

Contents

- Transport models in quantum plasmas
Fernando Haas, João Goedert e Giovanni Manfredi 1-22
- Plasma: The fourth state of matter
Leonardo G. Garcia e João Goedert 23-38
- Mathematical tools for Monte Carlo techniques
Anelise Bertotti, Bardo E. J. Bodmann 39-56
- A study of dispatch rules and applications to scheduling
Leandro T. Hoffmann, Arthur T. Gómez 57-72
- On the use of metaheuristics for modelling part selection and scheduling problems in flexible manufacturing systems
Antonio G. Rodrigues, Arthur T. Gómez 73-108
- Computational previsibility in chaotic systems
Marcelo Sobottka e Luiz P. L. de Oliveira 109-126

MODELOS DE TRANSPORTE EM PLASMAS QUÂNTICOS

Fernando Haas¹, João Goedert² e Giovanni Manfredi¹

¹Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés
 Université Henri Poincaré, Nancy 1
 54506 Vandoeuvre-les-Nancy, França
 haas@lpmi.uhp-nancy.fr

²Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas
 Universidade do Vale do Rio dos Sinos – UNISINOS
 Av. Unisinos 950, 93022-000 São Leopoldo, RS
 goedert@exatas.unisinos.br

ABSTRACT

We present some basic aspects of the Schrödinger-Poisson, the Wigner-Poisson and the hydrodynamic models for quantum plasmas. Only electrostatic phenomena are taken into account in non relativistic plasmas for which quantum statistics effects are not relevant. With an eye to applications in modern ultra-integrated semiconductor devices, we propose some possible improvements to the models under consideration.

KEYWORDS Schrödinger-Poisson model, Wigner-Poisson model, Quantum plasmas.

RESUMO

Apresentamos aspectos básicos dos modelos de Schrödinger-Poisson, Wigner-Poisson e hidrodinâmico utilizados na descrição de plasmas quânticos não relativísticos, tendo em vista sua eventual aplicação na modelagem de sistemas de dimensões submicrométricas. O tratamento é restrito a ondas eletrostáticas em plasmas não relativísticos.

onde os efeitos da estatística fermiônica não são essenciais. Alternativas para a melhoria destes modelos básicos são apontadas com relação as suas possíveis aplicações em circuitos semicondutores ultra-integrados.

PALAVRAS CHAVE Modelo Schrödinger-Poisson, Modelo Wigner-Poisson, Plasmas quânticos.

1 INTRODUÇÃO

O grau cada vez mais alto da miniaturização dos dispositivos semicondutores torna indispensável o emprego de modelos quânticos para a descrição do transporte dos portadores de carga. O diodo túnel, por exemplo, um dispositivo muito popular na indústria, tem por princípio básico de operação, como indica o nome, o efeito túnel. Para este tipo de semicondutor, modelos puramente clássicos como o modelo de Vlasov-Poisson (Markowich et al.(1990)) são totalmente inadequados. No caso específico do diodo túnel, uma descrição quântica em termos do sistema de Wigner-Poisson fornece resultados em concordância com o observado experimentalmente (Kluksdahl et al.(1989)).

No presente trabalho, nossa proposta é apresentar ao leitor não familiarizado com a área, alguns dos modelos de transporte quânticos correntemente usados, tais como o recém citado sistema de Wigner-Poisson. Por motivos de simplicidade, consideraremos apenas sistemas unidimensionais, não relativísticos e sem a presença de campos magnéticos. Igualmente, ignoraremos a indistin- guibilidade dos portadores de carga. Mesmo com estas simplifi- cações, ainda resta, como será visto no que segue, uma vasta gama de situações físicas interessantes que podem ser tratadas de modo satisfatório por estes modelos. Além disso, é importante esclare- cer que a seqüência de aproximações feita está em conformidade

com os modelos usualmente utilizados em aplicações industriais (Markowich et al.(1990)).

O gás de elétrons nos semicondutores, dada a fundamental importância dos fenômenos coletivos na sua dinâmica, pode ser considerado um plasma. Essencialmente, plasmas são meios alta- mente ionizados nos quais, justamente, fenômenos coletivos (tais como a propagação de ondas) tem um papel relevante. Normal- mente, plasmas são globalmente neutros. No caso dos semicon- dutores, a neutralidade de carga é garantida pelos íons da rede cristalina. Ao contrário de um plasma comum, entretanto, o plas- ma num semicondutor não pode ser descrito adequadamente pela Mecânica Clássica. Neste caso, correlações quânticas com origem na sobreposição dos pacotes de onda dos elétrons amplificam con- sideravelmente os efeitos quânticos. Situações semelhantes ocor- rem em outros plasmas na natureza, no plasma encontrado nas estrelas de nêutrons. Neste tipo de plasma astrofísico, a densi- dade dos portadores de carga atinge valores compatíveis com uma significativa sobreposição dos pacotes de onda dos portadores de carga. Entretanto, no caso destes plasmas, a temperatura é de tal magnitude que nenhum tipo de rede cristalina pode sobreviver. Porém, este não é o caso nos semicondutores, onde se deve levar em conta o impacto da rede cristalina na dinâmica.

O movimento coletivo dos portadores de carga em um semi- condutor suscita o aparecimento de oscilações coerentes do cam- po eletromagnético presente no material. A descrição destas os- cilações, ou ondas, constitui um dos objetivos elementares de qual- quer modelo para o transporte de cargas em semicondutores. Neste trabalho, limitaremos a apresentação apenas às ondas eletrostáti- cas.

O artigo é organizado da seguinte maneira. Na seção 2, são revisados os modelos de Schrödinger-Poisson e Wigner-Poisson para o plasma quântico. Especial ênfase é reservada às diversas apro- ximações inerentes a estes modelos. O modelo de Schrödinger- Poisson é o mais adequado no caso de sistemas puros ou no ca- so em que poucos estados quânticos são admissíveis. Nos casos em que muitos estados quânticos são possíveis, é mais indicado o

uso da matriz densidade ou da função de Wigner. Neste artigo, enfatiza-se o emprego da função de Wigner, que apresenta algumas vantagens em relação a matriz densidade. Como é visto no que segue, a função de Wigner, ao contrário da matriz densidade, é uma função real. Além disso, o limite clássico pode ser obtido de modo mais direto a partir do formalismo de Wigner. Finalmente, a função de Wigner é o objeto preferencialmente usado na literatura sobre os plasmas quânticos em semicondutores. Na seção 3, examinam-se os modelos de fluido que podem ser obtidos a partir do sistema de Wigner-Poisson. Sendo representações reduzidas, os modelos de fluido necessariamente contém um número menor de variáveis do que os modelos cinéticos. Do ponto de vista computacional é sempre desejável trabalhar com espaços de dimensionalidade menor, que demandam menos memória para sua discretização. Finalmente, a seção 4 dedica-se a conclusão e a enumeração de algumas questões em aberto.

2 TRANSPORTE EM PLASMAS QUÂNTICOS

Consideraremos exclusivamente plasmas compostos de elétrons, com um fundo iônico imóvel e homogêneo garantindo a neutralidade global da carga. Basicamente por motivos de simplicidade, serão tratados problemas unidimensionais, eletrostáticos, não relativísticos e nos quais a estatística dos portadores de carga pode ser ignorada. Enquanto a restrição a problemas unidimensionais pode ser facilmente dispensada, às custas apenas de uma notação mais complicada, as demais restrições são associadas a hipóteses físicas significativas e não necessariamente realistas. Especificamente, um fundo iônico homogêneo poderia ser substituído por uma distribuição de carga com a periodicidade da rede cristalina do semiconductor em questão. Um passo adiante seria levar em conta o movimento dos íons, o que é imperativo a partir de uma certa temperatura. Finalmente, embora efeitos relativísticos, de campos magnéticos e de spin, não sejam importantes para o funcionamento dos dispositivos semicondutores atualmente fabri-

cados, a tendência é que tais efeitos venham a assumir um papel importante no futuro. Nosso objetivo, neste artigo, resume-se meramente na apresentação de alguns dos modelos que, embora simplificados, estão aptos a capturar a física básica dos plasmas quânticos em semicondutores.

Partimos da hipótese simplificadora que os elétrons constituintes do plasma sejam todos descritos por uma só função de onda $\psi = \psi(x, t)$, sendo o potencial eletrostático autoconsistente do sistema denotado por $\phi = \phi(x, t)$. Face às hipóteses adotadas no início da seção, o modelo quântico mais elementar concebível é o sistema de Schrödinger-Poisson para um estado puro,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - e\phi\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{e}{\epsilon_0} (|\psi|^2 - n_0), \quad (2)$$

onde foi adotada a normalização

$$\int_0^L |\psi|^2 dx = N, \quad (3)$$

onde N é o número de partículas contidas no intervalo $[0, L]$. Assumimos também condições de contorno periódicas (ou condições de contorno de Born-von Karman),

$$\psi(x + L, t) = \psi(x, t), \quad \phi(x + L, t) = \phi(x, t). \quad (4)$$

Observamos de (4) que o comprimento L caracteriza a periodicidade do sistema. No sistema de Schrödinger-Poisson (1-2), $-e$ e m são a carga e a massa dos elétrons, \hbar é a constante de Planck reduzida, ϵ_0 é a constante dielétrica do meio e n_0 é a densidade do fundo iônico. Tomou-se, sem perda de generalidade, íons de carga $+e$. O fato de se considerar apenas uma única função de onda para descrever o conjunto de todos os elétrons implica em considerar apenas estados puros. Estritamente, esta hipótese é inconsistente com a estatística fermiônica dos elétrons, a qual, devido ao princípio da exclusão de Pauli, impediria que dois elétrons de mesmo spin ocupassem o mesmo estado. Entretanto,

se a densidade de partículas não for extrema, é razoável supor, numa primeira abordagem, que os efeitos da estatística fermiônica possam ser negligenciados. Neste caso, não é absurdo que uma só função de onda esteja apta a descrever o conjunto de todos os elétrons do sistema. É interessante notar que num semiconductor real, ϵ_0 pode variar com a posição. Isto ocorre, por exemplo, quando o semiconductor é composto por diferentes materiais, cada qual com sua própria constante dielétrica. Em aplicações práticas, pode-se substituir a massa do elétron pela massa efetiva dos portadores de carga no material. Desta maneira, numa certa medida se teria em conta a influência da rede cristalina do semiconductor (Markowich et al.(1990)). Note-se também que, até certo ponto, a presença de uma rede cristalina pode ser levada em conta por meio das condições de contorno periódicas.

O sistema de Schrödinger-Poisson para um estado puro contém todos os ingredientes necessários para a descrição do transporte de carga em plasmas quânticos: um potencial eletrostático gerado de modo auto consistente pelas partículas do plasma (já que a densidade de carga na equação de Poisson é fornecida pelos elétrons e pelo fundo iônico) e uma equação de transporte quântica, a equação de Schrödinger. Apesar das simplificações drásticas adotadas, não se conhece uma solução analítica exata para o sistema de Schrödinger-Poisson (1-2). Técnicas numéricas, geralmente baseadas em esquemas do tipo "splitting" (Suh et al.(1991)) se fazem necessárias. Mesmo a resolução numérica da equação de Schrödinger para um potencial externo já é uma tarefa pouco trivial. No caso do sistema de Schrödinger-Poisson, se tem não um potencial externo, mas um potencial auto consistente, o que implica em dificuldades extras. De fato, o sistema torna-se acoplado e não linear, ao contrário do que acontece no caso da equação de Schrödinger para um elétron em presença de um potencial externo. Entretanto, as técnicas numéricas atualmente disponíveis são suficientes para o tratamento, via o sistema de Schrödinger-Poisson, de uma gama de situações físicas importantes. Pode-se citar, como um exemplo ilustrativo, o problema da expansão de um gás de elétrons no vácuo, sujeitos a sua própria repulsão eletrostática

(Manfredi(1994)).

Uma vez resolvido numericamente o sistema de Schrödinger-Poisson, pode-se calcular todas as quantidades físicas de interesse no plasma. Mais precisamente, dado um observável \hat{O} como a energia total do sistema de elétrons, calcula-se o seu valor médio $\langle \hat{O} \rangle$ quântico usando

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\int_0^L \psi^* \hat{O} \psi dx}{\int_0^L \psi^* \psi dx}. \quad (5)$$

Como em qualquer descrição quântica, se tem acesso unicamente ao valor médio de um dado observável. Note-se também que, no lado direito de (5), estamos usando a representação O do observável \hat{O} na base de coordenadas. Por exemplo, quando \hat{O} é o momentum canônico, a sua representação na base de coordenadas é dada pelo operador diferencial $p = -i\hbar\partial/\partial x$.

Um aprimoramento do sistema de Schrödinger-Poisson (1-2) consiste em tomar não um estado puro, mas sim uma mistura estatística envolvendo um número arbitrário n de estados $\psi_i = \psi_i(x,t)$, $i = 1, \dots, n$. Neste caso, cada elétron teria uma probabilidade α_i de ocupar o estado ψ_i . Para que os números α_i possam ser diretamente considerados probabilidades, é necessário que sejam satisfetas as condições

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i = 1, \quad \alpha_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (6)$$

Com estas definições feitas, escreve-se o sistema de Schrödinger-Poisson para uma mistura estatística conforme

$$i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} = e\phi\psi_i = i\hbar \frac{\partial \psi_i}{\partial t} \quad (7)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{e}{\epsilon_0} \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i |\psi_i|^2 - n_0 \right). \quad (8)$$

A condição de normalização é

$$\int_0^L |\psi_i|^2 dx = N_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (9)$$

sendo N o número de portadores contidos no intervalo $[0, L]$. Quanto as condições de contorno, continuamos com as de Born-von Karman, agora estendidas a todos os estados,

$$\psi_i(x + L, t) = \psi_i(x, t), \quad \phi(x + L, t) = \phi(x, t). \quad (10)$$

Naturalmente, quando todas as probabilidades α_i , com exceção de uma, se anulam, recai-se no caso de um estado puro.

No sistema de Schrödinger-Poisson para uma mistura estatística, comparecem dois tipos de incerteza. Uma delas, de carácter puramente quântico, reflete a impossibilidade de medirmos simultaneamente posição e momentum com total exatidão. Esta é a falta de informação, diretamente ligada ao princípio da incerteza de Heisenberg, com a qual temos de conviver, e que subsiste mesmo que saibamos com precisão absoluta a função de onda do sistema. A outra informação que nos falta reflete a ignorância sobre qual estado ψ_i é ocupado pelo sistema. Tem-se acesso unicamente às probabilidades α_i de ocupação. Esta falta de informação é idêntica aquela encontrada na Mecânica Estatística Clássica, na qual não se conhece precisamente a posição e o momentum de todas as partículas num dado sistema.

Uma vez resolvido (numericamente) o sistema de Schrödinger-Poisson para uma mistura estatística, calcula-se o valor médio $\langle \hat{O} \rangle$ do observável \hat{O} usando

$$\langle \hat{O} \rangle = \sum_{i=1}^n \alpha_i \langle \hat{O} \rangle_i, \quad (11)$$

onde $\langle \hat{O} \rangle_i$ é a média no estado ψ_i ,

$$\langle \hat{O} \rangle_i = \frac{\int_0^L \psi_i^* \hat{O} \psi_i dx}{\int_0^L \psi_i^* \psi_i dx} = \frac{1}{N} \int_0^L \psi_i^* \hat{O} \psi_i dx. \quad (12)$$

Em (11), se tem dois tipos de média. Uma delas corresponde ao cálculo do valor médio do observável num dado estado. Outra delas corresponde ao cálculo da média sobre todos os estados acessíveis do sistema. Estes dois processos, conforme aludido anteriormente, representam a nossa ignorância do estado do sistema e as relações de incerteza de Heisenberg, respectivamente.

Com justiça, o leitor pode se perguntar se o objeto mais adequado para o tratamento de misturas estatísticas não seria a matriz densidade, como descrito nos livros textos de Mecânica Estatística Quântica (Markowich et al.(1990)). Ocorre que, normalmente, o procedimento numérico para a determinação da matriz densidade é uma tarefa bastante complicada. Além disso, por vezes um número pequeno de estados ψ_i é suficiente para a obtenção de resultados significativos. A este respeito, pode-se citar a referência (Haas et al.(2000)), na qual são tomados apenas dois estados ψ_1 e ψ_2 , cada qual com igual probabilidade $\alpha_1 = \alpha_2 = 1/2$. O problema assim obtido é o análogo quântico do problema do feixe duplo clássico (Akhiezer et al.(1975)). Classicamente, o feixe duplo pode levar a instabilidades, responsáveis pelo colapso de alguns experimentos visando a fusão termonuclear controlada. Estas instabilidades ocorrem quando a velocidade relativa entre os feixes é suficientemente baixa, ou quando os comprimentos de onda envolvidos são suficientemente grandes. Quanticamente, o tipo de instabilidade que pode intervir é bem mais complexo. Para maiores detalhes, ver (Haas et al.(2000)). Outra dificuldade concretamente a matriz densidade é a difícil interpretação de seus elementos não diagonais. Os elementos diagonais da matriz densidade fornecem diretamente a densidade de matéria do sistema, enquanto os termos não diagonais são, normalmente, números complexos, de difícil interpretação física.

No caso de ser necessário considerar um número muito grande de estados ψ_i , pode-se lançar mão de uma alternativa extensivamente usada nos últimos anos, a função de Wigner $f = f(x, p, t)$, dada por

$$f = \sum_i \alpha_i \int \frac{d\lambda}{2\pi\hbar} \psi_i^*(x + \frac{\lambda}{2}, t) \exp(-i\frac{p\lambda}{\hbar}) \psi_i(x - \frac{\lambda}{2}, t). \quad (13)$$

A descrição do plasma em termos da função de Wigner é estritamente equivalente a descrição em termos da matriz densidade (Markowich et al.(1990)), e apresenta a vantagem de ter uma interpretação física mais directa quando no seu limite semi-clássico. Além disso, a função de Wigner é sempre real, ao contrário do que ocorre

com os elementos da matriz densidade.

Dada a função de Wigner, obtém-se o valor médio de um observável \hat{O} usando

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\int f(x, p, t) O(x, p, t) dp dx}{\int f(x, p, t) dp dx}. \quad (14)$$

Pode-se mostrar que (14) conduz aos mesmos resultados que (11). Porém, note-se que no lado direito de (14) aparece a função clássica $O(x, p, t)$ correspondente ao operador \hat{O} . Desta maneira, no formalismo de Wigner é dispensada a utilização de operadores, definidos no espaço de Hilbert. Os objetos a tratar são sempre funções, definidas no espaço de fase. A primeira vista, parece que os problemas de ordenamento (regras de correspondência) inerentes à Mecânica Quântica foram todos contornados. Na verdade, ocorre que no formalismo de Wigner, implicitamente se adota sempre a regra de Weyl para o ordenamento. Detalhes sobre esta questão puramente técnica podem ser encontrados em (Tatarskii(1983)). Observe-se também que, no caso de observáveis como o spin, sem análogo clássico, é preciso uma definição de função de Wigner mais geral do que (13).

A equação (13) para a média de um observável é inteiramente análoga a equação que fornece a média de um observável clássico num sistema com função distribuição $f(x, p, t)$. No entanto, a equação de evolução temporal de f é bastante diferente da equação de Vlasov para a função distribuição clássica. A chamada equação de Vlasov quântica pode ser encontrada usando a definição (13) da função de Wigner e o fato de que cada ψ_i satisfaz separadamente uma equação de Schrödinger, conforme (7). Feitos alguns cálculos, obtém-se a equação de Vlasov quântica, dada por

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial f}{\partial x} = \int dp' K(p' - p, x, t) f(p', x, t), \quad (15)$$

onde $K(p' - p, x, t)$ é um funcional do potencial eletrostático,

$$K(p' - p, x, t) = \frac{e}{i\hbar} \int \frac{d\lambda}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{(p' - p)\lambda}{\hbar}\right) \times \left(\phi\left(x - \frac{\lambda}{2}, t\right) - \phi\left(x + \frac{\lambda}{2}, t\right)\right). \quad (16)$$

A título de comparação, é interessante escrever a equação de Vlasov, satisfeita pela função distribuição clássica,

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{p}{m} \frac{\partial f}{\partial x} + e \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial p} = 0. \quad (17)$$

Pode-se mostrar (Tatarskii(1983)) que a equação de Vlasov quântica recal na equação de Vlasov clássica no limite em que $\hbar \rightarrow 0$. A diferença mais evidente entre (16) e (17) é o caráter não local do termo de interação quântico. Formalmente, o termo de interação quântico é de uma natureza tal que, dada uma função de Wigner $f(x, p, 0)$ inicialmente positiva em todo o seu domínio, não há garantia de que $f(x, p, t)$ permaneça positiva no futuro. A positividade, porém, é uma propriedade que se demonstra no caso clássico.

É importante notar também que funções de Wigner com valores negativos estão longe de ser a exceção. Pelo contrário, raramente se consegue construir condições iniciais para as quais f se mantém positiva ao longo de toda a evolução temporal. Desta forma, é impossível interpretar a função de Wigner como uma distribuição de probabilidade. Por outro lado, a integral de f no espaço de momentum

$$\int f(x, p, t) dp = \sum_i \alpha_i |\psi_i(x, t)|^2, \quad (18)$$

é nada mais do que a densidade de elétrons, é uma quantidade positiva definida. Tendo em conta (18), pode-se re-escrever a equação de Poisson conforme

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{e}{\epsilon_0} \left(\int f(x, p, t) dp - n_0 \right), \quad (19)$$

onde (18) - (19) determina de modo auto consistente o potencial eletrostático e a função de Wigner, e é denominado sistema de Vlasov.

Embora seja comum adotar valores negativos para a função de Wigner, a interpretação aparentemente apenas técnica, na verdade, é a estrutura fundamental da Mecânica Quântica. De

fato, é sempre impossível determinar ao mesmo tempo com exatidão absoluta o valor de dois observáveis que não comutam, como posição e momentum. A impossibilidade de interpretar a função de Wigner como uma distribuição de probabilidades fez com que o formalismo de Wigner fosse tratado com desconfiança durante décadas. Recentemente, porém, a necessidade de modelos eficientes para dispositivos semicondutores ultra-integrados levou a uma re-habilitação da descrição de Wigner, baseada no espaço de fase. O ponto importante aqui é a acessibilidade do sistema de Wigner-Poisson a análise numérica, como no caso notório do diodo túnel (Kluksdahl et al.(1989)). Segundo Markowich *et al.*, (Markowich et al.(1990)), o modelo de Wigner-Poisson é talvez o único modelo *cinético* para plasmas quânticos em circuitos ultra-integrados que pode ser simulado eficientemente. Note-se, porém, que uma série de questões sobre o sistema de Wigner-Poisson ainda não foi totalmente esclarecida. Por exemplo, o tamanho finito (e cada vez menor) dos semicondutores pode ter um efeito significativo no funcionamento dos mesmos. Além disso, normalmente os semicondutores são sistemas abertos, com fluxo de partículas tanto para o interior quanto para o exterior do material. Claramente, simples condições de contorno periódicas não são suficientes para dar conta da finitude e do caráter aberto dos sistemas que se quer tratar. Alternativas tem sido propostas (Frenley(1990)), como as chamadas condições de contorno do tipo "inflow" ou "outflow".

Como uma aplicação elementar do sistema de Wigner-Poisson, consideraremos a relação de dispersão para um plasma quântico. Suponhamos que o plasma se encontra num estado de equilíbrio homogêneo caracterizado por uma função de Wigner de equilíbrio $f = f_0(p)$ e por um potencial eletrostático nulo. Perturbando este equilíbrio, resulta que o plasma apresenta oscilações coletivas, com modos normais determinados pela relação de dispersão. Formalmente, a relação de dispersão pode ser obtida substituindo

$$f(x, p, t) = f_0(p) + f_1(p)e^{i(kx - \omega t)}, \quad \phi(x, t) = \phi_1 e^{i(kx - \omega t)} \quad (20)$$

no sistema de Wigner-Poisson (15-19), onde $f_1(p)$ e ϕ_1 são quantidades de primeira ordem. Está-se fazendo aqui, implicitamente,

um desenvolvimento da perturbação em séries de Fourier no espaço e no tempo. As ondas lineares que resultam deste procedimento tem frequência $\omega = \omega(k)$, necessariamente uma função do número de onda k . A relação de dispersão é justamente a expressão que relaciona a frequência e o número de onda. Considerar apenas um modo normal $\omega = \omega(k)$ não representa perda de generalidade se nos atermos a oscilações lineares, de pequena amplitude. A este respeito, o estudo de oscilações não lineares de plasmas, sejam clássicas, sejam quânticos, é levado a cabo apenas numericamente, na maior parte dos casos. Note-se também que, estritamente, o método mais adequado para a análise dos modos normais de um plasma consiste em tratar a questão como um problema de valor inicial. Neste sentido, se procura determinar a evolução temporal da perturbação, o que é feito via transformada de Laplace no tempo e transformada de Fourier no espaço. Este procedimento leva a uma conhecida solução de Landau (Akhiezer et al.(1975)), que mostra o atenuamento progressivo das ondas lineares em plasmas clássicos com distribuição de equilíbrio Maxwelliana.

Substituindo, então, (20) em (15)-(19), obtém-se, para o termo de ordem zero,

$$\int f_0(p) dp = n_0, \quad (21)$$

que garante a neutralidade global de carga no equilíbrio. Para termos de ordem um, resulta um sistema linear e homogêneo $A f_1 + B \phi_1 = 0$, a qual só tem solução quando

$$\det \begin{pmatrix} \epsilon_0 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp}{\omega - k p/m} (f_0(p + \hbar k/2) - f_0(p - \hbar k/2)) & 0 \\ 0 & -k^2 \epsilon_0 \phi_1 \end{pmatrix} = 0, \quad (22)$$

onde ω é a frequência do plasma eletrônica,

$$\omega_p = \left(\frac{n_0 e^2}{m \epsilon_0} \right)^{1/2}, \quad (23)$$

para uma dada função distribuição de equilíbrio, $f_0(p)$. Para termos de ordem k , ou seja, a relação de dispersão, resulta $A f_1 + B \phi_1 = 0$, onde A e B são funções de k e ω . Assim, a relação de dispersão é dada por $A(\omega, k) = 0$.

O exemplo mais simples para ilustrar o uso de (22) é aquele no qual o estado de equilíbrio do plasma corresponde ao caso em que todos os elétrons encontram-se imóveis. Neste caso, se tem

$$f_0(p) = n_0 \delta(p), \quad (24)$$

sendo $\delta(p)$ a função de Dirac. A função distribuição (24) expressa o fato de todos os elétrons terem velocidade zero no equilíbrio escolhido. Além disso, por construção (24) é coerente com a neutralidade global de carga. Entretanto, este tipo de função distribuição não é coerente com a exigência de temperaturas moderadas feita na introdução deste trabalho. De fato, não é razoável negligenciar efeitos de spin se o plasma encontra-se no zero absoluto. A escolha de (24) deve-se sobretudo a motivos didáticos.

Inserindo (24) na relação de dispersão (22), encontra-se, de modo exato,

$$\omega^2 = \omega_p^2 + \frac{\hbar^2 k^4}{4m^2}. \quad (25)$$

Note-se que a correção quântica só é significativa para grandes números de onda, isto é, para pequenos comprimentos de onda.

Considerar equilíbrios mais realistas fatalmente levaria a relações de dispersão que podem ser calculadas apenas de modo aproximado. Pode-se mostrar, em várias situações de interesse (como no caso de um equilíbrio Maxwelliano a uma dada temperatura), que os efeitos quânticos tornam-se mais pronunciados quando a densidade eletrônica é alta, quando a temperatura é baixa e quando o comprimento de onda é pequeno. Todas estas situações podem facilmente ter lugar em semicondutores ou em plasmas astrofísicos, por exemplo.

3 MODELOS DE FLUIDO

Descrições cinéticas exigem a consideração da dinâmica no espaço de fase. Os algoritmos computacionais para os modelos cinéticos, portanto, requerem sempre a discretização de dois conjuntos de variáveis: as variáveis de posição e as variáveis de momentum. O

gasto em memória e em tempo de máquina é consideravelmente maior do que no caso de modelos reduzidos, nos quais, de alguma forma, a descrição é feita em termos de um número menor de coordenadas. Além disso, em muitas situações os modelos cinéticos contêm mais informação do que o efetivamente necessário. Por todos estes motivos, são muito úteis os modelos de fluido, nos quais as únicas variáveis importantes são posição e tempo. Ou seja, as funções de interesse não dependem do momentum. A eliminação do momentum é obtida por meio de integrações adequadas no espaço de momentum. Mais precisamente, a partir da função de Wigner se definem os campos hidrodinâmicos de densidade $n = n(x, t)$,

$$n(x, t) = \int dp f(x, p, t), \quad (26)$$

de velocidade $u = u(x, t)$,

$$u(x, t) = \frac{1}{mn} \int dp p f(x, p, t), \quad (27)$$

de pressão $P = P(x, t)$,

$$P = \frac{1}{m} \int dp (p - m u)^2 f(x, p, t). \quad (28)$$

Em sistemas de dimensão mais alta, deve-se considerar um tensor de pressão.

Entretanto, os campos hidrodinâmicos dependem apenas de posição e momentum. A sua interpretação física é imediata, sendo n a densidade de matéria, $u(x, t)$ a velocidade e P a pressão do fluido quântico. As definições usadas são as mesmas utilizadas para os campos hidrodinâmicos obtidos a partir de uma teoria cinética clássica (Akhiezer et al. (1975)). A função de Wigner-Poisson, entretanto, descreve a evolução temporal da função distribuição quântica, e não clássica, o que implica em algumas diferenças no que segue.

Em qualquer teoria de fluido, seja ela clássica, seja ela quântica, a descrição hidrodinâmica perde-se a informação sobre a função distribuição no espaço de momentum.

Esta perda de informação sobre a estrutura fina da distribuição de partículas pode levar ao mascaramento de efeitos importantes. Por exemplo, o amortecimento de Landau (Suh et al.(1991)) não é detectado pelo modelo hidrodinâmico para o plasma quântico. Mesmo assim, é de interesse construir uma teoria de fluido, que requer menor esforço computacional e que pode dar uma idéia ao menos aproximada do comportamento do sistema em estudo.

Para obter as equações que descrevem a evolução temporal dos campos hidrodinâmicos, basta integrar a equação de Vlasov quântica (15) no espaço de momentum, após multiplicá-la por potências adequadas de p . Estas integrais são chamadas momentos da equação de Vlasov quântica. O momento de ordem zero, por exemplo, é obtido simplesmente integrando (15) no espaço de momentum. O resultado é uma equação de continuidade de matéria,

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial (nu)}{\partial x} = 0. \quad (29)$$

Já o momento de ordem um é encontrado multiplicando (15) por p e integrando no espaço de momentum. O que se obtém é uma equação para o transporte de momentum,

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{e}{m} \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{1}{mn} \frac{\partial P}{\partial x}. \quad (30)$$

Formalmente, as equações de continuidade e de força são idênticas nos níveis clássico e quântico. Termos extras nas equações hidrodinâmicas quânticas só aparecem quando se consideram momentos de ordem mais alta. Em particular, o seguinte momentum de (15) descreve o transporte de calor no fluido quântico.

Observe-se que a equação para a evolução temporal da densidade (um momento de ordem zero) envolve a velocidade (um momento de ordem um), ao passo que a equação para a evolução temporal da velocidade envolve a pressão (um momento de ordem dois). Pode-se demonstrar, com toda generalidade, que a equação para a evolução temporal de um momento de ordem N sempre depende de um momento de ordem $N+1$. Desta maneira, o que se obtém é uma cadeia infinita de equações, similar (mas não idêntica) a cadeia BBGKY da física de plasma clássica. Uma

maneira de obter sistemas fechados de equações é adotar uma equação de estado relacionando as diversas quantidades presentes. Por exemplo, pode-se supor que a pressão seja dada em termos da densidade por uma relação do tipo $P = nk_B T$, onde k_B é a constante de Boltzmann e T a temperatura. Neste caso, teríamos a equação de estado para um gás ideal. A adoção de equações de estado é prática corrente e reflete o tipo de aproximação que se está fazendo, mas não tem justificativa rigorosa. A correção das hipóteses feitas deve ser testada experimentalmente.

Embora as equações de transporte (29-30) para o fluido quântico sejam formalmente idênticas as equações de transporte para o fluido clássico, há uma diferença sutil presente na função pressão. Após escrever P em termos da função de Wigner usando (13) e (21), é conveniente utilizar a decomposição dos estados ψ_i dada por

$$\psi_i(x, t) = A_i(x, t) \exp(i S_i(x, t)/\hbar), \quad (31)$$

onde $A_i(x, t)$ e $S_i(x, t)$ são funções reais e finitas no limite clássico $\hbar \rightarrow 0$. Após alguns cálculos, demonstra-se que

$$P = P^C + P^Q, \quad (32)$$

$$P^Q = \frac{1}{2m} \sum_{i,j=1}^n \alpha_i \alpha_j A_i^2 A_j^2 \left(\frac{\partial S_i}{\partial x} - \frac{\partial S_j}{\partial x} \right)^2 \quad (33)$$

é o termo da função pressão que não se anula no limite clássico e

$$P^C = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \alpha_i \left(\left(\frac{\partial A_i}{\partial x} \right)^2 - A_i \frac{\partial^2 A_i}{\partial x^2} \right) \quad (34)$$

é o termo que vai a zero no limite clássico. Porém, no limite clássico, pode-se ver por inspeção de (33) e (34) se constata que o termo da pressão se anula, o que não ocorre com a pressão clássica. Isto reflete o fato de que P^C corresponde a uma imagem da pressão, que seria apenas o resultado da pressão de um sistema. Esta imagem parece ser a mesma dada em (28). Entretanto, é fundamental

levar em conta também P^Q , que reflete uma espécie de “pressão” de origem puramente quântica, cujo efeito mais famoso é a dispersão dos pacotes de onda, em condições normais. Em última análise, esta pressão quântica é uma manifestação das relações de incerteza de Heisenberg.

4 CONCLUSÃO E PROBLEMAS EM ABERTO

Curiosamente, melhores supercomputadores possibilitam melhores simulações do comportamento de plasmas em semicondutores e melhores simulações destes sistemas possibilitam a construção de melhores supercomputadores. Esta interação auto consistente tem proporcionado um incremento contínuo do poder dos supercomputadores, levando a crer que, em futuro próximo, será possível simular com suficiente realismo a maioria dos semicondutores com aplicação industrial. Esta tarefa é em parte facilitada pela existência, para a simulação de plasmas clássicos, de bons códigos numéricos (Birdsall(1985)), os quais podem ser usados como ponto de partida para a construção de algoritmos aplicáveis aos modelos de transporte quânticos. A este respeito, entretanto, note-se a forma complicada do termo de interação presente na equação de Liouville quântica. Além disso, efeitos de colisões, quando acuradamente tratados, invariavelmente levam a grandes complicações numéricas. Uma abordagem pragmática, neste caso, é a adoção de termos de colisão fenomenológicos, como nos modelos de relaxação (Markowich et al.(1990)). Até o momento, não se chegou a um acordo universal sobre a forma mais apropriada do termo de colisão que representa os possíveis efeitos dissipativos nos plasmas em semicondutores.

Um problema ainda objeto de controvérsia é a determinação de condições de contorno matematicamente apropriadas para o sistema de Wigner-Poisson. A este respeito, novamente a maior dificuldade reside no caráter não local do termo de interação na equação de Liouville quântica. Outro obstáculo que se apresenta é o fato dos plasmas em semicondutores serem, normalmente,

sistemas abertos, com correntes fluindo para o exterior ou para o interior do material. O tipo de condição de contorno adotada representa, sempre, alguma espécie de hipótese física a respeito dos contatos do circuito eletrônico. Por exemplo, um contato dito ideal é aquele para o qual não há reflexão dos portadores de carga (Frensley(1990)).

A descrição dos sistemas ultra-integrados atualmente produzidos é baseada na interação eletrostática. A principal razão para isto é a gama de dificuldades analíticas e computacionais representadas pela introdução de campos magnéticos. Entretanto, é de se esperar que o estudo de situações idealizadas possa trazer resultados interessantes. A este propósito, a física de plasma clássica é adequada em fenômenos nos quais os campos magnéticos são fundamentais. Tome-se, para citar um exemplo, o caso da propagação de ondas eletromagnéticas transversais num plasma não relativístico. É de interesse verificar em que medida efeitos quânticos podem afetar a propagação deste tipo de onda. Além dos campos magnéticos, outro efeito a incorporar nas teorias futuras é o spin dos portadores de carga, os quais, freqüentemente, obedecem a uma estatística fermiônica.

Por fim, as técnicas analíticas normalmente utilizadas no estudo dos plasmas quânticos estão restritas a regimes lineares e a amplitude das ondas é pequena. Um passo adicional na construção de uma teoria quasi-linear para o sistema de Wigner-Poisson. No nível clássico, a teoria quasi-linear para plasmas é extensivamente considerada (Shapiro(1997)). Atualmente em andamento, estamos construindo uma teoria quasi-linear para o sistema de Wigner-Poisson. Em particular, estamos considerando uma teoria de conta da saturação observada em alguns casos (Hass et al.(2000)) em algumas instabilidades de plasmas. Este trabalho é parte linear do plasma quântico.

AGRADECIMENTOS

Trabalho parcialmente financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). Um dos autores (F. H.) agradece ao Laboratoire de Physique des Milieux Ionisés (LPMI) pela hospitalidade durante o preparo deste trabalho.

Referências

- Markowich, P. A., Ringhofer, C. A. & Schmeiser, C. *Semiconductor equations*. Viena: Springer-Verlag, 1990.
- Kluksdahl, N. C., Kriman, A. M., Ferry, D. K. & Ringhofer, C. *Self-consistent study of the resonant-tunneling diode*. Phys. Rev. B **39** (1989) 7720-7735.
- Suh, N., Feix, M. R. & Bertrand, P. *Numerical simulation of the quantum Liouville-Poisson system*. J. Comput. Phys. **94** (1991) 403-418.
- Manfredi, G. *Sur les modèles de Vlasov, Schrödinger et Wigner en Physique des Plasmas: Redimensionnement et Expansion dans le Vide*, tese, Université d'Orleans, 1994.
- Haas, F., Manfredi, G. & Feix, M. R. *Multistream model for quantum plasmas*. Phys. Rev. E. Previsto para publicação em agosto de 2000.
- Akhiezer, A. I., Akhiezer, I. A., Polovin, R. V., Sitenko, A. G. & Stepanov, K. N. *Plasma electrodynamics*. Oxford Pergamon Press, 1975.
- Tatarskii, V. I. *The Wigner representation of Quantum Mechanics*. Sov. Phys. Usp. **26** (1983) 311-327.
- Frenshley, W. R. *Boundary condition for open quantum systems driven far from equilibrium*. Rev. Mod. Phys. **61** (1990) 745-791.
- Birdsall, K. & Langdon, A. B. *Plasma physics via computer simulation*. New York: McGraw-Hill, 1985.

Shapiro, V. D. & Sagdeev, R. Z. *Nonlinear wave-particle interaction and condition for the applicability of quasilinear theory*. Phys. Rep. **283** (1997) 49-71.