



Universidade do Estado do Rio de Janeiro
Centro de Tecnologia e Ciências
Instituto de Física Armando Dias Tavares

Emanuel José Reis de Oliveira

**Estudos sobre canais de transporte em camadas de
GaAs/GaMnAs**

Rio de Janeiro
2010

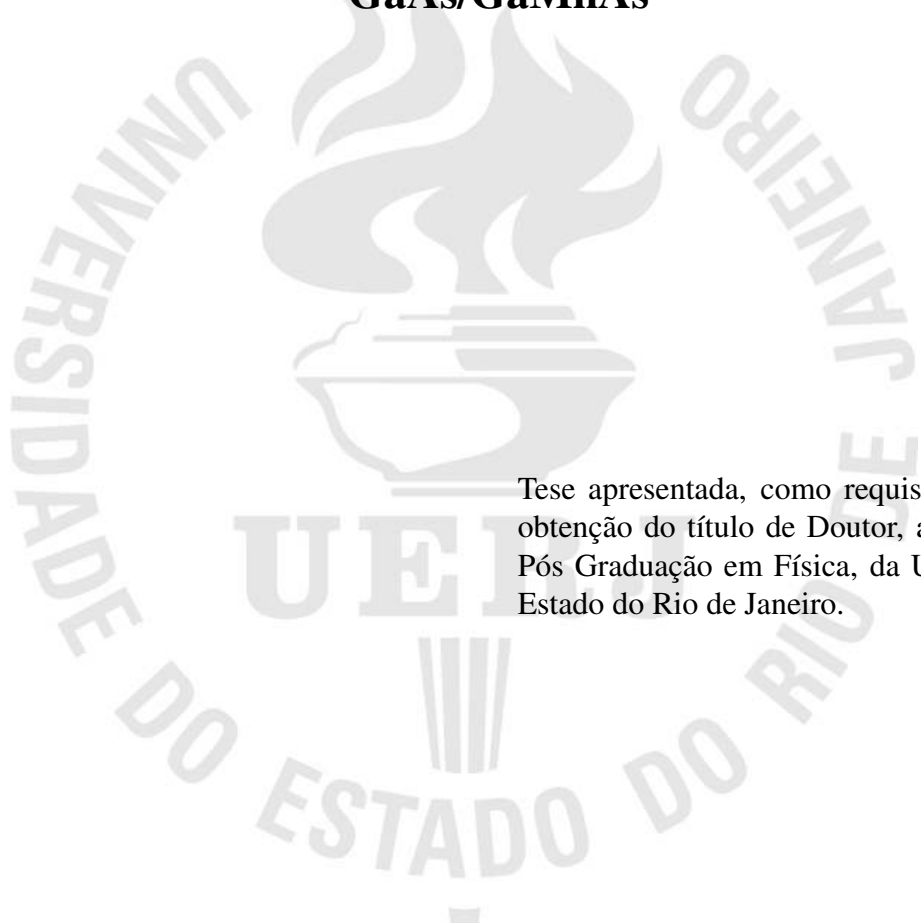
Livros Grátis

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

Milhares de livros grátis para download.

Emanuel José Reis de Oliveira

**Estudos sobre canais de transporte em camadas de
GaAs/GaMnAs**



Tese apresentada, como requisito parcial para
obtenção do título de Doutor, ao Programa de
Pós Graduação em Física, da Universidade do
Estado do Rio de Janeiro.

Orientador: Prof. Dr. Ivan Costa de Cunha Lima

Rio de Janeiro
2010

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC-D

O48 Oliveira, Emanuel José Reis de.
Estudos sobre canais de transporte em camadas de
GaAs/GaMnAs / Emanuel José Reis de Oliveira. - 2010.
69f.: il. color.

Orientador: Ivan Costa da Cunha Lima.

Tese (Doutorado) - Universidade do Estado do Rio de
Janeiro, Instituto de Física Armando Dias Tavares.

1. Teoria do Transporte - Teses. 2. Matéria condensada -
Teses. I . Cunha Lima, Ivan Costa da. II. Universidade do
Estado do Rio de Janeiro, Instituto de Física Armando Dias
Tavares. III. Título.

CDU 538.93

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta tese.

Assinatura

Data

Emanuel José Reis de Oliveira

Estudos sobre canais de transporte em camadas de GaAs/GaMnAs

Tese apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós Graduação em Física da Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Aprovada em 01 de outubro de 2010.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Ivan Costa da Cunha Lima (Orientador)
Instituto de Física Armando Dias Tavares da UERJ

Prof. Dr. Virgílio de Carvalho dos Anjos
Universidade Federal de Juiz de Fora

Prof. Dr. Daniel Gustavo Barci
Instituto de Física Armando Dias Tavares da UERJ

Prof. Dr. Sergio Saul Makler
Universidade Federal Fluminense

Prof. Dr. Nilson Antunes de Oliveira
Instituto de Física Armando Dias Tavares da UERJ

Profa. Dra. Luciana Loureiro da Silva
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Rio de Janeiro
2010

DEDICATÓRIA

À minha família,
Adriana, Vinícius e Adriano

AGRADECIMENTOS

Como em todas as conquistas, sempre existem pessoas que foram muito importantes para tais conquistas acontecerem. Neste pequeno espaço quero registrar a minha gratidão a algumas dessas pessoas que contribuíram para que este momento fosse possível.

Seguindo uma linha do tempo, muito obrigado à minha namorada, companheira, amiga, parceira e mulher, Adriana. Não existem palavras possíveis para expressar o tamanho da minha gratidão a você. Sempre presente ao longo de todos esses anos, desde o primeiro dia foi minha grande incentivadora. Nos momentos mais difíceis e de vontade de desistir de tudo, sempre tinha uma palavra amiga e o argumento certo para seguir em frente. Muito obrigado, minha querida...

Agradeço à minha mãe, Maria Regina, que em sua simplicidade e a sabedoria peculiar às mães, sempre me apoiou ao longo desses anos.

Agradeço aos meus irmãos, Flávio, Júnior, Tarcísio e Daniel. Mesmo à distância e em meio ao turbilhão de suas próprias vidas, sempre me ajudaram nos momentos em que deles necessitei.

Agradeço ao meu orientador, professor Ivan Costa da Cunha Lima pela orientação, pela paciência com minhas dificuldades e limitações. Obrigado pelos ensinamentos ao longo desses anos, pelo incentivo e por acreditar em mim. Registro aqui também o meu agradecimento ao professor Marco A. Boselli como um importante colaborador para a realização desta tese.

Agradeço à minha amiga Erika Dias Cabral por sua inestimável colaboração para o término desta tese, principalmente nos últimos meses.

Muito obrigado aos meus tios José Fernando e Carminha, que me acolheram em sua casa como a um filho. Sem a generosidade de vocês certamente seria muito mais difícil terminar este trabalho.

Agradeço ao Programa de Pós Graduação em Física da Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ) pela oportunidade de realizar este trabalho e aos secretários, Laurimar, Rogério e Izabel, por toda a ajuda ao longo desses anos.

Por fim, quero agradecer àquelas pessoas não citadas aqui nominalmente, mas que de alguma forma participaram deste importante momento da minha vida.

RESUMO

OLIVEIRA, Emanuel José Reis de. **Estudos sobre canais de transporte em camadas de GaAs/ GaMnAs**. 2010. 69f. Tese (Doutorado em Física) - Instituto de Física Armando Dias Tavares, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2010.

Propostas de construção de dispositivos que unem a eletrônica com a spintrônica utilizando compostos semicondutores magnéticos diluídos (DMS) tem se tornado cada mais frequentes junto à comunidade científica em geral. Em particular, por suas propriedades magnéticas e de transporte hoje conhecidas, camadas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ pertencem a um grupo de DMS com grandes possibilidades de utilização prática. Nesse sentido, entender suas propriedades de transporte é essencial para o desenvolvimento dessa nova área. Investigamos o transporte spin polarizado em nanocamadas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ que exibem uma fase ferromagnética abaixo de certa temperatura de transição de fase. Como procedimento de pesquisa, nosso cálculo da resistividade considerou a existência de uma banda de impureza que determina a natureza do estado no nível de Fermi e dos estados próximos a ele como estendidos (condução "metálica") ou localizados (condução por excitação térmica). A ordem magnética e a resistividade são interligados devido à influência da polarização de spin da banda de impurezas e um efeito tipo separação Zeeman sobre a *mobility edge*¹. Obtivemos para um dado intervalo de concentração de manganês e de portadores, um comportamento metálico em que o transporte por estados estendidos domina em baixas temperaturas e é dominado por um processo de excitação térmica dos estados localizados para temperaturas próximas e acima da temperatura de transição. O resultado dessa combinação de canais de condução foi o aparecimento de uma lombada na resistividade, a qual tem sido observada experimentalmente, e traz esclarecimentos sobre a relação entre as propriedades de transporte e magnéticas desse material.

Palavras-chave: Estados estendidos e localizados. Banda de impurezas. *Mobility edge*. Resistividade.

¹Embora a expressão possa ter uma tradução, é comumente usada na área em inglês.

ABSTRACT

Construction proposals of the contrivances that put together electronic with spintronic using diluted magnetic semiconducting compounds (DMS) are more and more frequent to the scientific community in general. In particular, because of its magnetic and transporting rightnesses that has been known today, GaMnAs stratum belongs to a DMS group with great possibilities of the practical utilization. In this sense, to understand its transporting rightnesses is essential to the development in this new area. We investigate the polarized spin transport in GaMnAs nanolayers that display an ferromagnetic stage below of the specific phase transition temperature. As a procedure research, our resistivity estimate has consider the existence of an impurity band that determine the state nature in the Fermi level and the states near to it like extended ("metallic" conduction) or located (thermic excitation conduction). The magnetic order and resistivity are interconnected due to the influence of the spin polarization of the band of the impurities and another effect as a Zeeman separation over the mobility edge. We acquire, for a certain interval of bearings and manganese concentration, a metallic behavior in which the transport to the extended states rules in low temperatures and is ruled by an process of thermic excitation of the states located to near and over temperatures of the transition temperature. The result of this transport channels combination was the appearance of an acclivity in the resistivity that has been observed experimentally and brings elucidations about the relation between the magnetic and transporting rightnesses of this material.

Keywords: Extended and localized states. Band of impurities. Mobility edge. Resistivity.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Resistividade dependente da temperatura para amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$, com x variando entre 0,015 e 0,071 [7].	13
Figura 2 - Diagrama de <i>self-energy</i> para a aproximação de espalhamento múltiplo. . . .	19
Figura 3 - (a) Densidade de estados em unidades arbitrárias para uma amostra típica com uma banda de impureza destacada.(b) Função densidade espectral para dois valores de energia: E_1 no meio da banda de impureza e E_2 dentro da banda de valência [36]	20
Figura 4 - Figura de mérito [37].	21
Figura 5 - Potencial magnético efetivo (esquemático) [16].	48
Figura 6 - Dupla camada de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, separada por uma camada não dopada de GaAs [16].	48
Figura 7 - Função densidade espectral para $E = E_F$ localizado.	50
Figura 8 - Função densidade espectral para $E = E_1$ localizado.	50
Figura 9 - Função densidade espectral para $E = \mu > E_F$ estendido.	51
Figura 10 - Função densidade espectral para $E = E_2 > \mu$ estendido.	51
Figura 11 - Densidades espectrais: (a) $E = E_F$; (b) $E = E_1 < \mu$; (c) $E = \mu < E_F$; (d) $E = E_2, \mu < E_2 < E_F$	52
Figura 12 - Densidade de estados, onde se indica a <i>mobility edge</i> μ [37].	53
Figura 13 - Gráficos de $\Pi_2^{(0)}(1, 1, \mathcal{E}_q, 0)$ para as temperaturas mostradas.	54
Figura 14 - Gráficos de $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ os pares $(m = 1; n = 2)$, $(m = 1; n = 1)$ e para as temperaturas mostradas.	55
Figura 15 - À esquerda, mostramos o gráfico de $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ para temperaturas e pares (m, n) diferentes. À direita, mostramos o gráfico de $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ a mesma temperatura e diferentes pares (m, n)	55
Figura 16 - Densidade de carga através da direção-z para $\langle M \rangle = 0$ e $\langle M \rangle = 1$	57
Figura 17 - Resistividade para $n_s^* = n_s$ em unidade arbitrárias em função da magnetização média. No inset, o número de subbandas ocupadas em função da magnetização média.	58
Figura 18 - Razão (n_s^*/n_s) em função da magnetização normalizada das amostras. Amostra 1: $n_i = 3,75 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $n_s = 3,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Amostra 2: $n_i = 4,5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $n_s = 3,25 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Amostra 3: $n_i = 7,5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $n_s = 3,25 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	59
Figura 19 - Gráfico da resistividade total em escala logarítmica.	61
Figura 20 - Classificação de amostras como metálicas e não metálicas esquematicamente	62

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Valores de concentração, propriedades magnéticas e de transporte para amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$ [7].	12
---	----

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	11
1	DESORDEM E LOCALIZAÇÃO	17
2	TEORIA DE BALANCEAMENTO DE FORÇA E ENERGIA	22
3	A POLARIZAÇÃO E A RESISTIVIDADE NO CASO ÔHMICO	39
4	RESISTIVIDADE EM CAMADAS DE GaAs/Ga_{1-x}Mn_xAs	47
5	CONCLUSÃO	64
	REFERÊNCIAS	66

INTRODUÇÃO

Semicondutores magnéticos diluídos ou DMS (*Diluted Magnetic Semiconductors*) são materiais semicondutores nos quais uma fração considerável dos seus componentes são substituídos por metais de transição ou terras raras. O resultado dessa substituição é a observação de vários efeitos intrigantes e importantes, tanto do ponto de vista tecnológico quanto para a ciência básica, no que tange ao conhecimento de suas propriedades óticas, magnéticas, de transporte, entre outras. Entre vários outros materiais, podemos citar como exemplo de DMS, compostos II-VI [1] (como CdTe e ZnTe dopados com Mn), compostos IV-VI (como PbTe dopados com Eu) e compostos III-V (como GaAs dopado com Mn). Particularmente, desde os primeiros relatos da produção de DMS a partir de compostos III-V, o interesse por eles tem crescido nos últimos vinte anos e têm sido objeto de muitos estudos tanto experimentais quanto teóricos.

Assim como os demais compostos de DMS, os baseados no GaAs são produzidos utilizando uma técnica de crescimento conhecida como MBE (Molecular Beam Epitaxy) a baixas temperaturas (200-300 °C). As primeiras amostras estáveis preparadas eram de $\text{In}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ [2], onde x é a concentração de manganês na amostra. A partir daí, vários trabalhos foram desenvolvidos com essas amostras e logo mostrou-se que elas exibiam uma ordem ferromagnética induzida por buracos em baixas temperaturas e propriedades como uma alta magnetoresistência negativa [3, 4, 5]. A possibilidade de se produzir amostras de DMS usando arseneto de gálio (GaAs) dopado com manganês, $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, com uma concentração da ordem de $x = 0,07$ [6], abriu novas perspectivas, uma vez que as propriedades eletrônicas do GaAs e suas ligas relacionadas permitem a sua utilização em dispositivos eletrônicos a temperatura ambiente. As primeiras amostras de (Ga,Mn)As já revelavam propriedades como uma ordem ferromagnética dependente da concentração de manganês e a evidência do efeito Hall anômalo, o qual, ao contrário do efeito Hall normalmente observado nos metais em geral, não depende da aplicação de um campo magnético externo, mas sim da magnetização da amostra. No entanto, as impurezas de manganês ainda não eram uniformemente distribuídas sobre as amostras e era identificado um acoplamento antiferromagnético entre íons de manganês e sítios de gálio.

O manganês é um metal de transição que tem o nível 3d semipreenchido com cinco elétrons, de tal forma que ele possui um momento magnético localizado igual a $5\hbar/2$. Por sua vez, o gálio tem três elétrons na sua última camada. Numa liga de GaMnAs, o manganês participa idealmente substituindo o gálio na estrutura cristalina. Dessa forma, o manganês será então uma impureza aceitadora e os portadores de carga elétrica serão buracos.

Com o desenvolvimento e o domínio da técnica de MBE a baixas temperaturas, boas amostras homogêneas foram produzidas por Oiwa et al [7] e van Esch et al [8] na fase ferromagnética e com temperaturas de transição mais altas. Dada a importância da produção dessas

amostras para a Spintrônica e para a ciência básica, apresentamos a seguir uma descrição de algumas das características relevantes dessas amostras do ponto de vista de transporte.

As amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$ pesquisadas por Oiwa et al foram crescidas pela técnica de MBE a baixas temperaturas com uma concentração de impurezas de Mn entre 0,015 e 0,071. A amostra 1, com $x = 0,015$, apresentou um comportamento paramagnético mesmo para temperaturas muito baixas, da ordem de 1,5 K. Medidas da resistividade apontaram para um comportamento tipicamente não metálico, com a resistividade diminuindo com o aumento da temperatura. A amostra 2, com uma concentração $x = 0,022$, apresenta uma resistividade com um comportamento semelhante ao da amostra 1, indicando o caráter não metálico da amostra. Porém, essa amostra torna-se ferromagnética a uma temperatura Curie de 5 K, o que permite concluir que o valor crítico da concentração de impurezas para a transição de paramagnética para ferromagnética está entre 0,015 e 0,022.

Por sua vez, a amostra 3, com uma concentração $x = 0,035$, também apresenta o caráter ferromagnético com uma temperatura de transição de $T_C \sim 60$ K. A resistividade mantém-se praticamente constante para temperaturas bem menores do que T_C , mostrando um máximo em torno de T_C . Esta dependência da resistividade com a temperatura é comumente encontrada em metais muito sujos, de alta resistividade. Desta forma, entre as concentrações 0,022 e 0,035 podemos identificar uma transição não metal-metal. A resistividade da amostra 4, com $x = 0,043$, da mesma forma que a amostra 3, apresenta um comportamento compatível com o de metais pobres, sendo praticamente constante para temperaturas baixas e tendo um pequeno aumento para temperaturas próximas à T_C , a qual, para esta amostra, está em torno de 70 K.

A amostra 5, $x = 0,053$, e a amostra 6, $x = 0,071$, exibem uma fase ferromagnética a partir das temperaturas críticas $T_C \sim 55$ K e $T_C = 35$ K, respectivamente. Em relação à resistividade dessas amostras, para temperaturas bem menores do que T_C , a resistividade de ambas decresce com o aumento da temperatura, exibindo uma lombada pronunciada para temperaturas próximas à T_C , e em seguida decrescendo novamente para temperaturas maiores do que a crítica. Este é um comportamento misto da resistividade, o que sugere que essas amostras são não metálicas e então podemos identificar uma outra transição de fase, agora metal-não metal. Na Tabela 1, apresentamos um resumo das propriedades magnéticas e de transporte até aqui discutidas para essas amostras.

Amostra	1	2	3	4	5	6
x	0.015	0.022	0.035	0.043	0.053	0,071
Condução	NM	NM	M	M	NM	NM
Magnetismo	Para	Ferro	Ferro	Ferro	Ferro	Ferro
T_C (K)	-	5	60	70	55	35

Tabela 1: Valores de concentração, propriedades magnéticas e de transporte para amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$ [7].

É interessante notar que o aumento da concentração de impurezas permite evidenciar

não somente uma transição da fase paramagnética para uma fase ferromagnética que permanece após um certo valor crítico de x , mas também mostra uma transição não metal-metal, acompanhado de um aumento na temperatura Curie e uma transição metal-não metal acompanhada de uma redução da temperatura crítica. Na Fig. 1, mostramos os gráficos da variação da resistividade com a temperatura para essas amostras.

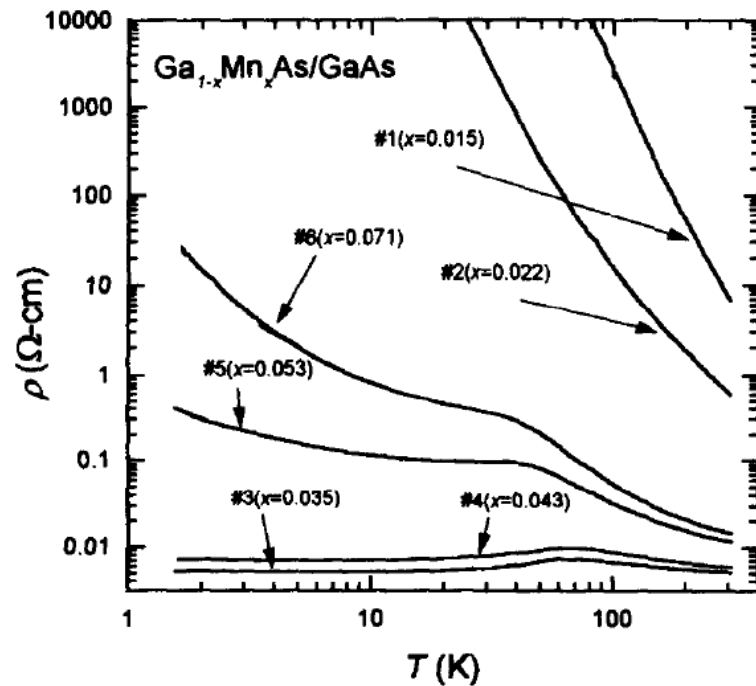


Figura 1: Resistividade dependente da temperatura para amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$, com x variando entre 0,015 e 0,071 [7].

No importante trabalho realizado por van Esch et al, as amostras de $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$ possuíam uma concentração de impurezas que variava entre $x = 0,029$ a $x = 0,087$. Porém, algumas das amostras desta pesquisa foram submetidas a um processo de recozimento (annealing). Este processo, de maneira simplificada, tem como objetivo tornar as amostras mais homogêneas. O comportamento da resistividade das amostras de maneira geral foi semelhante ao observado nas seis amostras descritas acima, bem como o aparecimento de uma fase ferromagnética dependendo do valor de x .

Recentemente, uma estrutura da forma $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}/\text{GaAs}/(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$ foi submetida ao processo de recozimento. O resultado obtido foi que, em apenas uma das camadas magnéticas, obteve-se uma temperatura de transição da ordem de 160 K [9].

O crescimento de amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$ que exibem uma ordem ferromagnética acima de um certo valor de concentração de impurezas e temperaturas críticas mais altas fez com que a busca por estruturas cada vez mais homogêneas se tornasse ainda mais intensa. Para tanto,

era necessário entender a origem do ferromagnetismo nas amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$. Experimentos mostraram que temperaturas de transição mais elevadas são obtidas para as concentrações de buracos mais altas. Este fato sugere que o ferromagnetismo em camadas magnéticas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$ seria um efeito da interação indireta entre os íons de manganês, mediada por buracos [10]. Partindo desse princípio, vários modelos foram propostos para explicar o comportamento magnético observado, dentre eles o modelo Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) [11] e o modelo Zener [12], todos utilizados no contexto de amostras na fase metálica. No entanto, como observado em [10], o ferromagnetismo também é observado em amostras na fase não metálica (estados localizados) e, neste caso, explica-se o magnetismo utilizando o modelo polaron magnético [13].

Nesse contexto da pesquisa com semicondutores magnéticos diluídos é que se insere o grupo de pesquisa do qual participo. Nos últimos anos, ele vem propondo tratar esses sistemas através de um mecanismo de interação de troca indireta via portadores spin-polarizados [14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23], juntamente com a utilização de simulações Monte Carlo dependente da temperatura.

Paralelamente aos esforços para obtenção de amostras de $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$ mais homogêneas e possíveis explicações para as propriedades magnéticas e de transporte, vários foram os trabalhos no sentido de utilizar os materiais semicondutores magnéticos diluídos em aplicações tecnológicas. Alguns anos antes das amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$ serem produzidas, um trabalho pioneiro previu teoricamente a possibilidade de se obter uma ordem ferromagnética num poço quântico de GaAs dopado com manganês através do controle das concentrações de portadores livres e de impurezas magnéticas [24].

A possibilidade de se empregar dispositivos eletrônicos que utilizem correntes spin polarizadas foi prevista teoricamente por Datta [25] a cerca de vinte anos atrás. Da mesma forma, um outro trabalho teórico previu em 1997 a utilização de um campo elétrico para controlar o ferromagnetismo em nanoestruturas [26]. Três anos mais tarde, um campo elétrico externo foi usado para controlar o ferromagnetismo em uma estrutura de $(\text{In},\text{Mn})\text{As}$ [27]. Outro trabalho relatou também a utilização de um campo elétrico externo para controlar a temperatura Curie em amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ com concentrações de manganês entre $x = 0,027$ a $x = 0,200$ [28].

Várias propostas para injeção de spin em semicondutores têm sido apresentadas nos relatos de pesquisas sobre o tema. Dentre elas, destacaremos duas. A primeira consiste na injeção de elétrons não polarizados vindos de um metal e ao passarem por uma camada de um semicondutor magnético diluído, alinham-se e são injetados em um semicondutor não magnético [29]. A outra, utiliza um semicondutor ferromagnético tipo-p como um polarizador de spin. Os buracos spin polarizados se recombinam com os elétrons não polarizados injetados, dando origem a uma eleroluminescência polarizada [30].

Porém, apenas a injeção de portadores spin polarizados não garante a possibilidade de

utilização dessa corrente em dispositivos práticos. Um outro problema é o fato de que os spins dos portadores podem mudar ao longo da estrutura, provocando o que chamamos de perda de coerência ou decoerência. Assim, é necessário um processo de injeção que implique em uma corrente spin polarizada de longa duração. Neste sentido, um avanço importante na direção da junção da spintrônica com a eletrônica é o relato de spins eletrônicos se moverem por uma distância de $100\mu\text{m}$ sem perder a coerência [31].

Um outro ponto a se destacar no trabalho de van Esch et al citado acima é a indicação da possível formação de uma banda de impurezas para amostras cuja concentração é muito alta. A formação de uma banda de impurezas evidencia o fato de que nas amostras podem coexistir portadores de carga (no caso de $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$, buracos) em estados estendidos ou localizados [32, 33, 34], o que leva a processos de condução diferentes. Recentemente, Jungwirth et al [35], através de medidas espectrais por fotoluminescência, constatou que, mesmo em amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ com baixíssima dopagem ($\ll 1\% \text{Mn}$), há a formação de uma banda de impurezas. Para amostras metálicas, com uma dopagem $> 2\%$, nenhum efeito é percebido do ponto de vista de transporte dc, sugerindo uma fusão da banda de impurezas com a banda de valência.

Em 2008, os efeitos da desordem em um sistema quase bidimensional de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ foram tratados usando a aproximação de espalhamento múltiplo que, de forma simplificada, consiste em levar em conta apenas diferentes espalhamentos provocados por uma mesma impureza. Aplicando esta técnica a camadas estreitas de $(\text{Ga},\text{Mn})\text{As}$, a densidade de estados e a função densidade espectral foram calculadas para um grande intervalo de valores da densidade de impurezas de manganês e da densidade de buracos [37, 36]. A partir daí, a natureza dos estados spin polarizados dos buracos no nível de Fermi foi explorada para inúmeros valores da magnetização média do sistema de impurezas magnéticas. Para um determinado intervalo de densidades de manganês e de buracos, um aumento na ordem magnética dos íons de manganês vem acompanhado de uma mudança na natureza dos estados no nível de Fermi. Isso mostra uma delocalização dos estados estendidos antialinhados com a magnetização média e uma alta polarização de spin do gás de buracos. Este fato está associado ao aparecimento de uma transição não metal-metal causada pelo aumento da concentração de manganês e que foi observada experimentalmente desde as primeiras amostras produzidas. A transição metal-não metal observada nas amostras das Refs. [7] e [8] aparece naquele cálculo como transições de Anderson que ocorrem para spins anti-alinhados na banda de impurezas de amostras com altas concentrações de manganês.

Nesta tese, fizemos uma conexão entre as propriedades de transporte e magnéticas de tal forma que a existência de uma banda de impurezas de buracos spin polarizados determina a natureza dos estados no nível de Fermi e próximo ao nível de Fermi como estendidos ou localizados. Para uma dada magnetização e uma amostra específica, uma separação tipo Zeeman, como será mostrado adiante, determina a *mobility edge*. Então, temos dois mecanismos de transporte distintos entre si. Um, que ocorre por ativação térmica (*hopping*) para os estados

localizados, que são aqueles estados ocupados cujas energias estão abaixo da *mobility edge*. O outro canal de condução, dito metálico, corresponde à contribuição dos estados estendidos ocupados, cujas energias estão entre a *mobility edge* e o nível de Fermi. Como os canais são independentes entre si, o inverso da resistividade total será dada pela soma dos inversos das resistividades de canal de condução.

Este trabalho está organizado em cinco capítulos. No capítulo 1, mostramos as principais características da aproximação de espalhamento múltiplo, como se obtém a densidade de estados e a função densidade espectral, a classificação dos estados como estendidos ou localizados e a *mobility edge*. No capítulo 2, apresentamos a teoria de balanceamento de força e energia, que nos permite calcular a resistividade para o caso de estados estendidos no limite ôhmico, onde aparece explicitamente a polarização do sistema de buracos. No capítulo 3, descrevemos o cálculo da polarização na ausência de interação coulombiana entre os portadores. No capítulo 4, estudamos a resistividade para o caso de uma dupla camada de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}/\text{GaAs}$ e discutimos os resultados obtidos à luz das observações experimentais conhecidas. Ao final, nas conclusões do trabalho, apontamos possíveis caminhos a seguir para aprimorar os resultados aqui obtidos e aprofundar o entendimento do comportamento da resistividade de camadas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$.

1 DESORDEM E LOCALIZAÇÃO

Em um sólido cristalino com simetria de translação e rotação, o teorema de Bloch pode ser usado a obtenção dos autoestados e as autoenergias do seu hamiltoniano. A presença de impurezas desordena o sistema, quebrando as simetrias de longa distância do cristal e pode modificar propriedades macroscópicas do sólido, sejam elas elétricas, magnéticas, mecânicas, térmicas ou óticas. Do ponto de vista de transporte, as impurezas representam centros espalhadores dos portadores de carga elétrica (elétrons ou buracos) e podem modificar o caráter dos estados desses portadores de estendido (Bloch) para localizado (Wannier) e vice versa.

O processo de condução ocorre nas proximidades do nível de Fermi de um sistema. Assim, compreender e caracterizar os estados no nível de Fermi como estendidos ou localizados é essencial para entender as propriedades de transporte de um sistema. Os trabalhos [36] e [37] discutiram o problema do caráter dos estados nas proximidades no nível de Fermi e no nível de Fermi numa camada de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, calculando a densidade de estados (DE) e a função densidade espectral (FDE) a partir da função de Green correspondente.

No caso de uma estrutura de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, onde x é a concentração de manganês, podemos considerá-lo um gás bidimensional de buracos de concentração n_s e impurezas negativamente ionizadas de concentração n_i , onde n_s e n_i são parâmetros independentes. Este sistema pode ser descrito por um hamiltoniano de partícula livre à qual acrescentamos um potenciais de interação coulombiana e magnética. Em termos dos operadores de criação e aniquilação de partículas, este hamiltoniano pode ser escrito da forma

$$H = \sum_{\mathbf{p}\sigma} \epsilon_0(\mathbf{p}) \mathbf{a}_{\mathbf{p}\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}\sigma} U_{\text{imp}}(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{\mathbf{p}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}\sigma\sigma'} V_{\text{mag}}(\mathbf{q}, \sigma, \sigma') \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{a}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger \mathbf{a}_{\mathbf{p}\sigma'}. \quad (1)$$

O segundo termo representa $U_{\text{imp}}(\mathbf{q})$ é a transformada de Fourier do potencial de espalhamento coulombiano $V(\mathbf{r})$, o qual é devido a N impurezas localizadas em sítios identificados por $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N$. O terceiro termo $V_{\text{mag}}(\mathbf{q}, \sigma, \sigma')$ representa a transformada de Fourier da interação de um buraco com os momentos magnéticos localizados nas posições dos íons de manganês $V_{sp-d}(\vec{r})$.

No caso de amostras semicondutoras dopadas em que a concentração de impurezas é elevada, a aproximação de Born autoconsistente perde a sua validade. A alternativa é, então, utilizar uma técnica conhecida como aproximação de espalhamento múltiplo. Esta técnica considera vários espalhamentos diferentes, supostos elásticos e que são provocados por uma mesma impureza. Partindo da definição da função de Green, com os operadores escritos na representação de interação,

$$G^R(\mathbf{p}, t; \mathbf{p}', t') = -i \langle 0 | T [a_{\mathbf{p}}(t) a_{\mathbf{p}'}^\dagger(t')] | 0 \rangle, \quad (2)$$

obtemos uma equação para a média configuracional da função de Green em termos da equação de Dyson,

$$\overline{G_\sigma^R(\mathbf{p}; E)} = G_0^R(\mathbf{p}; E) + G_0^R(\mathbf{p}; E)\Sigma_\sigma^R(\mathbf{p}, E)\overline{G_\sigma^R(\mathbf{p}; E)}, \quad (3)$$

onde E é a energia que se conserva durante o processo de espalhamento, $G_0^R(\mathbf{p}; E)$ é a função de Green não perturbada e $\Sigma_\sigma^R(\mathbf{p}, E)$ é a *self-energy* (autoenergia) correspondente.

Calcular a média indicada na equação (3) é uma tarefa muito complicada. Uma forma possível de calculá-la é entender a *self-energy* $\Sigma_\sigma^R(\mathbf{p}, E)$ como composta por duas parcelas e tratá-las separadamente. Em símbolos, isso significa escrever a *self-energy* da forma

$$\Sigma_\sigma^R(\mathbf{p}, E) = \Sigma_{coul}^R(\sigma, \mathbf{p}, E) + \Sigma_{mag}^R(\sigma, \mathbf{p}, E), \quad (4)$$

onde $\Sigma_{coul}^R(\sigma, \mathbf{p}, E)$ corresponde à interação coulombiana com as impurezas e $\Sigma_{mag}^R(\sigma, \mathbf{p}, E)$ representa a interação com os momentos magnéticos localizados.

Para calcular a *self-energy* relativa à interação magnética, modelamos essa interação por um potencial do tipo Kondo,

$$V_{sp-d}(\vec{r}) = -I \sum_i \vec{S}(\vec{R}_i) \cdot \vec{s}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{R}_i), \quad (5)$$

onde $\vec{S}(\vec{R}_i)$ é o spin localizado do ion de manganês na posição \vec{R}_i e que foi tratada como uma variável clássica, $\vec{s}(\vec{r})$ é o operador de spin do buraco na posição \vec{r} e I é a constante de interação sp-d. Uma primeira aproximação consiste em desprezar as flutuações nos momentos magnéticos das impurezas, o implica na impossibilidade de espalhamentos *spin-flip*. Assumimos ainda que $\vec{S}(\vec{R}_i) = \frac{5\hbar}{2}\langle M \rangle$, onde $\langle M \rangle$ é a magnetização normalizada ($0 \leq \langle M \rangle \leq 1$). Além disso, assumimos uma distribuição homogênea dos momentos magnéticos localizados com uma densidade dada pela concentração de manganês. Dessa forma, obtemos uma contribuição real para a autoenergia relativa à interação magnética e que pode ser incorporada à energia da partícula, isto é,

$$\epsilon_\sigma(\mathbf{p}) = \epsilon_0(\mathbf{p}) - \frac{x}{2} N_0 \beta \langle M \rangle \sigma, \quad (6)$$

onde $\sigma = \pm 1$, x é a concentração de manganês e $N_0 \beta = -1, 2eV$ é o potencial de troca para buracos, de acordo com a referência [10].

Assim, a função de Green de partícula livre spin polarizada $G_\sigma^0(\mathbf{p}, E)$ será dada por

$$G_\sigma^0(\mathbf{p}, E) = \frac{1}{E - \epsilon_\sigma(\mathbf{p}) + i\eta}. \quad (7)$$

A técnica de espalhamento múltiplo consiste em escolher nas autoenergias apenas os termos que correspondem à expansão diagramática indicada na Fig. 2.

A partir deste ponto, utilizando o método desenvolvido por Klauder[38] e o seu apri-
mo-

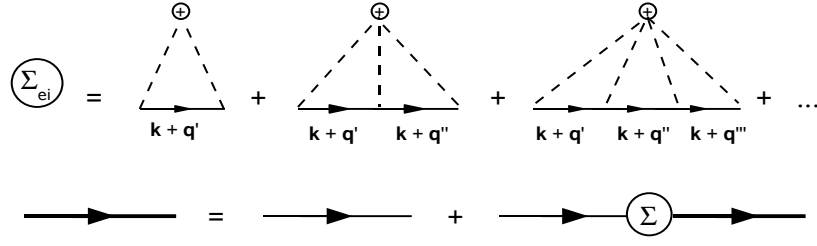


Figura 2: Diagrama de *self-energy* para a aproximação de espalhamento múltiplo.

ramento proposto por Serre-Ghazali[39], calcula-se a função de Green média e então obtém-se a densidade de estados, $\mathcal{D}_\sigma(E)$, e a função densidade espectral, $A_\sigma(\mathbf{k}, E)$,

$$\mathcal{D}_\sigma(E) = -\frac{1}{2\pi} \sum_{\mathbf{p}} \text{Im} \left[\overline{G_\sigma^R(\mathbf{p}; E)} \right], \quad (8)$$

$$A_\sigma(\mathbf{p}, E) = -\frac{1}{2\pi} \text{Im} \left[\overline{G_\sigma^R(\mathbf{p}; E)} \right], \quad (9)$$

onde $\overline{G_\sigma^R(\mathbf{p}; E)}$ é a função de Green média para a energia E , vetor de onda \mathbf{p} e para uma polarização de spin σ .

Conhecer a função densidade espectral (FDE) para um dado valor de energia E é um passo importante na caracterização dos estados como estendidos ou localizados. Para entender o motivo dessa importância, consideremos como um exemplo os estados de energia mostrados na Fig. 3 acima para uma amostra no regime de concentração intermediária, com $n_s = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_i = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Na esquerda, (a) mostra a densidade de estados com uma energia E_1 bem centrada numa banda de impurezas destacada e uma energia E_2 dentro da banda de valência. Na direita, (b) mostra a FDE para as energias E_1 e E_2 mostradas em (a). Vemos que, para a energia E_2 , a FDE é bem centrada em um dado valor k , o que define uma partícula livre (estado estendido) no caso em que a sua energia depende apenas do seu vetor de onda \mathbf{k} através da expressão $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$. Por outro lado, para a energia E_1 , a FDE tem uma grande largura e está centrada em $k = 0$, o que caracteriza uma partícula localizada (estado localizado).

Fixando n_i e aumentando a densidade de portadores n_s , observa-se que os portadores com spins antialinhados com a magnetização média assumem um caráter estendido com o aumento da magnetização, o que corresponderia a uma transição não metal-metal. Para pequenos valores de n_s , os estados são localizados para ambas as polarizações. Por outro lado, fixando n_s , à medida que aumentamos a concentração e manganês, obtemos um conjunto de amostras que, independente do valor da magnetização, ambas as polarizações de spin apresentam um caráter localizado, o que corresponderia a uma transição metal-não metal.

Tendo em vista a discussão acima sobre a caracterização dos estados como estendidos ou localizados a partir da forma da função densidade espectral para um determinado valor de energia, define-se um parâmetro $D(n_i, n_s, E, \sigma)$ que permite saber o quão estendidos são os

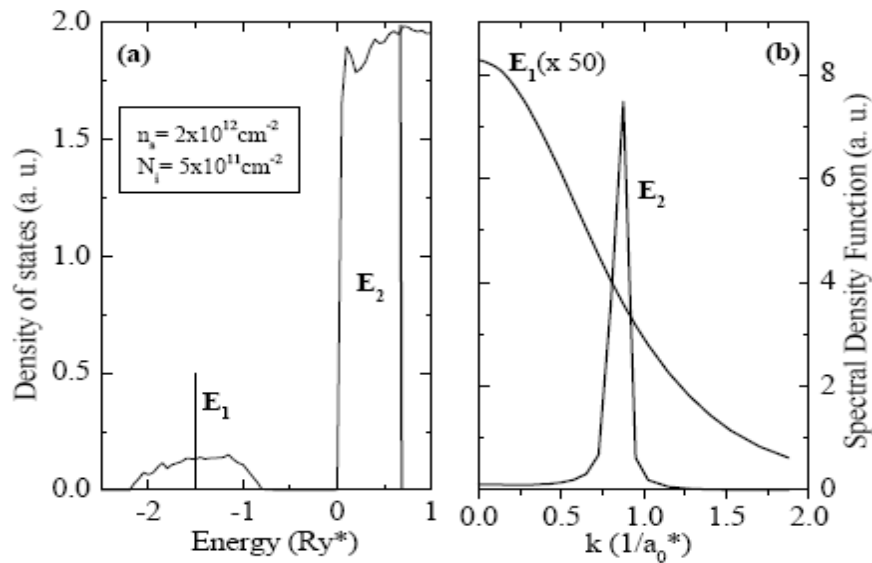


Figura 3: (a) Densidade de estados em unidades arbitrárias para uma amostra típica com uma banda de impureza destacada. (b) Função densidade espectral para dois valores de energia: E_1 no meio da banda de impureza e E_2 dentro da banda de valência [36]

estados, e que é dado por

$$D(n_i, n_s, E, \sigma) = \frac{k_0}{\Delta_\sigma(E)}, \quad (10)$$

onde k_0 é o vetor de onda para o qual a função densidade espectral para uma determinada energia é máxima e $\Delta_\sigma(E)$ é a largura da função densidade espectral para esta energia. Assim, o maior valor de $D(n_i, n_s, E, \sigma)$ corresponderá ao estado mais estendido e o seu menor valor corresponderá ao estado mais localizado.

Uma vez calculado os valores do parâmetro $D(n_i, n_s, E, \sigma)$, a razão

$$D^*(n_i, n_s) = \frac{D(n_i, n_s, E_F, \sigma)}{\max [D(n_i, n_s, E_F, \sigma)]}, \quad (11)$$

onde $\max [D(n_i, n_s, E_F, \sigma)]$ representa o maior valor obtido do parâmetro definido em (10) no conjunto de pares (n_i, n_s) que caracterizam as amostras, o nível de Fermi varia de uma amostra para outra e a Fig. 4 assim obtida permite classificar o quanto as amostras são metálicas ou não metálicas.

A Fig. 4 pode ser entendida como um diagrama de fases, no qual tem uma escala de cores anexa. Este diagrama mostra o quanto as amostras são metálicas em função dos valores de n_s e n_i . Nota-se a formação de duas regiões que correspondem às melhores amostras metálicas (cor vermelha). A primeira delas é uma "ilha" que se forma próximo aos valores $n_i = 1,2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ e $n_s = 6,5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Atravessando a figura da esquerda para a direita alcançamos uma transição não metal-metal próximo a $n_i = 7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_s = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. Mantendo n_s constante, após $n_i = 1,6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, a figura de mérito cai rapidamente, caracterizando

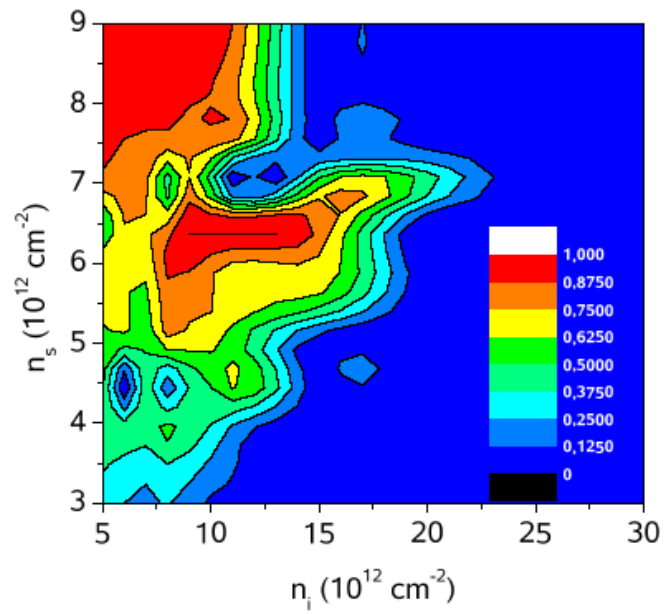


Figura 4: Figura de mérito [37].

uma transição metal-não metal que ocorre em amostras ferromagnéticas com alta concentração de manganês. Uma segunda região com boas amostras metálicas está localizada à esquerda e no alto do diagrama. Nesta região, temos uma baixa concentração de impurezas e uma alta concentração de portadores, indicando uma forte dopagem das amostras.

2 TEORIA DE BALANCEAMENTO DE FORÇA E ENERGIA

Neste capítulo apresentamos os conceitos, os principais resultados e o procedimento que seguimos para calcular a resistividade de uma heteroestrutura de GaAs/Ga_{1-x}Mn_xAs a partir da teoria de balanceamento de força e energia, tomando como norte o trabalho de Lei e Ting [40]. No caso aqui considerado a temperatura de transição envolvida é baixa, da ordem de 60K, de modo que os efeitos dos fônons e da interação buraco-fônon podem ser desconsiderados quando comparados aos efeitos das demais interações. Dessa forma, com o objetivo de estudar somente os efeitos da presença de impurezas sobre o comportamento da resistividade, partimos de uma hamiltoniana que não inclui a presença de fônons no sistema. No entanto, a teoria de balanceamento de força e energia pode ser aplicada ao caso em que os fônons e suas interações são relevantes [40],[41].

Uma heteroestrutura de GaAs/Ga_{1-x}Mn_xAs forma um sistema quase bidimensional de buracos que podem participar do processo de condução. Consideremos um sistema contendo N buracos sob a influência de um campo elétrico \mathbf{E} uniforme aplicado paralelo ao plano xy . Neste sistema, os buracos podem interagir entre si através de um potencial coulombiano e podem ser espalhados por impurezas aleatoriamente distribuídas. Assumindo uma descrição de massa efetiva, a hamiltoniana desse sistema pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_i \left[\frac{\mathbf{p}_i^2}{2m^*} + \frac{p_{zi}^2}{2m^*} + U(z_i) \right] + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\kappa} \sum_{i<j} \frac{1}{[(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{1/2}} + \\
 & + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\kappa} \sum_{i,a} \frac{1}{[(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_a)^2 + (z_i - z_a)^2]^{1/2}} - e \sum_i \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{E}. \quad (12)
 \end{aligned}$$

Na equação (12), $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i)$ e $\mathbf{p}_i = (p_{xi}, p_{yi})$ são, respectivamente, as coordenadas e momentos do i -ésimo buraco com massa efetiva m^* no plano xy , enquanto (z_i, p_{zi}) são as coordenadas canônicas do i -ésimo buraco na direção perpendicular ao plano xy e $U(z_i)$ é o potencial de confinamento. O segundo termo à direita representa a interação coulombiana entre os buracos, seguido do potencial de espalhamento devido à uma impureza randomicamente localizada em (\mathbf{r}_a, z_a) e o último termo à direita é a energia potencial associada ao campo elétrico aplicado.

Quando um sistema físico possui duas ou mais partículas, separamos o movimento em duas partes: uma parte representa o movimento do centro de massa (CM) do sistema e a outra parte representa o movimento das demais partículas em relação ao centro de massa. Levando em conta que o nosso modelo constitui-se de um número muito grande de buracos, seguimos o mesmo procedimento básico indicado acima, considerando o movimento do CM do sistema e o movimento dos demais buracos em relação a esse centro de massa, doravante denominados buracos relativos. Sob a influência de um campo elétrico aplicado paralelo ao plano, o movimento

do centro de massa do sistema de buracos ocorrerá somente no plano. Assim, é conveniente introduzir as coordenadas do centro de massa $\mathbf{R} = (R_x, R_y)$ e o momento linear do centro de massa $\mathbf{P} = (P_x, P_y)$ bidimensionais para um sistema composto por N partículas de massas iguais e que são definidos por

$$\mathbf{R} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \quad (13)$$

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i. \quad (14)$$

A relação entre as coordenadas relativas ao centro de massa, as coordenadas do próprio centro de massa e aquelas tomadas em relação a um referencial fixo (em duas dimensões) são dadas por

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i - \mathbf{R}. \quad (15)$$

Daí, a relação entre os momentos será dada por

$$\mathbf{p}'_i = \mathbf{p}_i - \frac{1}{N} \mathbf{P}. \quad (16)$$

As N coordenadas e momentos relativos ao centro de massa dos buracos (\mathbf{r}'_i e \mathbf{p}'_i) não são mutuamente independentes, mas obedecem às seguintes relações de vínculos:

$$\sum_i \mathbf{r}'_i = 0 \quad \sum_i \mathbf{p}'_i = 0. \quad (17)$$

A posição e o momento do centro de massa são variáveis canonicamente conjugadas, isto é,

$$[\mathbf{R}_\alpha, \mathbf{P}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}, \quad (18)$$

onde α e β representam as componentes cartesianas (x, y, z) da posição e do momento do centro de massa. Utilizando essas relações, podemos mostrar que as coordenadas canônicas dos buracos relativos (\mathbf{r}', \mathbf{p}') comutam com as coordenadas do centro de massa (\mathbf{R}, \mathbf{p}), ou seja, podemos escrever que

$$[\mathbf{r}'_i, \mathbf{P}] = 0 \quad [\mathbf{R}, \mathbf{p}'_i] = 0. \quad (19)$$

A relação de comutação entre as coordenadas canônicas dos buracos relativos será dada por

$$[r'_{i\alpha}, p'_{j\beta}] = [(r_{i\alpha} - P_\beta), (p_{j\beta} - \frac{1}{N}P_\beta)], \quad (20)$$

onde i e j aqui representam, respectivamente, o i -ésimo e o j -ésimo buraco relativo. Usando as relações de comutação acima mostradas, juntamente com as definições das coordenadas

canônicas do centro de massa, obteremos

$$[r'_{i\alpha}, p'_{j\beta}] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}(\delta_{ij} - \frac{1}{N}). \quad (21)$$

A equação (21) representa uma relação de comutação não-canônica entre as coordenadas e momentos dos buracos relativos. É possível mostrar [42] que, no caso de um sistema macroscópico ($N \gg 1$), o termo não canônico $\frac{1}{N}$ não é relevante. Como consequência, o centro de massa do sistema pode ser tratado como uma partícula clássica e os buracos relativos podem ser tratados como um sistema canônico desvinculado que obedece à relação canônica de comutação aproximada

$$[r'_{i\alpha}, p'_{j\beta}] \approx i\hbar\delta_{\alpha\beta}\delta_{ij}. \quad (22)$$

Usando essas equações (15) e (16) na equação (12), obtemos uma hamiltoniana escrita em termos das coordenadas do CM bidimensionais e das coordenadas relativas:

$$\begin{aligned} H &= \frac{P^2}{2Nm^*} - Ne\mathbf{E} \cdot \mathbf{R} + \sum_i \left[\frac{\mathbf{P}'_i{}^2}{2m^*} + \frac{p_{zi}^2}{2m^*} + U(z_i) \right] + \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\kappa} \sum_{i<j} \frac{1}{[(\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{1/2}} + \\ &+ \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\kappa} \sum_{i,a} \frac{1}{\{[\mathbf{r}'_i + (\mathbf{R} - \mathbf{r}_a)]^2 + (z_i - z_a)^2\}^{1/2}} \end{aligned} \quad (23)$$

onde

$$H_{cm} = \frac{P^2}{2Nm^*} - Ne\mathbf{E} \cdot \mathbf{R} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} H_b &= \sum_i \left[\frac{\mathbf{P}'_i{}^2}{2m^*} + \frac{p_{zi}^2}{2m^*} + U(z_i) \right] + \\ &+ \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\kappa} \sum_{i<j} \frac{1}{[(\mathbf{r}'_i - \mathbf{r}'_j)^2 + (z_i - z_j)^2]^{1/2}} \end{aligned} \quad (25)$$

$$H_{bi} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\kappa} \sum_{i,a} \frac{1}{\{[\mathbf{r}'_i + (\mathbf{R} - \mathbf{r}_a)]^2 + (z_i - z_a)^2\}^{1/2}} \quad (26)$$

representam, respectivamente, as hamiltonianas do centro de massa, dos buracos relativos e da interação buraco-íon.

Como daqui em diante sempre nos referimos ao movimento dos buracos em relação ao centro de massa, isto é, ao movimento relativo, vamos omitir as "linhas" nas coordenadas e momentos relativos dos buracos.

Na ausência de impurezas e de um campo elétrico, o sistema de buracos é descrito

apenas pela hamiltoniana

$$H_0 \equiv \sum_i h_0^{(i)} \quad (27)$$

$$h_0^{(i)} \equiv \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m^*} + \frac{p_{zi}^2}{2m^*} + U(z_i).$$

Os autoestados da hamiltoniana (27) podem ser descritos por um índice de subbanda n , um vetor de onda bidimensional $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ e uma função de onda dada por

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \phi_n(z), \quad (28)$$

onde $\phi_n(z)$ é uma função envelope tal que

$$H_0 \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z) = \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z) \quad (29)$$

e $\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}$ são as autoenergias correspondentes. As subbandas são parabólicas, de modo que autoenergias variam de acordo com a expressão

$$\mathcal{E}_{n\mathbf{k}} = \mathcal{E}_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}. \quad (30)$$

A equação (29) é resolvida usando a aproximação de Hartree-Fock autoconsistente.

Uma vez obtida a hamiltoniana do sistema em termos das coordenadas do centro de massa, a equação (23) pode ser reescrita em termos dos operadores de criação e destruição de buracos. Utilizando a definição usual dos operadores de campo para buracos, a hamiltoniana total será dada por

$$H = H_{cm} + H_b + H_{bi}, \quad (31)$$

onde

$$H_{cm} = \frac{P^2}{2Nm^*} - N\mathbf{e}\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} \quad (32)$$

$$H_b = \sum_{n\mathbf{k}\sigma} \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{m,n,m',n' \\ \mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\sigma,\sigma'}} V_{mn,m'n'}(\mathbf{q}) c_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma'} c_{m'\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{n'\mathbf{k}\sigma} \quad (33)$$

$$H_{bi} = \sum_{\substack{m,n,\sigma \\ \mathbf{k},\mathbf{q},a}} U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r}_a)} c_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} \quad (34)$$

Nas hamiltonianas acima, $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}$) são os operadores de criação (destruição) de buracos com vetor de onda \mathbf{k} e spin σ , $V_{mn,m'n'}(\mathbf{q})$ representa o potencial de interação entre os buracos dado

por

$$V_{mn,m'n'}(q) = \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0\kappa q} \int \int dz_1 dz_2 \phi_{m\sigma}^*(z_1) \phi_{n\sigma'}^*(z_2) \times \phi_{m'\sigma'}(z_2) \phi_{n'\sigma}(z_1) e^{-q|z_1-z_2|} \quad (35)$$

e $U_{mn}(\mathbf{q}, z_a)$ o potencial de interação buraco-íon que é dado por

$$U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) = \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0\kappa q} \int dz \phi_{m\sigma}^*(z) \phi_{n\sigma}(z) e^{-q|z-z_a|}, \quad (36)$$

onde κ é a constante dielétrica do GaAs.

O centro de massa representa uma partícula com uma grande massa e o seu movimento é essencialmente clássico. Assim, como uma segunda aproximação, o tratamos como uma partícula clássica browniana de massa Nm^* e carga Ne . Ele se move sob a ação de uma força elétrica externa $Ne\mathbf{E}$ e de uma força dissipativa, que possui origem na interação buraco-impureza (H_{bi}). Os operadores relacionados ao centro de massa (posição \mathbf{R} e momento linear \mathbf{p}) podem ser tratados classicamente. Isso significa que, na hamiltoniana de interação buraco-impureza, \mathbf{R} é entendida como a posição real do centro de massa dependente do tempo, isto é, $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$. Neste ponto, é importante ressaltar que tratar $\mathbf{R}(t)$ como uma variável clássica significa desprezar a não-comutatividade de $\mathbf{R}(t)$ em instantes diferentes. O erro induzido neste tratamento é da ordem de $1/N$ e ele é exatamente cancelado pelos termos não-canônicos $1/N$ presentes nas relações de comutação (21) [42].

Portanto, as duas principais aproximações na formulação da teoria da equação de balanço, isto é, tratar os buracos como um sistema desvinculado e tratar o centro de massa como uma partícula clássica browniana, não induzem a nenhum erro.

Por outro lado, os buracos relativos compõem um sistema de muitas partículas que interagem entre si e, desta forma, deve ser tratado quanticamente. A hamiltoniana (31) mostra que os buracos relativos não sofrem a ação direta do campo elétrico aplicado. Porém, a presença da coordenada do centro de massa $\mathbf{R}(t)$ em H_{bi} representa uma interação indireta entre os buracos relativos e o campo elétrico aplicado.

Sendo o centro de massa tratado como uma partícula clássica, a sua velocidade \mathbf{V} será dada pela equação

$$\mathbf{V} = \dot{\mathbf{R}} = -i[\mathbf{R}, H] = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{P}} = \frac{\mathbf{P}}{Nm^*} \quad (37)$$

e a força a qual está submetido é dada por

$$\mathbf{F} = \dot{\mathbf{P}} = -i[\mathbf{p}, H] = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{R}} = Ne\mathbf{E} - \frac{\partial H_{bi}}{\partial \mathbf{R}}, \quad (38)$$

que pode ser escrita na forma

$$\dot{\mathbf{P}} = Ne\mathbf{E} + \mathbf{F}_i. \quad (39)$$

Na equação (39), o termo à esquerda da igualdade representa a força resultante exercida sobre o centro de massa do sistema de buracos, o primeiro termo à direita da igualdade representa a força elétrica exercida sobre o centro de massa e \mathbf{F}_i representa uma força de amortecimento que age sobre o centro de massa do sistema e que é devida aos espalhamentos por impurezas, que são considerados elásticos. A força \mathbf{F}_i é composta de duas parcelas, sendo a primeira uma força média e a segunda uma flutuação em torno dessa média. A flutuação dessa força contribui com uma força aleatória exercida sobre o centro de massa. Essa força aleatória, agindo sobre o centro de massa, levará a velocidade a ter também duas parcelas: o valor médio, $\langle \mathbf{V} \rangle$, e uma flutuação, $\delta\mathbf{V}$. Logo, a força de amortecimento aplicada ao centro de massa devido aos espalhamentos por impurezas será dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_i &= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \left\{ \sum_{\substack{m,n,\sigma \\ \mathbf{k},\mathbf{q},a}} U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r}_a)} c_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} \right\} \\ \mathbf{F}_i &= i \sum_{\substack{m,n,\sigma \\ \mathbf{k},\mathbf{q},a}} U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) \mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}+\mathbf{r}_a)} c_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma}. \end{aligned} \quad (40)$$

De maneira análoga, podemos calcular as taxas de variação da energia do sistema de buracos relativos da forma

$$\dot{H}_b = -i[H_b, H] \equiv S. \quad (41)$$

A conservação da energia para o sistema de elétrons relativos é obedecida se a taxa de variação da energia por unidade de tempo fornecida pelo campo elétrico aplicado, $Ne\mathbf{E} \cdot \mathbf{V}$, for igual à soma da taxa de variação de energia do centro de massa, $\frac{d}{dt}(\frac{1}{2}NmV^2)$, com a taxa de variação de energia interna dos buracos relativos, S . Isto é,

$$Ne\mathbf{E} \cdot \mathbf{V} = Nm\mathbf{V} \cdot \frac{d\mathbf{V}}{dt} + S. \quad (42)$$

O sistema de buracos relativos é constituído de um grande número de partículas interagentes e seu movimento é essencialmente estatístico. Ele será descrito por uma matriz densidade $\hat{\rho}$. Logo, as equações (39) e (42) podem ser obtidas calculando-se as médias estatísticas de \mathbf{F}_i e S sobre a matriz densidade do sistema de buracos relativos.

A média estatística de uma variável dinâmica A no instante t pode ser avaliada na representação de Schrödinger por

$$\langle A \rangle = Tr\{\hat{\rho}A\}, \quad (43)$$

onde A é um operador (possivelmente dependente do tempo) que representa uma variável dinâmica na representação de Schrödinger e $\hat{\rho}$ é a matriz densidade que satisfaz à equação

de Liouville [43]

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i\hbar[H, \hat{\rho}], \quad (44)$$

sujeita à condição inicial

$$\hat{\rho}(t_0) = \hat{\rho}_0. \quad (45)$$

Para a hamiltoniana (31), a equação de Liouville será reescrita da forma

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = -i\hbar[H_b + H_{bi}, \hat{\rho}], \quad (46)$$

que é implicitamente dependente do tempo através da coordenada do centro de massa $\mathbf{R}(t)$. Dessa forma, para resolver a equação de Liouville, precisamos definir quem é a matriz densidade inicial do sistema.

Fisicamente, esperamos que condições externas (campo elétrico, campo magnético, etc) determinem de forma única o estado estacionário final de um sistema. Para exemplificar essa afirmação, consideremos um corpo C qualquer, inicialmente em repouso e apoiado sobre uma mesa horizontal. Suponhamos ainda que o coeficiente de atrito (estático ou cinético) entre a superfície do corpo C e a superfície da mesa seja μ . Em um determinado instante, uma força externa de intensidade F atua impulsivamente sobre esse corpo, de modo que ele entra em movimento. O fato de existir atrito entre o corpo C e a superfície da mesa sobre a qual ele se desloca determina que o estado estacionário final desse sistema será o repouso, não dependendo da velocidade inicial adquirida pelo corpo C, ou seja, independentemente da magnitude da força exercida pelo agente externo sobre o corpo C. Ainda que o corpo C estivesse em movimento inicialmente, o estado estacionário final do sistema seria o repouso. Isso significa que o estado estacionário final para o qual um sistema evolui sob a influência de algum agente externo a ele não depende das condições iniciais particulares. Em outras palavras, após um intervalo de tempo suficientemente longo, o sistema atingirá um estado estacionário único, não importando de qual estado inicial ele começou a evoluir. No entanto, o tempo necessário para o sistema evoluir de um estado inicial qualquer para o estado estacionário final depende fortemente do estado inicial. Em nosso exemplo, se o corpo C está inicialmente com uma velocidade constante e uma força externa age impulsivamente sobre ele, o tempo necessário para o corpo C atingir o estado estacionário final, isto é, o repouso, será maior do que na situação inicial anterior, na qual ele estava inicialmente em repouso.

Tendo em vista o exposto acima, no caso do sistema descrito pela hamiltoniana (31), devemos esperar que o campo elétrico aplicado e a interação buraco-impureza determinem o estado estacionário final do sistema. Isso significa que podemos escolher um estado inicial cujas características principais sejam tão próximas quanto possível do estado final. Isto é, partindo de um estado inicial virtual é possível obter o estado final real do sistema através de um processo de evolução temporal curto.

Para definir a matriz densidade inicial, assumimos que o campo elétrico $\mathbf{E}(t)$ e a interação buraco-impureza são ligados no instante inicial $t_0 = -\infty$, ou seja, $\hat{\rho}(t_0 = -\infty) = \hat{\rho}_0$. Supomos que num determinado instante $t > t_0$ durante a evolução temporal do sistema o campo elétrico e a interação buraco-impureza sejam desligados simultaneamente. Então, a partir do instante t , o centro de massa e os buracos relativos estão desacoplados um do outro. Por isso, o centro de massa passa a se comportar como uma partícula livre com uma velocidade $\mathbf{v}_d = \mathbf{v}(t)$, que é igual à velocidade de *drift* do sistema de buracos relativos no instante t . Por outro lado, ao se desligar as interações dos buracos relativos com as impurezas, o sistema de buracos relativos comporta-se como um sistema isolado e se aproximará de um estado de equilíbrio térmico com uma temperatura fixa $T_b = T_b(t)$. A velocidade de *drift* \mathbf{v}_d e a temperatura do sistema de buracos T_b são então usados como parâmetros da teoria da equação de balanço e devem ser determinados pelas equações obtidas. Assim, a matriz densidade inicial escolhida é dada por

$$\hat{\rho}_0 = \frac{1}{Z_b} e^{-H_b/T_b}, \quad (47)$$

onde Z_b é a função partição de equilíbrio para os buracos relativos.

Para calcular as médias estatísticas das grandezas envolvidas nas equações (39) e (42), utilizamos a representação de interação, na qual a equação (43) é reescrita na forma

$$\langle A(t) \rangle = Tr\{\hat{\rho}(t)A(t)\}, \quad (48)$$

onde definimos

$$A(t) \equiv e^{iH_b t} A e^{-iH_b t} \quad (49)$$

e

$$\hat{\rho}(t) \equiv e^{iH_b t} \hat{\rho} e^{-iH_b t}. \quad (50)$$

Dessa forma, a equação integral equivalente à equação de Liouville é dada por

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [H_{bi}(t'), \hat{\rho}(t')]. \quad (51)$$

Para a primeira ordem do potencial de espalhamento por impurezas, $\hat{\rho} \approx \hat{\rho}_0$, e então

$$\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [H_{bi}(t'), \hat{\rho}_0]. \quad (52)$$

Com essa expressão aproximada para $\hat{\rho}(t)$ e a equação que permite calcular a média estatística de um operador $A(t)$, obtemos:

$$\langle A(t) \rangle = Tr \left\{ \left(\hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [H_{bi}(t'), \hat{\rho}_0] \right) A(t) \right\}$$

$$\langle A(t) \rangle = Tr \{ \hat{\rho}_0 A(t) \} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' Tr \{ H_{bi}(t') \hat{\rho}_0 A(t) - \hat{\rho}_0 H_{bi}(t') A(t) \}$$

Usando a propriedade cíclica do traço, isto é, $Tr(ABC) = Tr(CAB) = Tr(BCA)$, no primeiro termo da equação acima, concluímos que a média estatística de uma variável dinâmica $A(t)$ para a primeira ordem em H_{bi} é dada por

$$\langle A(t) \rangle = Tr \{ \hat{\rho}_0 A(t) \} + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' Tr \{ \hat{\rho}_0 [H_{bi}(t'), A(t)] \} \quad (53)$$

ou ainda

$$\langle A(t) \rangle = \langle A(t) \rangle_0 + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [H_{bi}(t'), A(t)] \rangle_0, \quad (54)$$

onde

$$\langle (\dots) \rangle_0 \equiv Tr \{ \hat{\rho}_0 (\dots) \}. \quad (55)$$

Tomando a média estatística da equação de operador (39) para a menor ordem em H_{bi} obtemos

$$\langle \dot{\mathbf{P}} \rangle = Ne\mathbf{E} + \langle \mathbf{F}_i \rangle. \quad (56)$$

O termo à esquerda da igualdade na equação acima corresponde à taxa de variação média do momento do centro de massa que será dado por

$$\langle \dot{\mathbf{P}} \rangle = Nm^* \frac{d\mathbf{V}}{dt}, \quad (57)$$

onde $\mathbf{V} = \langle \mathbf{V} \rangle + \delta\mathbf{V}$. O símbolo $\langle (\dots) \rangle$ deve ser entendido como uma média sobre um período temporal adequado ou sobre um ensemble estatístico tal que as flutuações podem ser eliminadas, ou seja, tal que $\delta\mathbf{V} = 0$. Desse modo, definindo $\mathbf{v}(t) \equiv \langle \mathbf{V} \rangle$ e considerando-a como a parte de *drift* da velocidade do centro de massa, obteremos

$$\langle \dot{\mathbf{P}} \rangle = Nm^* \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt}, \quad (58)$$

onde N é o número de buracos livres e m^* sua massa efetiva. Se n_s^* é a densidade de buracos livres por unidade de área do sistema, $n_s^* = \frac{N}{A}$, podemos reescrever a equação (56) da forma

$$n_s^* m^* \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = n_s^* e\mathbf{E} + \mathbf{f}_i, \quad (59)$$

que deve ser entendida como uma equação por unidade de área, isto é, a parcela \mathbf{f}_i representa uma força por unidade de área.

Usando as equações (53) e (49), teremos

$$\mathbf{f}_i(t) = Tr \{ \hat{\rho}_0 \mathbf{F}_i(t) \} + \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' Tr \{ \hat{\rho}_0 [H_{bi}(t'), \mathbf{F}_i(t)] \}, \quad (60)$$

onde

$$H_{bi}(t') = \sum_{\substack{m,n,\sigma \\ \mathbf{k},\mathbf{q},a}} U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) e^{-i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{R}(t')+\mathbf{r}_a]} c_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger(t') c_{n\mathbf{k}\sigma}(t') \quad (61)$$

$$\mathbf{F}_i(t) = i \sum_{\substack{m,n,\sigma \\ \mathbf{k},\mathbf{q},a}} U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) \mathbf{q} e^{-i\mathbf{q}\cdot[\mathbf{R}(t)+\mathbf{r}_a]} c_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger(t) c_{n\mathbf{k}\sigma}(t). \quad (62)$$

Substituindo as equações de $H_{bi}(t')$ e $\mathbf{F}_i(t)$ na equação (60), obteremos então

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i(t) &= \frac{i}{\hbar} \sum_{mn\mathbf{q}} \sum_{m'n'\mathbf{q}'} \mathbf{q}' \left\{ \sum_{a,a'} U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{m'n'}(\mathbf{q}', z_{a'}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_{a'}} \right\} \times \\ &\times \int_{-\infty}^t dt' e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}(t')} e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{R}(t)} \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \left\{ -i \langle [c_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger(t) c_{n\mathbf{k}\sigma}(t), c_{m'\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger(t') c_{n'\mathbf{k}\sigma'}(t')] \rangle_0 \right\}. \quad (63) \end{aligned}$$

Em uma amostra macroscópica, se o número de impurezas é suficientemente elevado, as propriedades macroscópicas para amostras semelhantes variam muito pouco. Suponhamos, então, uma amostra com um número N muito grande de impurezas num volume Ω , dividido em M sítios de modo que a probabilidade de existir mais de uma impureza em cada sítio é desprezível. Se não há correlação entre as probabilidades de ocupação dos sítios, podemos escrever que

$$P(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \prod_{j=1}^N P(\mathbf{x}_j), \quad (64)$$

onde $P(\mathbf{x}_j)$ é a densidade de probabilidade de uma impureza ocupar o sítio identificado pela posição \mathbf{x}_j . No caso totalmente aleatório, todos os sítios são igualmente prováveis de ocupação e, neste caso,

$$P(\mathbf{x}_j) = \frac{1}{\Omega}. \quad (65)$$

A média configuracional para esse tipo de amostra corresponde à medida de uma propriedade macroscópica $\mathcal{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ para todas as ocupações possíveis ou para configurações específicas de impurezas, sendo dada por

$$\overline{\mathcal{F}} \equiv \int \prod_{j=1}^N d\mathbf{x}_j \mathcal{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) P(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (66)$$

Para a densidade de probabilidade de ocupação dada pela equação (65), a equação acima torna-se

$$\overline{\mathcal{F}} = \frac{1}{\Omega} \int \prod_{j=1}^N d\mathbf{x}_j \mathcal{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (67)$$

Retornando à equação (63), calculamos a média configuracional usando a equação (67). Assim, temos que

$$\mathcal{F}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \mathcal{F}(\mathbf{q}, z_a; \mathbf{q}', z_{a'}) \equiv \sum_{a, a'} U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{m'n'}(\mathbf{q}', z_{a'}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_{a'}}. \quad (68)$$

A equação (68) nos permite identificar dois casos possíveis no que se refere às impurezas:

- Caso 1 ($a = a'$)

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'; \mathbf{r}_a, z_a) &= \sum_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{m'n'}(\mathbf{q}', z_a) e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\cdot\mathbf{r}_a} \\ \overline{\mathcal{F}(\mathbf{q})} &= \frac{1}{\Omega} \sum_{a=1}^N \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{m'n'}(\mathbf{q}', z_a) \int d^2 r_a e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\cdot\mathbf{r}_a} \\ \overline{\mathcal{F}(\mathbf{q})} &= n_i \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{m'n'}(\mathbf{q}', z_a) \delta_{\mathbf{q}'=-\mathbf{q}}, \end{aligned} \quad (69)$$

onde $n_i \equiv \frac{N}{\Omega}$ é a densidade volumétrica de impurezas.

- Caso 2 ($a \neq a'$)

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\mathbf{q}, \mathbf{r}_a, z_a; \mathbf{q}', \mathbf{r}_{a'}, z_{a'}) &= \left(\sum_{a=1}^N U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} \right) \times \\ &\times \left(\sum_{a' \neq a}^{N-1} U_{m'n'}(\mathbf{q}', z_{a'}) e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_{a'}} \right) \\ \overline{\mathcal{F}(\mathbf{q}, \mathbf{q}')} &= \left(\sum_{a=1}^N \frac{1}{\Omega} \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) \int d^2 r_a e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} \right) \times \\ &\times \left(\sum_{a' \neq a}^{N-1} \frac{1}{\Omega} \int dz_{a'} U_{m'n'}(\mathbf{q}', z_{a'}) \int d^2 r_{a'} e^{-i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_{a'}} \right) \\ \overline{\mathcal{F}(\mathbf{q}, \mathbf{q}')} &= \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) \int dz_{a'} U_{m'n'}(\mathbf{q}', z_{a'}) \times \\ &\times \frac{N(N-1)}{\Omega^2} \delta_{\mathbf{q}=0} \delta_{\mathbf{q}'=0}. \end{aligned}$$

Para N muito grande, podemos tomar $\frac{N(N-1)}{\Omega^2} \rightarrow n_i^2$, de modo que

$$\overline{\mathcal{F}(\mathbf{q}, \mathbf{q}')} \propto n_i^2 \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) \int dz_{a'} U_{m'n'}(\mathbf{q}', z_{a'}) \delta_{\mathbf{q}=0} \delta_{\mathbf{q}'=0}, \quad (70)$$

e o caso $a \neq a'$ pode ser desprezado.

Substituindo a equação (69) na equação (63), teremos:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i(t) &= \frac{-in_i}{\hbar} \sum_{mn\mathbf{q}} \sum_{m'n'} \mathbf{q} \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{m'n'}(-\mathbf{q}, z_a) h(z_a) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dt' A(\mathbf{q}, t, t') \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; t - t'), \end{aligned} \quad (71)$$

onde $h(z_a)$ é uma função tal que $h(z_a) = 1$ para z_a dentro da camada magnética de GaMnAs e $h(z_a) = 0$ para z_a fora da camada magnética,

$$A(\mathbf{q}, t, t') \equiv e^{i\mathbf{q} \cdot [\mathbf{R}(t) - \mathbf{R}(t')]} = \exp\left[i\mathbf{q} \cdot \int_{t'}^t \mathbf{v}(s) ds\right] \quad (72)$$

é uma função que depende da velocidade do centro de massa do sistema de buracos e

$$\Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; t - t') = \text{T} \langle [c_{m\mathbf{k}' - \mathbf{q}\sigma}^\dagger(t) c_{n\mathbf{k}'\sigma}(t), c_{m'\mathbf{k} + \mathbf{q}\sigma'}^\dagger(t') c_{n'\mathbf{k}\sigma'}(t')] \rangle_0. \quad (73)$$

é a polarização do sistema de buracos, sendo T o operador de ordenamento temporal.

Conforme a discussão que permitiu definir a matriz densidade inicial $\hat{\rho}_0$, o movimento do centro de massa do sistema de buracos no estado estacionário é caracterizado pelo seu deslocamento a uma velocidade de *drift* constante \mathbf{v}_d . Neste caso, $\mathbf{v}(s) = \mathbf{v}_d$ na equação (72), de modo que podemos escrever

$$A(\mathbf{q}; t - t') = e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_d(t-t')} = e^{i\omega_d(t-t')}, \quad (74)$$

onde $\omega_d \equiv \mathbf{q} \cdot \mathbf{v}_d$. Logo, a força \mathbf{f}_i reescreve-se da forma

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i(t) &= \frac{-in_i}{\hbar} \sum_{mn\mathbf{q}} \sum_{m'n'} \mathbf{q} \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{m'n'}(-\mathbf{q}, z_a) h(z_a) \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i\omega_d(t-t')} \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; t - t') \end{aligned} \quad (75)$$

ou então

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i(v_d) &= \frac{-in_i}{\hbar} \sum_{mn\mathbf{q}} \sum_{m'n'} \mathbf{q} \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{m'n'}(-\mathbf{q}, z_a) h(z_a) \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; \omega_d), \end{aligned} \quad (76)$$

onde

$$\Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; \omega_d) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{i\omega_d(t-t')} \Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; t - t') \quad (77)$$

é a transformada de Fourier de $\Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; t - t')$.

Podemos avaliar a função dada em (77) usando a função de Green correspondente na representação de Matsubara [44]:

$$\hat{\Pi}_{mn\sigma,m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \tau) = -\langle T_\tau [c_{m\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma}^\dagger(\tau) c_{n\mathbf{k}'\sigma}(\tau), c_{m'\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger(0) c_{n'\mathbf{k}\sigma'}(0)] \rangle_0. \quad (78)$$

As amostras de camadas de GaMnAs que usamos representam um gás de buracos muito denso. Neste caso, a importância relativa da energia cinética dos buracos é maior do que a energia potencial de interação entre os buracos. Dessa forma, basta avaliarmos a função polarização no caso em que não há interação entre os buracos.

Aplicando o teorema de Wick à equação (78), a primeira expansão, que corresponde à polarização sem interação, será dada por:

$$\begin{aligned} \hat{\Pi}_{mn\sigma,m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \tau) &= -\langle T_\tau [c_{n\mathbf{k}'\sigma}(\tau) c_{m'\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma'}^\dagger(0)] \rangle_0 \times \\ &\times -\langle T_\tau [c_{n'\mathbf{k}\sigma'}(0) c_{m\mathbf{k}'-\mathbf{q}\sigma}^\dagger(-\tau)] \rangle_0 \\ \hat{\Pi}_{mn\sigma,m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \tau) &= \{ \mathcal{G}_{m\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}', -\tau) \mathcal{G}_{n\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, \tau) \} \delta_{n'm} \delta_{m'n} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}} \delta_{\sigma'\sigma}. \end{aligned} \quad (79)$$

Devemos, agora, avaliar o produto de funções que se encontra entre chaves na equação (79). Para isso, notemos inicialmente que

$$\hat{\Pi}_{mn\sigma,m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; i\omega_s) = \int_0^\beta \hat{\Pi}_{mn\sigma,m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; \tau) e^{i\omega_s \tau} d\tau. \quad (80)$$

Além disso, podemos ainda escrever

$$\hat{\Pi}_{mn\sigma,m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; \tau) = \left\{ \frac{1}{\beta} \sum_\nu e^{-ip_\nu \tau} \mathcal{G}_{m\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}', ip_\nu) \right\} \left\{ \frac{1}{\beta} \sum_\mu e^{ip_\mu \tau} \mathcal{G}_{n\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, ip_\mu) \right\} \quad (81)$$

$$\hat{\Pi}_{mn\sigma,m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; \tau) = \frac{1}{\beta^2} \sum_{\nu, \mu} [e^{-ip_\nu \tau} e^{ip_\mu \tau} \mathcal{G}_{m\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}', ip_\nu) \mathcal{G}_{n\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, ip_\mu)]. \quad (82)$$

Substituindo (82) em (80), obteremos

$$\hat{\Pi}_{mn\sigma,m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; i\omega_s) = \frac{1}{\beta} \sum_\nu \mathcal{G}_{m\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}', ip_\nu) \mathcal{G}_{n\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, ip_\nu - i\omega_s), \quad (83)$$

onde $\mathcal{G}_{m\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}', ip_\nu)$ e $\mathcal{G}_{n\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, ip_\nu - i\omega_s)$ na equação acima são as funções de Green não perturbadas na representação de Matsubara. Assim, o avaliaremos a soma de frequências indicada abaixo:

$$S = \frac{1}{\beta} \sum_\nu f(ip_\nu) = \frac{1}{\beta} \sum_\nu \left(\frac{1}{ip_\nu - \xi_{m\mathbf{k}'}} \right) \left(\frac{1}{ip_\nu - i\omega_s - \xi_{n\mathbf{k}}} \right). \quad (84)$$

Para calcular a soma mostrada na equação (84), consideremos uma função complexa da forma

$g(z) = g_1(z)g_2(z)$ definida por

$$g(z) = \left(\frac{1}{z - \xi_{m\mathbf{k}'}}\right)\left(\frac{1}{z - i\omega_s - \xi_{n\mathbf{k}}}\right), \quad (85)$$

que possui polos simples em $z = \xi_{m\mathbf{k}'}$ e $z = \xi_{n\mathbf{k}} + i\omega_s$. Como a soma é sobre frequências de férmions, consideremos a função de Fermi

$$f_0(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1}, \quad (86)$$

que possui múltiplos polos em $e^{\beta z} = -1$ e cujo resíduo é igual a $\frac{-1}{\beta}$. Calcularemos, agora, uma integral no plano complexo da forma

$$I = \oint_C f_0(z)g(z)dz, \quad (87)$$

onde o contorno C é uma circunferência de raio R . Usando o teorema de Cauchy para o cálculo dos resíduos, obtemos

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\nu} f(ip_{\nu}) = \frac{f_0(\xi_{m\mathbf{k}'}) - f_0(\xi_{n\mathbf{k}})}{\xi_{m\mathbf{k}'} - \xi_{n\mathbf{k}} - i\omega_s} \quad (88)$$

e então

$$\hat{\Pi}_{mn\sigma, m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; i\omega_s) = \frac{f_0(\xi_{m\mathbf{k}'}) - f_0(\xi_{n\mathbf{k}})}{\xi_{m\mathbf{k}'} - \xi_{n\mathbf{k}} - i\omega_s}. \quad (89)$$

A transformada de Fourier $\Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \omega_d)$ é obtida através do que se denomina prolongamento analítico. Na prática, o prolongamento analítico significa trocar $i\omega_s$ por $\omega_d + i\alpha$, onde α é uma grandeza infinitesimal. Teremos

$$\Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \omega_d) = \hat{\Pi}_{mn\sigma, m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}; i\omega_s) \Big|_{i\omega_s \rightarrow \omega_d + i\alpha}, \quad (90)$$

que nos permite escrever

$$\Pi_{mn\sigma, m'n'\sigma'}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}, \omega_d) = \left[\frac{f_0(\xi_{m\mathbf{k}'}) - f_0(\xi_{n\mathbf{k}})}{\xi_{m\mathbf{k}'} - \xi_{n\mathbf{k}} - \omega_d - i\alpha} \right] \delta_{n'm} \delta_{m'n} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \delta_{\sigma'\sigma}. \quad (91)$$

Substituindo (91) na equação (76), teremos:

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_i(v_d) &= \frac{-in_i}{\hbar} \sum_{mn\mathbf{q}} \sum_{m'n'} \mathbf{q} \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{m'n'}(-\mathbf{q}, z_a) h(z_a) \times \\ &\times \sum_{\mathbf{k}\sigma} \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \left[\frac{f_0(\xi_{m\mathbf{k}'}) - f_0(\xi_{n\mathbf{k}})}{\xi_{m\mathbf{k}'} - \xi_{n\mathbf{k}} - \omega_d - i\alpha} \right] \delta_{n'm} \delta_{m'n} \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \delta_{\sigma'\sigma} \\ \mathbf{f}_i(v_d) &= \frac{-in_i}{\hbar} \sum_{mn\mathbf{q}} \mathbf{q} \int dz_a U_{mn}(\mathbf{q}, z_a) U_{mn}(-\mathbf{q}, z_a) h(z_a) \times \end{aligned}$$

$$\times \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{f_0(\xi_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\xi_{n\mathbf{k}})}{\xi_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{n\mathbf{k}} - \omega_d - i\alpha}$$

$$\mathbf{f}_i(v_d) = \frac{-in_i}{\hbar} \sum_{mn\mathbf{q}} |U_{mn}(q)|^2 \mathbf{q} \Pi^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d), \quad (92)$$

onde

$$|U_{mn}(q)|^2 = \int dz_a |U_{mn}(\mathbf{q}, z_a)|^2 h(z_a) \quad (93)$$

é o potencial efetivo devido às impurezas e

$$\Pi^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d) \equiv \sum_{\mathbf{k}\sigma} \frac{f_0(\xi_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\xi_{n\mathbf{k}})}{\xi_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \xi_{n\mathbf{k}} - \omega_d - i\delta} \quad (94)$$

é a polarização na ausência da interação coulombiana entre os buracos.

A força $\mathbf{f}_i(v_d)$ está diretamente relacionada à resistividade do sistema e, portanto, é uma grandeza real. Usando o fato de que a polarização definida na equação (94) é uma grandeza complexa, podemos escrevê-la na forma

$$\Pi^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d) = \Pi_1^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d) + i\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d). \quad (95)$$

Substituindo essa expressão na equação (92), obteremos

$$\mathbf{f}_i(v_d) = \frac{n_i}{\hbar} \sum_{mn\mathbf{q}} |U_{mn}(q)|^2 \mathbf{q} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d). \quad (96)$$

Neste ponto, é interessante fazermos uma breve análise dimensional da equação (96). Teremos:

$$\begin{aligned} [\mathbf{f}_i(v_d)] &= \frac{[L^{-3}]}{[E] \cdot [T]} \cdot [L] [E]^2 \cdot [L]^{-1} [T] \\ [\mathbf{f}_i(v_d)] &= [E] [L^{-3}] = [M] [L]^2 [T]^{-2} [L]^{-3} \\ [\mathbf{f}_i(v_d)] &= \frac{[M] [L] [T]^{-2}}{[L]^2}, \end{aligned} \quad (97)$$

que corresponde então à densidade superficial de força (força/unidade de área).

Estando o sistema em seu estado estacionário, não há variação na velocidade do centro de massa do sistema de buracos. Dessa forma, a equação de balanço de força (59) torna-se

$$n_s^* e \mathbf{E} + \mathbf{f}_i(v_d) = 0. \quad (98)$$

No caso de um sistema isotrópico, a relação entre a densidade de corrente e o campo elétrico

aplicado é dada pela equação $\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}$ ou, em termos da resistividade,

$$\rho \mathbf{J} = \mathbf{E}. \quad (99)$$

Daí, podemos escrever que

$$\rho = \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_d}{\mathbf{J} \cdot \mathbf{v}_d}. \quad (100)$$

Uma vez que a densidade de corrente é dada por $\mathbf{J} = n_s^* e \mathbf{v}_d$, a resistividade poderá ser reescrita da forma

$$\rho = \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_d}{n_s^* e \mathbf{v}_d \cdot \mathbf{v}_d} = \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_d}{n_s^* e v_d^2}. \quad (101)$$

Por outro lado, da equação de balanço de força para o estado estacionário, (98), teremos:

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_d = -\frac{\mathbf{f}_i \cdot \mathbf{v}_d}{n_s^* e}. \quad (102)$$

Logo,

$$\rho = \rho_i = -\frac{\mathbf{f}_i \cdot \mathbf{v}_d}{(n_s^* e v_d)^2}. \quad (103)$$

Fisicamente, a energia dissipada através da interação com as impurezas é transferida para a rede. A quantidade $J^2 \rho$ representa a taxa de transferência de energia dissipada para a rede.

Substituindo a expressão de $\mathbf{f}_i(v_d)$ dada pela equação (96) na equação (103), teremos

$$\rho_i = -\frac{\mathbf{v}_d}{(n_s^* e v_d)^2} \cdot \left\{ \frac{n_i}{\hbar} \sum_{mn\mathbf{q}} |U_{mn}(q)|^2 \mathbf{q} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d) \right\}. \quad (104)$$

Como o movimento ocorre no plano xy , supondo $\mathbf{v}_d = v_d \hat{x}$, a equação acima torna-se

$$\rho_i = -\frac{n_i}{\hbar n_s^{*2} e^2 v_d} \sum_{mn\mathbf{q}} q_x |U_{mn}(q)|^2 \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d) \quad (105)$$

ou ainda

$$\rho_i = -\frac{n_i}{\hbar n_s^{*2} e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} \frac{q_x^2}{\omega_d} |U_{mn}(q)|^2 \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d), \quad (106)$$

onde usamos a definição $\omega_d = v_d q_x$. Como estamos considerando o caso isotrópico, a equação (106) vale para qualquer direção do vetor \mathbf{q} . Assim, podemos generalizar esta equação, obtendo

$$\rho_i = -\frac{n_i}{2\hbar n_s^{*2} e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} \frac{q^2}{\omega_d} |U_{mn}(q)|^2 \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d). \quad (107)$$

Importante notar que a resistividade depende somente de um valor específico de frequência, ω_d , que está relacionada diretamente ao módulo da velocidade constante v_d do centro de massa do sistema de buracos.

No caso ôhmico, que corresponde a uma corrente elétrica fraca, a resistividade pode ser obtida da equação (107) tomando o limite em que $\omega_d \rightarrow 0$, o que equivale a escrever

$$\begin{aligned} \rho_i = & -\frac{n_i}{2\hbar n_s^* e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} \frac{q^2}{\omega_d} |U_{mn}(q)|^2 \times \\ & \times [\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, 0) + \Pi_2'^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)\omega_d], \end{aligned} \quad (108)$$

onde

$$\Pi_2'^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) \equiv \left[\frac{\partial \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d)}{\partial \omega_d} \right]_{\omega_d=0}. \quad (109)$$

3 A POLARIZAÇÃO E A RESISTIVIDADE NO CASO ÔHMICO

Vimos no capítulo anterior que a resistividade para o caso de estados estendidos depende diretamente da polarização, mais especificamente da parte imaginária da polarização, conforme indica a equação (107). O objetivo deste capítulo é calcular a expressão para $\Pi_2(m, n, \mathbf{q}, \omega_d)$ na ausência de interação coulombiana e em seguida obter uma expressão que nos permita calcular a resistividade no caso ôhmico, que corresponde a uma corrente elétrica fraca.

A função que define a polarização na ausência de interação coulombiana, também denominada polarização zero, por grau de liberdade de spin é dada por

$$\Pi^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega) = \hbar \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_0(\mathcal{E}_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}}, T) - f_0(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}, T)}{\mathcal{E}_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \hbar\omega - i\hbar\alpha}, \quad (110)$$

onde $f_0(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}, T)$ é a função de distribuição de Fermi-Dirac dada por

$$f_0(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}, T) = \frac{1}{e^{[\mathcal{E}_k - (\mu - \mathcal{E}_n)]/k_B T} + 1}, \quad (111)$$

sendo μ o potencial químico, k_B a constante de Boltzmann, \mathcal{E}_n é o menor valor de energia da subbanda n e \mathcal{E}_k é a energia cinética associada ao vetor de onda \mathbf{k} dada por $\mathcal{E}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$. Teremos:

$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega) &= \hbar \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_0(\mathcal{E}_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}}, T)}{\mathcal{E}_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \hbar\omega - i\hbar\alpha} - \\ &- \hbar \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_0(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}, T)}{\mathcal{E}_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \hbar\omega - i\hbar\alpha}. \end{aligned} \quad (112)$$

Fazendo a mudança $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ na primeira soma da equação acima, obtemos que

$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) &= \hbar \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_0(\mathcal{E}_{m\mathbf{k}}, T)}{\mathcal{E}_{m\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \mathcal{E}_\omega - i\mathcal{E}_\alpha} - \\ &- \hbar \lim_{\alpha \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_0(\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}, T)}{\mathcal{E}_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} - \mathcal{E}_\omega - i\mathcal{E}_\alpha}, \end{aligned} \quad (113)$$

onde $\mathcal{E}_\omega \equiv \hbar\omega$ e $\mathcal{E}_\alpha \equiv \hbar\alpha$. Em nosso caso, as subbandas de energia são parabólicas, de modo que as energias são dadas por

$$\mathcal{E}_{m\mathbf{k}} = \mathcal{E}_m + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*},$$

onde m^* é a massa efetiva. Assim, teremos:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} &= \mathcal{E}_m + \frac{\hbar^2}{2m^*} (\mathbf{k} + \mathbf{q}) \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \mathcal{E}_n - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \\ \mathcal{E}_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}} &= \mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n + \mathcal{E}_q + 2\sqrt{\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k} \cos\theta, \end{aligned} \quad (114)$$

onde $\mathcal{E}_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*}$. Analogamente,

$$\mathcal{E}_{m\mathbf{k}} - \mathcal{E}_{n\mathbf{k}-\mathbf{q}} = \mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n - \mathcal{E}_q + 2\sqrt{\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k} \cos\theta. \quad (115)$$

Transformando as somas em integrais e escrevendo-as em termos da variável de energia, os resultados acima mostrados no levam a

$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) &= \frac{m^*}{2\pi^2 \hbar} \int_0^\infty d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{nk}, T) \times \\ &\times \int_0^\pi \frac{d\theta}{2\sqrt{\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k} \cos\theta + \mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n + \mathcal{E}_q - \mathcal{E}_\omega - i\mathcal{E}_\alpha} - \\ &- \frac{m^*}{2\pi^2 \hbar} \int_0^\infty d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk}, T) \times \\ &\times \int_0^\pi \frac{d\theta}{2\sqrt{\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k} \cos\theta + \mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n - \mathcal{E}_q - \mathcal{E}_\omega - i\mathcal{E}_\alpha}. \end{aligned} \quad (116)$$

Esta equação pode ser reescrita na forma

$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) &= \frac{m^*}{2\pi^2 \hbar} \left\{ \int_0^\infty d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{nk}, T) \int_0^\pi \frac{d\theta}{2\sqrt{\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k} \cos\theta - \mathcal{E}_- - i\mathcal{E}_\alpha} - \right. \\ &\left. - \int_0^\infty d\mathcal{E} f_0(\mathcal{E}_{mk}, T) \int_0^\pi \frac{d\theta}{2\sqrt{\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k} \cos\theta - \mathcal{E}_+ - i\mathcal{E}_\alpha} \right\}, \end{aligned} \quad (117)$$

onde definimos

$$\mathcal{E}_+ \equiv \mathcal{E}_\omega + \mathcal{E}_q - \Delta_{mn} \quad (118)$$

$$\mathcal{E}_- \equiv \mathcal{E}_\omega - \mathcal{E}_q - \Delta_{mn} \quad (119)$$

$$\Delta_{mn} \equiv \mathcal{E}_m - \mathcal{E}_n. \quad (120)$$

A função $\Pi^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega)$ é complexa e interessa-nos aqui obter apenas a sua parte imaginária, $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega)$, pois é ela que está na expressão que usaremos para calcular a resistividade. Usando o teorema das funções analíticas, obtemos

$$\begin{aligned} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) &= \frac{m^*}{2\pi \hbar} \left\{ \int_0^\infty d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{nk}, T) \int_0^\pi d\theta \delta \left[2\sqrt{\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k} \cos\theta - \mathcal{E}_- \right] - \right. \\ &\left. - \int_0^\infty d\mathcal{E} f_0(\mathcal{E}_{mk}, T) \int_0^\pi d\theta \delta \left[2\sqrt{\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k} \cos\theta - \mathcal{E}_+ \right] \right\}. \end{aligned} \quad (121)$$

Usando uma propriedade da função delta de Dirac, resolvemos as integrais na variável angular

θ , obtendo

$$\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) = \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{nk}, T) \Theta(4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2}} - \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk}, T) \Theta(4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2}} \right\}, \quad (122)$$

onde as funções $\Theta(4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2)$ e $\Theta(4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2)$ nos numeradores da equação (122) determinam o intervalo de variação da energia \mathcal{E}_k para que os denominadores sejam sempre um número real positivo.

Neste ponto, devemos considerar o cálculo $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega)$ em dois casos diferentes: para $T = 0$ K e para $T \neq 0$ K. Quando $T = 0$ K, as funções de Fermi se reduzem às funções degrau da forma

$$f_0(\mathcal{E}_{nk}, T = 0) = \Theta(\mathcal{E}_{Fn} - \mathcal{E}_k) \quad (123)$$

$$f_0(\mathcal{E}_{mk}, T = 0) = \Theta(\mathcal{E}_{Fm} - \mathcal{E}_k), \quad (124)$$

onde \mathcal{E}_{Fn} e \mathcal{E}_{Fm} são as energias do nível de Fermi para as subbandas n e m , respectivamente. Em outras palavras, como \mathcal{E}_n e \mathcal{E}_m são as menores energias das subbandas n e m , teremos que

$$\mathcal{E}_{Fm} \equiv \mathcal{E}_F - \mathcal{E}_m \quad (125)$$

$$\mathcal{E}_{Fn} \equiv \mathcal{E}_F - \mathcal{E}_n, \quad (126)$$

onde \mathcal{E}_F é o nível de Fermi do sistema. Substituindo as equações (123) e (124) na equação (122), obteremos

$$\begin{aligned} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) &= \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k \Theta(\mathcal{E}_{Fn} - \mathcal{E}_k) \Theta(4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2}} - \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k \Theta(\mathcal{E}_{Fm} - \mathcal{E}_k) \Theta(4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2}} \right\} \\ \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) &= \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_0^{\mathcal{E}_{Fn}} \frac{d\mathcal{E}_k \Theta(4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2}} - \int_0^{\mathcal{E}_{Fm}} \frac{d\mathcal{E}_k \Theta(4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2}} \right\} \\ \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) &= \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_0^{\mathcal{E}_{Fn}} \frac{d\mathcal{E}_k}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2}} \Theta\left(\mathcal{E}_k - \frac{\mathcal{E}_-^2}{4\mathcal{E}_q}\right) - \int_0^{\mathcal{E}_{Fm}} \frac{d\mathcal{E}_k}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2}} \Theta\left(\mathcal{E}_k - \frac{\mathcal{E}_+^2}{4\mathcal{E}_q}\right) \right\}. \quad (127) \end{aligned}$$

Usando a condição imposta pelas funções

$$\Theta\left(\mathcal{E}_k - \frac{\mathcal{E}_-^2}{4\mathcal{E}_q}\right) \quad \Theta\left(\mathcal{E}_k - \frac{\mathcal{E}_+^2}{4\mathcal{E}_q}\right)$$

na equação (127) podemos escrever que

$$\begin{aligned} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) = \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \Theta\left(\mathcal{E}_{Fn} - \frac{\mathcal{E}_-^2}{4\mathcal{E}_q}\right) \int_{\mathcal{E}_-^2/4\mathcal{E}_q}^{\mathcal{E}_{Fn}} \frac{d\mathcal{E}_k}{\sqrt{4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2}} - \right. \\ \left. - \Theta\left(\mathcal{E}_{Fm} - \frac{\mathcal{E}_+^2}{4\mathcal{E}_q}\right) \int_{\mathcal{E}_+^2/4\mathcal{E}_q}^{\mathcal{E}_{Fm}} \frac{d\mathcal{E}_k}{\sqrt{4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2}} \right\} \end{aligned} \quad (128)$$

Resolvendo as integrais na equação (128), obteremos

$$\begin{aligned} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) = \frac{m^*}{4\pi\hbar\mathcal{E}_q} \left[\Theta(4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_{Fn} - \mathcal{E}_-^2) \sqrt{4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_{Fn} - \mathcal{E}_-^2} - \right. \\ \left. - \Theta(4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_{Fm} - \mathcal{E}_+^2) \sqrt{4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_{Fm} - \mathcal{E}_+^2} \right]. \end{aligned} \quad (129)$$

Da equação (129), podemos ver que, se estamos tratando de um sistema com uma única banda parabólica de energia, então devemos ter $\mathcal{E}_{Fm} = \mathcal{E}_{Fn} = \mathcal{E}_F$. Neste caso, $\Delta_{mn} = 0$ e o que obteremos é a bem conhecida expressão de $\Pi_2^{(0)}(\mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega)$ [45].

A resistividade no caso ôhmico é dada pela equação (108), que é equivalente à equação

$$\begin{aligned} \rho_i = -\frac{n_i}{2\hbar n_s^* e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} \frac{q^2}{\omega_d} |U_{mn}(\mathbf{q})|^2 \times \\ \times \left[\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) + \Pi_2^{\prime(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)\omega_d \right], \end{aligned} \quad (130)$$

onde

$$\Pi_2^{\prime(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) \equiv \left[\frac{\partial \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathbf{q}, \omega_d)}{\partial \omega_d} \right] \Big|_{\omega_d=0} = \hbar \left[\frac{\partial \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_{\omega_d})}{\partial \mathcal{E}_{\omega_d}} \right] \Big|_{\mathcal{E}_{\omega_d}=0}$$

ou seja,

$$\Pi_2^{\prime(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) = \hbar \Pi_2^{\prime(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_{\omega_d} = 0), \quad (131)$$

com $\mathcal{E}_{\omega_d} \equiv \hbar\omega_d$. Então, no caso linear

$$\begin{aligned} \rho_i = -\frac{n_i}{2\hbar n_s^* e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} \frac{q^2}{\omega_d} |U_{mn}(\mathbf{q})|^2 \times \\ \times \left[\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) + \hbar \Pi_2^{\prime(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_{\omega_d} = 0)\omega_d \right]. \end{aligned} \quad (132)$$

Por outro lado, na equação (129), as energias \mathcal{E}_{Fn} e \mathcal{E}_{Fm} não são independentes entre si. Das

equações (125) e (126), obtemos que

$$\mathcal{E}_{Fn} = \mathcal{E}_{Fm} + \Delta_{mn}. \quad (133)$$

Substituindo (133) na equação (129), fazendo $\mathcal{E}_{\omega_d} = 0$ e usando as definições de \mathcal{E}_- e \mathcal{E}_+ , obtemos que $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_{\omega_d} = 0) = 0$. Logo, a resistividade no caso linear é dada pela equação

$$\rho_i = -\frac{n_i}{2n_s^{*2}e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} q^2 |U_{mn}(q)|^2 \Pi_2^{\prime(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0). \quad (134)$$

A equação (129) pode ser escrita na forma

$$\begin{aligned} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) &= \frac{m^*}{4\pi\hbar\mathcal{E}_q} \left\{ \Theta [4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_{Fn} - (\mathcal{E}_\omega - \mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2] \times \right. \\ &\times \sqrt{4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_{Fn} - (\mathcal{E}_\omega - \mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2} - \\ &- \Theta [4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_{Fm} - (\mathcal{E}_\omega + \mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2] \times \\ &\left. \times \sqrt{4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_{Fm} - (\mathcal{E}_\omega + \mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2} \right\} \end{aligned} \quad (135)$$

e daí obteremos que

$$\Pi_2^{\prime(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) = \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \frac{\Theta [4\mathcal{E}_{Fm}\mathcal{E}_q - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2]}{\sqrt{4\mathcal{E}_{Fm}\mathcal{E}_q - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}} \right\}. \quad (136)$$

Portanto, a resistividade no caso ôhmico para $T = 0K$ é dada por

$$\rho_i = -\frac{m^*n_i}{4\pi\hbar n_s^{*2}e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} q^2 |U_{mn}(q)|^2 \left\{ \frac{\Theta [4\mathcal{E}_{Fm}\mathcal{E}_q - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2]}{\sqrt{4\mathcal{E}_{Fm}\mathcal{E}_q - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}} \right\}, \quad (137)$$

onde $|U_{mn}(q)|^2$ é dado pela equação (93).

Quando a temperatura é diferente de zero, temos que:

$$\begin{aligned} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) &= \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{nk}, T) \Theta(4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2}} - \right. \\ &\left. - \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk}, T) \Theta(4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2}} \right\}, \end{aligned} \quad (138)$$

Usando as condições impostas pelas funções $\Theta(4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2)$ e $\Theta(4\mathcal{E}_q\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2)$ sobre os valores

da energia \mathcal{E}_k , a equação acima torna-se

$$\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) = \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_{\mathcal{E}_k^-}^{\infty} \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{nk}, T)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2}} - \int_{\mathcal{E}_k^+}^{\infty} \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk}, T)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2}} \right\}, \quad (139)$$

onde definimos

$$\mathcal{E}_k^- \equiv \frac{\mathcal{E}_-^2}{4\mathcal{E}_q} = \frac{(\mathcal{E}_\omega - \mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}{4\mathcal{E}_q} \quad (140)$$

$$\mathcal{E}_k^+ \equiv \frac{\mathcal{E}_+^2}{4\mathcal{E}_q} = \frac{(\mathcal{E}_\omega + \mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}{4\mathcal{E}_q} \quad (141)$$

e agora as integrais na equação (139) serão resolvidas numericamente.

Como no caso em que $T = 0K$, a resistividade no caso ôhmico para temperaturas diferentes de zero também é dada pela equação (132), isto é,

$$\rho_i = -\frac{n_i}{2\hbar n_s^* e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} \frac{q^2}{\omega_d} |U_{mn}(q)|^2 \left[\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) + \Pi_2'^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) \hbar \omega_d \right]$$

ou então

$$\begin{aligned} \rho_i &= -\frac{n_i}{2n_s^* e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} q^2 |U_{mn}(q)|^2 \times \\ &\times \left[\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) + \Pi_2'^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) \right], \end{aligned} \quad (142)$$

onde $\Pi_2'^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ é a derivada de $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_{\omega_d})$ em relação à \mathcal{E}_{ω_d} no limite em que $\mathcal{E}_{\omega_d} \rightarrow 0$.

Fazendo $\mathcal{E}_{\omega_d} = 0$ nas equações (156) e (157), a equação (138) torna-se:

$$\begin{aligned} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) &= \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_0^{\infty} \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{nk}, T) \Theta [4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q + \Delta_{mn})^2]}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q + \Delta_{mn})^2}} - \right. \\ &\left. - \int_0^{\infty} \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk}, T) \Theta [4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2]}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}} \right\}. \end{aligned} \quad (143)$$

Da mesma forma que as energias \mathcal{E}_{Fm} e \mathcal{E}_{Fn} para o caso de $T = 0K$, as energias \mathcal{E}_{mk} e \mathcal{E}_{nk} nas funções de Fermi na equação acima são tais que, para qualquer valor de \mathbf{k} , sendo $m < n$,

$\mathcal{E}_{nk} = \mathcal{E}_{mk} - \Delta_{mn}$ ¹. Substituindo essa relação no primeiro termo da equação (143), teremos:

$$\begin{aligned} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) &= \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk} - \Delta_{mn}, T)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q + \Delta_{mn})^2}} \times \right. \\ &\quad \times \Theta [4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q + \Delta_{mn})^2] - \\ &\quad \left. - \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk}, T) \Theta [4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2]}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}} \right\} \\ \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) &= \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_m + \mathcal{E}_k - \Delta_{mn}, T)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q + \Delta_{mn})^2}} \times \right. \\ &\quad \times \Theta [4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q + \Delta_{mn})^2] - \\ &\quad \left. - \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk}, T) \Theta [4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2]}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}} \right\}. \end{aligned}$$

Fazendo a troca de variáveis $\mathcal{E}'_k = \mathcal{E}_k - \Delta_{mn}$ no primeiro termo da equação acima, obteremos

$$\begin{aligned} \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) &= \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}'_k f_0(\mathcal{E}'_{mk}, T) \Theta [4\mathcal{E}_q \mathcal{E}'_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2]}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}'_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}} \right. \\ &\quad \left. - \int_0^\infty \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk}, T) \Theta [4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2]}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - (\mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}} \right\}. \end{aligned}$$

Como \mathcal{E}'_k é uma variável de integração, podemos trocá-la por \mathcal{E}_k , o que nos leva imediatamente que $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0) = 0$ para qualquer valor de temperatura. Portanto, a equação (142) torna-se

$$\rho_i = -\frac{n_i}{2n_s^* e^2} \sum_{mn\mathbf{q}} q^2 |U_{mn}(q)|^2 \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0), \quad (144)$$

onde $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ é dada pela equação (139).

Para encerrar este capítulo, é conveniente apresentar aqui um comentário importante sobre resistência e resistividade em duas dimensões. Considere uma amostra metálica de comprimento L_x , largura L_y e uma espessura desprezível comparada às outras dimensões. Se aplicamos um campo na direção longitudinal e campo magnético na direção perpendicular a essa

¹Aqui usamos por conveniência que $m < n$. No entanto, se fizermos $m > n$, vamos obter que $\mathcal{E}_{nk} = \mathcal{E}_{mk} + \Delta_{mn}$ e o resultado final não vai se alterar.

placa, a diferença de potencial em cada direção será dada por

$$U_x = RI_x + R_H I_y \quad (145)$$

$$U_y = -R_H I_x + RI_y, \quad (146)$$

onde R_H é a resistência Hall. Se o campo elétrico for uniforme ao longo da amostra, então

$$E_x = \frac{U_x}{L_x} \quad (147)$$

$$U_y = \frac{U_y}{L_y}. \quad (148)$$

Assim, as equações para as diferenças de potencial podem ser escritas na forma

$$E_x L_x = RI_x + R_H I_y \quad (149)$$

$$E_y L_y = -R_H I_x + RI_y, \quad (150)$$

e então o elemento diagonal da resistividade será dada por

$$\rho_{xx} = R \frac{L_x}{L_y}. \quad (151)$$

A razão $\frac{L_x}{L_y}$ é conhecida como fator geométrico para a resistividade no caso de sistemas bidimensionais. Vemos que as dimensões de resistência e resistividade são as mesmas, porém seus valores somente serão iguais se as dimensões da amostra bidimensional forem iguais.

4 RESISTIVIDADE EM CAMADAS DE GaAs/Ga_{1-x}Mn_xAs

Vimos anteriormente no capítulo 1, que em camadas de Ga_{1-x}Mn_xAs na fase metálica há tanto estados estendidos quanto estados localizados. No capítulo 1, apresentamos a teoria da equação de balanço de força e energia para o caso quase bidimensional considerando apenas as interações entre os portadores de carga elétrica e as impurezas na estrutura. Para o caso ôhmico e considerando apenas a polarização sem interação entre os portadores, obtivemos uma expressão que permite calcular a resistividade para o caso de portadores livres [equação (108)]. No capítulo 3, calculamos a polarização para o caso sem interação e chegamos a uma expressão para a resistividade para portadores livres e para temperaturas finitas [equação (144)] no caso ôhmico. Neste capítulo, apresentamos os resultados obtidos para a resistividade em camadas de Ga_{1-x}Mn_xAs para o caso ôhmico usando o modelo descrito a seguir.

Numa camada de Ga_{1-x}Mn_xAs, com uma concentração de impurezas de manganês $x = 0,05$, a interação entre os momentos magnéticos localizados dos íons de manganês tem como efeito global uma magnetização média e uma ordem ferromagnética do sistema de buracos. Para temperaturas suficientemente baixas, podemos desprezar a flutuação dos momentos magnéticos das impurezas, de modo que o spin dos íons de manganês será dado por $S_i = 5\hbar\langle M\rangle/2$, onde $\langle M\rangle$ é a magnetização média normalizada ($0 \leq \langle M\rangle \leq 1$). Assumindo que a interação magnética local ocorre entre uma distribuição uniforme de momentos magnéticos e uma concentração de íons de manganês, então o potencial magnético efetivo será dado por

$$V_{mag} = -\frac{x}{2}N_0\beta\langle M\rangle\sigma, \quad (152)$$

onde $\sigma = \pm 1$, x é a concentração de manganês, $cI = N_0\beta$ e $N_0\beta = -1,2\text{eV}$ é o potencial de troca para buracos, de acordo com as referências [7], [10]. Se $x = 0,05$ e a amostra está completamente ordenada magneticamente, o potencial magnético V_{mag} provoca uma separação tipo efeito Zeeman, fazendo aparecer na densidade de estados duas bandas, uma para buracos com spins alinhados com a magnetização e outra para buracos com spins antialinhados com a magnetização. Neste caso, o efeito de V_{mag} sobre os buracos com spins alinhados será equivalente ao de uma barreira de potencial de $+75\text{ meV}$ e sobre os buracos com spins antialinhados equivalerá a um poço de potencial de -75 meV , de modo que a separação total entre as bandas spin polarizadas será de 150 meV , o que corresponde a uma magnetização máxima. O potencial magnético efetivo está esquematicamente representado na Fig. 5 abaixo.

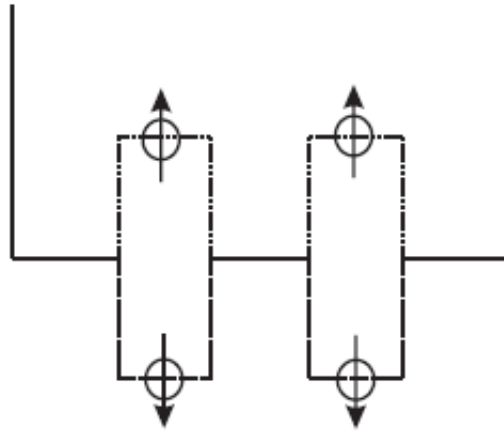


Figura 5: Potencial magnético efetivo (esquemático) [16].

De acordo com a discussão apresentada em [16], no caso de uma estrutura com duas camadas magnéticas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ com $x = 0,05$ em cada camada e separadas entre si por uma camada não dopada de GaAs, os íons negativamente carregados de manganês atraem os buracos para a região das camadas magnéticas. Porém, devido ao fato de que $N_0\beta$ é negativo no potencial magnético efetivo V_{mag} , buracos com spins antialinhados vão se concentrar nas camadas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, enquanto os buracos com spins alinhados vão se espalhar por toda a região da dupla camada. Essa não homogeneidade na distribuição da polarização do gás de buracos modifica a forma de interação entre os momentos magnéticos localizados, levando a uma temperatura crítica de transição de fase maior.

É conveniente destacar neste ponto que, embora atualmente uma camada muito estreita de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ seja produzida (camada δ) [46], uma camada do tipo δ não possui grande interesse para uma concentração $x = 0,05$, pois, neste caso, as temperaturas críticas são muito baixas. No entanto, para concentrações da ordem de vinte a trinta por cento, camadas do tipo δ são importantes tanto do ponto de vista da ciência básica quanto do ponto de vista tecnológico. Aqui não discutimos o caso da camada δ , mas estudos da resistividade deste tipo de sistema estão em andamento.

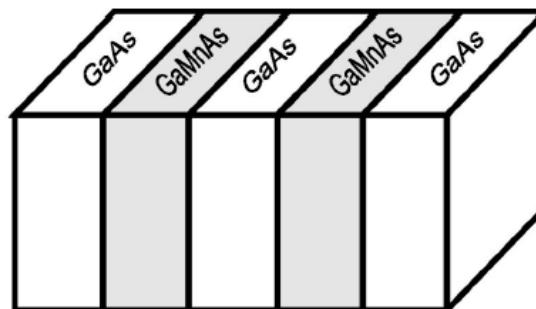


Figura 6: Dupla camada de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, separada por uma camada não dopada de GaAs [16].

Considerando a discussão acima, o nosso sistema é, então, composto por uma dupla camada magnética de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ com 20\AA de largura cada uma, separadas por uma camada de GaAs não dopada de largura 20\AA , como mostrado na Fig. 6 acima. As camadas não dopadas de GaAs à esquerda e à direita das camadas magnéticas de GaMnAs possuem uma largura de 70\AA cada uma, de forma que a heteroestrutura como um todo possui uma largura de 200\AA . A razão para que as camadas de GaAs não dopadas das extremidades tenham uma dimensão maior do que as camadas mais internas (as camadas de GaMnAs e a camada intermediária de GaAs) é garantir que as funções de ondas não contribuam significativamente para distâncias muito grandes das camadas magnéticas. Estudamos o comportamento da resistividade dessa heteroestrutura na fase metálica para determinados valores da densidade de impurezas n_i e da densidade de portadores n_s , aqui considerados parâmetros independentes do nosso modelo.

Para definir os valores dos parâmetros n_i e n_s , usamos como referência o diagrama de fase apresentado na Fig. 4, que foi obtida para camadas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ para o caso totalmente bidimensional. Levando em consideração que esse diagrama apresenta uma região de amostras metálicas para um conjunto de pares (n_i, n_s) e ainda permite identificar as transições não metal-metal e metal-não metal, escolhemos os valores de n_i e n_s de nossas amostras de tal maneira que elas estejam na fase metálica e próximas das referidas transições de fase acima citadas. Sendo assim, definimos a amostra 1 pelo par $n_i = 3,75 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $n_s = 3,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$; a amostra 2 por $n_i = 4,5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $n_s = 3,25 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$; e a amostra 3 por $n_i = 7,5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $n_s = 3,25 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.

Em amostras metálicas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, os estados dos buracos podem ser estendidos ou localizados, como já discutido anteriormente. A questão então é saber quais são os estados estendidos e quais são os estados localizados, já que buracos em estados com características diferentes participam do processo de condução por canais diferentes. A maneira de obter para qual intervalo de energia os estados são estendidos ou localizados é determinar o valor da chamada *mobility edge*. A *mobility edge* representa o valor de energia para o qual o caráter do estado de buraco muda de localizado para estendido. Já vimos antes que um estado é caracterizado como estendido se, para um dado valor de energia E , a função densidade espectral tem a forma de uma função delta, ou seja, se possui uma largura Δk estreita. Inversamente, se para o valor de energia E a função densidade espectral possui uma grande largura, com o perfil de um sino (função lorentziana), então esse estado é caracterizado como localizado. Dessa forma, a maneira de se obter o valor da *mobility edge* é variar a energia e calcular a função densidade espectral correspondente. Temos dois casos possíveis, quais sejam, a *mobility edge* pode ser maior ou menor do que o nível de Fermi, E_F .

Como o nível de Fermi representa um valor de energia de referência, é interessante calcular inicialmente a função densidade espectral para $E = E_F$. Vamos supor que ao calcular $\mathcal{A}(\mathbf{k}, E_F)$, obtemos como resultado uma curva centrada em $\mathbf{k} = 0$ e cuja forma é típica de um estado localizado, como indicado na Fig. 7. Isso significa que todos os estados com energia

menores do que E_F são localizados e, portanto, a *mobility edge* será maior do que o nível de Fermi.

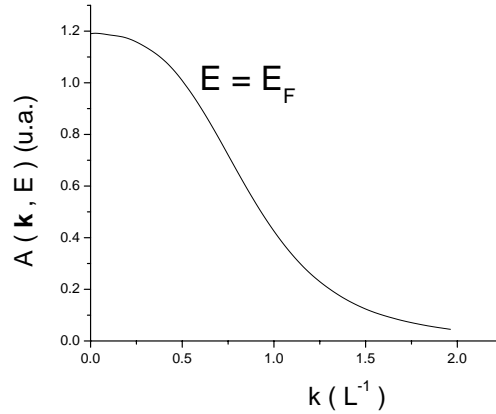


Figura 7: Função densidade espectral para $E = E_F$ localizado.

Então, a partir de $E = E_F$, calcula-se a função densidade espectral para um valor de energia $E_1 > E_F$, cujo gráfico está indicado na Fig. 8. Novamente, aumenta-se o valor da

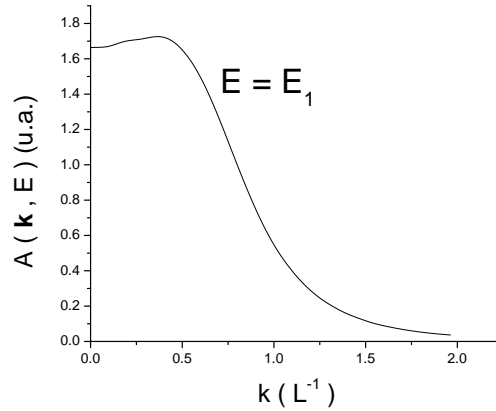


Figura 8: Função densidade espectral para $E = E_1$ localizado.

energia e calcula-se a função densidade espectral. A Fig. 9 mostra a $\mathcal{A}(k, E)$ para $E = \mu > E_F$. Para energias maiores do que μ , por exemplo $E = E_2 > \mu$, existirão estados que são estendidos, e a Fig. 10 mostra a forma típica de um estado estendido, centrado em um valor k e uma largura bem estreita.

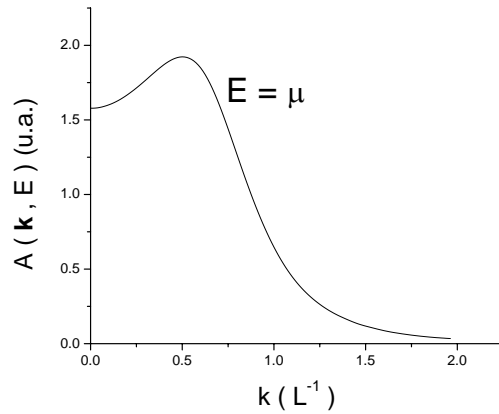


Figura 9: Função densidade espectral para $E = \mu > E_F$ estendido.

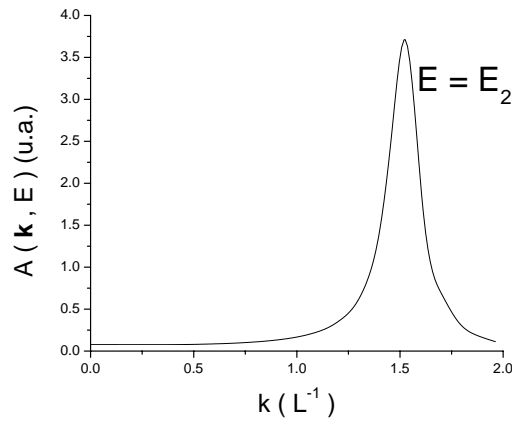


Figura 10: Função densidade espectral para $E = E_2 > \mu$ estendido.

Suponhamos, agora, que o estado para a energia $E = E_F$ seja estendido, como indicado na Fig. 11a abaixo. Neste caso, teremos estados com energia acima do nível de Fermi que são estendidos e a *mobility edge* será menor do que E_F . Assim, para obter o valor da *mobility edge*, devemos calcular a função densidade espectral para valores energias menores do que o nível de Fermi. A Fig. 11b representa a função densidade espectral para um estado localizado com energia $E_1 < \mu$, a Fig. 11c mostra a função densidade espectral para $E = \mu < E_F$, que define um estado estendido e a Fig. 11d representa um estado estendido para uma energia E_2 tal que $\mu < E_2 < E_F$.

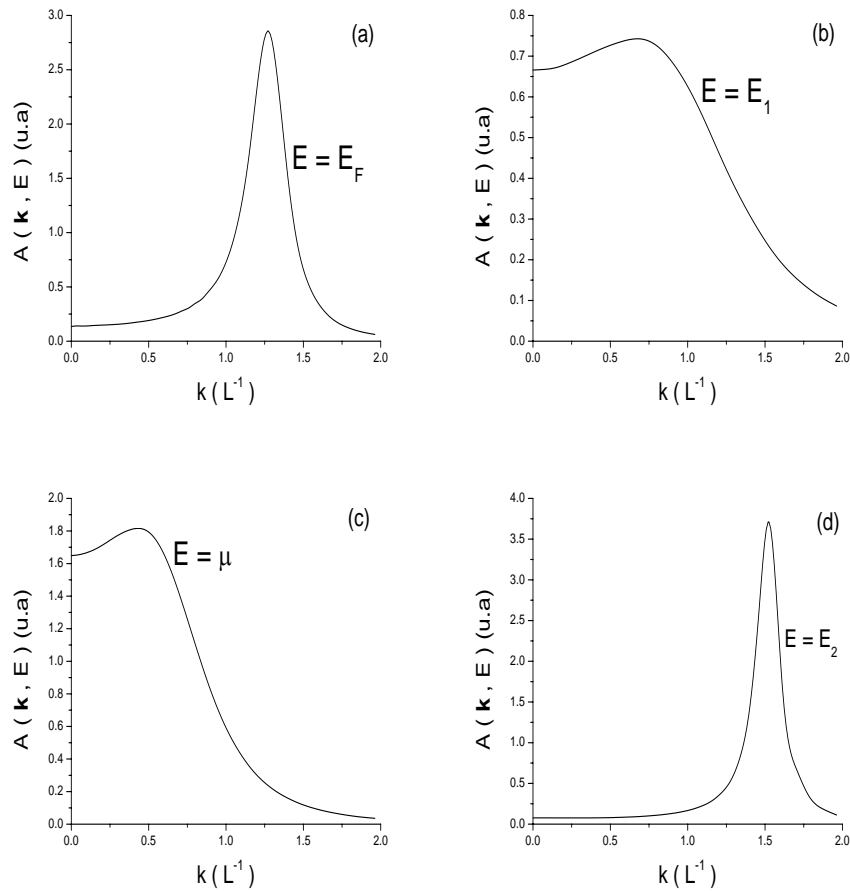


Figura 11: Densidades espectrais: (a) $E = E_F$; (b) $E = E_1 < \mu$; (c) $E = \mu < E_F$; (d) $E = E_2$, $\mu < E_2 < E_F$.

Os gráficos mostrados nas Figuras 7 a 11 são exemplos de como deve ser a forma da função densidade espectral para estados estendidos e localizados. Maiores detalhes sobre esse assunto podem ser encontrados em Cabral [47].

Neste ponto, definimos uma densidade de buracos estendidos, n_s^* . Uma vez obtido o valor da *mobility edge*, podemos calcular o valor de n_s^* para nossas três amostras através da equação

$$n_s^* = \int_{\mu}^{E_F} dE \mathcal{D}(E), \quad (153)$$

onde $\mathcal{D}(E)$ é a densidade de estados. Importante notar que o valor de n_s^* depende da magnetização da amostra e que as medidas de densidade de portadores através de efeito Hall são na realidade medidas de n_s^* . A Fig. 12 mostra o gráfico da densidade de estados para um sistema em que $\langle M \rangle = 1$, com $n_i = 1,2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ e $n_s = 6,5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Do ponto de vista de transporte, todas as amostras metálicas possuem dois canais de condução. Esses canais são independentes um do outro e a importância de cada um está diretamente relacionada com o valor de n_s^* em cada amostra. Um dos canais, que é o equivalente ao

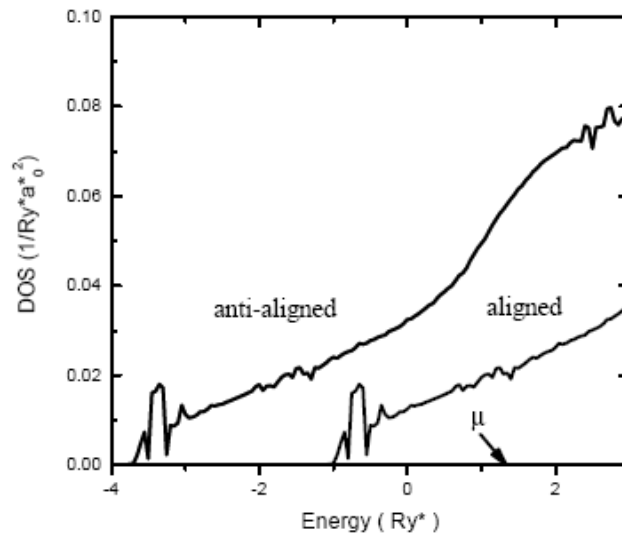


Figura 12: Densidade de estados, onde se indica a *mobility edge* μ [37].

da condução elétrica nos metais comuns (cobre, alumínio etc), ocorre principalmente via portadores livres (estados estendidos). Neste trabalho, a resistividade para o caso ôhmico relativa a este canal, que designaremos por ρ_e , é calculada usando a teoria da equação de balanço de força e que, como vimos, depende dos valores de n_i e n_s^* , da polarização do sistema de buracos desconsiderando a interação coulombiana entre eles e depende ainda implicitamente da temperatura através da função de distribuição de Fermi-Dirac. Em nosso caso, para duas das amostras este será o seu principal canal de transporte, mesmo quando a magnetização se torna muito pequena.

A expressão que permite calcular a resistividade ρ_e é dada pela equação

$$\rho_e = -\frac{n_i}{2n_s^{*2}e^2} \sum_{mnq} q^2 |U_{mn}(q)|^2 \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0), \quad (154)$$

onde

$$\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, \mathcal{E}_\omega) = \frac{m^*}{2\pi\hbar} \left\{ \int_{\mathcal{E}_k^-}^{\infty} \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{nk}, T)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_-^2}} - \int_{\mathcal{E}_k^+}^{\infty} \frac{d\mathcal{E}_k f_0(\mathcal{E}_{mk}, T)}{\sqrt{4\mathcal{E}_q \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_+^2}} \right\} \quad (155)$$

é a polarização do sistema de buracos sem interação entre os mesmos para qualquer temperatura, $|U_{mn}(q)|^2$ é o potencial efetivo devido às impurezas e é dado pela equação (93) e

$$\mathcal{E}_k^- \equiv \frac{\mathcal{E}_-^2}{4\mathcal{E}_q} = \frac{(\mathcal{E}_\omega - \mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}{4\mathcal{E}_q} \quad (156)$$

$$\mathcal{E}_k^+ \equiv \frac{\mathcal{E}_+^2}{4\mathcal{E}_q} = \frac{(\mathcal{E}_\omega + \mathcal{E}_q - \Delta_{mn})^2}{4\mathcal{E}_q}. \quad (157)$$

Transformando a soma em q na equação (154) em uma integral na energia \mathcal{E}_q , obteremos:

$$\rho_e = -\frac{m^* n_i}{2\pi \hbar^2 n_s^* e^2} \sum_{mn} \int d\mathcal{E}_q |U_{mn}(\mathcal{E}_q)|^2 \Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0). \quad (158)$$

Como a resistividade depende da derivada da polarização em relação a \mathcal{E}_ω no limite em que $\mathcal{E}_\omega \rightarrow 0$, é importante entender o comportamento desta função e o quanto ela contribui. A presença da função de Fermi-Dirac no integrando da expressão da polarização indica que a mesma deve ser resolvida numericamente. Assim, a derivada em relação a \mathcal{E}_ω também será obtida por métodos numéricos. Inicialmente, devemos notar que, trocando m por n na expressão da polarização não haverá alteração no resultado. Dessa forma, podemos restringir a soma indicada na equação (158) apenas para $m \leq n$. Os radicandos nos denominadores da expressão da polarização dependem das energias cinéticas \mathcal{E}_k e \mathcal{E}_q , que podem assumir somente valores positivos. Por sua vez, \mathcal{E}_q é a variável de integração na equação da resistividade ρ_e . Assim, a energia \mathcal{E}_q deve estar no intervalo entre as raízes do radicando da polarização para garantir que $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ seja real. Usando esta condição, plotamos abaixo alguns gráficos representativos de $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ em função de \mathcal{E}_q para alguns pares (m, n) .

Nas Figs.13 e 14 abaixo, mostramos dois gráficos de $\Pi_2^{(0)}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ apenas para as subbandas (m, n) de menor energia.

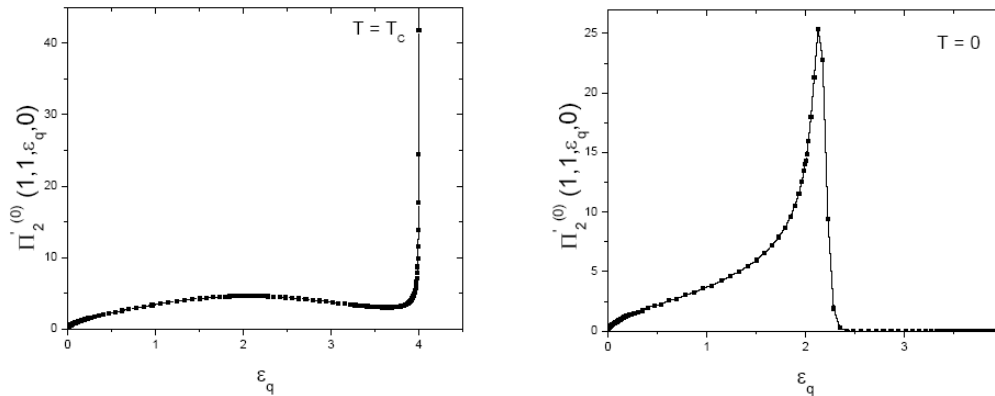


Figura 13: Gráficos de $\Pi_2^{(0)}(1, 1, \mathcal{E}_q, 0)$ para as temperaturas mostradas.

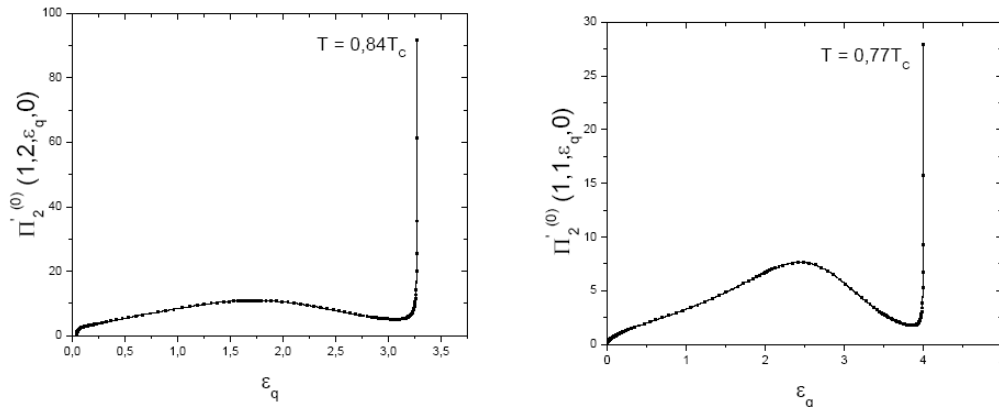


Figura 14: Gráficos de $\Pi_2^{(0)'}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ os pares $(m = 1; n = 2)$, $(m = 1; n = 1)$ e para as temperaturas mostradas.

A seguir, na Fig. 15, mostramos dois gráficos de $\Pi_2^{(0)'}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$. A figura da esquerda mostra o gráfico de $\Pi_2^{(0)'}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ para diferentes temperaturas e pares (m, n) . Note que, para temperaturas diferentes, os valores de $\Pi_2^{(0)'}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ para $m \neq n$ são maiores do que para $m = n$ para todos os valores da energia \mathcal{E}_q . O mesmo comportamento é observado quando consideramos a mesma temperatura, como indicado nos gráficos à direita da Fig. 15.

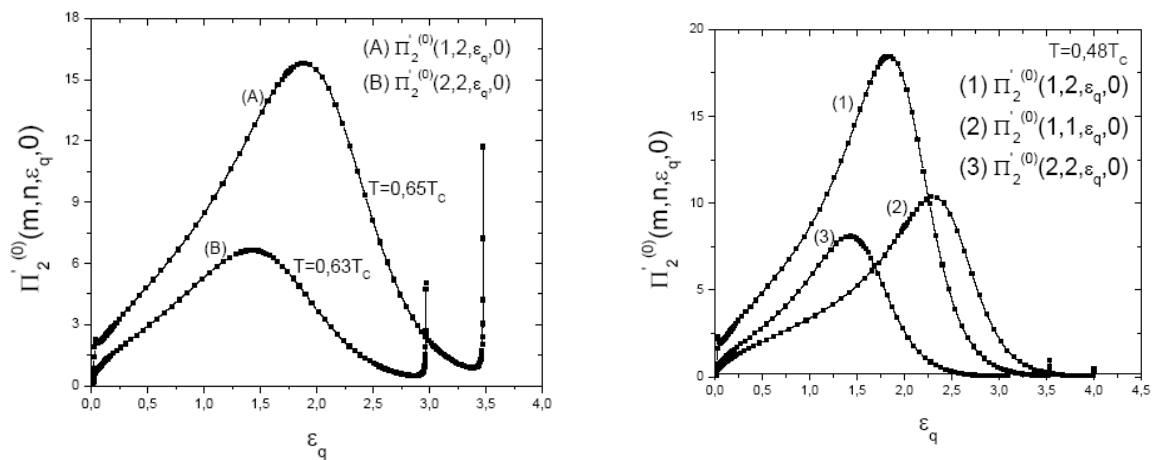


Figura 15: À esquerda, mostramos o gráfico de $\Pi_2^{(0)'}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ para temperaturas e pares (m, n) diferentes. À direita, mostramos o gráfico de $\Pi_2^{(0)'}(m, n, \mathcal{E}_q, 0)$ a mesma temperatura e diferentes pares (m, n) .

Numa amostra metálica, o principal canal de transporte é via portadores livres, ou seja, aqueles cujo caráter dos estados é estendido. No entanto, aqueles portadores que se encontram em estados localizados também podem participar do processo de condução através de um mecanismo conhecido como *variable range hopping*¹ [32]. Neste processo, uma vez que os estados dos portadores são localizados, os portadores não podem se deslocar livremente na estrutura. A forma possível de deslocamento dos portadores é então através de saltos entre um íon

¹Expressão sem tradução para o português

e outro. Essa forma de condução ocorre por meio de ativação térmica, isto é, é explicitamente dependente da temperatura, e a resistividade pode ser expressa por

$$\rho_\ell = \rho_0 e^{\Delta/k_B T}, \quad (159)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, Δ é a energia de ativação, T é a temperatura e ρ_0 é a resistividade quando a temperatura assume um valor muito grande ($T \rightarrow \infty$). Nesta equação, a energia de ativação e a constante ρ_0 são dois parâmetros que devem ser obtidos e a forma como foram calculados será descrito abaixo.

A energia de ativação é dada pela diferença entre a energia de Fermi e a *mobility edge*. No entanto, como discutido acima, a *mobility edge* pode assumir valores tanto acima quanto abaixo do nível de Fermi. Logo, podemos calcular a energia de ativação pela equação

$$\Delta = |E_F - \mu|. \quad (160)$$

O valor da *mobility edge* foi obtido a partir da análise da função densidade espectral para vários valores de energia e identificando para qual valor de energia o estado muda do caráter localizado para estendido.

Inicialmente, vamos considerar o caso em que todos os buracos nas amostras estão em estados estendidos, isto é, vamos considerar que o valor de n_s^* não depende da magnetização e portanto será igual ao valor da densidade total de buracos, n_s . Neste caso, a condução ocorre somente pelo canal de estados estendidos, pois não existem buracos que ocupem estados localizados. Isto é, a resistividade total será dada apenas pela equação (158).

Na Fig. 16, onde $n_i = 1,0 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ and $n_s = 2,0 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, mostramos a densidade de carga total na dupla camada de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ ao longo da direção-z para as magnetizações nula e máxima. Os íons negativamente carregados, por meio do efeito coulombiano, atraem os buracos para a região das camadas magnéticas. No entanto, o potencial magnético efetivo V_{mag} atua de forma distinta para buracos com polarizações de spin diferentes. Assim, para $\langle M \rangle = 1$, a densidade de carga total, indicada na Fig. 16 pela linha preta, concentra-se na região das camadas magnéticas de GaMnAs. Para a magnetização máxima, o potencial magnético efetivo atua como um poço de potencial de de valor -75 meV para os buracos com spins antialinhados (*down*) com a magnetização. Dessa forma, há uma alta densidade de buracos com spins antialinhados na região das camadas magnéticas (linha vermelha). Por outro lado, para os buracos com spins alinhados (*up*) com a magnetização, o potencial magnético efetivo atua como uma barreira de potencial de +75 meV, fazendo com que apenas uma pequena densidade de buracos com spins alinhados estejam na região das camadas magnéticas (linha azul).

A redução gradativa da magnetização faz diminuir a separação efetiva entre os buracos com spins alinhados e antialinhados e a distribuição de carga nas camadas magnéticas também

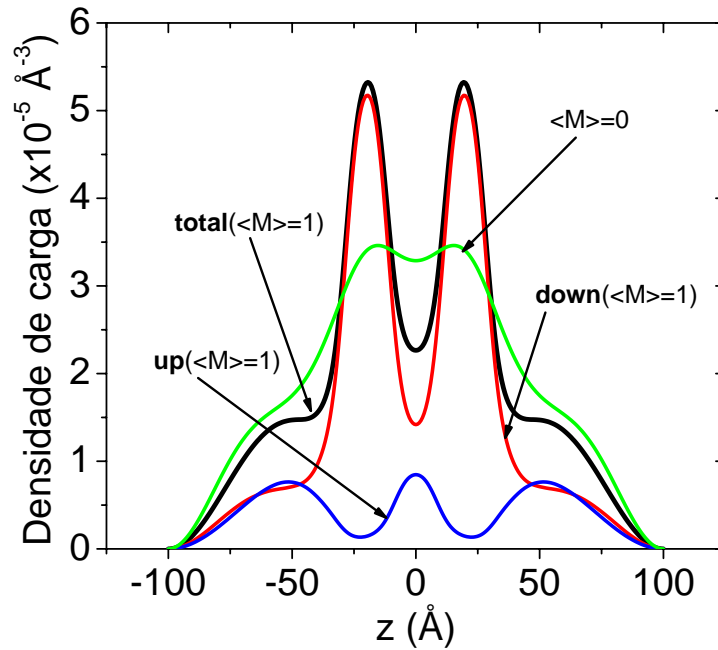


Figura 16: Densidade de carga através da direção-z para $\langle M \rangle = 0$ e $\langle M \rangle = 1$.

se modifica. À medida que a magnetização diminui, a carga se espalha por uma região maior do que aquela ocupada pelas impurezas. De fato, como mostrado na Fig. 16, para a magnetização nula, as cargas se distribuem por toda a heteroestrutura (linha verde). A consequência imediata disso é que devemos esperar uma diminuição na resistividade à medida que a magnetização diminui.

A Fig. 17 mostra como a resistividade varia com a diminuição da magnetização numa escala linear. O primeiro ponto a ser notado é que, para $\langle M \rangle \rightarrow 0$, que corresponde a $T \approx T_c$, forma-se a lombada que tem sido observada experimentalmente em amostras com comportamento metálico e concentração $x = 0,05$. Um outro ponto a ser destacado é que, inicialmente, a resistividade assume um valor muito alto para a magnetização máxima. A diminuição da magnetização e o fato da carga se espalhar por uma larga região tem como efeito imediato um número maior de subbandas ocupadas, o que é mostrado no inset da Fig. 17. Isso significa que o nível de Fermi salta de repente de uma subbanda pouco ocupada para outra subbanda mais ocupada. A resistividade, por sua vez, apresenta variações bruscas correspondendo à mudança na ocupação das subbandas, mostrando oscilações equivalentes às de Shubnikov-de Haas. Para $\langle M \rangle$ tendendo a zero, as subbandas ocupadas possuem tanto buracos com spin alinhados quanto antialinhados igualmente distribuídos, fazendo com que ambas as polarizações contribuam de forma semelhante para a função polarização, aumentando assim a resistividade.

Importante ressaltar que este comportamento oscilatório da resistividade aqui descrito é uma consequência direta da hipótese de n_s^* ser independente da magnetização e igual à densidade de buracos total existente na amostra (n_s).

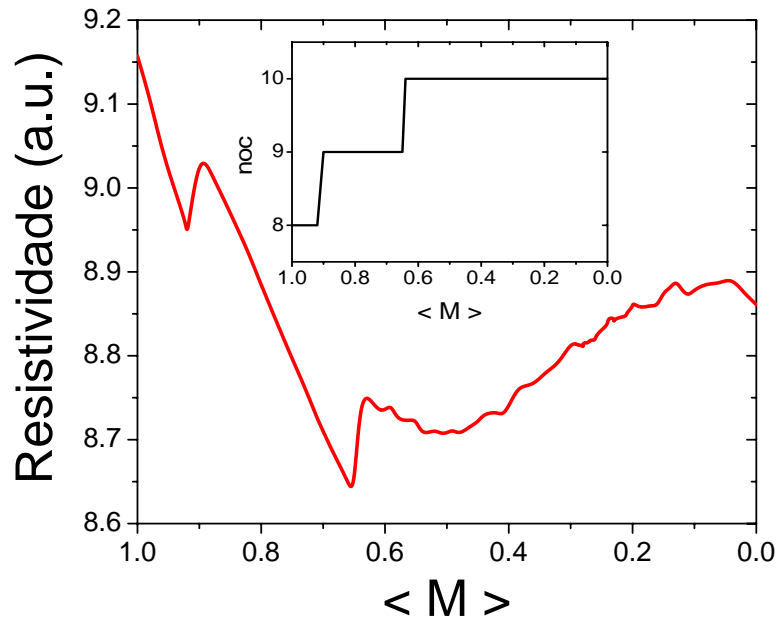


Figura 17: Resistividade para $n_s^* = n_s$ em unidade arbitrárias em função da magnetização média. No inset, o número de subbandas ocupadas em função da magnetização média.

Em seguida, passamos a considerar o caso do aparecimento de uma banda de impurezas, cuja assinatura deve ser expressa pela existência de dois canais de transporte: um devido a estados eventualmente localizados e outro a estados eventualmente estendidos. O nosso sistema é constituído por três amostras metálicas de camadas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, cujos buracos estão confinados na direção z e são livres no plano xy , o que nos permitiu considerá-las como um sistema quase bidimensional. A escolha dos nossos parâmetros n_i e n_s foi baseada em um resultado obtido para um sistema totalmente bidimensional que calculou a razão entre a densidade de buracos em estados estendidos (n_s^*) e a densidade total de buracos (n_s). Para calcular a energia de ativação, usamos o seguinte ansatz: para amostras totalmente bidimensionais que possuem a mesma razão n_s^*/n_s que as amostras 1, 2 e 3, a energia de ativação será a mesma.

De maneira geral, resultados experimentais de medida de resistividade apresentam um comportamento semelhante para amostras com concentrações de impurezas com valores próximos. Dessa forma, podemos obter uma relação entre a constante ρ_0 e a concentração de impurezas a partir de dados experimentais conhecidos. Sendo assim, usamos os dados das amostras produzidas por Oiwa et al [7], cujo comportamento é tipicamente não metálico, quais sejam, as amostras com concentrações $x = 0,015$, $x = 0,022$ e $x = 0,071$. A partir dos gráficos obtidos da resistividade pela temperatura para essas três amostras, fazendo uma interpolação obtivemos o valor de ρ_0 para cada uma delas. Fizemos então uma nova interpolação dos valores obtidos para ρ_0 , fitando numa função da forma

$$\rho_0 = \frac{\alpha}{x^{\beta/3}}, \quad (161)$$

para uma dada concentração x . A dependência esperada para ρ_0 é que seja aproximadamente proporcional à distância média entre os átomos de manganês. De fato, obtivemos $\beta = 1,4$. A partir da equação (161) calculamos a constante ρ_0 para a concentração $x = 0,05$ de impurezas de manganês.

Aqui cabem duas observações sobre o procedimento adotado para obter a energia de ativação e a resistividade para $T \rightarrow \infty$, ρ_0 , e os resultados obtidos para a resistividade. Em um sistema bidimensional puro e com dimensões finitas, a relação entre a resistência e a resistividade é dada pela equação $\rho = R \frac{L_x}{L_y}$. As nossas amostras são tais que podemos considerá-las infinitas, de modo que o fator geométrico $\frac{L_x}{L_y}$ perde em importância e então podemos dizer que resistência e resistividade assumem o mesmo comportamento em nossas amostras. Outro ponto a ser comentado é que a energia de ativação foi avaliada a partir de valores da *mobility edge* e da energia de Fermi para um sistema puramente bidimensional. Essa hipótese nos permitiu calcular a resistividade devido ao canal de transporte pelo mecanismo de *hopping*. Devemos então fazer uma ressalva de que não podemos aqui comparar os nossos resultados numéricos para a resistividade total com valores obtidos experimentalmente para amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ com a mesma concentração de impurezas. Apesar disso, os gráficos obtidos para a resistividade total por meio desse procedimento reproduzem em bom acordo o comportamento identificado em amostras reais.

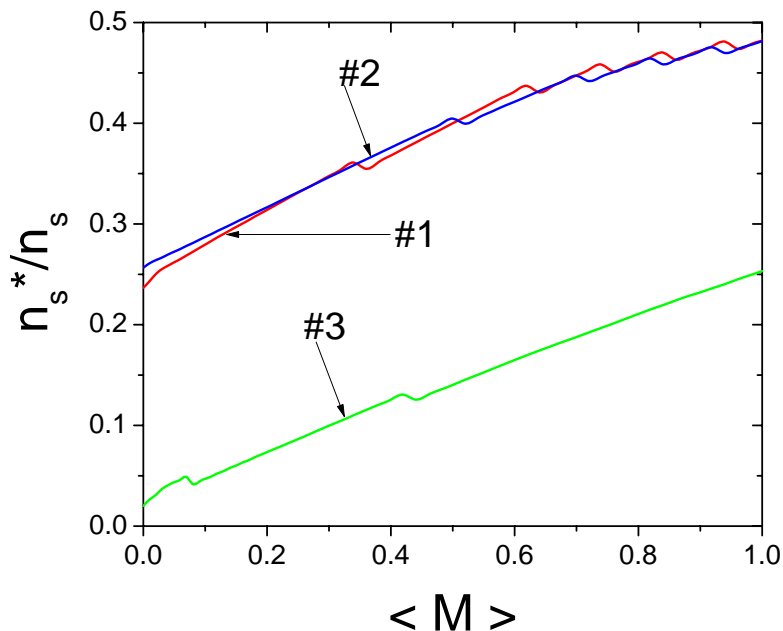


Figura 18: Razão (n_s^*/n_s) em função da magnetização normalizada das amostras. Amostra 1: $n_i = 3,75 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $n_s = 3,0 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Amostra 2: $n_i = 4,5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $n_s = 3,25 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Amostra 3: $n_i = 7,5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ e $n_s = 3,25 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$

A densidade de buracos efetivamente livres (n_s^*) não é igual à densidade de buracos total nas amostras (n_s), mas sim representa apenas uma fração desta e é calculada através da

equação (153). Uma vez obtido o valor da *mobility edge* efetiva pelo processo indicado anteriormente, podemos calcular os valores calculados de n_s^* e construir um gráfico da razão n_s^*/n_s pela magnetização normalizada, mostrado na Fig. 18. Este gráfico nos permitirá inferir previamente que tipo de comportamento cada amostra deve apresentar, o que se confirmará posteriormente com o cálculo da resistividade.

Na Fig. 18, notamos que o valor de n_s^* diminui com a redução da magnetização para as três amostras. Isso demonstra que a densidade de portadores efetivamente livres depende fortemente da magnetização da amostra. No caso da amostra 3, mesmo para a magnetização igual a um, a densidade de portadores estendidos é muito baixa. E para a magnetização igual a zero, n_s^* é praticamente zero, o que indica um comportamento praticamente não metálico. Diferentemente, nas amostras 1 e 2, mesmo para a magnetização igual a zero, os valores de n_s^* são altos, indicando que essas amostras são de fato metálicas. Um outro ponto importante é notar que o valor de n_i é mais do que o dobro do valor de n_s na amostra 3, enquanto que as amostras 1 e 2 são fortemente dopadas, fazendo com que o n_s^* seja alto mesmo para $\langle M \rangle = 0$.

Neste caso, a densidade de buracos em estados localizados será dada pela diferença $n_s - n_s^*$ e a resistividade relativa a este canal de condução será obtida através do processo que depende de excitação térmica e calculada através da equação (159). Portanto, temos dois canais de condução independentes entre si e a resistividade total será dada por

$$\frac{1}{\rho_{total}} = \frac{1}{\rho_e} + \frac{1}{\rho_l}. \quad (162)$$

O gráfico da resistividade total para as mesmas três amostras da Fig. 18 está mostrado na figura abaixo.

As amostras 1 e 2, que possuem um alto valor de n_s^* mesmo para a magnetização praticamente zero, mostram um comportamento semelhante entre si. Possuem uma resistividade sempre menor do que a da amostra 3 e uma pequena lombada para $T \rightarrow T_C$, o que é compatível com o comportamento observado experimentalmente em amostras metálicas.

Por outro lado, a amostra 3 mostra um pico pronunciado para valores de temperaturas próximas à T_C e é praticamente constante para as temperaturas mais baixas. Esta amostra possui uma clara influência da banda de impurezas. De fato, em baixas temperaturas, ela mostra um comportamento tipicamente metálico, com n_s^* dependendo da magnetização e o efeito da temperatura finita faz com que as oscilações de Shubnikov-de Haas desapareçam. Próximo à temperatura Curier, o potencial químico torna-se cada vez mais próximo da *mobility edge*, fazendo aumentar a importância do canal de condução termicamente ativado dos estados localizados.

Para encerrar a nossa discussão sobre o caráter metálico ou não metálico de amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, a Fig. 20 mostra de forma esquemática a fusão da banda de impurezas com a banda de valência no caso de amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ com uma concentração de $x = 0,05$

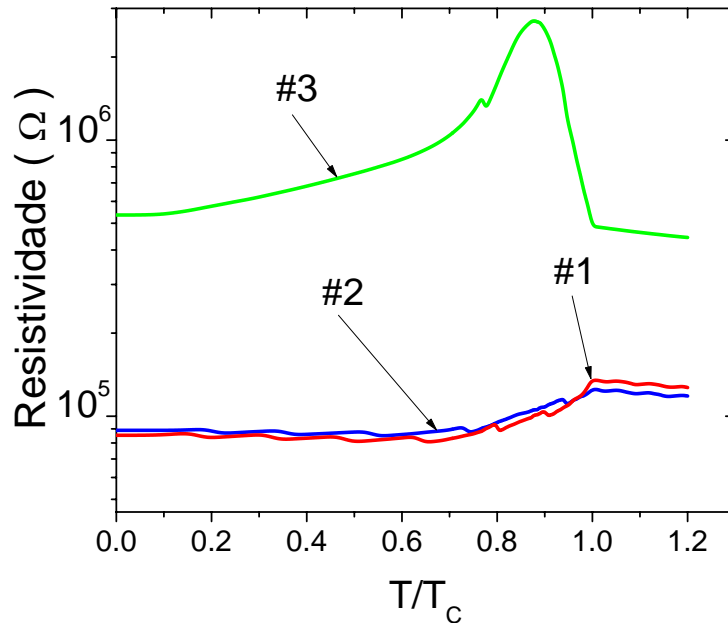


Figura 19: Gráfico da resistividade total em escala logarítmica.

para três valores da magnetização e três situações diferentes no que se refere à classificação das amostras como metálicas ou não metálicas. Na figura, as curvas em azul e vermelho representam, respectivamente, as bandas de buracos spin polarizadas alinhada e antialinhada com a magnetização média. As retas em azul e vermelho representam as *mobilities edge* das bandas alinhadas e antialinhadas, respectivamente e o traço preto corresponde ao valor do nível de Fermi. A primeira linha corresponde à magnetização máxima, isto é, $\langle M \rangle = 1$, a segunda linha a um valor de magnetização intermediário de $\langle M \rangle$ entre os valores mínimo e máximo e a terceira linha representa a situação em que a magnetização média é nula.

Para que a nossa análise se torne mais simples, vamos usar como referência a extremidade esquerda da banda de buracos com spins antialinhados, ou seja, vamos considerar que a banda antialinhada (azul) está fixa por sua extremidade à esquerda.

Na coluna da esquerda e na primeira linha, com a $\langle M \rangle = 1$, as bandas alinhada e antialinhada possuem a maior separação entre si. O nível de Fermi é menor do que os valores de ambas as *mobilities edge*. Isso significa que a amostra é não metálica para $\langle M \rangle = 1$, todos os estados são localizados e apenas a condução por ativação térmica é possível. Quando a magnetização diminui, a separação entre as bandas diminui. Esta é a situação da segunda linha na coluna da esquerda. Observamos agora que a banda alinhada se deslocou para a esquerda. Enquanto a *mobility edge* da banda alinhada se aproxima do valor da *mobility edge* da banda antialinhada, o nível de Fermi também "caminha" para a esquerda, tornando a amostra ainda mais não metálica. Na situação limite em que $\langle M \rangle = 0$ (terceira linha, coluna da esquerda), temos uma única banda com spins alinhados e antialinhados (na cor verde) e um único valor

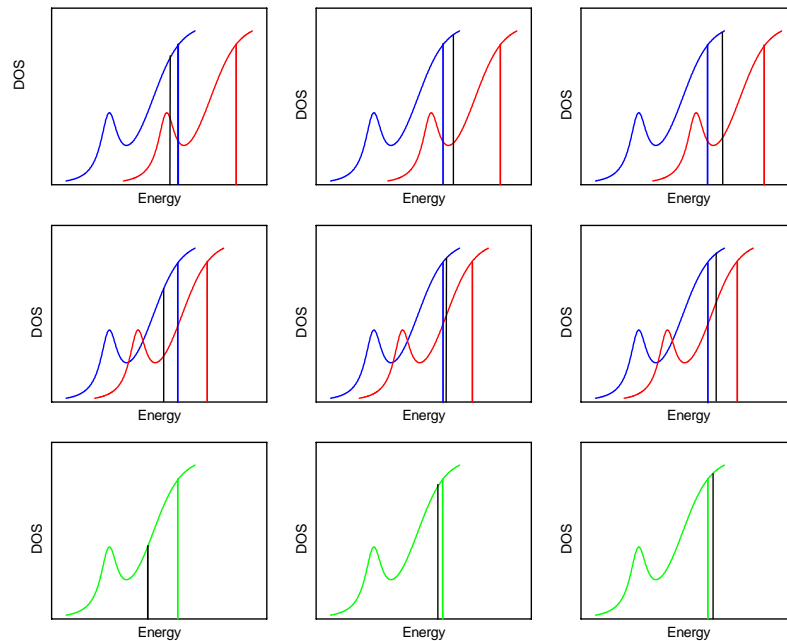


Figura 20: Classificação de amostras como metálicas e não metálicas esquematicamente

para a *mobility edge*. O nível de Fermi caminha ainda mais para a esquerda, sendo então menor do que o valor da *mobility edge*. Logo, neste caso, esta amostra é não metálica para qualquer valor da magnetização média.

No caso mostrado na coluna central, a primeira linha indica o nível de Fermi com um valor tal que ele está entre os valores das *mobilities edge*, mas não é muito maior do que a *mobility edge* da banda antialinhada. Agora, a amostra tem um caráter metálico para $\langle M \rangle = 1$ e o valor de n_s^* tem contribuição apenas da banda antialinhada. Diminuindo a magnetização, a banda alinhada caminha novamente para a esquerda, o mesmo acontecendo com o nível de Fermi. No entanto, o nível de Fermi ainda é maior do que a *mobility edge* da banda antialinhada e, então, a amostra é continua sendo classificada como metálica. Quando a magnetização vai a zero, as bandas alinhada e antialinhada se fundem em uma só e o nível de Fermi passa a estar abaixo do valor da *mobility edge*. Agora, não há mais estados estendidos e a amostra é não metálica. Portanto, neste caso, temos uma transição metal-não metal.

Por fim, a coluna da direita em sua primeira linha mostra o nível de Fermi novamente entre os valores das *mobilities edge* para $\langle M \rangle = 1$. Porém, agora, ele é bem maior do que a *mobility edge* da banda antialinhada e a amostra será metálica, com n_s^* tal que $n_s^* = n_{s\downarrow}^*$. Ao se reduzir a magnetização, a banda alinhada e o nível de Fermi caminham para a esquerda, mas ambos continuam maiores do que a *mobility edge* antialinhada. Novamente, a amostra

será metálica e apenas a banda antialinhada contribui para o valor de n_s^* . Finalmente, quando a magnetização for zero, as bandas alinhada e antialinhada se fundem e a *mobility edge* é menor do que o nível de Fermi e a amostra ainda será metálica. Porém, neste caso, entre os valores da *mobility edge* e o nível de Fermi há tanto buracos com spins antialinhados quanto com spins alinhados. Logo, o valor da densidade de buracos em estados estendidos será dado por $n_s^* = n_{s\downarrow}^* + n_{s\uparrow}^*$. Portanto, a amostra é metálica para qualquer valor da magnetização média.

5 CONCLUSÃO

À guisa de uma conclusão desta pesquisa, retomemos aqui os principais passos nele seguidos. Neste trabalho, tivemos por objetivo investigar o transporte spin polarizado em camadas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x$ que exibem uma fase ferromagnética abaixo de certa temperatura de transição de fase. No âmbito da metodologia, adotamos como procedimento de pesquisa calcular a resistividade considerando que a existência de uma banda de impurezas determina se os estados nas proximidades do nível de Fermi e no nível de Fermi têm natureza estendida ou localizada. Portadores em estados com uma natureza estendida participam do processo de condução por um canal dito "metálico", enquanto que os portadores em estados com natureza localizada participam da condução por um canal que depende explicitamente da temperatura, isto é, é termicamente excitado. O comportamento da resistividade é afetado pela polarização de spin da banda de impurezas, uma vez que a ordem magnética desta última tem como efeito uma separação tipo Zeeman sobre a mobility edge.

Nosso sistema de pesquisa era constituído por uma dupla camada de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ com uma determinada densidade de impurezas (n_i) e uma densidade total de portadores (n_s), separadas entre si por uma camada não magnética de GaAs. A existência de estados estendidos e localizados nas amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$, mostrou que apenas uma parcela da densidade total de portadores era de fato estendida, o que permitiu encontrar uma relação entre a densidade de portadores em estados estendidos (n_s^*) e a densidade de portadores total, (n_s^*/n_s), em função da magnetização. A resistividade total foi então obtida considerando a independência entre os canais de condução metálico e por excitação térmica.

Consideramos duas situações distintas. Na primeira, supomos que todos os estados eram estendidos e portanto somente o canal de condução metálico contribuiu para a resistividade. Neste caso, obtivemos que a resistividade oscila com a diminuição da magnetização para uma determinada faixa de valores de $\langle M \rangle$, à medida que a magnetização foi reduzida, a resistividade aumentou. No segundo caso, há uma contribuição para a resistividade dos dois canais de condução. O resultado é que as oscilações obtidas no caso anterior desaparecem. Das três amostras estudadas, duas apresentaram um comportamento tipicamente metálico, com uma resistividade praticamente constante para temperaturas baixas e uma pequena lombada nas proximidades da temperatura Curie, fato característico em amostras de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ na fase metálica. A terceira amostra exibiu um pico pronunciado para temperaturas próximas a T_C indicando uma forte influência da banda de impurezas e uma equivalência entre os canais de condução.

Por fim, compreendemos que uma pesquisa futura se faz possível. Dentre os caminhos possíveis, citamos considerar esse mesmo sistema da camada dupla de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ incluindo a interação elétron-fônon o que não fizemos nesta tese. De imediato, estamos aplicando o

procedimento aqui relatado ao caso de camadas magnéticas de $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ muito estreitas, com uma largura da ordem de oito ângstrons com uma alta densidade de portadores, caso em que o sistema é totalmente bidimensional.

REFERÊNCIAS

- [1] FURDYNA, J. K. Diluted magnetic semiconductors. **Journal of Applied Physics**, v. 64, n. 4, p. R29-R64, aug. 1988.
- [2] MUNEKATA, H.; OHNO, H.; von MOLNAR, S.; SEGMÜLLER, A.; CHANG, L. L.; ESAKI, L. Diluted Magnetic III-V Semiconductors. **Physical Review Letters**, v. 63, n. 17, p. 1849-1852, oct. 1989.
- [3] OHNO, H.; MUNEKATA, H.; von MOLNAR, S.; CHANG, L. L. New III-V diluted magnetic semiconductors (invited). **Journal of Applied Physics**, v. 69, n. 8, p. 6103-6108, apr. 1991.
- [4] OHNO, H.; MUNEKATA, H.; PENNEY, T.; von MOLNAR, S.; CHANG, L. L. Magnetotransport Properties of p-Type (In,Mn)As Diluted Magnetic III-V Semiconductors. **Physical Review Letters**, v. 68, n. 17, p. 2664-2667, apr. 1992.
- [5] MUNEKATA, H.; ZASLAVSKY, A.; FUMAGALLI, P.; GAMBINO, R. J. Preparation of (In,Mn)As/(Ga,Al)Sb magnetic semiconductor heterostructures and their ferromagnetic characteristics. **Applied Physics Letters**, v. 63, n. 21, p. 2929-2931, nov. 1993.
- [6] OHNO, H.; SHEN, A.; MATSUKURA, F.; OIWA, A. ENDO, A. KATSUMOTO; IYE, Y. (Ga,Mn)As: A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs. **Applied Physics Letters**, v. 69, n. 3, p. 363-365, jul. 1996.
- [7] OIWA, A.; KATSUMOTO, S.; ENDO, A.; HIRASAWA, M.; IYE, Y.; OHNO, H.; MATSUKURA, F.; SHEN, A.; SUGAWARA, Y. Nonmetal-metal-nonmetal transition and large negative magnetoresistance in (Ga,Mn)As/GaAs. **Solid State Communications**, v. 103, n. 4, p. 209-213, apr. 1997.
- [8] VAN ESCH, A.; VAN BOCKSTAL, L.; DE BOECK, J.; VERBANCK, G.; VAN STEENBERGEN, A. S.; WELLMANN, P. J.; GRIETENS, B.; BOGARERTS, R.; HERLACH, F.; BORGHS, G. Interplay between the magnetic and transport properties in the III-V diluted magnetic semiconductor $Ga_{1-x}Mn_xAs$. **Physical Review B**, v. 56, n. 20, p. 13103-13112, nov. 1997.
- [9] CHIBA, D.; TAKAMURA, K.; MATSUKURA, F.; OHNO, H. Effect of low-temperature annealing on (Ga,Mn)As trilayer structures. **Applied Physics Letters**, v. 82, n. 18, p. 3020-3022, may 2003.
- [10] MATSUKURA, F.; OHNO, H.; SHEN, A.; SUGAWARA, Y. Transport properties and origin of ferromagnetism in (Ga,Mn)As. **Physical Review B**, v. 57, n. 4, p. R2037-2040, jan. 1998.
- [11] DIETL, T.; HAURY, A.; MERLE, Y. Free Carrier-induced Ferromagnetism in Structures of Diluted Magnetic Semiconductors. **Physical Review B**, v. 55, n. 6, p. R3347-R3350, feb. 1997.

- [12] DIETL, T.; OHNO, H.; MATSUKURA, F. Hole-mediated Ferromagnetism in Tetrahedrally Coordinated Semiconductors. **Physical Review B**, v. 63, n. 195205, p. 1-21, apr. 2001.
- [13] DURST, A. C.; BHATT, R. N.; WOLFF, P. A. Bound Magnetic Polaron Interactions in Insulating Doped Diluted Magnetic Semiconductors. **Physical Review B**, v. 65, n. 235205, p. 1-10, jun. 2002.
- [14] BOSELLI, M. A.; CUNHA LIMA, I. C. da; GHAZALI, A. Magnetic Order in GaAlAs:Mn Double Quantum Wells. **Journal of Applied Physics**, v. 87, n. 9, p. 6439-6441, may 2000.
- [15] BOSELLI, M. A.; GHAZALI, A.; CUNHA LIMA, I. C. da. Ferromagnetism and canted spin phase in AlAs/Ga_{1-x}Mn_xAs single quantum wells: Monte Carlo simulation. **Physical Review B**, v. 62, n. 13, p. 8895-8901, oct. 2000.
- [16] BOSELLI, M. A.; CUNHA LIMA, I. C. da; GHAZALI, A. Indirect exchange in (Ga,Mn)As bilayers via spin-polarized hole gas: Monte Carlo simulation. **Physical Review B**, v. 68, n. 085319, p. 1-10, aug. 2003.
- [17] GHAZALI, A.; CUNHA LIMA, I. C. da; BOSELLI, M. A. Hole Spin Polarization in GaAsAs:Mn Structures. **Physical Review B**, v. 63, n. 153305, p. 1-4, mar. 2001.
- [18] BOSELLI, M. A.; SILVA, L. L. da; CUNHA LIMA, I. C. da. Magnetic Interaction between GaMnAs layers via spin-polarized quasi-two-dimensional hole gas: Monte Carlo simulation. **Journal of Applied Physics**, v. 93, n. 10, p. 6790-6792, may 2003.
- [19] SILVA, L. L. da.; BOSELLI, M. A.; WANG, X. F.; WEBERSZPIL, J.; MAKLER, S. S.; CUNHA LIMA, I. C. da. Magnetic Multilayers in Ga_{1-x}Mn_xAs/GaAs Structures. **Brazilian Journal of Physics**, v. 32, n. 2A, p. 433-435, apr. 2001.
- [20] GHAZALI, A.; CUNHA LIMA, I. C. da. Hole Spin Polarization in GaAlAs/Ga_{1-x}Mn_xAs Structures. **Brazilian Journal of Physics**, v. 32, n. 2A, p. 430-432, jun. 2002.
- [21] BOSELLI, M. A.; GHAZALI, A.; CUNHA LIMA, I. C. da. Magnetic Ordering in GaAlAs:Mn Heterostructures: Monte Carlo Simulation. **Journal of Magnetism and Magnetic Material**, v. 226-230, p.1362-1364, 2001.
- [22] BOSELLI, M. A.; CUNHA LIMA, I. C. da; LEITE, J. R.; TROPER, A.; GHAZALI, A. Ferromagnetism in the metallic phase of (Ga,Mn)N nanostructures. **Applied Physics Letters**, v. 84, n. 7, p. 1138-1140, feb. 2004.
- [23] BOSELLI, M. A.; CUNHA LIMA, I. C. da. Effect of Spin-polarized Subbands in the Inhomogeneous Hole Gas Providing the Indirect Exchange in GaMnAs Bilayers. **Journal of Magnetism and Magnetic Material**, v. 272-276, p. 351-352, 2004.
- [24] GUMMICH, U.; CUNHA LIMA, I. C. da. Interaction Between Two Magnetic Impurities in a Quantum Well. **Solid State communications**, v. 76, n. 6, p. 831-833, nov. 1990.
- [25] DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. **Applied Physics Letters**, v. 56, n. 7, p. 665-667, dec. 1990.

- [26] CUNHA LIMA, I. C. da.; FERREIRA FILHO, L. G.; TROPER, A. Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida Interaction Between Magnetic Impurities in GaAs/AlAs Quantum Wells Under Strong Electric Fields. **Journal of Applied Physics**, v. 81, n. 8, p. 5308, apr. 1997.
- [27] OHNO, H.; CHIBA, D.; MATSUKURA, F.; OMIYA, T.; ABE, E; DIETL, T.; OHNO, Y. OHTANI, K. Electric-field control of ferromagnetism. **Nature**, v. 408, p. 944-946, dec. 2000.
- [28] NISHITANI, Y.; CHIBA, D.; MATSUKURA, F.; OHNO, H. Electrical Curie temperature modulation In (Ga,Mn)As field-effect transistors with Mn composition from 0.027 to 0.200. **Journal of Applied Physics**, v. 103, n. 07D139, p. 1-3, mar. 2008.
- [29] OESTREICH, M.; HÜBNER, J.; HÄGELE, D.; KLAR, P. J.; HEIMBRODT, W.; RÜHLE; ASHENFORD, D. E.; LUNN, B. Spin injection into semiconductors. **Applied Physics Letters**, v. 74, n. 9, p. 1251-1253, mar. 1999.
- [30] OHNO, Y.; YOUNG, D. K.; BESCHOTEN, B.; MATSUKURA, F.; OHNO, H.; AWSCHALOM, D. D. Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure. **Nature**, v. 402, p. 790-792, dec. 1999.
- [31] KIKKAWA, J. M.; AWSCHALOM, D. D. Lateral drag os spin coherence in galium arsenide. **Nature**, v. 397, p. 139-141, jan. 1999.
- [32] MOTT, N. F.; TWOSE, W. D. The Theory of Impurity Conduction. **Advances in Physics**, v. 10, p. 107-163, apr. 1961.
- [33] MOTT, N. F. Conduction in Non-crystalline Systems. I. Localized Electronic States in Disordered Systems. **Philosophical Magazine**, v. 17, p. 1250-1284, mar. 1968.
- [34] RAYMOND, A. Application of High Magnetic Fields in Semiconductor Physics. In: THE INTERNATIONAL SYMPOSIUM GRENOBLE, France. **Proceedings of the International Symposium Grenoble**, Berlim: Springer-Verlag, 1983, p. 344-355.
- [35] JUNGWIRTH, T.; SINOVA, J.; MacDONALD, A. H.; GALLAGHER, B. L.; NOVÁK, V.; EDMONDS, K. W.; CAMPION, R. P.; FOXON, C. T.; EAVES, L.; OLEJNIK, E.; MASEK, J.; ERIC YANG, S. R.; WUNDERLICH, J.; GOULD, C.; MOLEMKAMP, L. W.; DIETL, T.; OHNO, H. Character of states near the Fermi level in (Ga,Mn)As: Impurity to valence band crossover. **Physical Review B**, v. 76, n. 125206, p. 1-9, sep. 2007.
- [36] CABRAL, E. D.; BOSELLI, M. A.; CUNHA LIMA, A. T. da; GHAZALI, A.; CUNHA LIMA, I. C. da. On the nature of the spin-polarized hole states in a quasi-two-dimensional GaMnAs ferromagnetic layer. **Applied Physics Letters**, v. 90, n. 142118, p. 1-3, apr. 2007.
- [37] CABRAL, E. D.; BOSELLI, M. A.; CUNHA LIMA, A. T. da; GHAZALI, A.; CUNHA LIMA, I. C. da. Impurity bands and the character of the electronic states in ferromagnetic GaMnAs layers. **Applied Physics Letters**, v. 93, n. 112110, p. 1-3, sep. 2008.
- [38] KLAUDER, J. R. The Modification of Electron Energy Levels by Impurity Atoms. **Ann. Phys. (N.Y.)**, v. 14, 43, 1961.

- [39] SERRE, J.; GHAZALI, A. From Band Tailing to Impurity-band Formation and Discussion of Localization in Doped Semiconductors: A Multiple-scattering Approach. **Physical Review B**, v. 28, n. 8, p. 4704-4715, oct. 1983.
- [40] LEI, X. L.; TING, C. S. Green's function to nonlinear electronic transport for an electron-impurity-phonon system in a strong electric field. **Physical Review B**, v. 32, n. 2, p. 1112-1132, sep. 1984.
- [41] LEI, X. L.; BIRMANN, Joseph L.; TING, C. S. Two-dimensional balance equation in nonlinear electronic transport and application to GaAs-GaAsAl/As heterojunctions. **Journal of Applied Physics**, v. 15, n. 6, p. 2270-2279, may 1985.
- [42] LEI, X. L. Absence of noncanonical modification in the balance equation theory of resistivity. **Physics Letters A**, v. 148, n. 8,9, p. 384-388, sep. 1990.
- [43] ZUBAREV, D. N. **Nonequilibrium Statistical Thermodynamics**. New York: Consultant Bureau, 1974.
- [44] MAHAN, G. D. **Many-Particle Physics**. 2ed., New York: Plenum Press, 1981.
- [45] ANDO, T.; FOWLER, A. B.; STERN, F. Electronic Properties of Two-dimensional Systems. **Review of Modern Physics**, v. 54, n. 2, p. 437-672, apr. 1982.
- [46] NAZMUL, A. M.; AMEMIYA, T.; SHUTO, Y.; SUGAHARA, S.; TANAKA, M. High Temperature Ferromagnetism in GaAs-Based Heterostructures with Mn δ Doping. **Physical Review Letters**, v. 95, n. 017201, p. 1-4, jul. 2005.
- [47] CABRAL, Erika Dias. **Estudos de propriedades elétrica e magnética em camadas de GaMnAs para uso em spintrônica**. 2009. 60f. Tese (Doutorado em Física) - Instituto de Física Armando Dias Tavares, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.

Livros Grátis

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

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

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

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

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