_c(\mathbf{r} - \mathbf{r}') : c(\mathbf{r})c(\mathbf{r}') : \quad \text{ovvero} \quad (\text{E.9})$$

$$U = \frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q} \neq 0} \phi_c(q) \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}} \quad , \quad (\text{E.10})$$

dove abbiamo indicato con $c(\mathbf{r}) = eN(\mathbf{r}) - \rho^f$ la densità di carica totale del sistema ($\rho^f = N/\Omega$ è la densità di carica del fondo fisso uniforme neutralizzante). Con $: \dots :$ indichiamo l' ordinamento di Wick che tiene conto della eliminazione del contributo dell' interazione di un elettrone con se stesso. Con $\phi_c(\mathbf{r}) = 1/|\mathbf{r}|$ indichiamo il potenziale Coulombiano tra due elettroni.

Nei sistemi quantistici è importante distinguere due tipi di regole di somma che sono concettualmente diversi. Il primo si riferisce allo schermo di cariche esterne classiche, mentre il secondo è legato allo schermo delle cariche del sistema stesso. Solo le regole di somma di quest' ultimo tipo hanno una pura natura quantistica.

Di solito lo schermo di cariche esterne si analizza con la teoria della risposta lineare. Per illustrare questo metodo in un caso semplice supponiamo di perturbare il jellium aggiungendo dall' esterno una carica statica puntiforme e_o nell' origine. L' energia potenziale di accoppiamento ($H \xrightarrow{+e_o} H + U_o$) tra la carica esterna ed il jellium è:

$$U_o = e_o \int d\mathbf{r} \frac{c(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}|} \quad . \quad (\text{E.11})$$

Al primo ordine in e_o troviamo ²:

$$\langle A \rangle_{e_o} = \langle A \rangle - e_o \int d\mathbf{r} \frac{1}{|\mathbf{r}|} \int_0^\beta d\tau \langle c_\tau(\mathbf{r}) A \rangle_T \quad , \quad (\text{E.14})$$

²Per ricavare la (E.14) abbiamo sviluppato $e^{-\beta(H+U_o)}$ in potenze crescenti di e_o . Questo si realizza ricordandoci che in generale per due operatori A e B vale l' identità:

$$e^{A+B} = e^A \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^1 dx_1 \dots dx_n T(B(x_1) \dots B(x_n)) \quad , \quad (\text{E.12})$$

dove $\langle A \rangle_{e_0}$ (rispettivamente $\langle A \rangle$) è la media (nel limite di volume infinito) di un osservabile A nello stato di equilibrio termico perturbato (inperturbato) nell' insieme gran-canonic alla temperatura inversa β e potenziale chimico μ . Il valore di aspettazione troncato di n osservabili A_1, \dots, A_n locali è definito come $\langle A_1, \dots, A_n \rangle_T = \langle (A_1 - \langle A_1 \rangle) \dots (A_n - \langle A_n \rangle) \rangle$. Infine indicando con $A_\tau = e^{\tau H} A e^{-\tau H}$, data una coppia di osservabili locali A e B , definiamo la quantità $\langle A_\tau B \rangle$ (una funzione di Green a tempo immaginario (ITGF)) come:

$$\langle A_\tau B \rangle = \lim_{\Omega \rightarrow \mathcal{R}^3} \frac{1}{Z_\Omega} \text{Tr}_\Omega (e^{\beta \mu N} e^{-(\beta - \tau)H} A e^{-\tau H} B) \quad , \quad 0 \leq \tau \leq \beta \quad , \quad (\text{E.15})$$

con Z_Ω la funzione di gran-partizione ed N il numero totale di particelle.

Possiamo allora introdurre la funzione di risposta densità-densità:

$$\chi(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \int_0^\beta d\tau \langle c_\tau(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}') \rangle_T \quad , \quad (\text{E.16})$$

che in termini della funzione di risposta ritardata [90]

$$\chi(\mathbf{r}; t|\mathbf{r}'; 0) = \frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [c(\mathbf{r}; t), c(\mathbf{r}'; 0)] \rangle_T \quad , \quad (\text{E.17})$$

con $c(\mathbf{r}; t) = c_{\tau=it/\hbar}(\mathbf{r})$, $\theta(t)$ la funzione di Heaviside e $[\dots, \dots]$ il commutatore ordinario, si riscrive ³:

$$\chi(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \int_{-\infty}^{\infty} dt \chi(\mathbf{r}; t|0; 0) \quad . \quad (\text{E.21})$$

È interessante cercare le regole di somma delle funzioni di risposta più generali:

$$\chi(\mathbf{r}|A) = \int_0^\beta d\tau \langle c_\tau(\mathbf{r}) A \rangle_T \quad , \quad (\text{E.22})$$

dove $B(x) = e^{-xA} B e^{xA}$ e T è il prodotto T-ordinato:

$$T(B(x_1) \cdots B(x_n)) \equiv \frac{1}{n!} \sum_{i_1 \neq \dots \neq i_n}^n \theta(x_{i_1} - x_{i_2}) \cdots \theta(x_{i_{n-1}} - x_{i_n}) B(x_1) \cdots B(x_n) \quad . \quad (\text{E.13})$$

Se A e B commutano $B(x) = B$ e si ha $e^{A+B} = e^A e^B$

³Partendo dalla definizione (E.16) abbiamo:

$$\chi(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \int_0^\infty d\tau \langle c_\tau(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}') \rangle_T - \int_\beta^\infty d\tau \langle c_\tau(\mathbf{r}) c(\mathbf{r}') \rangle_T \quad (\text{E.18})$$

$$= \int_0^\infty \langle [c_\tau(\mathbf{r}), c(\mathbf{r}')] \rangle_T \quad . \quad (\text{E.19})$$

Prendendo formalmente la continuazione analitica di c_τ a $\tau = \frac{it}{\hbar}$ e cambiando variabili di integrazione abbiamo:

$$\chi(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt \langle [c(\mathbf{r}; t), c(\mathbf{r}'; 0)] \rangle_T \quad , \quad (\text{E.20})$$

da cui segue (E.21)

dove A è un generico osservabile locale.

Le condizioni di equilibrio per le ITGF sono: l' equazione di 'Kubo-Martin-Schwinger' (KMS)

$$\langle A_\tau B \rangle = \langle B_{\beta-\tau} A \rangle \quad \text{con} \quad 0 \leq \tau \leq \beta \quad , \quad (\text{E.23})$$

e le "equazioni del moto" per tempi immaginari

$$\frac{d}{d\tau} \langle A_\tau B \rangle = \langle [H, A]_\tau B \rangle = \langle B_{\beta-\tau} [H, A] \rangle . \quad (\text{E.24})$$

Dalla (E.24) prendendo $A = c(\mathbf{r})$ si ottiene "l' equazione di continuità" e prendendo $a = J(\mathbf{r})$ si ottiene "la legge della forza", l' analogo quantistico delle BBGKY (vedi sezione II in [137]).

Per studiare le proprietà di schermo interno tra gli elettroni quantistici si deve considerare le correlazioni carica-carica statiche (la funzione di struttura quantistica):

$$S(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = \langle c(\mathbf{r})c(\mathbf{r}') \rangle_T \quad . \quad (\text{E.25})$$

Più in generale si introduce la funzione di correlazione (simmetrizzata):

$$c[\mathbf{r}|A] = \frac{1}{2} \langle c(\mathbf{r})A + Ac(\mathbf{r}') \rangle_T \quad , \quad (\text{E.26})$$

che si può interpretare come una densità di carica in eccesso in uno stato condizionato dall' avere specificato un osservabile locale A . Se $A = N(\mathbf{r}_1) \cdots N(\mathbf{r}_n)$ è un prodotto di densità, con $\mathbf{r}_1 \neq \dots \neq \mathbf{r}_n$, la quantità $c[\mathbf{r}|N(\mathbf{r}_1) \cdots N(\mathbf{r}_n)] = c(\mathbf{r}|\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_n)$ ha la stessa espressione della densità di particelle in eccesso classica (4.15), in termini delle funzioni di distribuzione ridotte. Queste ultime sono la parte diagonale nella configurazione delle matrici densità ridotte (RDM) definite da:

$$\rho(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_n | \mathbf{r}'_1 \dots \mathbf{r}'_n) = \langle \psi^\dagger(\mathbf{r}_1) \cdots \psi^\dagger(\mathbf{r}_n) \psi(\mathbf{r}'_n) \cdots \psi(\mathbf{r}'_1) \rangle . \quad (\text{E.27})$$

Le equazioni del moto per le RDM si scrivono (vedi sezione II di Ref. [142]):

$$-(H(Q) - H(Q'))\rho(Q|Q') = \int d\mathbf{r} \left[\sum_{i=1}^k \phi_c(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}) - \sum_{j=1}^l \phi(\mathbf{r}'_j - \mathbf{r}) \right] \times \\ \times [\rho(Q, \mathbf{r}|Q', \mathbf{r}) - \rho(Q|Q')\rho(\mathbf{r}|\mathbf{r})] \quad , \quad (\text{E.28})$$

dove abbiamo indicato con $Q \equiv (\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_k)$ e con $Q' \equiv (\mathbf{r}'_1 \dots \mathbf{r}'_l)$.

Se A è un osservabile che non dipende soltanto dalla configurazione spaziale degli elettroni la (E.26) coinvolge la parte fuori diagonale delle RDM. È interessante conoscere quali regole di somma sono verificate dalle (E.26) e (E.22) ossia dalle ITGF e dalle RDM.

Classicamente le funzioni (E.16) e (E.25) coincidono. In meccanica quantistica non c'è nessun legame diretto tra esse. Comunque, dalle definizioni date, ci accorgiamo che la trasformata di Fourier spazio temporale della funzione $\chi(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t) = \chi(\mathbf{r}; t | \mathbf{r}'; 0)$ definita in (E.17) è legata all'integrale sulle frequenze della trasformata di Fourier spazio temporale $S(\mathbf{k}; \omega)$ della funzione di struttura dipendente dal tempo del sistema omogeneo $S(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t) = S(\mathbf{r}; t | \mathbf{r}'; 0) = \langle c(\mathbf{r}; t) c(\mathbf{r}'; 0) \rangle_T$:

$$\chi(\mathbf{k}; \omega) = -\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \left[\frac{S(\mathbf{k}; \omega') - S(-\mathbf{k}; -\omega')}{\omega - \omega' + i0^+} \right], \quad (\text{E.29})$$

dove 0^+ è un infinitesimo positivo ed abbiamo usato il fatto che la trasformata di Fourier della funzione di Heaviside $\theta(t)$ è $i/(\omega + i0^+)$. Sappiamo inoltre dal teorema del bilancio dettagliato che $S(-\mathbf{k}; -\omega) = e^{-\hbar\beta\omega} S(\mathbf{k}; \omega)$ (vedi appendice 5 in [90]).

Ringraziamenti

Desidero ringraziare vivamente il Prof. M.P.Tosi per il costante e paziente aiuto che mi ha dato nello svolgimento della tesi.

Desidero inoltre ringraziare tutti gli amici per il supporto morale ricevuto nel corso di tutto il lavoro.

Bibliografia

- [1] T.R.Brown e C.C.Grimes: Phys.Rev.Lett. **29**, 1233 (1972).
- [2] C.C.Grimes e G.Adams: Phys.Rev.Lett. **42**, 795 (1979).
- [3] F.Stern: Phys.Rev.Lett. **18**, 546 (1967).
- [4] F.Stern, W.E.Howard: Phys.Rev. **163**, 816 (1967).
- [5] P.B.Visscher, L.M.Falicov: Phys.Rev. **3**, 2541 (1971).
- [6] M.Plischke: Can.J.Phys. **59**, 802 (1981).
- [7] H.M.Miesenböck, M.P.Tosi: Z.Phys.B **78**, 255 (1990).
- [8] L.Swierkowski, D.Neilson, J.Szymanski: Phys.Rev.Lett. **67**, 241 (1991).
- [9] A.L.Fetter: Ann.Phys. **88**, 1 (1974).
- [10] A.Alastuey, Ph.A.Martin: J.Stat.Phys. **39**, 405 (1985).
- [11] Ph.A.Martin: Rev.Mod.Phys. **60**, 1075 (1988).
- [12] B.Jancovici: Phys.Rev.Lett. **46**, 386 (1981).
- [13] A.Alastuey, Ph.A.Martin: Europhys.Lett. **6(5)**, 385 (1988).
- [14] J.P.Eisenstein, L.N.Pfeiffer, K.W.West: Phys.Rev.Lett. **68**, 674 (1992).
- [15] R.Balescu, *Equilibrium and Nonequilibrium Statisticals Mechanics* (John Wiley & Sons, New York, London, Sydney, Toronto, 1975).
- [16] A.L.Fetter: Ann.Phys. **81**, 367 (1973).
- [17] R.S.Crandall: Phys.Rev.A **8**, 2136 (1973).
- [18] E.Wigner: Phys.Rev. **46**, 1002 (1934) e Trans.Faraday Soc. **34**, 678 (1938).
- [19] K.Fuchs: Proc.Roy.Soc. **A151**, 585 (1935).
- [20] L.L.Foldy: Phys.Rev.B **3**, 3472 (1970).

-
- [21] G.Senatore e G.Pastore: Phys.Rev.A **64**, 303 (1990).
 - [22] D.Ceperley, B.J.Alder: Phys.Rev.Lett. **45**, 566 (1980).
 - [23] V.Tozzini e M.P.Tosi: Europhys.Lett. **23**, 433 (1993).
 - [24] D.Pines e Ph.Nozières: Phys.Rev **111**, 442 (1958).
 - [25] J.Kugler: Ann.Phys.N.Y **53**, 133 (1969).
 - [26] B.Tanatar and D.M.Ceperley: Phys.Rev.B **39**, 5005 (1989).
 - [27] R.S.Crandall e R.Williams: Phys.Lett. **34A**, 404 (1971).
 - [28] R.C.Gann, S.Chakravarty, G.V.Chester: Phys.Rev. **20**, 326 (1979).
 - [29] H.M.Van Horn: Phys.Rev. **157**, 342 (1967).
 - [30] A.V.Chaplik: Sov.Phys.JETP **35**, 395 (1972).
 - [31] A.Alastuey, B.Jancovici: J.Stat.Phys **24**, 443 (1981).
 - [32] A.B.Fowler, F.F.Fang, W.E.Howard and P.J.Stiles: Phys.Rev.Lett. **16**, 901 (1966).
 - [33] W.E.Howard e F.F.Fang: Bull.Am.Phys.Soc. **11**, 240 (1966).
 - [34] J.R.Schrieffer, in *Semiconductor Surface Physics*, edited by R.H.Kingston (University of Pennsylvania Press, Philadelphia, 1957), p. 55.
 - [35] F.Neppl, J.P.Kotthaus and J.F.Koch: Phys.Lett. **B16**, 1519 (1977).
 - [36] F.Koch: Surf.Sci. **98**, 79 (1979).
 - [37] R.Dingle, H.L.Störmer, A.C.Gossard and W.Weigman: Surf.Sci. **98**, 90 (1980).
 - [38] J.H.English, A.C.Gossard, H.L.Störmer and K.W.Baldwin: Appl.Phys.Lett. **50**, 1826 (1987).
 - [39] L.L.Chang and L.Esaki: Surf.Sci. **98**, 70 (1980).
 - [40] D.C.Tsui, H.L.Störmer ed A.C.Gossard: Phys.Rev.Lett. **48**, 1559 (1985).
 - [41] R.B Laughlin: Phys.Rev.Lett. **50**, 1395 (1983).
 - [42] Jiang *ed al.*: Phys.Rev.Lett. **65**, 633 (1990).
 - [43] Goldman *ed al.*: Phys.Rev.Lett. **65**, 2189 (1990).
 - [44] H.Buhmann, W.Joss, K.v.Klitzing, I.V.Kukushkin, A.S.Plaut, G.Martinez, K.Ploog e V.B.Timofeev: Phys.Rev.Lett. **66**, 926 (1991).

- [45] J.M.Worlock: Phys.World , 26 (Novembre 1990).
- [46] H.Buhmann, W.Joss, K.v.Klitzing, I.V.Kukushkin, A.S.Plaut, K.Ploog, G.Martinez, e V.B.Timofeev: Phys.Rev.Lett. **65**, 1056 (1990).
- [47] W.Rüdorff e E.Schulze: Z.Anorg.Allg.Chem. **277**, 156 (1954).
- [48] M.S.Dresselhaus: Phys.Today **37**, 60 (1984).
- [49] M.S.Dresselhaus e G.Dresselhaus: Adv.Phys. **30**, 139 (1981).
- [50] S.A.Solin: Adv.Chem.Phys. **49**, 455 (1982).
- [51] H.Kamimura:Phys.Today **40**, 64 (1987).
- [52] F. e T.H.Geballe, in *Treatise on Solid State Chemistry*, edited by N.B.Hannay (Plenum Press, New York, New York, 1976), p. 89.
- [53] W.Y.Liang, in *Intercalation in Layered Materials*, edited by M.S.Dresselhaus (Plenum Press, New York, 1987), p. 31.
- [54] C.Julien, E.Hatzikraniotis, K.M.Paraskevopoulos, A.Chevy e M.Balkanski: Solid State Ionics **18-19**, 859 (1986).
- [55] S.A.Solin, in *Intercalation in Layered Materials*, edited by M.S.Dresselhaus (Plenum Press, New York, N.Y., 1987), p. 145.
- [56] N.Wada, M.Suzuki, D.R.Hines, K.Koga e H.Nishihara:J.Mater.res.Phys. **2**, 864 (1987).
- [57] *Chemistry of Clays and Clay Minerals*, edited by A.C.D.Newmen (Harlow-Longman Scientific and Technical, Mineralogical Society Series Monograph no.6, 1987).
- [58] A.Herold, in *Physics and Chemistry of Materials with Layered Structures*, edited by F.Levy (Reidel, Dordrecht, 1979), p. 323.
- [59] L. e E.Tosatti, *Physics of Intercalation Compounds, Springer Series in Solids State Sciences* (Springer-Verlag, Berlin, 1981), Vol. 38.
- [60] F.L.Vogel e A.Herold: Proceedings of the International Conference on Intercalation Compounds of Graphite, Mater.Sci.Eng. **31**, (1977).
- [61] F.L.Vogel: Proceedings of the Second International Conference on Intercalation Compounds of Graphite, Synth.Met. **2-3**, (1980).
- [62] Y.Nishina, S.Tanuma e H.W.Myron: Proceedings of the Yamada Conference IV on the Physics and Chemistry of Layered Compounds, Physica B **105**, (1981).

- [63] A.Herold, D.Guerard e P.Lagrange: Proceedings of the Third International Conference on Intercalation Compounds of Graphite, Synth.Met. **7-8**, (1983).
- [64] *Proceedings of the Symposium on Intercalated Graphite*, edited by J. e. M. M.S.Dresselhaus, G.Dresselhaus (North-Holland, New York, 1983), Vol. 20.
- [65] *Exetended Abstracts of the 1984 MRS Symposium on Graphite Intercalation Compounds*, edited by M. e. G. P.C.Ecklund (Materials Research Society, Pittsburgh, PA, 1984).
- [66] *Exetended Abstracts of the 1986 MRS Symposium on Graphite Intercalation Compounds*, edited by G. e. S. M.S.Dresselhaus (Materials Research Society, Pittsburgh, PA, 1986).
- [67] *Intercalation in Layered Materials Compounds*, edited by M.S.Dresselhaus (Plenum Press, New York, N.Y., 1987).
- [68] R.Brec, in *Intercalation in Layered Materials*, edited by M.S.Dresselhaus (Plenum Press, New York, N.Y., 1987), p. 93.
- [69] P.Boalchand, W.J.Bresser, D.McDaniel, K.Sisson, V.Yeh e P.C.Eklund: Solid State Commun. **40**, 1049 (1981).
- [70] P.Lagrange, A.Metrot e A.Herold: C.R.Acad.Sci. **287**, 701 (1974).
- [71] I. e. Y. M.Suzuki, *Exetended Abstracts of the 1984 MRS Symposium on Graphite Intercalation Compounds* (Materials Research Society, Pittsburgh, PA, 1984), p. 91.
- [72] G.Timp e M.S.Dresselhaus: J.Phys.C **17**, 2641 (1984).
- [73] H.Suematsu, K.Ohmtsu, T.Sakakibara, K.Suda e N.Metoki: Synth.Met. **23**, 7 (1988).
- [74] N.Daumas e A.Herold: C.R.Acad.Sci. **268**, 373 (1969).
- [75] R.Moret, in *Intercalation in Layered Materials*, edited by M.S.Dresselhaus (Plenum Press, New York, N.Y., 1987), p. 185.
- [76] A.Erbil, A.R.Kortan, R.J.Birgeneau e M.S.Dresselhaus: Phys.Rev.B **28**, 6329 (1983).
- [77] F.Rosseaux, R.Moret, D.Guerard, P.Lagrange e M.Lelaurain: J.Phys.(Paris)Lett. **45**, L1111 (1984).
- [78] E.McRae, J.F.Mareche, A.Bendriss-Rehrhaye, P.Lagrange e M.Lelaurain: Ann.Phys.Colloque No.2, Supplement No.2 **11**, 13 (1986).

-
- [79] I.L.Spain, in *Chemistry and Physics of Carbon*, edited by P. e P.A.Thrower (Marcel Dekker, Inc., New York, N.Y., 1973), p. 1.
- [80] E.McRae e J.F.Mareche: *J.Mater.Res.* **3**, 75 (1988).
- [81] R.Schlögl, in *International Colloquium on Layered Compounds*, edited by D. e P.Lagrange (Pont-a-Mousson Conference, ., 1988), p. 237.
- [82] M.Plischke, W.D.Leckie: *Can.J.Phys.* **60**, 1139 (1982).
- [83] K.S.Singwi, M.P.Tosi, R.H.Land, A.Sjolander: *Phys.Rev.* **176**, 589 (1968).
- [84] K.S.Singwi, A.Sjolander, M.P.Tosi, R.H.Land: *Phys.Rev.* **1**, 1044 (1970).
- [85] K.W-K.Shung: *Phys.Rev.B* **34**, 979 (1986).
- [86] D.Grecu: *Phys.Rev.* **8**, 1958 (1973).
- [87] M.Jonson: *J.Phys.C* **9**, 3055 (1976).
- [88] C.Kittel, *Quantum theory of solids* (Wiley, New York, 1963).
- [89] H.M.Miesenböck, M.P.Tosi: *Nuovo Cimento* **9D**, 301 (1987).
- [90] N.H.March and M.P.Tosi, *Coulomb Liquids* (Academic Press, London, 1984).
- [91] L.van Hove: *Phys.Rev.* **95**, 294 (1954).
- [92] S.Luryi: *Appl.Phys.Lett.* **52**, 501 (1988).
- [93] N.Iwamoto: *Phys.Rev.A* **30**, 2597 (1984).
- [94] N.Iwamoto: *Phys.Rev.A* **30**, 3289 (1984).
- [95] J.Lindhard: *Kgl.Danske Videnskab.Selskab, Mat.-Fys.Medd.* **28**, No.8 (1954).
- [96] S.Ichimarui: *Rev.Mod.Phys.***54**, 1017 (1982).
- [97] A.L.Fetter: *Phys.Rev.B* **10**, 3739 (1974).
- [98] H.Totsuji: *J.Phys.Soc.Jap.* **40**, 857 (1976).
- [99] D.F.DuBois, V.Gilinsky e M.G.Kivelson: *Phys.Rev.Lett.* **11**, 419 (1962).
- [100] M.J.Lighthill, *Introduction to Fourier Analysis and Generalised Functions* (Cambridge at the University Press, Cambridge, England, 1958).
- [101] S.Das Sarma, J.J.Quinn: *Phys.Rev.B* **43**, 7603 (1982).
- [102] K.S.Singwi, M.P.Tosi: *Solid State Phys.* **36**, 177 (1981).

-
- [103] J.J.Ritsko e M.J.Rice: Phys.Rev.Lett. **42**, 666 (1979).
- [104] M.Apostol: Z.Phys.B **25**, 13 (1975).
- [105] W.L.Bloss E.M.Brody: Solid State Commun. **43**, 523 (1982).
- [106] D.Olego, A.Pinczuk, A.C.Gossard e W.Wiegmann: Phys.Rev.B **25**, 7603 (1982).
- [107] S.Das Sarma e A.Madhukar: Phys.Rev.B **23**, 805 (1981).
- [108] P.Hohenberg, W.Kohn: Phys.Rev. **136**, B864 (1964).
- [109] W.Kohn, L.J.Sham: Phys.Rev. **140**, 1133 (1965).
- [110] J.Hubbard: Proc.Roy.Soc. **A240**, 539 (1957).
- [111] J.Hubbard: Proc.Roy.Soc. **A243**, 336 (1957).
- [112] M.Baus, J.P.Hansen: Phys.Rep. **59**, 1 (1980).
- [113] S.F.Edwards, A.Lenard: J.Math.Phys **3**, 778 (1962).
- [114] W.Yang: J.Stat.Phys. **49**, 1 (1987).
- [115] D.C.Brydges, P.Federbush: Commun.Math.Phys. **73**, 197 (1980).
- [116] J.Z.Imbrie: Commun.Math.Phys. **87**, 515 (1983).
- [117] J.Yvon, *Correlation and Entropy in Classical Statistical Mechanics* (Pergamon, New York/Los Angeles/Paris/London, 1969).
- [118] J.P.Hansen and I.R.McDonald, *Theory of Simple Liquids* (Academic, New York/London, 1972).
- [119] T.L.Hill, *Statistical Mechanics* (McGraw-Hill Book Company, New York, Toronto, London, 1956).
- [120] Ch.Gruber, J.L.Lebowitz, Ph.A.Martin: J.Chem.Phys. **75(2)**, 944 (1981).
- [121] L.Blum, C.Gruber, J.L.Lebowitz, P.Martin: Phys.Rev.Lett. **48**, 1769 (1982).
- [122] F.H.Stillinger, R.Lovett: J.Chem.Phys. **48**, 385 (1968).
- [123] F.H.Stillinger, R.Lovett: J.Chem.Phys. **49**, 1991 (1968).
- [124] S.Ichimarū, H.Totsuji, T.Tange e D.Pines: Prog.Theo.Phys. **54**, 1077 (1975).
- [125] S.L.Carnie e D.Y.C.Chan: Chem.Phys.Lett. **77**, 437 (1981).
- [126] S.L.Carnie: J.Chem.Phys. **78**, 2742 (1983).

-
- [127] G.Stell, in *The Equilibrium Theory of Classical Fluids*, edited by J. H.L.Frish (Benjamin, New York, 1964).
- [128] L.Landau, J.Fernando Perez e W.F.Wreszinski: *J.Stat.Phys.* **26**, 755 (1981).
- [129] P.A.Martin: *Nuovo Cimento* **68**, 302 (1982).
- [130] Ch.Gruber, Ph.A.Martin: *Ann.Phys.* **131**, 56 (1981).
- [131] L.Blum, C.Gruber, D.Henderson, J.L.Lebowitz, Ph.A.Martin: *J.Chem.Phys.* **78**, 3195 (1983).
- [132] M.Requardt e H.J.Wagner: *J.Stat.Phys.* **58**, 1165 (1990).
- [133] N.D.Mermin: *Phys.Rev.* **176**, 250 (1968).
- [134] N.D.Mermin: *Phys.Rev.B* **20**, 4762 (1979).
- [135] M.S.Wertheim: *J.Chem.Phys.* **65**, 2377 (1976).
- [136] R.Lovett, C.Y.Mou e F.P.Buff: *J.Chem.Phys.* **65**, 570 (1976).
- [137] A.Alastuey, Ph.A.Martin: *Phys.Rev.A* **40**, 6485 (1989).
- [138] R.N.Hill: *J.Math.Phys.* **9**, 1534 (1968).
- [139] D. e Ph.Nozières, *The Teory of Quantum Liquids* (W.A.Benjamin, New York, Amsterdam, 1966).
- [140] F.Cornu e Ph.A.Martin: *Phys.Rev.A* **44**, 4893 (1991).
- [141] A.L.Fetter and J.D.Valecka, *Quantum Theory of Many Particle Systems* (McGraw-Hill Book Company, New York, 1971).
- [142] Ph.A.Martin, Ch.Gruber: *Phys.Rev.A* **30**, 512 (1984).

Tesi di Laurea

Regole di somma in un gas di elettroni stratificato

Tesine

1 . Interferenza delle eccitazioni di quasiparticella in sistemi ibridi semiconduttori-superconduttori: eccesso di corrente nella riflessione di Andreev

Relatore: Chiar.mo Prof. **F. Beltram**

2 . Misura dell' angolo di Weinberg dall' urto Neutrino-Nucleone

Relatore: Chiar.mo Prof. **V. Cavasinni**

3 . Modello dinamico di particelle elementari basato su un' analogia con la superconduttività

Relatore: Chiar.mo Prof. **E. Guadagnini**