MARIO JAIRO CAZECA

SBI-IFUSP

305M810T0509

OSCILAÇÕES DO NÍVEL DE FERMI DO BISMUTO
NO LIMITE DE BAIXOS NÚMEROS QUÂNTICOS

*Tese de Mestrado apresentada
ao Instituto de Física da
USP, como parte dos requi-
sitos necessários para a
obtenção do título de
Mestre em Ciências.*

SÃO PAULO

1 9 8 0

AGRADECIMENTOS

Desejamos expressar aqui nossos sinceros agradecimentos a todos, que tornaram possível a realização desse trabalho, e em especial às seguintes pessoas:

Ao Prof. Dr. José Rezende Pereira Neto, pela suges-
tão e orientação desse trabalho.

Ao Prof. Dr. José Manuel de Vasconcelos Martins, pe
la sua orientação no laboratório, sem a qual não seria possível
obter os dados necessários a esse trabalho.

Ao Prof. Dr. Angelo Piccini, pelo emprestimo do cristal
de bismuto.

A Profa. Dra. Cecilia de A.F. Pimentel, do Departa-
mento de Cristalografia pela orientação do cristal.

Aos colegas Lucinda M. de Fátima Rodrigues, José Car-
los Sartorelli e Kazunori Watari, pelas proveitosas discussões
durante as diferentes fases desse trabalho.

Ao Sr. Oswald Cappello e sua equipe, pelo nitrogênio
e o hélio líquido que nos foram fornecidos.

Ao Sr. Francisco de Paula Oliveira e sua equipe, pe
la construção do porta-amostra.

A Sra. Marli César Paternostro, pelo trabalho de da-
tilografia.

E a instituição FAPESP pela bolsa de aperfeiçoamento
concedida.

R_E_S_U_M_O

Realizamos medidas das oscilações do nível de Fermi do bismuto observando as variações do potencial de contato em um monocristal. As medidas foram feitas em diferentes temperaturas, e com o campo magnético variando de 0 a ~ 20 KG, na direção binária dos eixos cristalográficos.

As oscilações observadas nas curvas experimentais resultam da passagem dos níveis de Landau dos elétrons de massa efetiva leve pelo nível de Fermi. Oscilações menores também foram observadas num intervalo de 8 a ~ 11 KG, que identificamos como sendo provenientes da passagem dos níveis de Landau dos buracos pelo nível de Fermi.

A partir dos dados obtidos da curva experimental e usando o modelo V.P.D.⁽⁸⁾, ajustamos uma curva teórica a partir da qual determinamos os parâmetros que caracterizam esse modelo.

A_B_S_T_R_A_C_T

We have measured the Fermi level oscillations of bismuth by observing the contact potencial variations of a monocrystal. The measurements were made at different temperatures, with applied magnetic field parallel to the binary direction of the crystallographic axes in the range $0 \sim 20$ KG.

The oscillations obtained from the experimental curves are the results of the passage of the Landau levels of the low effective mass electrons through the Fermi level. Small oscillations have also been observed within the range $8 \sim 11$ KG which we identify as being due to the passage of the Landau levels of the holes through the Fermi level.

From the data obtained from the experimental curve and by using the model V.P.D.⁽⁸⁾, we fitted a theoretical curve from which we have determined the parameters that characterize this model.

I N D I C E

	pág.
INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO I - TEORIA	2
I- a) Considerações a respeito do bismuto ...	3
I- b) Resumo dos modelos que precederam o modelo V.P.D.	7
I- c) Modelo V.P.D.	14
CAPÍTULO II - TÉCNICAS EXPERIMENTAIS	34
II- a) Preparação da amostra	34
II- b) Método de Medida	35
II- c) Porta Amostra	41
II- d) Sistema Criogênico	41
II- e) Campo Magnético	44
II- f) Parte eletrônica	45
CAPÍTULO III - MEDIDAS E ANÁLISE DOS RESULTADOS	48
III a) Relato sobre o Programa Computacional .	48
III b) Apresentação e Comentário sobre os Resultados obtidos	50
CONCLUSÕES	73
APÊNDICE 1	75
APÊNDICE 2	77
REFERÊNCIAS	78

INTRODUÇÃO

O bismuto é um material muito estudado devido a sua baixa densidade eletrônica (10^{18} cm^{-3}), e pequena massa efetiva dos elétrons. Por essa razão o efeito de Haas-van Alphen é muito pronunciado. Esse efeito nos dá informações sobre as faixas de energia nas proximidades da superfície de Fermi.

O objetivo desse trabalho é investigar as oscilações do nível de Fermi, produzidas por um monocristal de bismuto, quando submetemos o mesmo a altos campos magnéticos. Em posse desses dados investigamos o modelo desenvolvido por V.P.D.⁽⁸⁾, e encontramos os parâmetros que caracterizam esse modelo.

O modelo já foi testado para experimentos de magneto-reflexão, mas nossa intenção é testar o mesmo para os dados obtidos pelo método desenvolvido por Piccini⁽¹¹⁾. Uma vez que este método é simples e não requer uma aparelhagem muito sofisticada, estando portanto nosso laboratório capacitado para realizá-la.

Nós procuramos detalhar bem o trabalho e o dividimos em três partes. No primeiro capítulo nós fizemos um resumo dos modelos que serviram de base para o desenvolvimento do modelo V.P.D.⁽⁸⁾. Em seguida apresentamos de maneira bem detalhada esse modelo.

No segundo capítulo nós descrevemos a preparação da amostra, os equipamentos necessários para efetuar as medidas, e o método de medida que foi utilizado.

No terceiro capítulo nós apresentamos os gráficos com suas respectivas tabelas, os dados conseguidos das curvas teóricas ajustadas e analisamos os mesmos.

CAPÍTULO I

TEORIA

a) Considerações a respeito do bismuto

O bismuto é um elemento do grupo V. É um semimetal possuindo densidade de portadores da ordem de 10^{18} cm^{-3} , ocupando portanto uma fração muito pequena da Zona de Brillouin (Z. B.). Ele possui uma estrutura cristalina romboedral A7. Esta estrutura pode ser gerada de uma rede cúbica simples, por duas pequenas distorções.

Vamos considerar duas redes cúbicas de face centrada se interpenetrando. Para criar a estrutura A7 primeiro uma sub-rede fcc é transladada em relação a outra ao longo da diagonal do cubo (ver figura 1). Uma tração é feita também ao longo dessa diagonal.

A diagonal do corpo na qual essas distorções estão associadas é o eixo trigonal da estrutura A7. Há, portanto dois átomos por célula unitária. Embora as distorções sejam pequenas, os elementos de simetria na estrutura A7 são reduzidos consideravelmente, nós temos para o eixo trigonal três eixos binários, cada um distando do outro de 120° e perpendiculares ao eixo trigonal, e tres planos de espelho cada um normal ao eixo binário.

Como vimos, a estrutura A7 pode ser vista como se fosse originada de distorções em uma rede cúbica. Também a Z.B. pode ser a Z.B. da fcc por uma compressão ao longo do eixo trigonal. A compressão é ao longo da direção trigonal RT figura 2. Os elementos de simetria são os mesmos da rede do cristal. A face hexagonal que contém T são hexágonos regulares, mas as ou-

tras seis faces hexagonais não são regulares, e o que era antes quadrado após a compressão tornou-se retângulo.

A superfície de Fermi é constituída por tres pacotes de elétrons e um pacote de buracos, os elétrons estão localizados no ponto L da Z.B. e os buracos no ponto T figura 2.

Esses pacotes possuem a forma de elipsóides de revolução. O eixo principal de cada elipsóide de elétrons está a 120° dos correspondentes eixos principais dos outros dois elipsóides. O eixo principal do elipsóide forma um ângulo de $\sim 6^\circ$ com o eixo bissetriz (ver figura 3). O nível de Fermi é determinado quando o número de elétrons e buracos se igualam.

Vamos identificar os elétrons em pesados e leves, conforme a sua massa efetiva de cíclotron seja grande ou pequena respectivamente.* Quando fôr aplicado um campo magnético ao longo na direção dos eixos cristalográficos, por exemplo, teremos dois pacotes com elétrons leves e um pacote com elétrons pesados. Para o campo magnético na direção bissetriz dos eixos cristalográficos teremos um pacote com elétrons leves e dois pacotes com elétrons pesados. Quando o campo magnético for aplicado na direção do eixo cristalográfico trigonal teremos três pacotes de elétrons equivalentes e pesados, figuras 4, 5 e 6 respectivamente.

* As massas efetivas do cíclotron são relacionadas com a área pela fórmula ⁽¹⁾

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{\partial A}{\partial \epsilon} \quad \text{I-1}$$

onde A é a área encerrada pela órbita dos elétrons, num plano perpendicular ao campo magnético.

FIGURA 1 - Estrutura A7 a partir da estrutura cúbica simples

FIGURA 2 - Zona de Brillouin para a estrutura A7.

FIGURA 3 - Relação entre os eixos cristalográficos do bismuto (binário, bissetor e trigonal) e os eixos dos elipsóides dos elétrons.

Figura 4 - Campo magnético na direção do eixo binário. Temos dois elipsóides de massa efetiva de ciclotron pesa

FIGURA 5 - Campo magnético na direção do eixo bissetriz. Temos um elipsóide de massa efetiva de cíclotron pesado e dois elipsóides de massa efetiva de cíclotron leve.

FIGURA 6 - Campo magnético na direção do eixo trigonal. Os três elipsóides possuem massa efetiva de cíclotron pesa-

FIGURA 7 - Zona de Brillouin do bismuto inscrita no romboedro, e seus eixos cristalográficos trigonal, binário e bissetriz.

b) Resumo dos modelos que precederam o modelo V.P.D⁽⁸⁾

O modelo que nós usamos para analisar nossos dados obtidos de um experimento do tipo de Haas-van Alphen, no qual observamos as oscilações do nível de Fermi, foi desenvolvido por Vecchi, Pereira e Dresselhaus⁽⁸⁾. Faremos a seguir um breve resumo de alguns modelos que serviram como base para o seu desenvolvimento.

Modelo S.B.R.⁽²⁾

Smith, Baraff e Rowell para analisar os dados obti-

dos de um experimento do tipo Shubnikov-de Haas, basearam-se no modelo não parabólico para as faixas dos elétrons, incluindo a possibilidade de desdobramento (splitting), dos níveis de energia para os elétrons e buracos devido a diferentes spins.

O modelo consiste de um conjunto de três elipsóides para os elétrons, e um elipsóide para os buracos. Para os elétrons a energia na ausência de campo magnético é dada por:

$$E(1 + \frac{E}{E_g}) = \frac{\vec{p} \cdot \vec{\alpha} \cdot \vec{p}}{2m_0} \quad \text{I-2}$$

aqui E_g é a energia do "gap" entre duas faixas, $\vec{p}$ é o momento na ausência de campo magnético e $\vec{\alpha}^{-1} = \vec{m}^*$, é o tensor de massa efetiva em unidade de massa de elétron livre.

Para os buracos a energia na ausência de campo magnético é dada por

$$E_0 - E = \frac{1}{2m_0} \left(\frac{(p_1^2 + p_2^2)}{M_1} + \frac{p_3^2}{M_3} \right) \quad \text{I-3}$$

onde E_0 é a energia do topo da faixa dos buracos relativa ao fundo da faixa dos elétrons conforme figura 8, onde L e T são pontos da Zona de Brillouin (Z.B.). E o correspondente tensor do inverso da massa efetiva é dado por

$$\vec{\alpha}_b = \begin{pmatrix} \frac{1}{M_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{M_1} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{M_3} \end{pmatrix} \quad \text{I-4}$$

FIGURA 8 - Esquema de faixas para os elétrons (ponto L) e buracos (ponto T) na Z.B..

A quantidade de portadores em cada elipsóide é determinada pela energia do nível de Fermi (E_F), e é proporcional ao volume desse elipsóide. A energia de Fermi é achada quando o número de buracos for igual ao número de elétrons.

Na presença de um campo magnético na direção z os auto estados de elétrons são rotulados pelos números quânticos n , P_z e $s = \pm 1$

$$E \left(1 + \frac{E}{E_g} \right) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar e H}{m_c^* c} + \frac{P_z^2}{2m_z^*} \pm \frac{1}{2} g \beta_0 H \quad \text{I-5}$$

onde:

$$m_z^* = \hat{h} \cdot \vec{m}^* \cdot \hat{h} \quad \text{I-6}$$

$\hat{h}$ é o vetor unitário na direção do campo magnético.

$$m_C^* = \left(\frac{\det m^*}{m_Z^*} \right)^{1/2} \quad \text{I-7}$$

$$g^2 = 4 m_0^2 \left(\frac{\hat{h} \cdot \overleftrightarrow{m}_s \cdot \hat{h}}{\det \overleftrightarrow{m}_s} \right) \quad \text{I-8}$$

m_0 é a massa do elétron livre e $\overleftrightarrow{m}_s$ é o tensor de massa do spin.

O número de estados com energias menores que E_F para os três elipsóides de elétrons é dado por

$$N_i^e(E_F) = \left(\frac{2^{3/2} e H}{h^2 c} \right) m_Z^{1/2} \sum_{n,s} \left(E_F^* - E(n,s) \right)^{1/2} \quad \text{I-9}$$

onde

$$E_F^* = E_F \left(1 + \frac{E_F}{E_g} \right) \quad \text{I-10}$$

$$E(n,s) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{\hbar e H}{m_C^* c} \quad \text{I-11}$$

e para o elipsóide de buraco é dado por:

$$N_b(E_F) = \left(\frac{2^{3/2} e H}{h^2 c} \right) (m_Z)^{1/2} \sum_{n,s} \left((E_0 - E_F) - E(n,s) \right)^{1/2} \quad \text{I-12}$$

A somatória se dá para todos os valores de n e s para os

quais o radicando é positivo. A neutralidade de carga exige que

$$\sum_{i=1}^3 N_i^e (E_F) = N_b (E_F) \quad \text{I-13}$$

e a solução dessa equação nos dá as oscilações do nível de Fermi.

O modelo S.B.R. apresenta dois inconvenientes. Um deles é a introdução da massa efetiva de spin sem uma justificação teórica, e o outro refere-se ao último nível de Landau $n=0$ e $s = \frac{1}{2}$, o qual envolve uma raiz quadrada de número negativo para altos campos magnéticos.

Modelo do Wolff⁽³⁾

P.A. Wolff construiu seu modelo partindo do modelo de duas faixas desenvolvido por Cohen e Blount⁽⁴⁾. Ele utiliza um conjunto de quatro faixas degeneradas duas a duas devido a presença do spin. As faixas têm seus extremos num ponto $k_0 \neq 0$ na Z.B.. As equações resultantes são similares a da teoria de Dirac⁽⁵⁾, e os elementos de matriz que são negligenciados no modelo de duas faixas, quando tratados relativisticamente desempenham um papel importante em sólidos.

As funções de onda para um elétron em k perto de k_0 na Z.B., são escritos em termos de quatro funções periódicas para o fundo da faixa

$$u(k, r) = \sum_{i=1}^4 (\psi_K^{(i)} u_i) \quad \text{I-14}$$

onde u_i são funções do fundo da faixa.

A substituição dessas funções na equação de Schrodinger resulta em quatro equações acopladas para os coeficientes de expansão $\psi_K^{(i)}$ ⁽³⁾. No Hamiltoniano resultante aparecem termos que podem ser identificados na teoria de Dirac ⁽⁵⁾.

O Hamiltoniano de Wolff não considera o efeito de outras faixas fora do modelo de duas faixas degeneradas e podemos escrevê-lo da seguinte forma

$$H_W = \begin{pmatrix} \overset{\leftrightarrow}{1} \epsilon & i\sqrt{\epsilon} \vec{K} \cdot \vec{\sigma} \\ -i\sqrt{\epsilon} \vec{K} \cdot \vec{\sigma} & -\overset{\leftrightarrow}{1} \epsilon \end{pmatrix} \quad \text{I-15}$$

onde

$\vec{\sigma}$ são as matrizes de spin de Pauli

$\vec{K}$ é um operador que satisfaz a relação $\vec{K} \times \vec{K} = i\beta^* H i_3$

i_3 é o vetor unitário na direção do campo magnético aplicado

β^* é um parâmetro ⁽⁶⁾

A função de onda encontrada por Wolff que satisfaz a equação secular

$$H_W \psi = E \psi \quad \text{I-16}$$

vem da função de onda de quatro componentes, onde duas se referem a faixa de condução e duas a faixa de valência, e são respectivamente ⁽⁶⁾

$$\psi_{n,s}^+(k_3) = \left[\frac{E_{n,s}(k_3) + \epsilon}{2E_{n,s}(k_3)} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} \ell(s)\phi_n(k_3) \\ \frac{-i\sqrt{\epsilon}}{E_{n,s}(k_3) + \epsilon} \ell'(s)\phi_n(k_3) \end{pmatrix}$$

$$\psi_{n,s}^-(k_3) = \left[\frac{E_{n,s}(k_3) + \epsilon}{2E_{n,s}(k_3)} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} \frac{-i\sqrt{\epsilon}}{E_{n,s}(k_3) + \epsilon} \ell'(s)\phi_n(k_3) \\ \ell(s)\phi_n(k_3) \end{pmatrix}$$

I-18

essas funções de onda são definidas mais detalhadamente na seção c.

Modelo de Baraff⁽⁷⁾

O modelo desenvolvido por G.A. Baraff tem muita coisa em comum com o modelo de Wolff⁽³⁾, as diferenças básicas são que Baraff considera outras faixas fora do modelo de duas faixas degeneradas, atuando neste como uma perturbação, e outro ponto que é muito importante refere-se aos níveis $n=0$ e $s=-1$ das faixas de valência e condução. Esses níveis podem se aproximar e depois se repelirem mutuamente, ou podem somente se repelir dependendo da direção do campo magnético.

FIGURA 9 - Níveis de energia $j=0$ para as faixas de valência e condução em função do campo magnético.

Na presença de um campo magnético, o Hamiltoniano de Baraff não pode ser diagonalizado exatamente, e os níveis de energias de Landau para perturbação em primeira ordem são achados através de

$$H_B = H_W + H_p \quad \text{I-19}$$

onde H_W é o Hamiltoniano de Wolff e H_p é o Hamiltoniano de perturbação, que é dada por

$$H_p = \begin{pmatrix} \vec{k} \cdot \vec{B}^c \cdot \vec{k} + \vec{L}^c \cdot \vec{\sigma} & \vec{0} \\ \vec{0} & \vec{k} \cdot \vec{B}^v \cdot \vec{k} + \vec{L}^v \cdot \vec{\sigma} \end{pmatrix} \quad \text{I-20}$$

onde $\vec{B}^{c,v}$ e $\vec{L}^{c,v}$ descrevem essencialmente a interação entre as faixas de fora do modelo de duas faixas degenerado com as faixas deste, e $\vec{\sigma}$ são as matrizes de spin de Pauli.

A função de onda que resolve a equação secular, são as mesmas que Wolff usou em seu modelo.

Mas o modelo de Baraff em sua forma original, é difícil de ser utilizado, devido a quantidade de parâmetros que possui. Mesmo quando $k=0$ a expressão para a energia torna-se muito complicada. O modelo V.P.D.⁽⁸⁾ que nós utilizamos, e que passaremos a descrever em seguida, resultou de simplificações introduzidas no modelo de Baraff fundamentadas em dados experimentais.

c) Modelo V.P.D.⁽⁸⁾

A relação de dispersão na energia para elétrons no bis

muta pode ser aproximada a duas faixas acopladas no ponto L da Z.B.. O modelo de duas faixas vem da teoria de perturbação $\vec{k} \cdot \vec{p}$ com relação de dispersão dada por

$$E^{\pm}(\vec{k}) = \pm \frac{1}{2} \left(E_g^2 + 2 E_g \hbar^2 \frac{\vec{k} \cdot \vec{\alpha} \cdot \vec{k}}{m} \right)^{1/2} \quad \text{I-21}$$

onde $\vec{\alpha}$ é um tensor adimensionado e nos dá o inverso da massa efetiva

$$\alpha_{ij} = (m^*)_{ij}^{-1} = \frac{2 \langle c | p_i | v \rangle \langle v | p_j | c \rangle}{E_g m} \quad \text{I-22}$$

onde v e c referem-se as faixas de valência (-) e condução (+), as quais são separadas pela energia E_g . E $\vec{\alpha}$ por argumentos de simetria⁽⁹⁾ assume a seguinte forma

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ 0 & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \quad \text{I-23}$$

1, 2 e 3 referem-se as direções binárias, bissetriz e trigonal dos eixos cristalográficos respectivamente.

As massas efetivas de cíclotron dos outros dois elipsoides $\vec{\alpha}$ (120°) são obtidos fazendo uma rotação de 120° e 240° entorno do eixo trigonal.

O modelo de duas faixas consiste de um par de níveis duplamente degenerados, tendo suas extremidades num ponto $k_0 \neq 0$ na Z.B..

FIGURA 10 - Modelo de duas faixas

Vamos chamar o hamiltoniano desse sistema de H_0 (6)
(isto é o hamiltoniano de Wolff) que é dado por:

$$H_0 = \begin{pmatrix} \epsilon \vec{1} & i \sqrt{\epsilon} K_n \vec{\sigma}_n \\ -i \sqrt{\epsilon} K_n \vec{\sigma}_n & -\epsilon \vec{1} \end{pmatrix} \quad \text{I-24}$$

onde $\epsilon = \frac{E_g}{2}$, σ_n são as três matrizes de Pauli para spin $\frac{1}{2}$ e nós fazemos uma somatória sobre as três componentes n , $\vec{1}$ é a matriz unitária (2×2) . As componentes de K_n são dadas por⁽⁶⁾

$$K_1 = \frac{\hbar}{\sqrt{m_c^*}} \left(k_1 + \frac{e}{2\hbar c} x_2 H \right) = \frac{\hbar}{\sqrt{m_c^*}} \tilde{k}_1 \quad \text{I-25a}$$

$$K_2 = \frac{\hbar}{\sqrt{m_c^*}} \left(k_2 - \frac{e}{2\hbar c} x_1 H \right) = \frac{\hbar}{\sqrt{m_c^*}} \tilde{k}_2 \quad \text{I-25b}$$

$$K_3 = \frac{\hbar}{\sqrt{m_H^*}} k_3 \quad \text{I-25c}$$

Num campo magnético $\vec{K}$ satisfaz a seguinte relação

$$\vec{K} \times \vec{K} = i \beta^* \vec{H} \quad \text{I-26}$$

onde

$$\beta^* = \frac{|e|\hbar}{m_c^* c} \quad \text{I-27}$$

m_c^* é a massa efetiva de cíclotron dada por

$$m_c^* = \left(\frac{\det \overleftrightarrow{m}^*}{m_H^*} \right)^{1/2} m^{3/2} \quad \text{I-28}$$

m_H^* é a massa efetiva na direção do campo magnético

$$m_H^* = (\hat{h} \cdot \overleftrightarrow{m}^* \cdot \hat{h}) m \quad \text{I-29}$$

$\hat{h}$ é o versor na direção do campo magnético

m é a massa do elétron livre.

O hamiltoniano da eq. I-24 pode ser resolvido exatamente quando na presença de um campo magnético externo.

A solução da equação secular para a função envelope
será

$$H_0 \psi = E \psi \quad \text{I-30}$$

onde a função ψ é composta de quatro componentes⁽⁸⁾

$$\psi_{n,s}^+(k_3) = \sqrt{\frac{E_{n,s}(k_3) + \epsilon}{2E_{n,s}(k_3)}} \begin{pmatrix} \ell(s) \phi_n(k_3) \\ \frac{-i\sqrt{\epsilon}}{E_{n,s}(k_3) + \epsilon} \ell'(s) \phi_n(k_3) \end{pmatrix}$$

I-31a

para a faixa de condução

$$\psi_{n,s}^-(k_3) = \sqrt{\frac{E_{n,s}(k_3) + \epsilon}{2E_{n,s}(k_3)}} \begin{pmatrix} \frac{-i\sqrt{\epsilon}}{E_{n,s}(k_3) + \epsilon} \ell'(s) \phi_n(k_3) \\ \ell(s) \phi_n(k_3) \end{pmatrix}$$

I-31b

para a faixa de valência, onde $\phi_n(k_3)$ é a função de onda do oscilador harmônico e $\ell(s)$ são spinores

$$\ell\left(\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{I-32a}$$

$$\ell\left(-\frac{1}{2}\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{I-32b}$$

$$\ell' \left(\frac{1}{2} \right) = \begin{pmatrix} \frac{\hbar k_3}{\sqrt{m_H^*}} \\ \sqrt{2 \beta^* H} \quad a \end{pmatrix} \quad \text{I-32c}$$

$$\ell' \left(-\frac{1}{2} \right) = \begin{pmatrix} \sqrt{2 \beta^* H} \quad a^+ \\ -\frac{\hbar k_3}{\sqrt{m_H^*}} \end{pmatrix} \quad \text{I-32d}$$

aqui a é operador de destruição e a^+ é o operador de criação.

O auto valor resultante é dado por

$$E_{n,s}^{\pm}(K_3) = \pm \left(\epsilon^2 + 2\epsilon\beta^* H \left(n + \frac{1}{2} - s \right) + \epsilon K_3^2 \right)^{1/2} \quad \text{I-33}$$

onde $n = 0, 1, 2, 3 \dots$ e $s = \pm \frac{1}{2}$

o campo magnético externo está na direção 3, os sinais (+) e (-) referem-se as faixas de condução e valência respectivamente, e a energia cinética ao longo da direção do campo magnético é dada por um termo envolvendo K_3 .

Vamos introduzir um novo número quântico j dado por

$$j = n + \frac{1}{2} - s \quad \text{I-34}$$

e reescrever a equação I-33 da seguinte forma

$$E_j^{\pm}(K_3) = \pm \left(\epsilon^2 + 2\epsilon\beta^* H j + \epsilon K_3^2 \right)^{1/2} \quad \text{I-35}$$

O modelo acima considera um pequeno número de estados, pontos de alta simetria, acoplados entre si. Vamos denominar esse conjunto de quase degenerado (CQD).

Baraff⁽⁷⁾ modificou o modelo de duas faixas de Wolff⁽³⁾ incluindo o efeito de outras faixas fora do conjunto CQD como uma perturbação no CQD. O hamiltoniano de Baraff é dado por

$$H_B = H_0 + H_p \quad \text{I-36}$$

onde

$$H_p = \sum_{n=1}^3 \left[\begin{array}{cc} (\vec{k} \cdot \vec{B}^c \cdot \vec{k}) \vec{1} + L_n^c \vec{\sigma}_n & \vec{0} \\ \vec{0} & (\vec{k} \cdot \vec{B}^v \cdot \vec{k}) \vec{1} + L_n^v \vec{\sigma}_n \end{array} \right]$$

I-37

é o hamiltoniano de perturbação do sistema, $\vec{0}$ é a matriz nula (2×2) , a somatória é feita sobre as três componentes n. $\vec{B}^{c,v}$ ⁽⁶⁾ é um tensor adimensional que independe de H.

$$\vec{k} \cdot \vec{B}^{c,v} \cdot \vec{k} = b_1^{c,v} \frac{\hbar^2}{m_c^*} (\tilde{k}_1 + \tilde{k}_2) + b_3^{c,v} \frac{\hbar^2 \tilde{k}_3}{m_H^*} \quad \text{I-38}$$

mas

$$b_3^{c,v} = \hat{h} \cdot \vec{B}^{c,v} \cdot \hat{h} \quad \text{I-39}$$

$$b_1^{c,v} = \left(\frac{\det \vec{B}^{c,v}}{b_3^{c,v}} \right)^{1/2} \quad \text{I-40.}$$

O termo $\vec{L}^{c,v} \cdot \vec{\sigma}$ vem da interação com as faixas fora do modelo de duas faixas

$$\vec{L}^{c,v} = \beta^* H \vec{L}^{c,v} \quad \text{I-41}$$

que depende linearmente de H , aqui $\vec{L}^{c,v}$ são vetores adimensionais.

A solução de CQD em $\vec{k}_0$ será dada por u_ℓ com energia E_ℓ , e o conjunto de faixas fora (CFF) do CQD será dado por u_v com energia E_v . A função de onda completa que resolve a equação secular será

$$\phi_{\vec{k}}^j(\vec{r}) = \sum_{\text{CQD}} \psi_\ell^j(\vec{r}, \vec{k}) u_\ell + \sum_{\text{CFF}} \psi_v^j(\vec{r}, \vec{k}) u_v \quad \text{I-42}$$

onde

$$\psi_\ell^j(\vec{r}, \vec{k}) = e^{i(\vec{k}-\vec{k}_0) \cdot \vec{r}} a_\ell^j(\vec{k}) \quad \text{I-43}$$

ej se refere a faixa considerada.

As auto funções $\phi_{\vec{k}}^j(\vec{r})$ são soluções da equação

$$H \phi_{\vec{k}}^j(\vec{r}) = E_j(k) \phi_{\vec{k}}^j(\vec{r}) \quad \text{I-44}$$

onde

$$H = H_{\vec{k}=\vec{k}_0} + H_{\vec{k} \neq \vec{k}_0} \quad \text{I-45}$$

e $H_{\vec{k}=\vec{k}_0}$ é o hamiltoniano de um elétron (H_0) e $H_{\vec{k} \neq \vec{k}_0}$ é dada por

$$H_{\vec{k} \neq \vec{k}_0} = \frac{\hbar^2 (k - k_0)^2}{2m} + \vec{v} \cdot \hbar (\vec{k} - \vec{k}_0) \quad \text{I-46}$$

e $\vec{v}$ é o operador velocidade dado por

$$\vec{v} = \frac{\vec{p}}{m} + \frac{\hbar^2}{2(m_c)^2} \vec{\sigma} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \quad \text{I-47}$$

na presença de um campo magnético externo o operador $\vec{p}$ será trocado nas equações acima por

$$\vec{\pi} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \quad \text{I-48}$$

onde $\vec{A}$ é o potencial vetor do campo magnético

$$\vec{H} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \quad \text{I-49}$$

Na figura abaixo vamos esquematizar os níveis de energia magnética para o modelo de duas faixas, e o modelo modificado de duas faixas.

No modelo de duas faixas todas exceto a primeira faixa são duplamente degeneradas. Vamos dividir os níveis de Landau em dois conjuntos $j=0$ e $j \neq 0$, devido as características diferentes que ambos os conjuntos apresentam quando submetidos a um campo magnético.

M. duas faixas (Wolff)

M. duas faixas modificado (Baraff)

aqui o número entre parênteses nos dá a degenerescência do nível

FIGURA 11 - Esquema dos níveis de energia magnética para o modelo de duas faixas e o modelo de duas faixas modificado por Baraff.

a) Correção nos níveis de Landau $j \neq 0$

No modelo de duas faixas todos os níveis $j \neq 0$ são degenerados, isto é $(n, \frac{1}{2})$ e $(n-1, -\frac{1}{2})$ têm a mesma energia conforme Fig. 11.

Devido a introdução do hamiltoniano de perturbação H_p , vamos fazer uso da teoria de perturbação em primeira ordem, para calcular a separação dos níveis de energia para cada spin produzida por H_p em cada nível $j \neq 0$ nas faixas de condução e valência. A matriz (2×2) para H_p é dada por

$$\begin{pmatrix} \langle j, \frac{1}{2} | H_p | j, \frac{1}{2} \rangle & \langle j, \frac{1}{2} | H_p | j, -\frac{1}{2} \rangle \\ \langle j, -\frac{1}{2} | H_p | j, \frac{1}{2} \rangle & \langle j, -\frac{1}{2} | H_p | j, -\frac{1}{2} \rangle \end{pmatrix}$$

I-50

Os elementos da matriz acima para a faixa de condução são

$$\langle j, \frac{1}{2} | H_p | j, \frac{1}{2} \rangle^c = \frac{E_j + \epsilon}{2E_j} \beta^* H \left[2b_1^c j + (b_1^c + L_3^c) \right] +$$

$$\frac{E_j - \epsilon}{2E_j} \beta^* H \left[2b_1^v j - (b_1^v + L_3^v) \right] \quad \text{I-51a}$$

$$\langle j, -\frac{1}{2} | H_p | j, -\frac{1}{2} \rangle^c = \frac{E_j + \epsilon}{2E_j} \beta^* H \left[2b_1^c j - (b_1^c - L_3^c) \right] +$$

$$\frac{E_j - \epsilon}{2E_j} \beta^* H \left[2b_1^v j + (b_1^v + L_3^v) \right]$$

I-51b

$$\langle j, \frac{1}{2} | H_p | j, -\frac{1}{2} \rangle^c = \left(\frac{2\epsilon(E_j - \epsilon)}{E_j + \epsilon} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar k_3}{\sqrt{2m_H^*}} \right) .$$

$$\frac{\beta^* H}{E_j} (b_1^V + L_3^V) \quad \text{I-51c}$$

e para a faixa de valência

$$\langle j, \frac{1}{2} | H_p | j, \frac{1}{2} \rangle^v = \frac{E_j + \epsilon}{2E_j} \beta^* H \left(2b_1^V j + (b_1^V + L_3^V) \right) +$$

$$\frac{E_j - \epsilon}{2E_j} \beta^* H \left(2b_1^C j - (b_1^C + L_3^C) \right)$$

I-52a

$$\langle j, -\frac{1}{2} | H_p | j, -\frac{1}{2} \rangle^v = \frac{E_j + \epsilon}{2E_j} \beta^* H \left(2b_1^V j - (b_1^V + L_3^V) \right) +$$

$$- \frac{E_j - \epsilon}{2E_j} \beta^* H \left(2b_1^C j + (b_1^C + L_3^C) \right)$$

I-52b

$$\langle j, \frac{1}{2} | H_p | j, -\frac{1}{2} \rangle^v = \left(\frac{2\epsilon(E_j - \epsilon)}{E_j + \epsilon} \right)^{1/2} \left(\frac{\hbar k_3}{\sqrt{2m_H^*}} \right) .$$

$$\frac{\beta^* H}{E_j} (b_1^C + L_3^C)$$

I-52c

nas equações acima foi usada uma forma simplificada para a energia

$$E_j = |E_{n,s}^+(k_3)| = |E_{n,s}^-(k_3)| = |E_{n-1,-s}^+(k_3)| = |E_{n-1,-s}^-(k_3)|$$

I-53

Os elementos de matriz fora da diagonal não acoplam dois níveis $j \neq 0$ em $k_3=0$, então vamos considerar a teoria de perturbação para os valores de k_3 perto do zero. Vamos escrever as energias para os níveis de Landau $j \neq 0$, usando teoria de perturbação em primeira ordem como

$$E_{j,s}^c(k_3) = E_j + \langle j,s | H_p | j,s \rangle^c \quad \text{I-54a}$$

$$E_{j,s}^v(k_3) = -E_j + \langle j,s | H_p | j,s \rangle^v \quad \text{I-54b}$$

Dá simplicidade do espectro de magneto-reflexão⁽¹⁰⁾ observado, para transição entre os níveis de Landau $j \neq 0$ concluiu-se que

$$b_1^c = -b_1^v \quad \text{I-55}$$

$$L_3^c = -L_3^v \quad \text{I-56}$$

Essas simplificações permite-nos, escrever as equações I-51 e I-52 da seguinte forma⁽⁶⁾

$$\langle j,s | H_p | j,s \rangle^c = \left(\frac{\epsilon}{E_j} \right) 2b_1 \beta^* H_j - 2sG \beta^* H \quad \text{I-57a}$$

$$\langle j, s | H_p | j, -s \rangle^e = \left(\frac{2\varepsilon(E_j - \varepsilon)}{E_j + \varepsilon} \right)^{1/2} \frac{\hbar k_3}{\sqrt{2m_H^*}} \frac{G\beta^* H}{E_j} \quad \text{I-57b}$$

$$\langle j, s | H_p | j, s \rangle^v = - \left(\frac{\varepsilon}{E_j} \right) 2b_1 \beta^* j H + 2s G \beta^* H \quad \text{I-57c}$$

$$\langle j, s | H_p | j, -s \rangle^v = - \left(\frac{2\varepsilon(E_j - \varepsilon)}{E_j + \varepsilon} \right)^{1/2} \frac{\hbar k_3}{\sqrt{2m_H^*}} \frac{G\beta^* H}{E_j} \quad \text{I-57d}$$

onde

$$G = - (b_1^c + L_3^c) = (b_1^v + L_3^v) \quad \text{I-58}$$

$$b_1 = b_1^c = - b_1^v \quad \text{I-59}$$

O parâmetro β^* que aparece nas equações acima não é aquele do modelo de duas faixas, pois o mesmo também foi modificado, devido a perturbação em primeira ordem dos níveis fora do modelo de duas faixas (NFF).

Partindo das equações I-54 e I-57, podemos escrever as energias para os níveis $j \neq 0$

$$E_{j,s}^\pm(k_3) = \pm \left[E_j - 2s |G \beta^*| H \right] \quad \text{I-60}$$

Na equação I-60 temos uma correção na parte de spin, caracterizado pelo parâmetro de separação de spin G , que é o mesmo para todos os níveis de Landau, e é determinado experimentalmente, e depende da orientação do campo magnético externo com relação aos eixos cristalográficos da amostra.

b) Níveis de Landau $j=0$

Os níveis de Landau $j=0$ nas faixas de valência e condução são tratados com um caso especial, uma vez que esses são os únicos não degenerados no modelo de duas faixas. Os níveis $j=0$ da faixa de valência e faixa de condução são separados por um certo "gap" de energia, quando o campo magnético é nulo. Mas a distância entre esses níveis diminui com o aumento do campo magnético até um valor mínimo, quando a distância entre esses níveis volta a aumentar.

Como a aproximação é de primeira ordem, vamos tratar os dois níveis $j=0$ como quase-degenerados, e resolver a matriz 2×2 dada por

$$\begin{pmatrix} \langle 0,c | H_p | 0,c \rangle & \langle 0,c | H_p | 0,v \rangle \\ \langle 0,v | H_p | 0,c \rangle & \langle 0,v | H_p | 0,v \rangle \end{pmatrix} \quad \text{I-61}$$

os dois níveis $j=0$ têm $s = \frac{1}{2}$ para as faixas de condução e valência. Calculado os elementos de matriz⁽⁶⁾ os auto valores da matriz acima podem ser escritos como

$$\begin{pmatrix} E_0 - \frac{\epsilon}{E_0} |G\beta^*| H - E & i \frac{\sqrt{2\epsilon}}{E_0} \frac{\hbar k_3}{\sqrt{2m_H^*}} |G\beta^*| H \\ - i \frac{\sqrt{2\epsilon}}{E_0} \frac{\hbar k_3}{\sqrt{2m_H^*}} |G\beta^*| H & - E_0 + \frac{\epsilon}{E_0} |G\beta^*| H - E \end{pmatrix} = 0$$

onde

$$E_0 = \left| \sqrt{\epsilon^2 + \epsilon \frac{\hbar^2 k_3^2}{m_H^*}} \right| \quad \text{I-63}$$

Vamos aumentar a ordem da perturbação na equação acima, isto porque outros níveis exercem sobre os níveis $j=0$ uma perturbação. Isto foi proposto por Baraff⁽⁷⁾, que usou nos termos fora da diagonal em $k_3=0$, originando nos elementos de matriz entre $j=0$ e $j \neq 0$ perturbação de segunda ordem.

Os elementos da matriz de perturbação H_p entre $j=0$ e os outros níveis de Landau são nulos, com exceção dos níveis $j=1$ nas faixas de valência e condução. Mas a perturbação H_p acopla os níveis $j=1$ com $j=2$, assim nós teremos correção de segunda ordem nos termos da diagonal da matriz 6×6 .

Matematicamente a matriz 6×6 pode ser escrita da seguinte forma

$$H_{\ell\ell'} = \langle \ell | H_B | \ell' \rangle + \delta_{\ell\ell'} \sum_{\mu} \frac{\langle \mu | H_p | \ell \rangle \langle \ell | H_p | \mu \rangle}{E_{\ell} - E_{\mu}} \quad \text{I-64}$$

onde ℓ e ℓ' correspondem aos níveis $j=0$ e $j=1$ e variam de 1 a 6, μ inclui todos os níveis fora do subconjunto $j=0$ e $j=1$ da fig. 11, μ varia de 7 a 10 e não acopla os níveis 1 e 2, porque o acoplamento dos níveis 1 e 2 são tratados somente no CQD. As auto funções de equação I-64 são dadas pela equação I.31.

Os níveis $j=0$ não são acoplados em $k_3=0$, isto porque as faixas de valência e condução tem paridades opostas em $k_3=0$, e a perturbação devido a um campo magnético aplicado, não acoplará estados de oscilador harmônico com mesmo número quânti

co nas faixas de valência e condução, por meio de faixas fora do modelo de duas faixas. Assim os dois níveis $j=0$ não serão acoplados em nenhuma ordem de perturbação.

Mas resultados experimentais⁽⁸⁾ indicam que de fato existe um pequeno acoplamento entre os níveis $j=0$ em $k_3 = 0$. Assim foi assumido⁽⁸⁾, que o acoplamento interfaixa para os níveis $j=0$ em $k_3=0$, seria proporcional ao campo magnético aplicado e independente de k_3 . Então

$$H_{12} = i \frac{\sqrt{2\epsilon}}{E_0} \frac{\hbar k_3}{\sqrt{2m_H^*}} |G\beta^*| H + P \beta^* H \quad \text{I-65}$$

onde P é um parâmetro adimensional (determinado experimentalmente), e representa o acoplamento entre os dois níveis $j = 0$ em $k_3 = 0$.

Para se chegar a uma forma a qual possamos tratar analiticamente a equação I-64, vamos construir uma matriz 2×2 que será uma aproximação dessa matriz 6×6 (6)

$$H_{11} = H_{11} + \sum_{\mu \neq 1,2} \frac{|H_{1\mu}|^2}{E_0 - E_\mu} + \sum_{\mu, \mu' \neq 1,2} \frac{H_{1\mu} H_{\mu\mu'} H_{\mu'1}}{(E_0 - E_\mu)(E_0 - E_{\mu'})} = - H_{22} \quad \text{I-66}$$

e

$$H_{12} = H_{12} + \sum_{\mu \neq 1,2} \frac{H_{1\mu} H_{\mu 2}}{E_0 - E_\mu} + \sum_{\mu, \mu' \neq 1,2} \frac{H_{1\mu} H_{\mu\mu'} H_{\mu'2}}{(-E_\mu)(-E_{\mu'})} = H_{21}^* \quad \text{I-67}$$

Mantendo somente os primeiros termos da correção em terceira ordem, e levando em conta que num campo magnético $E_1 \gg E_0$ temos que

$$H_{11} = H_{11} + \frac{1}{2} |L_{\perp}|^2 (\beta^* H)^2 \left(\frac{1}{E_0 - E_1} + \frac{1}{E_0 + E_1} \right) +$$

$$\frac{1}{8} |L_{\perp}|^2 (\beta^* H)^2 \frac{\hbar^2 k_3^2}{\epsilon m_H^*} \left(\frac{1}{E_0 - E_1} + \frac{1}{E_0 + E_1} \right) +$$

$$\frac{2 |L_{\perp}|^2 b_1 (\beta^* H)^3}{E_0^2 - E_1^2} = - H_{22} \quad \text{I-68}$$

e

$$H_{12} = H_{12} + i \frac{|L_{\perp}|^2 b_1 (\beta^* H)^3}{2 E_1^2} \frac{\hbar k_3}{\sqrt{\epsilon m_H^*}} = H_{21}^* \quad \text{I-69}$$

onde

$$L_{\perp} = L_1^c - i L_2^c = -L_1^v + i L_2^v \quad \text{I-70}$$

podemos simplificar as equações acima

$$H_{11} = E_0 - \frac{\epsilon}{E_0} |G \beta^*| H - \frac{|L_{\perp}|^2}{2} \left(\frac{E_0}{\epsilon} \right)^{3/2} \beta^* H -$$

$$\frac{|L_{\perp}|^2 b_1 (\beta^* H)^2}{\epsilon} = - H_{22} \quad \text{I-71}$$

e

$$H_{12} = i \frac{\epsilon}{E_0} \frac{\hbar k_3}{\sqrt{\epsilon m_H^*}} |G\beta^*|_H + P\beta^*H +$$

$$i \frac{|L_{\perp}|^2 b_1 (\beta^*H)^2}{2 \epsilon} \frac{\hbar k_3}{\sqrt{\epsilon m_H^*}} = H_{12}^* \quad \text{I-72}$$

Resolvendo o problema de autovalores para os níveis $j=0$, da matriz aproximada 2×2 obtemos

$$E_{j=0}^{\pm}(k_3) = \pm \left(|H_{11}|^2 + |H_{12}|^2 \right)^{1/2} \quad \text{I-73}$$

$$E_{j=0}^{\pm}(k_3) = \pm \left\{ \left(E_0 - \frac{\epsilon}{E_0} |G\beta^*|_H - \frac{|L_{\perp}|^2}{2} \left(\frac{E_0}{\epsilon} \right)^{3/2} \beta^*H - \frac{|L_{\perp}|^2 b_1 (\beta^*H)^2}{\epsilon} \right)^2 + \frac{\hbar^2 k_3^2}{\epsilon m_H^*} \left(\frac{\epsilon}{E_0} |G\beta^*|_H + \frac{|L_{\perp}|^2 b_1 (\beta^*H)^2}{2 \epsilon} \right)^2 + (P\beta^*H)^2 \right\}^{1/2} \quad \text{I-74}$$

no caso particular quando $k_3=0$ temos

$$E_{j=0}^{\pm}(k_3=0) = \pm \left\{ \left(\epsilon - |G\beta^*|_H - \frac{|L_{\perp}|^2}{2} \beta^*H - \frac{|L_{\perp}|^2}{\epsilon} b_1 (\beta^*H)^2 \right)^2 + (P\beta^*H)^2 \right\}^{1/2} \quad \text{I-75}$$

fazendo

$$A = \left(\epsilon - |G\beta^*|H - \frac{|L_{\perp}|^2}{2} \beta^* H - \frac{|L_{\perp}|^2}{\epsilon} b_1 (\beta^* H)^2 \right)^2$$

I-76

temos

$$E_{j=0(k=0)}^{\pm} = \pm \{A + (P\beta^* H)^2\}^{1/2} \quad \text{I-75a}$$

A dependência de $E_{j=0}^{\pm}$ com o campo magnético é mostrada na figura 12, mostrando também que a introdução do termo de acoplamento $P\beta^* H$ é importante, e determina a energia mínima de separação entre os dois níveis $j=0$ em $k_3=0$.

Os níveis $j=0$ se aproximam para baixos campos magnéticos, devido a predominância do termo A até que o mesmo se anule para um determinado campo magnético, e a distância mínima entre os níveis $j=0$ será igual ao valor do termo $P\beta^* H$. Com o aumento do campo magnético o termo A volta a ser predominante, e a distância entre os níveis $j=0$ começa a aumentar novamente.

FIGURA 12 - Variação da energia em função do campo magnético para os níveis $j=0$ em $k_3=0$
O parâmetro P é determinado experimentalmente e depende da orientação do campo magnético.

CAPÍTULO II

TÉCNICAS EXPERIMENTAIS

a) Preparação da amostra

O monocristal de bismuto usado em nosso experimento, foi fornecido pela "Metal Research Ltd.", o mesmo foi crescido na direção do eixo trigonal com um desvio de $\sim 2^{\circ}$, e apresenta uma pureza de 99.9999%. Tendo a forma cilíndrica com 18 mm de diâmetro e 14 mm de altura.

Uma de suas faces foi polida mecanicamente com pasta de diamante, e polido quimicamente com um "etching" composto por uma parte de ácido nítrico e três partes de água. Com o polimento mecânico removemos da face do monocristal as asperezas deixando a mesma bastante regular. E usando o polimento químico retiramos as impurezas deixadas pelo polimento mecânico, ficando na superfície somente monocristal de bismuto.

A necessidade do procedimento acima, visa o passo seguinte na preparação da amostra que é a orientação do cristal. Por meio de raio-X e fazendo uso da técnica de Laue, determinamos no laboratório de microscopia do IFUSP, as direções dos eixos cristalográficos binário e bissetriz e a confirmação do eixo trigonal, conforme figura 3.

Feita as orientações do monocristal de bismuto, nosso objetivo era preparar com essa amostra, um dispositivo que funcionasse como um capacitor. Para tanto colamos, usando graxa de silicone da Dow Chemical na face polida do monocristal, uma folha de mica com $\sim 0,01$ mm de espessura, a qual servirá como dielétrico do nosso capacitor. Sobre essa folha de mica depositamos,

fazendo uso de pincel, uma camada de prata coloidal da Micro Circuits Company, a qual foi desenvolvida em acetona antes de ser aplicada. A prata coloidal adere fortemente a superfície da mica constituindo a outra placa do nosso capacitor.

A necessidade de se usar a prata coloidal como outra placa, deve-se ao fato que, sendo a mesma policristalina não dará contribuição as oscilações do nível de Fermi. Isto porque sendo policristalina a média desses efeitos é nula nesse material.

O conjunto acima descrito formará o capacitor que usaremos para medir as oscilações do nível de Fermi, na figura 13 esquematizamos o capacitor.

FIGURA 13 - Esquema do capacitor usado no experimento

Realizamos testes com o capacitor amostra, e medimos uma capacitância de ~ 280 pF a temperatura e pressão ambiente.

b) Método de Medida

As oscilações do nível de Fermi no monocristal de bismuto, serão fornecidas pela diferença de potencial entre monocristal, que constitui uma das faces do capacitor e a camada de prata coloidal (policristal), que será a outra face do capacitor, esse método fundamenta-se no trabalho de Witten e Piccini⁽¹¹⁾.

A necessidade de se obter um tempo razoavelmente longo, para o escoamento das cargas do monocristal de bismuto para o policristal, nos obriga a colocar entre essas placas um material dielétrico de reduzida espessura. Esse conjunto foi descrito na parte a deste capítulo. A camada de prata coloidal sendo policristalina, não contribuirá para as oscilações do nível de Fermi, portanto todo efeito observado será devido ao monocristal de bismuto.

O capacitor por nós construído será ligado em série com um eletrômetro Keithley modelo 602. A resistência interna do eletrômetro é muito alta $\sim 10^{12}$ ohm, e a capacitância de entrada deste é de 20 pF. As capacitâncias parasitas do circuito (fios de ligação, bastão do porta amostra, capacitância de entrada do eletrômetro) estão ligados em série com o nosso capacitor amostra conforme figura 14.

FIGURA 14 - Esquema do circuito

- onde
- C - capacitor amostra
 - V_c - representa a tensão devido a variação do potencial de contato.
 - C_p - capacitância parasita do sistema

R - resistência interna do eletrômetro

E - eletrômetro

A diferença de potencial entre as placas do capacitor é dada pela oscilação do nível de Fermi. A passagem dos níveis de Landau pelo nível de Fermi, será caracterizada pelo desvio do ponteiro do eletrômetro (que no início do experimento estará no zero). Esse desvio é devido a descarga do capacitor na resistência do eletrômetro. O capacitor se descarregará em um certo intervalo de tempo, que é uma característica do circuito e é dado por $R(C+C_p)$ (tempo de relaxação do sistema).

O eletrômetro que usaremos em nosso experimento possui uma resistência interna da ordem de $\sim 10^{12}$ ohm, a capacitância do nosso capacitor mais a capacitância parasita do sistema $(C+C_p)$ é da ordem de ~ 360 pF, a constante de tempo do circuito $R(C+C_p)$ será da ordem de ~ 360 segundos, que é o tempo disponível para que possamos varrer o campo magnético aplicado de 0 a 20 KG.

Dentro desse intervalo de tempo em que ocorrerá a descarga do capacitor, o nível de Fermi oscilará e o campo magnético variará linearmente com o tempo de 0 a 20 Kg. Para observarmos as oscilações do nível de Fermi, a constante de tempo do circuito $R(C+C_p)$ terá que ser maior, que o tempo gasto para varrer o campo magnético de 0 até 20 KG.

Pode-se notar pela exposição acima que a capacitância deve ser alta, para que possamos obter bons resultados. Isto é possível se a espessura do dielétrico for bastante reduzida, pois a área A é uma característica intrínseca da nossa amostra, e não pode ser muito maior que 1 cm^2 .

A capacitância é dada por

$$C = k \epsilon_0 \frac{A}{d}$$

onde k é a constante dielétrica da mica e d é a distância entre as placas do capacitor, portanto a espessura do dielétrico, e ϵ_0 é a permissividade elétrica do vácuo. Sendo $\epsilon_0 \sim 10^{11} \frac{S^2 C^2}{m^3 Kg}$, $A \sim 10^{-4} m^2$ e $k \sim 6$, deveremos ter $d \sim 10^{-5} m$ para que possamos ter um capacitor com $\sim 600 pF$. Tal capacitância não é conseguida, uma vez que a camada de graxa de silicone, usada para fixar a folha de mica no bismuto, aumenta a distância entre as placas do nosso capacitor diminuindo, portanto a capacitância.

Resolvendo o circuito da figura 14, temos que a relação entre o sinal lido (V_m) e o sinal gerado na interface (V_c) será:

$$\frac{V_m}{V_c} = \frac{Z}{Z + \frac{1}{j\omega C}} \quad \text{II-2}$$

$$\frac{V_m}{V_c} = \frac{1}{1 + \frac{1}{j\omega CZ}} \quad \text{II-3}$$

onde Z é a impedância equivalente da resistência do eletrômetro e das capacitâncias parasitas do sistema, Z é dada por

$$Z = \left(\frac{1}{R} + j\omega C_p \right)^{-1} \quad \text{substituindo na equação II-3 temos}$$

$$V_m = \frac{j\omega RC}{1 + j\omega R(C + C_p)} V_c \quad \text{II-4}$$

aqui
$$V_c = V_{o_c} e^{(j\omega t - \phi)} \quad \text{II-5}$$

$$V_m = V_{o_m} e^{j\omega t} \quad \text{II-6}$$

As oscilações do potencial de contato para o modelo de elétrons livres são periódicas, mas o modelo que nós estamos usando não é o de elétrons livres, portanto as oscilações não são periódicas. Assim a frequência de oscilação $(\frac{\omega}{2\pi})$ que nós vamos usar é uma aproximação.

Vamos considerar duas situações distintas

- a) quando $R(C+C_p) \cdot \frac{\omega}{2\pi} \ll 1$; $\frac{2\pi}{\omega}$ nos dá o período das oscilações do nível de Fermi

$$V_m = j \omega R C V_c \quad \text{II-7}$$

usando a equação II-5 temos:

$$V_m = RC \frac{dV_c}{dt} \quad \text{II-8}$$

O eletrômetro indicará uma voltagem que é diretamente proporcional a derivada da diferença de potencial de contato entre as placas do capacitor.

- b) quando $R(C+C_p) \cdot \frac{\omega}{2\pi} \gg 1$; isto é o período das oscilações é menor que o tempo de relaxação do sistema

$$V_m = \frac{C}{C+C_p} V_c \quad \text{II-9}$$

nesse caso a voltagem no eletrômetro é diretamente proporcional a diferença de potencial no capacitor amostra, a menos do fator constante $\frac{C}{C+C_p}$.

A tensão medida no eletrômetro (V_m), é proporcional a corrente que atravessa a resistência interna do mesmo, e essa tensão está defasada das oscilações do nível de Fermi (V_c). Essa defasagem acarreta uma certa atenuação na tensão medida (V_m), atenuação esta que é dada por⁽¹²⁾

$$1 - \frac{V_m}{V_c} = 1 - \left\{ 1 + \frac{1}{(\omega R (C + C_p))^2} \right\}^{-1/2} \quad \text{II-10}$$

$$\text{mas } \frac{\omega R}{2\pi} (C + C_p) \approx 19 \quad \text{II-11}$$

resultando portanto numa atenuação completamente desprezível. Teremos também uma defasagem entre as oscilações do nível de Fermi (V_c), e a tensão medida (V_m)

$$\text{tg} \theta = \frac{1}{\omega R (C + C_p)} \quad \text{II-12}$$

$$\theta = \text{arc tg} \left(\frac{1}{\omega R (C + C_p)} \right) \quad \text{II-13}$$

$$\theta \approx 3^\circ \quad \text{II-14}$$

Assim sendo nós podemos usar a equação II-9 como uma boa aproximação da equação II-4.

c) Porta Amostra

O conjunto porta amostra (figura 15) é constituído por duas partes, o bastão de latão e a caixa porta amostra.

A caixa porta amostra é composta por um corpo de araldite (A), o qual possui um orifício que acomoda a amostra (B) no seu interior. As peças (C) (D) e (E) formam um conjunto que é responsável pela pressão exercida no capacitor amostra, para melhor contato entre as placas do mesmo, uma vez que (D) é uma mola de bronze fosforoso. As partes (E) e (F) através dos fios de ligação (G) fazem o contato da caixa porta amostra com o bastão de latão.

O bastão de latão tem duas finalidades distintas, uma delas é a de sustentar a caixa porta amostra, e a outra é fazer a ligação entre o capacitor amostra e o exterior (eletrômetro).

O tubo de latão (H) é um dos pólos de contato, e o outro pólo é um fio de manganina (I), que fica no interior do tubo de latão, e é isolado deste por uma bucha de teflon (J). Temos na extremidade superior do bastão de latão uma rolha de teflon (L) (que isola os dois pólos), cujo centro é vazado por um pino de latão onde o fio de manganina é soldado. Na saída deste bastão há um conector tipo BNC, que liga esses pólos (placas do capacitor) aos instrumentos de medida.

d) Sistema Criogênico

O sistema criogênico que nós usamos (na Figura 18), é constituído por um dewar metálico que encerra na extremidade inferior uma bobina supercondutora. Nesse dewar fica o Hélio-4 líquido a uma temperatura de 4.2 K. Dentro desse dewar temos um

FIGURA 15 - Porta-Amostra

Figura 16 : Sistema criogenico

outro dewar menor, cuja finalidade é isolar a amostra do banho de hélio da bobina supercondutora, possibilitando o controle da temperatura. Existe uma comunicação entre o espaço experimental deste dewar e o banho da bobina, cuja finalidade é transferir hélio líquido para o resfriamento da amostra. Quando a experiência está sendo realizada, esta comunicação é mantida fechada.

A temperatura pode ser variada bombeando-se no espaço experimental, isto é diminuindo a pressão do vapor de hélio.

O valor da temperatura é obtido lendo-se a pressão do vapor de hélio sobre o hélio líquido, em manômetros de mercúrio (para o intervalo de temperatura 4,2 a 2,3 K) e em manômetro de óleo (para temperaturas entre 2,3 e 1,2 K) a qual é convertida em temperatura por meio da tabela "The 1958 H^4 Scale of Temperature" (13).

Para controlar a temperatura é necessário controlar a vazão do hélio gasoso, isto é feito manualmente controlando as válvulas de saída do hélio gasoso, e olhando num manômetro diferencial. Dessa forma consegue-se a estabilidade da temperatura.

Com esse sistema consegue-se uma variação na temperatura entre 1,2 e 4,2 K, com precisão de 0,01 K.

e) Campo Magnético

O campo magnético que nós usamos em nosso experimento, tinha que obedecer as seguintes características para que pudéssemos observar as oscilações do nível de Fermi:

- a) tinha que ser alta, pois o penúltimo nível de Landau passa pelo nível de Fermi quando $H \approx 15 \text{ KG}$

- b) tinha que ser uniforme, uma vez que a nossa amostra era relativamente grande, e se assim não fosse nós poderíamos ter em diferentes partes da amostra diferentes campos magnéticos, acarretando em diferentes concentrações de portadores de carga nas diferentes partes da amostra.

A bobina supercondutora que nós utilizamos apresentava as seguintes características⁽¹⁵⁾

- a) campo magnético máximo de 70 KG
b) homogeneidade no campo magnético superior a 0,01% em uma esfera de 1 polegada de diâmetro.

O valor do campo magnético é diretamente proporcional a corrente, e é obtido observando-se a corrente através da bobina supercondutora, essa corrente é medida quando a mesma passa por um resistor de 0,01 ohm, podemos dessa forma verificar a voltagem nos terminais desse resistor. A precisão na determinação do campo magnético é de 10 Gauss.

6) Parte Eletrônica

O instrumento usado para medir a diferença de potencial de contato entre as placas do capacitor, foi um eletrômetro Keithley-602 da Keithley Instruments, que possui uma alta impedância de entrada 10^{14} ohm e uma capacitância de entrada de 20 pF.

O eletrômetro estava ligado por meio de um cabo coaxial à saída do bastão porta-amostra. A saída desse eletrômetro estava acoplada ao Y de um registrador X-Y da VARIAN. O X desse registrador estava ligado a um voltímetro digital da Hewlett

Packard - 3480B, que por sua vez está ligado a um resistor de 0,01 ohm, e este à saída dos terminais da bobina supercondutora.

Através do voltímetro digital observamos a variação do potencial na saída da bobina supercondutora. Essa variação de potencial esta diretamente relacionada com a variação do campo magnético na bobina supercondutora.

A varredura do campo magnético não pode ser muito rápida, uma vez que isto acarretaria em uma instabilidade na bobina supercondutora. Assim escolhemos uma velocidade de varredura de ~ 1 minuto, e dentro desse período o campo magnético variava de 0 a ~ 20 KG.

Um esquema da montagem é apresentada na figura 17.

Figura 17 : Diagrama de blocos da montagem da experiência

CAPÍTULO III

MEDIDAS E ANÁLISE DOS RESULTADOS.

a) Relato sobre o Programa Computacional

O programa computacional que utilizamos para descrever as oscilações do nível de Fermi, foi desenvolvido por José Pereira Rezende no MIT⁽¹⁴⁾. Nós implantamos o programa, fizemos algumas modificações no mesmo, e o usamos com o objetivo de ajustar as curvas obtidas experimentalmente das oscilações do nível de Fermi para um experimento do tipo de Haas-van Alphen.

No nosso trabalho o nível de Fermi é determinado pela igualdade do número de portadores de carga, isto é

$$\sum_{i=1}^3 n_i = p$$

onde n_i nos dá a concentração de elétrons de cada elipsóide i , localizados no ponto L da Z.B., e p nos dá a concentração de buracos no ponto T da Z.B., conforme figura 2.

As medidas que nós realizamos com o campo magnético na direção binária dos eixos cristalográficos figura 4, evidenciam principalmente o comportamento dos elétrons de massa de cíclotron leve (temos dois elipsóides com massa efetiva de cíclotron leve), que nos gráficos de 1 a 3 são evidenciados pelos picos na energia Fermi. Variando o campo magnético entre 0 e ~ 15 KG nós observamos todos os picos, isto é todos os níveis de Landau com massas efetivas de cíclotron leves já passaram pelo nível de Fermi, com exceção do nível $j=0$ no qual teremos todos os estados eletrônicos (desses elipsóides).

No programa computacional nós utilizamos, para simular o comportamento dos portadores de carga na presença de um campo magnético variável, a equação I-60 para $j \neq 0$ e a equação I-74 para $j=0$ desenvolvidos no V.P.D.⁽⁸⁾ para os elétrons de massa efetiva de cíclotron leve.

A expressão da energia para $j=0$ em $k_3=0$ é dada por

$$E_{j=0}^{\pm}(k_3=0) = \pm \left[\left(\frac{E_g}{2} - |G_0 \beta^*| H \right)^2 + (P \beta^* H)^2 \right]^{1/2} \quad \text{I-75}$$

onde (+) e (-) se referem as faixas de valência e condução respectivamente, separados pelo gap de energia E_g com $H=0$. Aqui $|G_0 \beta^*|$ representa o termo de separação entre os níveis $j=0$, e $(P \beta^*)^2$ representa o acoplamento entre os níveis $j=0$.

A aproximação entre os dois níveis $j=0$ em $k_H=0$ é verificada para baixos campos magnéticos, até um determinado valor do campo magnético onde a distância entre esses níveis é mínima. A partir daí começam a se afastar mutuamente conforme figura 12.

O procedimento descrito na figura 12 é observado somente no modelo teórico, uma vez que necessitamos de campos magnéticos muito altos para observar tal comportamento. Esse comportamento para os níveis $j=0$ foi descrito por Baraff⁽⁷⁾.

Para os elétrons de massa efetiva de cíclotron pesada e para os buracos utilizamos o modelo desenvolvido por Smith, Baraff e Rowell⁽²⁾. O motivo é que sendo grande a diferença entre as massas efetivas (as massas efetivas de elétrons pesados e de buracos são muito maiores que as massas efetivas de elétrons leves), enquanto já passaram todos os níveis de Landau, com exceção do nível $j=0$, para os elétrons de massa efetiva de cíclotron leve, para os elétrons de massa efetiva de cíclotron pesa-

da e buracos ainda temos muitos níveis de Landau. Temos então um baixo número de estados eletrônicos, e assim podemos utilizar esse modelo sem afetar o nosso estudo sobre as oscilações do nível de Fermi.

A passagem dos níveis de Landau dos buracos pelo nível de Fermi, pode ser detetada num intervalo de campo magnético de 8 a 12 KG (ver gráfico 4). Isto se nós fizemos no programa computacional, o campo magnético variar com intervalo de 0,1 KG.

b) Apresentação e Comentário sobre os Resultados Obtidos

Os gráficos das oscilações do potencial de contato foram tirados para diferentes temperaturas conforme gráficos 1, 2 e 3. O abaixamento da temperatura é necessário, visto que, quanto menor a temperatura mais agudos são os picos das oscilações do potencial de contato (ver apêndice 1).

No processo de abaixamento da temperatura nós chegamos até 2,24 K. Isto porque a descarga do capacitor amostra torna-se bastante acentuada, conforme gráfico 3, ficando portanto difícil de se medir as oscilações do potencial de contato.

Os gráficos experimentais foram corrigidos (ver apêndice 2), para que nós tivéssemos as oscilações do potencial de contato ocorrendo em torno de um valor médio da energia de Fermi.

Conforme se pode notar nesses gráficos para as diferentes temperaturas, os picos ocorrem para os mesmos valores do campo magnético ~ 5 , ~ 7.5 e ~ 15 KG respectivamente.

Vamos tomar somente esses três picos uma vez que para campos magnéticos menores os picos não ficaram bem definidos,

em decorrência da rápida descarga do capacitor amostra, e os valores do potencial de contato não são confiáveis.

Nós escolhemos o gráfico 2 à temperatura 3,15 K, para ser ajustado com o programa computacional e determinar os parâmetros do modelo V.P.D.⁽⁸⁾. A escolha desse gráfico e não do gráfico 3 (uma vez que este está a uma temperatura menor), deve-se unicamente ao fato do gráfico 2 apresentar uma regularidade maior para os três picos, dos quais nós nos servimos para fazer o ajuste do programa computacional.

No gráfico 4 nós apresentamos a curva experimental ajustada e a sua respectiva curva teórica ajustada. Para fazer esse ajuste nós manipulamos com muitos parâmetros. Entre esses parâmetros estão os tensores de massas efetivas de cíclotron e de spin, para elétrons de massa efetiva pesada e buracos e que nós apresentamos na tabela 5. Nessa mesma tabela colocamos os valores da energia do gap entre as faixas de valência e condução, e de E_0 que é a energia entre o fundo da faixa de condução, e o topo da faixa para os buracos (vide figura 8).

Esses parâmetros apresentados na tabela 5 e o parâmetro β^* da tabela 6, são os responsáveis pelas alterações mais bruscas no gráfico das oscilações do nível de Fermi.

Os parâmetros da tabela 6 estão associados ao elétron de massa efetiva de cíclotron leve, mas com exceção de β^* os outros parâmetros servem para fazer o ajuste fino da curva teórica. Também apresentamos nessa tabela os parâmetros do artigo V.P.D.⁽⁸⁾ para estabelecer uma comparação.

Na tabela 7 nós apresentamos os valores dos campos magnéticos, nos quais ocorrem a passagem do nível de Landau n , com o seu respectivo spin s pelo nível de Fermi E_F . Esses valores são dados para as curvas experimental e teórica.

O gráfico 5 corresponde a oscilações dos portadores

de carga, para os elétrons de massa efetiva de cíclotron leve e pesada. As oscilações do número de portadores para elêtron de massa efetiva de cíclotron leve, como podem ser notadas, são os inversos das oscilações da energia de Fermi no gráfico 4.

Para o campo magnético maior que 15 KG todos os elétrons de massa efetiva de cíclotron leve estão no nível $j=0$ ($n=0$ e $s = -\frac{1}{2}$), e o número de portadores aumenta devido a dependência linear desta com o campo magnético. Também podemos observar no gráfico 5 que o decrêscimo no número desses elétrons, é compensado por um aumento no número dos elétrons de massa efetiva de cíclotron pesada.

Usando a equação I-75 e os parâmetros ajustados no programa computacional para diferentes valores do campo magnético, nós construímos a tabela 9 e traçamos o gráfico 6. Através desse gráfico nós podemos observar a aproximação das faixas de valência e condução. Com os dados que nós usamos para ajustar a curva teórica à experimental, o gap entre essas faixas foi de 5,16 meV para um campo magnético de 65 KG. O valor do parâmetro de acoplamento P, que nós usamos para fazer o ajuste, foi escolhido de forma que no gráfico 6 o gap mínimo entre essas faixas fosse o mesmo do artigo V.P.D.⁽⁸⁾.

A passagem dos níveis de Landau dos buracos pelo nível de Fermi, pode ser observada para o gráfico 2-a no intervalo de ~ 8 a ~ 11 KG, onde a curva apresenta irregularidades.

Quando examinamos a curva teórica ajustada nesse intervalo de campo magnético, podemos observar essas oscilações, e notamos que as mesmas são muito pequenas. O motivo é que a massa efetiva dos buracos é muito maior que a massa efetiva dos elétrons leves. Assim muitos níveis de Landau dos buracos passam nesse intervalo de campo magnético.

Da curva teórica ajustada nós conseguimos identifi-

car os níveis de Landau, que estão passando pelo nível de Fermi e elaboramos a tabela 10. Para os buracos não foi possível identificar a que spin correspondia a energia de Fermi, pois os níveis de energia magnética dos dois spin estão muito próximos um do outro.

TABELA 1

Energia de Fermi para as Curvas Experimental e Experimental Ajustada

 $T = 4,13 \text{ K}$ (curva 1)

H (KG)	$E_F(\text{exp})$ (meV)	$E_F(\text{exp. ajustada})$ (meV)	H (KG)	$E_F(\text{exp})$ (meV)	$E_F(\text{exp. ajustada})$ (meV)
3	26,56	26,96	10,0	25,26	26,58
3,5	26,60	27,07	10,5	25,06	26,45
4,0	26,54	27,08	11,0	24,94	26,39
4,3	26,48	27,06	11,5	24,90	26,41
4,5	26,52	27,12	12,0	24,92	26,50
4,9	26,60	27,26	12,5	25,00	26,64
5,2	26,50	27,20	13,0	25,20	26,91
5,4	26,36	27,08	13,5	25,50	27,27
5,6	26,26	27,01	14,0	25,76	27,59
5,8	26,20	26,97	14,5	25,98	27,88
6,0	26,10	26,90	15,0	26,04	28,00
6,2	26,06	26,89	15,5	25,98	28,00
6,6	26,12	27,00	16,0	25,74	27,82
7,0	26,26	27,19	16,5	25,54	27,69
7,3	26,34	27,31	17,0	25,28	27,49
7,6	26,30	27,31	17,5	25,06	27,33
7,9	26,20	27,25	18,0	24,86	27,19
8,2	26,10	27,19	18,5	24,66	27,05
8,5	25,92	27,05	19,0	24,46	26,92
9,0	25,70	26,89	19,5	24,32	26,84
9,5	25,50	26,76	20,0	24,14	26,72

2

$\gamma = 3.15 \times \begin{cases} 466.18 \\ 694.09 \end{cases}$ mm de Hg

R = 20 mV/cm

corrida
[1 min. e 12 seg.
20 KG

F. H. Elettronetro 10 mV

TABELA 2

Energia de Fermi para as curvas Experimental e Experimental Ajustada

 $T = 3,15 \text{ K}$ (curva 2)

H (KG)	E_F (exp) (meV)	E_F (exp. ajustada) (meV)	H (KG)	E_F (exp) (meV)	E_F (ajustada) (meV)
2,5	27,08	27,33	9,0	25,88	26,79
2,8	27,00	27,29	9,5	25,58	26,54
3,0	26,88	27,19	10,0	25,30	26,30
3,1	26,80	27,12	10,5	25,18	26,23
3,3	26,74	27,08	11,0	25,06	26,16
3,6	26,78	27,15	11,5	25,04	26,19
4,0	26,70	27,11	12,0	25,08	26,28
4,3	26,54	26,98	12,5	25,20	26,45
4,5	26,58	27,04	13,0	25,42	26,72
4,8	26,66	27,15	13,5	25,80	27,15
5,0	26,64	27,15	14,0	26,10	27,50
5,3	26,48	27,02	14,5	26,30	27,74
5,8	26,32	26,91	14,8	26,36	27,83
6,4	26,22	26,87	15,0	26,36	27,85
6,7	26,30	26,98	15,5	26,20	27,74
7,0	26,46	27,17	16,0	25,96	27,55
7,3	26,52	27,26	16,5	25,66	27,30
7,8	26,40	27,19	17,0	25,30	26,99
8,0	26,34	27,15	17,5	25,10	26,83
8,5	26,04	26,90	18,0	24,90	26,68

Gráfico 2-a

curva experimental

ajustada

$H \parallel$ ao eixo binário

$T = 2.24 \text{ K}$

602,26

556,98

mm de Hg

893,80

201,60

mm de óleo

 $R = 20 \text{ mV/cm}$

corrida

1 min. e 13 seg.

20 KG

F. E. Eletrometro 10 mV

TABELA 3

Energia de Fermi para as Curvas Experimental e Experimental Ajustada

$T = 2,24 \text{ K}$ (curva 1)

H (KG)	E_F (exp.) (meV)	E_F (exp. ajustada) (meV)	H (KG)	E_F (exp) (meV)	E_F (ajustada) (meV)
3,25	26,60	29,85	8,5	25,40	27,04
3,5	26,64	27,33	9,0	25,12	26,86
3,6	26,70	27,41	9,5	24,86	26,69
3,7	26,74	27,47	10,0	24,48	26,40
3,9	26,70	27,47	10,5	24,26	26,28
4,0	26,60	27,39	11,0	24,07	26,18
4,2	26,56	27,39	11,5	24,02	26,22
4,4	26,51	27,42	12,0	24,00	26,29
4,7	26,54	27,46	12,5	24,04	26,42
4,9	26,57	27,51	13,0	24,24	26,72
5,0	26,56	27,51	13,5	24,58	27,15
5,25	26,40	27,43	14,0	24,84	27,50
5,5	26,21	27,29	14,5	25,12	27,87
6,0	25,97	27,14	15,0	25,12	27,96
6,5	25,81	27,08	15,5	24,92	27,84
6,8	25,88	27,20	16,0	24,66	27,67
7,0	25,97	27,33	17,0	24,12	27,31
7,2	26,02	27,42	18,0	23,66	27,03
7,5	25,96	27,42	18,4	23,42	26,86
8,0	25,72	27,27			

H // ao eixo binário

Gráfico 3-a

curva experimental

ajustada

TABELA==4*Energia de Fermi para a Curva Teórica*

H (KG)	E_{Fermi} (meV)	H (KG)	E_{Fermi} (meV)
3,0	27,06	12,0	26,40
3,5	27,13	12,5	26,54
4,0	26,98	13,0	26,70
4,5	26,99	13,5	26,92
5,0	27,15	14,0	27,27
5,5	26,92	14,5	27,60
6,0	26,82	15,0	27,91
6,5	26,87	15,5	27,67
7,0	27,19	16,0	27,36
7,5	27,30	16,5	27,19
8,0	27,06	17,0	27,01
8,5	26,83	17,5	26,83
9,0	26,66	18,0	26,60
9,5	26,55	18,5	26,37
10,0	26,44	19,0	26,14
10,5	26,35	19,5	25,85
11,0	26,34	20,0	25,69
11,5	26,36		

$H \parallel$ ao eixo binário

Gráfico 4

curva experimental

ajustada ----

curva teórica —

$T = 3.15 \text{ K}$

TABELA 5

Parâmetros da Curva Teórica Ajustada

$$E_o = 44,0 \text{ meV}$$

$$E_g = 14,45 \text{ meV}$$

Elétrons Pesados

$$\vec{m}_C^* = \begin{pmatrix} 0,0006 & 0 & 0 \\ 0 & 0,13 & -0,0098 \\ 0 & -0,0098 & 0,0022 \end{pmatrix}$$

$$\vec{m}_S^* = \begin{pmatrix} 0,00051 & 0 & 0 \\ 0 & 1,06 & -0,065 \\ 0 & -0,065 & 0,00545 \end{pmatrix}$$

Buracos

$$\vec{m}_C^* = \begin{pmatrix} 0,032 & 0 & 0 \\ 0 & 0,032 & 0 \\ 0 & 0 & 0,345 \end{pmatrix}$$

$$\vec{m}_S^* = \begin{pmatrix} 0,017 & 0 & 0 \\ 0 & 0,017 & 0 \\ 0 & 0 & 0,345 \end{pmatrix}$$

TABELA 6

Parâmetros para os Elêtrons de Massa Efetiva Leve

	β^* (meV)/KG	G	P	$ L_{\perp} ^2$	$L_3^C = - L_3^V$	$b_1^C = - b_1^V$
Nossos dados	5,546	- 0,002	0,007	0,007	- 0,034	0,036
Artigo V.P.D.	5,949	- 0,008	0,003	0,001	- 0,030	0,038

Com exceção de β^ os outros parâmetros são adimensionais*

TABELA 7

Níveis de Energia Magnética para os Elétrons Leves

n	s	H(teórica) (KG)	H(exp.) (KG)	E _F (teórica) (meV)	E _F (exp.) (meV)
3	$\frac{1}{2}$	4,7	4,6	27,21	27,08
3	$-\frac{1}{2}$	4,8	4,65	27,28	27,10
2	$\frac{1}{2}$	7,0	6,9	27,19	27,10
2	$-\frac{1}{2}$	7,2	7,0	27,43	27,18
1	$\frac{1}{2}$	14,0	14,2	27,27	27,64
1	$-\frac{1}{2}$	14,6	14,7	27,63	27,80

TABELA 8

Número de Portadores (Elétrons)

H (KG)	N _(leve) $10^{17} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	N _(pesado) $10^{17} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	H (KG)	N _(leve) $10^{17} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	N _(pesado) $10^{17} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$
3,0	1,568	0,318	12,0	1,717	0,278
3,5	1,556	0,319	12,5	1,701	0,279
4,0	1,587	0,313	13,0	1,668	0,285
4,5	1,585	0,312	13,5	1,617	0,291
5,0	1,556	0,316	14,0	1,567	0,300
5,5	1,600	0,308	14,5	1,487	0,305
6,0	1,624	0,303	15,0	1,439	0,314
6,5	1,614	0,303	15,5	1,481	0,304
7,0	1,561	0,312	16,0	1,522	0,298
7,5	1,529	0,313	16,5	1,568	0,291
8,0	1,577	0,304	17,0	1,614	0,284
8,5	1,623	0,299	17,5	1,659	0,275
9,0	1,658	0,292	18,0	1,702	0,272
9,5	1,690	0,287	18,5	1,744	0,266
10,0	1,711	0,284	19,0	1,784	0,253
10,5	1,722	0,280	19,5	1,824	0,247
11,0	1,731	0,278	20,0	1,868	0,238
11,5	1,727	0,279			

Gráfico 5

TABELA 9Níveis de Energia Magnética dos Elétrons Leves para $j=0$

H (KG)	$\pm^* E_{j=0} (\xi=0)$ (meV)
0	7,23
5,0	7,05
10,0	6,82
15,0	6,54
20,0	6,21
25,0	5,84
30,0	5,43
35,0	4,97
40,0	4,49
45,0	3,99
50,0	3,50
55,0	3,05
60,0	2,71
65,0	2,58
70,0	2,75
75,0	3,21
80,0	3,90
85,0	4,76
90,0	5,73
95,0	6,81
100,0	7,97
105,0	9,21
110,0	10,51

* - faixa de
valência
+ faixa de
condução

TABELA 10

Níveis de Energia Magnética para os Buracos

n	H(teórica) (KG)	H(exp.) (KG)	E _F (teórica) (meV)	E _F (exp.) (meV)
19	7,9	7,9	27,06	27,19
18	8,5	8,5	26,84	26,94
17	9,1	9,0	26,64	26,79
16	9,6	9,6	26,48	26,48
15	10,4	10,5	26,36	26,24
14	11,2	11,2	26,33	26,07
13	11,9	12,0	26,39	26,19

CONCLUSÕES

O programa computacional que nós usamos, foi desenvolvido para simular as oscilações do nível de Fermi num experimento de magneto-reflexão, tendo como base o modelo V.P.D.⁽⁸⁾. Essas experiências foram realizadas à temperatura de 22,5 K e 84 K (vide artigo V.P.D.), mas a temperatura não aparece nas equações dos níveis de energia magnética desse modelo, visto que a temperatura não é um fator essencial nesse tipo de experimento.

Mas como pode ser visto nos gráficos de 1 a 3 obtidos por nós, existe uma diferença visível entre esses gráficos à diferentes temperaturas, tirados de um experimento do tipo de Haas van Alphen onde a temperatura é um parâmetro essencial.

As amplitudes das oscilações do nível de Fermi que nós observamos, também são sensivelmente maiores que as observadas por V.P.D.⁽⁸⁾. Obrigando-nos portanto a ajustar as massas efetivas de elétrons pesados e buracos, acarretando numa diferença acentuada entre os parâmetros encontrados nos dois tipos de experimentos.

Considerando essas diferenças, concluímos que se quisermos comparar os parâmetros encontrados para os dois tipos de experimentos, teremos que modificar o modelo desenvolvido por Vecchi, Pereira e Dresselhaus⁽⁸⁾, acrescentando ao mesmo a dependência com a temperatura.

Mas apesar dessa falha no modelo, nos foi possível identificar, a passagem dos níveis de Landau dos buracos pelo nível de Fermi, para campos magnéticos não muito elevados ~ 8 a ~ 12 KG (vide tabela 10). Isto é muito importante, uma vez que na literatura sobre o assunto (experimento de magneto-reflexão) é usual dizer, que as oscilações do nível de Fermi devido aos buracos, são detectados somente para campos magnéticos muito altos.

Concluimos também, que embora o experimento de oscilação do potencial de contato sendo mais simples que o de magneto-reflexão, quando estudado pelo modelo V.P.D., nos possibilita obter mais informações que este (oscilação do nível de Fermi devido aos buracos).

APÊNDICE 1

No modelo desenvolvido por V.P.D.⁽⁸⁾ e no programa computacional desenvolvido por J.P. Rezende, não aparecem a temperatura explicitamente. Mas quando se faz um experimento do tipo de Haas-van Alphen, pode-se notar claramente que a temperatura é um fator muito importante, vide gráficos 1, 2 e 3 obtidos experimentalmente para diversas temperaturas. Com a diminuição da temperatura, o tempo de vida média das quase partículas aumenta, aumentando a amplitude das oscilações.

Outro aspecto da questão se refere a passagem do nível de Landau pelo nível de Fermi. Se a temperatura fosse 0 K a função de distribuição de Fermi seria igual a 1, e nós teríamos estados ocupados somente abaixo do nível de Fermi, acima do nível de Fermi não teríamos estados ocupados. Como a temperatura é diferente de 0 K, teremos numa região próxima ao nível de Fermi alguns estados ocupados acima do nível de Fermi, e alguns estados desocupados abaixo do nível de Fermi.

Na distribuição de Fermi nós temos que

para que nossas medidas sejam as melhores possíveis, devemos ter

$$4 \text{ KT} \ll 1 \text{ meV}$$

$$T \ll 3^{\circ}\text{K}$$

aqui 1 meV é a ordem das amplitudes das oscilações observadas.

APÊNDICE -- 2

Os gráficos obtidos por nós no laboratório, apresentaram as oscilações do nível de Fermi em torno de uma certa curva, que era caracterizada por um decaimento exponencial. Esse decaimento exponencial está associado a descarga do capacitor na resistência do eletrômetro. O ideal seria que o capacitor não se descarregasse durante a variação do campo magnético, e assim as oscilações do nível de Fermi seriam em torno de um valor médio deste.

Fizemos portanto um ajuste na curva experimental, ajustando-a a uma função exponencial do tipo

$$f(H) = A e^{-\alpha H}$$

e encontramos os parâmetros A e α . Feito isso encontramos o que deveria ser somado ($\Delta(H)$), a cada ponto da curva experimental para que a mesma passasse a oscilar em torno de uma certa energia de Fermi constante, onde

$$\Delta(H) = A(1 - e^{-\alpha H})$$

REFERÊNCIAS

- (1) J.M. Ziman; Principles of the Theory of Solids (2^a ed.) University Press, Cambridge (1972).
- (2) Smith G.E., Baraff G.A., Rowell J.M.; Phys. Rev. vol. 135 n° 4A, A 1118 (1964).
- (3) Wolff P.A.; J. Phys. Chem. Solids 25, 1057 (1967).
- (4) Cohen M.H. and Blount E.I.; Phil. Mag. 5, 115 (1960).
- (5) Dirac P.A.M.; The Principles of Quantum Mechanics. The Clarendon Press, Oxford (1958).
- (6) Vecchi M.P.; Tese de Doutorado, Departamento de Engenharia Elétrica, MIT (1975).
- (7) Baraff G.A.; Phys. Rev. 137, A 842 (1965).
- (8) Vecchi M.P., Pereira J.R., Dresselhaus M.S.; Phys. Rev. B 14, 298 (1976).
- (9) L.M. Falicov and Stuart Golin; Phys. Rev. vol. 137, n° 3 A, A 871 (1964).
- (10) M. Maltz and M.S. Dresselhaus; Phys. Rev. B 2, 2877 (1970).
- (11) Whitten W.B. e Piccini A.; Phys. Letters 20, 248 (1966).
- (12) Brophy J.J.; Basic Eletronics for Scientists, International Student edition, Tokio - Japão (1966).
- (13) The 1958 Scale of Temperature. N.B.S. monograf 10 U.S. Department of Commerce. N.B.S. Washington.
- (14) Vecchi M.P. and Dresselhaus M.S.; Phys. Rev. B 9, 3257 (1974).
- (15) Martins, J.M.V.; Tese de Doutorado, Instituto de Física USP - (1976).