Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Localização de Anderson e Transição Metal- Isolante em Filmes de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p

Marcelos Lima Peres

Orientador: Prof. Dr. Valmir Antônio Chitta

Tese de doutorado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção
do título de Doutor em Ciências

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Valmir Antônio Chitta (IF - USP)

Prof. Dr. Alain André Quivy (IF - USP)

Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques (IF - UFSCAR)

Prof. Dr. Eliermes Arraes Meneses (IF - UNICAMP)

Prof. Dr. Paulo Sérgio Soares Guimarães (IF - UFMG)

São Paulo
2008

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação
do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Peres, Marcelos Lima

Localização de Anderson e Transição Metal-Isolante em
Filmes de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p .

Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo.
Instituto de Física - Depto. de Física dos Materiais e
Mecânica

Orientador: Prof. Dr. Valmir Antônio Chitta

Área de Concentração: Física

Unitermos: 1. Física da matéria condensada;
2. Propriedades dos sólidos; 3. Física Experimental

USP/IF/SBI-040/2008

à minha família.

Agradecimentos

A Deus, pelo mundo fascinante que criou e à que nos permitiu estudar.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Valmir Chitta, por todo o conhecimento transmitido, pela criatividade das sugestões, pelas discussões sempre produtivas e pela paciência.

Ao Prof. Dr. Paulo Henrique de Oliveira Rappl pela fabricação das amostras e por toda a atenção, disposição e gentileza com que atendeu às solicitações.

Agradeço ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa de estudos concedida para a realização do projeto de doutorado.

Ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo por disponibilizar seus laboratórios para a realização deste trabalho.

À minha mãe, Leonor, ao meu pai, Alonso, e aos meus irmãos, Mayken, Mayara, Marnyce e Marden, pelo carinho e apoio incondicional.

À Anne, pela companhia maravilhosa, pelo apoio, inteligência e paciência com que me ajudou a resolver os mais diversos problemas e que tornou minha vida muito mais feliz.

Aos meus amigos, Rone Peterson, Silas Luiz, Suene Bernardes, Pedro Tavares, Camila de Almeida, Nilton Bueno, Thiago Brito, Maurício Manfrini, Rodrigo Amorin, Laura Paulucci, Wellington Dantas, Paula Jaramillo, Denilson Borges e Rita de Cássia, cuja companhia e amizade tornaram esse período de trabalho uma época muito especial.

A todos os funcionários do Departamento de Física dos Materiais e aos funcionários da secretária da Pós-Graduação pela disposição em ajudar em diversas tarefas.

Localização de Anderson e Transição Metal-Isolante em Filmes de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p

Resumo

Neste trabalho, realizamos o estudo da transição metal-isolante e da localização de Anderson na liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p para x variando de 0 até 0.1. As propriedades de transporte nessa liga (mobilidade, concentração de portadores e resistividade elétrica) foram obtidas utilizando o método de caracterização elétrica por efeito Hall entre as temperaturas de 300 K e 10 K. Nessa região de temperatura, foi possível observar uma transição metal-isolante para $x > 0.05$. Verificamos que a transição é do tipo Anderson e ocorre devido à desordem presente na liga. Para baixas temperaturas ($T < 10$ K) e em amostras com $x > 0.01$, verificamos a presença de magnetorresistência positiva e negativa aplicando campos magnéticos de até 11 T. Nas amostras metálicas, a presença de magnetorresistência negativa é causada pelo efeito conhecido como *localização de Anderson* (efeito de interferência quântica construtiva entre as funções de onda) e a presença de magnetorresistência positiva é causada, principalmente, pelo acoplamento *spin*-órbita, e é chamada de *antilocalização*. Nas amostras isolantes, a magnetorresistência negativa é originada pelo efeito Zeeman enquanto que a magnetorresistência positiva é causada pela redução do comprimento de localização. Assim, os valores positivos e negativos da magnetorresistência têm origens diferentes dependendo do regime de condução (metálico ou isolante). Por esse motivo, o estudo dos resultados experimentais apresentados nesse trabalho foi dividido em duas partes: uma parte que trata as amostras metálicas (região de desordem fraca) e outra parte para as amostras isolantes (região de desordem forte). A partir dessa divisão, e utilizando os modelos teóricos disponíveis na literatura, foi possível fazer uma análise das medidas experimentais de magnetotransporte. Como resultado, identificamos os principais mecanismos de interação (espalhamento inelástico, efeito Zeeman, acoplamento *spin*-órbita, etc.) que interferem no transporte e nos efeitos de localização e antilocalização.

Anderson Localization and Metal-Insulator Transition in p - type Films of $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$

Abstract

In this work, we investigated Anderson's localization and the metal-insulator transition in p -type films of $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ for x varying from 0 up to 0.1. The transport properties of this alloy (mobility, carrier concentration and electrical resistivity) were obtained using the Hall method of electrical characterization for temperatures ranging from 300 K down to 10 K. In this temperature range, it was possible to observe a metal-insulator transition for $x > 0.05$. The transition is of the Anderson type and is due to the disorder present in the alloy. For low temperatures ($T < 10$ K) and for samples with $x > 0.01$, we observed positive and negative magnetoresistance for magnetic fields up to 11 T. For metallic samples, the negative magnetoresistance originates from *Anderson's localization* (constructive quantum interference effect between the wave functions) while positive magnetoresistance is caused, mainly, by the spin-orbit scattering, and it is called *antilocalization*. For insulating samples, negative magnetoresistance is originated from the Zeeman effect while positive magnetoresistance is caused by the localization length reduction. Therefore, positive and negative magnetoresistance values have different origins depending on the conduction regime (metallic or insulating). For this reason, our experimental investigation, presented in this work, was separated into two parts: the first one treats the metallic samples (weak-disorder regime) and the other treats the insulating samples (strong-disorder regime). From this division, and using available theoretical models, it was possible to analyze the magnetotransport experimental measurements. As a result, we identify the main interaction mechanisms (inelastic scattering, Zeeman effect, spin-orbit coupling, etc.) that interfere on the transport and localization and antilocalization effects.

Sumário

1	Introdução	13
2	Características do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$	20
2.1	Propriedades gerais do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$	20
2.1.1	Estrutura de bandas	22
2.1.2	<i>Gap</i> de energia	24
2.1.3	Tensões na rede	25
2.1.4	Fator g de Landé anisotrópico	27
2.2	Características de crescimento	30
2.3	Caracterização elétrica por efeito Hall	31
2.3.1	Tensor condutividade	33
2.3.2	Efeito Hall	36
2.3.3	Magnetorresistência	37
2.4	Método van der Pauw	40
2.5	Propriedades elétricas	41
2.6	Mecanismos de espalhamento	46
2.6.1	Espalhamento por fônons	46
2.6.2	Espalhamento da liga	48
2.6.3	Espalhamento por íons magnéticos	49
2.6.4	Espalhamento elétron-elétron	51
3	Localização Fraca	53
3.1	Definição	53
3.1.1	Probabilidade de retorno do elétron	54
3.1.2	Correção para a condutividade	56
3.1.3	Correção para a magnetocondutividade	59
3.2	Efeito de interações na localização fraca	61
3.2.1	Efeito Zeeman e acoplamento <i>spin</i> -órbita	61

3.2.2	Efeito do espalhamento magnético	64
3.2.3	Interação elétron-elétron	67
4	Resultados no Regime de Localização Fraca	71
4.1	Medidas de magnetorresistência	71
4.2	Ajustes das curvas de magnetorresistência	80
5	Transição metal-isolante	91
5.1	Semicondutores metálicos e isolantes	91
5.2	Estados localizados e limite de mobilidade	92
5.3	O formalismo de Kubo	93
5.4	Localização de Anderson	95
5.5	Transição de Anderson e o Efeito Hall	99
5.6	Transição de Mott	100
6	Resultados do Transporte no Regime Isolante	102
6.1	Condutividade	102
6.2	Efeito do campo magnético	105
6.3	Resultados experimentais	107
6.3.1	Medidas de resistência elétrica	107
6.3.2	Medidas de magnetorresistência	111
7	Região de Transição Metal-Isolante	122
7.1	Características da série	122
7.2	Resistividade no regime crítico	126
7.3	Magnetorresistência	127
8	Conclusões	135

Lista de Figuras

1.1	Resistência elétrica de filmes finos de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com concentração de Eu variando de $x = 0$ até $x = 0.1$, em função da temperatura, normalizada para o valor da resistência em $T = 140$ K. Uma transição metal-isolante ocorre em torno de 0.05.	16
1.2	Curvas de magnetorresistência para $T \sim 7$ K. Em (a), medidas para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.04$ e em (b), medidas para a amostra de $x = 0.1$. Embora ambas as amostras apresentem curvas com perfis bastante semelhantes, a magnetorresistência observada nessas figuras tem origens diferentes. Note que a magnetorresistência atinge seu valor máximo em torno de $B = 1.5$ T para a amostra de 0.04, enquanto que para a amostra de 0.1, o máximo ocorre em torno de $B = 3.0$ T.	16
1.3	Curvas de magnetorresistência para amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo n e p . Em (a), para a amostra do tipo n , observamos somente valores negativos de magnetorresistência indicando a presença de localização fraca (os valores positivos são devidos à magnetorresistência clássica). Em (b), para a amostra do tipo p , observamos valores positivos e negativos de magnetorresistência. Ambas as amostras então próximas da região de transição metal-isolante.	17
2.1	Estrutura cristalina cúbica, do tipo NaCl, do PbTe. As esferas maiores representam o chumbo (Pb) e as menores o telúrio (Te).	21
2.2	Primeira zona de Brillouin com os elipsóides de revolução orientados nas direções $[111]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$ e $[11\bar{1}]$	22
2.3	Estrutura de bandas do PbTe calculada utilizando o método empírico do pseudopotencial [15]. A densidade de estados também pode ser visualizada no lado direito da figura.	23
2.4	Representação esquemática da estrutura de bandas do PbTe no ponto L da zona de Brillouin. Sem $spin$ -órbita (esquerda) e com $spin$ -órbita (direita) [18].	23

2.5	Varição da anisotropia $K = m_l/m_t$ com a concentração de Európio para o $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$	24
2.6	(a) Variação do gap do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com a temperatura e para alguns valores de x . (b) <i>Gap</i> de energia em função de x para as temperaturas de 300 e 4.2 K.	25
2.7	(a) Estrutura de bandas em $T = 4.2$ K sem o efeito de <i>strain</i> , com as bandas 1 e 2 ocupadas, onde 1 representa os vales oblíquos e 2 o vale na direção [111]. (b) O efeito do strain desloca as energias de forma que a diferença entre as bandas de condução dos dois vales seja de 10 meV. Se a energia de Fermi (E_F) for menor que 10 meV, somente o vale na direção [111] estará populado (vale 2).	26
2.8	Varição da energia de Fermi com a inclusão de Eu para os filmes de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p investigados nesse trabalho. A energia de Fermi se torna menor que 10 meV para $x = 0.03$	27
2.9	Fator g efetivo total para a banda de condução e de valência para a liga $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$: (a) para o vale na direção [111] (longitudinal) e (b) para os vales oblíquos. Os valores de g diminuem mais rapidamente para a banda de condução que para a banda de valência conforme a quantidade de Európio (x) aumenta.	30
2.10	Representação esquemática de uma amostra mostrando os contatos elétricos utilizando a geometria de van der Pauw.	41
2.11	Resistência elétrica de filmes finos de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com concentração de Eu variando de $x = 0$ até $x = 0.1$, em função da temperatura, normalizada para o valor da resistência em $T = 140$ K. Uma transição metal-isolante ocorre em torno de 0.05.	42
2.12	Densidade de buracos em função da concentração x para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p para as temperaturas de 1.8 e 10 K.	43
2.13	Resistências R_{xx} em (a) e as mobilidades das amostras em (b) para amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p como função da concentração x de Eu para $T = 10$ K.	44
2.14	Varição de $k_F l$ para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p em função da concentração de Eu. Para $x = 0.05$ o produto $k_F l$ torna-se menor que 1 e concorda com a transição observada na figura 2.11.	44
2.15	(a) Mobilidade em função da temperatura para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0, 0.02, 0.04$ e 0.05 . (b) Ajuste de $\mu \sim T^{-\alpha}$ para as curvas de mobilidade. O expoente α diminui com o aumento de x	46
2.16	Tempos de espalhamento por fônons calculados a partir da equação (2.6.4) para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p	48
2.17	Tempos de espalhamento por fônons para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p em função de x para as temperaturas fixas de 300 K em (a) e de 4 K em (b).	49

2.18	Tempo de espalhamento pela liga para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p em função da concentração de Eu.	49
2.19	Tempos de espalhamento sem “ <i>spin-flip</i> ” (τ_s^z) em (a) e com “ <i>spin-flip</i> ” (τ_s^t) em (b) para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo- p em função da concentração de Eu.	51
3.1	(a) Representação esquemática de alguns possíveis caminhos de um elétron viajando de A até A' . (b) Trajetórias que se cruzam.	55
3.2	Variação da condutividade σ , para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , em função da concentração de Eu, em $T = 4.2$ K juntamente com a correção $\Delta\sigma$	58
3.3	Contribuição da antilocalização para a magnetorresistência, para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ para $x = 0.03$, levando em conta a interação <i>spin</i> -órbita e o efeito Zeeman segundo a expressão (3.2.2).	63
3.4	Os tempos de <i>spin-flip</i> (τ_s^t) e sem <i>spin-flip</i> (τ_s^z) calculado para uma amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ para $x = 0.04$	65
3.5	A variação de γ nos modelos de Fukuyama e Amaral. No modelo de Fukuyama, γ tende a 1 muito mais lentamente que no modelo de Amaral.	67
3.6	Magnetorresistências de acordo com os modelos de Fukuyama e Amaral (equações (3.2.1) e (3.2.4)) para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.04$, em $T = 1.6$ K. Os pontos medidos são representados pelas caixas abertas.	68
4.1	Curvas de magnetorresistência para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) Para $x = 0$, observamos o comportamento quadrático da magnetorresistência com o campo para valores muito pequenos de B . Conforme B aumenta, as curvas apresentam um comportamento quase linear com o campo. (b) Para $x = 0.01$, observamos o comportamento clássico para as temperaturas variando de 4.3 até 9 K. Em 2.1 K, vemos uma pequena amplitude positiva em torno de $B = 0$. (c) Para $x = 0.02$, observamos um comportamento anômalo para $T < 2.3$ K e na figura (d), para $x = 0.03$, não é mais possível observar o comportamento clássico. As curvas obtidas para as amostras de 0.04, figura (e) e 0.05, figura (f), exibem comportamentos característicos de localização (magnetorresistência negativa) e antilocalização (magnetorresistência positiva).	73

- 4.2 Magnetorresistência calculada com $\mu^2 B^2$ (linhas tracejadas) juntamente com as curvas medidas (linhas cheias) para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) Na amostra com $x = 0$, vemos que a aproximação é válida para campos de até 0.1 T, aproximadamente, tanto para a mais alta quanto para a mais baixa temperatura. Para $x = 0.01$, figura (b), a dependência quadrática pode ser considerada para campos de até 0.35 T. Na figura (c), para $x = 0.02$, a aproximação quadrática é válida até $B \sim 1$ T. Na figura (d), para $x = 0.03$, essa aproximação é válida na região de campo onde $0.5 < B < 1$ T enquanto que para $x = 0.04$, figura (e), temos a validade dentro da região onde $1.5 < B < 2.5$ T. 75
- 4.3 Magnetorresistência para a amostra de PbTe ($x = 0$). Curva experimental para $T = 1.8$ K juntamente com a curva clássica calculada utilizando a aproximação quadrática. A diferença entre as duas é nula (curva vermelha tracejada) até ~ 0.1 T. 76
- 4.4 Curvas de magnetorresistência obtidas quando subtraímos a contribuição clássica dos pontos medidos para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo- p . (a) Para $x = 0.01$ observamos pequenas oscilações nas curvas para $B < 0.35$ T mas não é possível afirmar que sejam uma indicação da presença de efeitos de interferência. (b) Para $x = 0.02$ fica clara a presença do efeito de antilocalização para temperaturas menores que 3.2 K. (c) Para $x = 0.03$, vemos valores positivos de magnetorresistência para todas as temperaturas. (d) A amostra de $x = 0.04$ apresenta valores tanto positivos quanto negativos. Valores de magnetorresistência para B fora da região de validade não têm significado físico (ver figura 4.2). . . . 77
- 4.5 Curva medida e curva obtida da subtração da contribuição clássica para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.05$. A curva mantém sua forma e sofre um pequeno deslocamento, que se torna mais evidente a partir de 0.25 T, aproximadamente. . . 78
- 4.6 Curvas de magnetorresistência para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com x variando de 0 até 0.05, para uma temperatura em torno de 4 K. Para $x = 0.01$, observamos o aparecimento de uma pequena contribuição negativa próxima de $B = 0$ que desaparece quando o campo aumenta. Para $x = 0.02$, observamos uma magnetorresistência positiva entre 0 e 1 T, aproximadamente, e que se origina do efeito de antilocalização. Para $x = 0.03$, podemos observar que a amplitude positiva atinge um valor máximo com relação às outras amostras. Para $x = 0.04$ e 0.05, a amplitude máxima atingida pela magnetorresistência positiva parece ser a mesma, enquanto que a magnetorresistência negativa é mais evidente na amostra de 0.05. 79

- 4.7 Resistência normalizada para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , em $T = 20$ K, em função da temperatura. Na amostra com $x = 0.01$, a resistência começa a aumentar em torno de 15 K. Para $x = 0.02$ o aumento de resistência ocorre mais lentamente, enquanto que para $x = 0.03$ a resistência cai abruptamente com a queda de temperatura. Para $x = 0.04$, a resistência cai até $T = 10$ K, a partir de onde começa a aumentar. Para $x = 0.05$, observamos somente um aumento da resistência quando a temperatura diminui. 81
- 4.8 Ajustes para as amostras com diferentes concentrações de Eu. (a) Resultados para a amostra com $x = 0.02$. Foi possível realizar um bom ajuste até 3.7 K e para valores de B até 0.1 T. (b) Para $x = 0.03$, o ajuste foi possível para valores máximos de $B \sim 0.05$ T. (c) Para $x = 0.04$, um bom ajuste foi possível para valores de B até 0.1 T. (d) Amostra com $x = 0.05$ para as temperaturas mais baixas. Um bom ajuste foi possível para as temperaturas de 1.6 e 2.6 K (para valores de B até 0.05 T), 3.5 e 5.8 K (para valores de B até 0.1 T). Para a temperatura mais baixa medida nessa amostra ($T = 1.4$ K), foi possível ajustar a curva na região de campo até 0.02 T. (e) Amostra com $x = 0.05$ para as temperaturas mais altas. O ajuste foi possível até $B \sim 0.1$ T. 83
- 4.9 Tempos de espalhamento inelástico (τ_i) e *spin*-órbita (τ_{so}) obtidos através dos ajustes para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) Para $x = 0.02$, observamos que τ_i aumenta com a queda de temperatura, enquanto que τ_{so} é praticamente constante, exceto para o ponto correspondente à temperatura de 5.6 K. Em (b), para $x = 0.03$, τ_i e τ_{so} aumentam com a queda de temperatura, embora τ_{so} aumente muito lentamente com T . Em (c), para $x = 0.04$, τ_i aumenta com a queda de temperatura até o valor de 4 K e passa a ser praticamente constante a partir desse ponto. Para essa mesma temperatura, τ_{so} sofre uma pequena oscilação. Em (d), para $x = 0.05$, ambos τ_i e τ_{so} parecem variar muito pouco com a redução de temperatura até $T = 4$ K. A partir dessa temperatura, tanto τ_i quanto τ_{so} aumentam quando a temperatura é reduzida. 84

4.10	A razão τ_i/τ_{so} em função da temperatura para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) Para $x = 0.02$, o aumento de τ_i/τ_{so} indica que o efeito de <i>spin</i> -órbita se torna cada vez mais importante quando a temperatura diminui, concordando com a análise feita e apresentada na figura 4.9. (b) Para $x = 0.03$, também observamos um aumento de τ_i/τ_{so} , porém, com uma amplitude menor. (c) Para $x = 0.04$, τ_i/τ_{so} segue o comportamento da amostra com $x = 0.03$. (d) Para $x = 0.05$, a razão τ_i/τ_{so} é praticamente independente da temperatura para $T > 4$ K. Para temperaturas menores, observamos claramente a diminuição de τ_i/τ_{so} com a queda de temperatura. Isso indica uma redução do acoplamento <i>spin</i> -órbita e concorda com a seqüência de curvas de magnetorresistência nas temperaturas 5.8, 3.5 e 1.6 K dessa amostra (ver figura 4.8 (d) e (e)).	88
4.11	Ajustes para os tempos de espalhamento inelásticos utilizando a expressão $\tau_i = AT^{-\alpha}$	89
4.12	Tempo de espalhamento inelástico, τ_i , variando com a concentração de európio (x) para as temperaturas fixas de 1, 2, 3, 4, 5 e 10 K. Para as temperaturas de 3, 4 e 5 K, τ_i varia muito pouco com a alteração da quantidade de Eu. Para temperaturas mais altas ou mais baixas que esses valores, não fica claro como τ_i evolui com a concentração de Eu. Para todas as amostras, o espalhamento diminui com a queda de temperatura.	90
5.1	Os 3 mecanismos de condução nos estados localizados. No caso 1, o portador é ativado para os estados acima do limite de mobilidade. No caso 2, o portador salta para o estado mais próximo e no caso 3 para o estado com a energia mais próxima.	94
5.2	Poços de potencial para uma rede cristalina que produzem uma banda estreita de níveis com largura B	96
5.3	Poços de potencial para uma rede de Anderson e a densidade de estados.	97
5.4	Diagramas das funções de onda. (a) quando $l \sim a$ e em (b) quando os estados estão localizados	98
5.5	Densidade de estados. Os estados localizados correspondem às regiões sombreadas e os estados estendidos estão no centro da banda. E_c e E_c' separam as regiões de energia.	99
6.1	Resistências elétricas medidas para baixas temperaturas. Ajuste para os modelos de Mott, ES e NNH para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) $x = 0.07$, (b) $x = 0.09$ e (c) $x = 0.1$	108

- 6.2 As energias para os saltos entre sítios para o caso Mott (equação (6.1.6)) e ES (equação (6.1.7)) juntamente com a energia do gap de Coulomb (equação (6.1.8)) em função da temperatura para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . A energia térmica $k_B T$ também é apresentada. Em (a) para $x = 0.09$ e (b) para $x = 0.1$. . . 109
- 6.3 A inclinação dR_{xx}/dT para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . Em (a) $x = 0.09$ e (b) $x = 0.1$. As mudanças na inclinação tem sinais diferentes para as duas amostras e ocorrem nas temperaturas onde $\Delta_{Mott} \sim 2\Delta_{CG}$ (ver figura 6.2). 110
- 6.4 Magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.1$. A oscilação em torno de 1 T para $T = 2.7$ K corresponde a uma ligeira variação de temperatura durante a medida. 111
- 6.5 Ajuste para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.1$. (a) Ajuste para baixo campo e (b) para alto campo utilizando (6.3.2) e (6.3.3). 112
- 6.6 Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.1$. (a) Energia do limite de mobilidade E_c obtida dos ajustes e a energia de Fermi E_F calculada a partir dos valores de concentração de buracos. (b) Valores de $k_B T$ comparados com a diferença $(E_c - E_F)$ 114
- 6.7 Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.1$. Energia de Zeeman e as diferenças $(E_c - E_F)$ para as temperaturas medidas. Os pontos de interseção indicam o ponto onde a magnetorresistência deveria mudar de inclinação. 115
- 6.8 Magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.09$. Essa amostra só apresentou valores negativos de magnetorresistência dentro da região de temperatura onde as medidas foram realizadas. 116
- 6.9 Ajustes para as curvas medidas da amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.09$ e apresentadas na figura 6.8. Espera-se que as curvas teóricas sejam válidas nas proximidades de 0.1 T. Para as temperaturas maiores que 4.9 K a dependência da magnetorresistência com o campo é muito pequena. 117
- 6.10 Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.09$. (a) As energias E_c e E_F em função da temperatura e (b) Valores da diferença de energia $(E_c - E_F)$ comparados com a energia térmica $k_B T$, em função da temperatura. 117
- 6.11 Curvas de magnetorresistência medidas para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.07$. Uma mudança drástica de comportamento ocorre para $T < 5.7$ K. 119
- 6.12 Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.07$. Ajustes para as curvas experimentais mostradas na figura 6.11. Em (a) temos as curvas para todas as temperaturas e em (b) somente para as temperaturas mais altas. 120
- 6.13 Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.07$. (a) Energias E_c e E_F e em (b) a diferença $(E_c - E_F)$ comparada com a energia térmica $k_B T$ 121

6.14	Modelo proposto por M. Lida para o nível $4f$ dentro da banda de valência no filme de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ (ref. [77]).	121
7.1	Concentração de buracos para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$. As amostras com menor concentração foram crescidas com um menor fluxo de Te (ver tabela 7.1).	124
7.2	Fluxos da célula de Te mantidos durante o crescimento de cada amostra juntamente com a concentração de portadores medida para $T = 300$ K para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$	125
7.3	Resistividades para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$, em função da temperatura, normalizadas em 300 K.	125
7.4	Ajuste das resistividades para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$. Apresentamos somente 4 amostras, escolhidas do início e do fim da série, para uma melhor visualização.	126
7.5	Curvas de resistividade medidas para as amostras 834 ($p \sim 10^{22} \text{ m}^{-3}$) e 841 ($p \sim 10^{24} \text{ m}^{-3}$) de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$	128
7.6	Resistividade da amostra 841 de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$	129
7.7	Curvas de magnetorresistência para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$. (a) Amostra 841. (b) Amostra 834.	130
7.8	Ajustes das curvas de magnetorresistência para a amostra 841, de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$, utilizando o modelo de Fukuyama e Yosida. As linhas tracejadas correspondem as curvas teóricas.	130
7.9	Amostra 841 de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$. (a) Energia do limite de mobilidade E_c comparada com a energia de Fermi E_F . (b) Diferença $E_c - E_F$ comparada com a energia térmica $k_B T$	132
7.10	Ajustes das curvas de magnetorresistência para a amostra 834 de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p apresentadas na figura 7.7 (b).	133
7.11	Tempo de espalhamento inelástico para a amostra 834 obtido dos ajustes apresentados na figura 7.10.	133

Lista de Tabelas

2.1	Componentes longitudinal e transversal para os fatores g efetivos, na ausência e na presença da interação de troca [21], e os resultados para as contribuições do vale longitudinal e dos vales oblíquos, para a banda de condução para um campo magnético aplicado na direção [111].	29
2.2	Componentes longitudinal e transversal para os fatores g efetivos, na ausência e na presença da interação de troca [21], e os resultados para as contribuições do vale longitudinal e dos vales oblíquos, para a banda de valência para um campo magnético aplicado na direção [111].	29
2.3	Resultados para g_T^{LO} e g_T^{OB} para a banda de valência e para a banda de condução.	30
2.4	Parâmetros de crescimento das amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , onde T é a temperatura da célula de efusão e ϕ o fluxo do elemento.	32
2.5	Propriedades elétricas da série de amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com x variando de 0 até 0.1 para $T = 10$ K. A amostra com $x = 0.08$ não pôde ser medida. Vemos na tabela a concentração de portadores p , a resistência elétrica R e a mobilidade μ	32
3.1	Valores de x , densidade de portadores p , resistência R , resistividade ρ , mobilidade μ e condutividade σ para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p para $T = 4.2$ K.	59
3.2	Massa transversal (m_t) e de ciclotron (m_c) e os tempos de espalhamento elástico (τ_0) e inelástico (τ_i) para $T = 4.2$ K	59
3.3	Tempos de espalhamento inelásticos τ_i e spin-órbita τ_{so} , obtidos dos ajustes dos modelos de Fukuyama e Amaral, para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.04$, em $T = 1.6$ K	67
4.1	Concentração de Eu (x), concentração de portadores (p), mobilidade μ , o produto $k_F l$ e a energia de Fermi para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ para $T = 4.2$ K . . .	78
4.2	Parâmetros utilizados no ajuste da magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.02$	86

4.3	Parâmetros utilizados no ajuste da magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.03$	86
4.4	Parâmetros utilizados no ajuste da magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.04$	86
4.5	Parâmetros utilizados no ajuste da magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$	87
6.1	Valores utilizados para os ajustes das curvas teóricas nos regimes de VRH ($\alpha = 1/4$ para Mott ou $\alpha = 1/2$ para ES) e NNH ($\alpha = 1$) para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.07, 0.09$ e 0.1 . Os valores do comprimento de salto R_s são para $T = 4.2$ K. Todas as grandezas estão em unidades do S.I. . .	109
7.1	Parâmetros de crescimento para a série de amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com uma concentração fixa $x = 0.05$	123
7.2	Valores obtidos para os parâmetros A e β para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$	127

Capítulo 1

Introdução

O estudo dos materiais cristalinos tem sido intensificado pelos físicos desde o início da mecânica quântica. A periodicidade de uma rede cristalina permite descrever as funções de onda eletrônicas em termos de funções de Bloch, de forma que é possível calcular a estrutura de bandas de uma grande variedade de materiais. Entretanto, apesar da eficácia das funções de Bloch, os materiais reais não apresentam uma periodicidade ideal. Na verdade, sempre existe um certo grau de desordem que pode variar desde algumas impurezas presentes na rede até o limite de desordem forte presente em uma liga. No caso da desordem fraca, o transporte é descrito por meio do espalhamento das ondas de Bloch pelas impurezas. Em um metal, esse tratamento leva à conhecida equação de transporte de Boltzmann, e a resistividade em baixas temperaturas tem a forma $\rho(T) = \rho_0 + AT^n$. A constante A , nesse caso, é sempre positiva e n é maior ou igual a 2. Se a desordem for forte, como no caso das ligas, onde átomos ocupam posições aleatórias na rede, a aproximação tradicional supõe que existe uma certa periodicidade quando se toma alguma média sobre o sistema.

Nas últimas décadas, porém, foi estabelecido que os materiais desordenados não podem ser compreendidos nos moldes de materiais ordenados. Hoje sabemos que, mesmo no limite de desordem fraca, basicamente todos os aspectos da expressão para a resistividade, apresentada acima, estão incorretos. O coeficiente A pode ser positivo ou negativo e o expoente n é tipicamente $1/2$ para sistemas tridimensionais. Esses novos conceitos se devem basicamente à teoria da *localização de Anderson* ou *localização fraca*.

Em 1958, Anderson [1] mostrou que a função de onda do elétron em um potencial aleatório pode ser profundamente alterada se a aleatoriedade for suficientemente grande. A visão tradicional era de que o espalhamento causado pelo potencial

aleatório fazia com que as ondas de Bloch perdessem sua coerência de fase na escala do livre caminho médio l . Ainda assim, a função de onda permaneceria estendida através da amostra. Anderson mostrou que, se a desordem for forte, a função de onda pode se tornar localizada e decair exponencialmente a partir de algum ponto do espaço ($\vec{r}_0$) como $|\psi(\vec{r})| \sim \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_0|/\xi)$ onde ξ é o comprimento de localização.

Neste trabalho, estudaremos o fenômeno da localização de Anderson e a transição metal-isolante que ocorrem na liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$. Ambos os efeitos originam-se da desordem causada pela introdução dos átomos de Eu em substituição aos átomos de Pb. O grau de desordem no sistema é basicamente determinado pela concentração de Eu (x), e podemos estudar a localização fraca para amostras com baixos valores de x . Conforme aumentamos a concentração x , observamos uma transição metal-isolante e a partir dessa concentração devemos tratar as amostras na região de desordem forte (amostras isolantes).

O $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ é um semicondutor magnético diluído do grupo IV-VI, onde o orbital semi-preenchido $4f$ do átomo de Eu fornece o caráter magnético dessa liga. Assim como os demais semicondutores do grupo IV-VI (entre eles o PbSe, PbS, SnTe e GeTe) o $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ apresenta propriedades bastante interessantes que o diferencia dos demais semicondutores. O pequeno *gap* do PbTe (~ 0.19 eV para $T = 4.2$ K) e a capacidade de alteração desse *gap*, mesmo para baixas concentrações de Eu, tornam bastante viável a aplicação desse material na fabricação de dispositivos de detecção na região do infravermelho [2]. Além disso, o elevado valor da constante dielétrica ε (~ 1350 para $T = 4.2$ K) [3] cria uma blindagem das impurezas ionizadas presentes no material permitindo que a mobilidade atinja valores elevados, da ordem de 10^2 m²/Vs, em baixas temperaturas [4]. Uma outra característica desse material é o elevado valor do fator g de Landé que resulta em um forte efeito Zeeman, tornando essa liga um candidato promissor para a fabricação de filtros de *spin* [5]. Essas propriedades, associadas à dependência do *gap* de energia com a temperatura (o *gap* diminui à medida que a temperatura diminui) e ao tipo de estrutura eletrônica (*gap* direto no ponto L da zona de Brillouin), diferenciam esse material dos semicondutores convencionais. Assim, além de proporcionar um sistema rico em propriedades físicas, o $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ tem-se mostrado um bom candidato para futuras aplicações em *spintrônica* [3], área que promete revolucionar a ciência da computação [6, 7].

As amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ estudadas nesse trabalho, essencialmente filmes finos com condutividade do tipo p , foram crescidas por meio da técnica de epitaxia por feixe molecular (MBE) para x variando de 0 até 0.1. O estudo do fenômeno de

localização de Anderson na região metálica e da transição metal-isolante, sofrida por esse material para $x = 0.05$, será feito por meio da análise das curvas de magnetorresistência e das propriedades de transporte (resistividade, concentração de portadores e mobilidade).

No capítulo 2, apresentaremos as principais características dos filmes epitaxiais de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ investigados no trabalho. Começaremos dando uma breve descrição das propriedades gerais do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ (estrutura de bandas, *gap* de energia, efeitos de *strain*, fator g de Landé, etc.) que serão importantes no decorrer do estudo para a análise dos resultados. Em seguida, apresentaremos as características de crescimento das amostras e passaremos para o método de caracterização elétrica por efeito Hall, apresentando parte do formalismo necessário para o tratamento dos dados experimentais. Após uma rápida introdução à Geometria de van der Pauw (geometria utilizada na configuração dos contatos elétricos na amostra), apresentaremos então as propriedades de transporte obtidas por meio do efeito Hall e, por fim, faremos uma breve descrição dos mecanismos de espalhamento presentes no sistema. Nesse capítulo, veremos que o aumento de Eu na liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p leva a uma transição metal-isolante que ocorre em torno de $x = 0.05$, conforme pode ser observado na figura 1.1. Com o objetivo de realizar uma análise mais clara, os resultados foram tratados em duas regiões: a região metálica ($x \leq 0.05$) e a região isolante ($x > 0.05$). Isso foi feito uma vez que, embora as curvas de magnetorresistência apresentem perfis semelhantes, os efeitos que explicam tais curvas tem origens completamente diferentes (ver figura 1.2).

No capítulo 3, faremos uma introdução ao fenômeno de localização fraca que ocorre em um sistema metálico devido a presença de desordem. Começaremos com sua definição e passaremos para os modelos existentes que calculam a contribuição da localização para a condutividade na presença de diversos mecanismos de interação. Com os dados apresentados no capítulo 2, poderemos identificar qual modelo se aplica melhor aos resultados obtidos nessas amostras. Veremos que o fenômeno de localização é uma poderosa ferramenta para o estudo dos mecanismos de espalhamento presentes em um sistema. Ao utilizarmos os modelos teóricos para ajustarmos os dados experimentais, será possível obter os tempos de espalhamento inelástico (τ_i) e *spin*-órbita (τ_{so}) em função de parâmetros como temperatura e concentração de Eu (x).

No capítulo 4, apresentaremos os resultados das medidas para as amostras do tipo p de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com x variando de 0 até 0.05. Esses resultados correspondem às amostras que se encontram no regime metálico. Por meio das curvas de resis-

Figura 1.1: Resistência elétrica de filmes finos de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com concentração de Eu variando de $x = 0$ até $x = 0.1$, em função da temperatura, normalizada para o valor da resistência em $T = 140$ K. Uma transição metal-isolante ocorre em torno de 0.05.

Figura 1.2: Curvas de magnetorresistência para $T \sim 7$ K. Em (a), medidas para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.04$ e em (b), medidas para a amostra de $x = 0.1$. Embora ambas as amostras apresentem curvas com perfis bastante semelhantes, a magnetorresistência observada nessas figuras tem origens diferentes. Note que a magnetorresistência atinge seu valor máximo em torno de $B = 1.5$ T para a amostra de 0.04, enquanto que para a amostra de 0.1, o máximo ocorre em torno de $B = 3.0$ T.

Figura 1.3: Curvas de magnetorresistência para amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo n e p . Em (a), para a amostra do tipo n , observamos somente valores negativos de magnetorresistência indicando a presença de localização fraca (os valores positivos são devidos à magnetorresistência clássica). Em (b), para a amostra do tipo p , observamos valores positivos e negativos de magnetorresistência. Ambas as amostras então próximas da região de transição metal-isolante.

tividade e de magnetorresistência, foi possível identificar a presença do fenômeno de localização fraca. Esse fenômeno também já foi observado em ligas de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo n [8] porém, nas amostras do tipo p , além do efeito de localização, também foram observadas curvas de magnetorresistência positiva indicando a presença do efeito que conhecemos como *antilocalização*. Na figura 1.3, mostramos algumas curvas de magnetorresistência para amostras do tipo n e do tipo p . Em (a), temos a magnetorresistência para várias temperaturas de uma amostra do tipo n [9], que só apresenta magnetorresistência negativa. Em (b), temos as medidas para uma amostra do tipo p , que apresenta tanto magnetorresistência positiva como negativa. Ambas as amostras estão próximas da região de transição metal-isolante, que ocorre para x maior que 0.1, no caso de amostras do tipo n [8], e para x maior que 0.05 no caso de amostra do tipo p [10]. A magnetorresistência positiva observada na figura 1.3 (b), para a amostra do tipo p , é uma indicação da presença de um efeito conhecido como *antilocalização* e até onde sabemos jamais foi observada em amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo n .

Faremos uso do modelo proposto por Fukuyama e Hoshino, que leva em conta a contribuição do efeito *spin*-órbita e do efeito Zeeman para a localização, para ajustarmos as curvas de magnetorresistência. Através desses ajustes, obteremos os tempos de espalhamento inelástico (τ_i) e de *spin*-órbita (τ_{so}) e, em seguida, verificaremos como esses mecanismos se comportam quando variamos a concentração de

Európio (x) e a temperatura (T).

No capítulo 5, faremos a introdução dos conceitos necessários para tratarmos o transporte no regime isolante. Começaremos apresentando a definição de semicondutores que apresentam condução metálica ou isolante e, em seguida, verificaremos como a condução é alterada na presença de estados localizados introduzindo o conceito de limite de mobilidade. Uma vez que o nível de Fermi passa de uma região de estados não localizados (estados estendidos) para uma região de estados localizados, passando pela energia E_c que separa as duas regiões, uma transição deve ocorrer. A condução, nesse caso, passa de metálica para uma condução por saltos. Esse tipo de efeito chama-se *transição de Anderson* e é causada pela desordem do sistema.

Por fim, no final deste capítulo, faremos uma breve introdução sobre a *transição do tipo Mott* que, ao contrário do tipo Anderson, não é causada pela desordem no sistema. Na verdade, na transição de Mott também ocorre localização das funções de onda, porém, nesse caso, a localização origina-se nas correlações eletrônicas, sendo um efeito de muitos corpos. Mostraremos que o critério para que ocorra uma transição do tipo Mott não é satisfeito e que, de fato, a transição metal-isolante observada nas amostras tratadas nesse trabalho é do tipo Anderson.

No capítulo 6, apresentaremos os resultados para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com x variando de 0.07 até 0.1. Veremos os modelos existentes que descrevem a condutividade e a magnetorresistência nesse regime bem como seus limites de validade. Sabendo de antemão as características das amostras analisadas, poderemos determinar qual o formalismo que se aplica em cada caso. As amostras serão tratadas detalhadamente uma vez que cada uma apresenta características particulares. Faremos uso dos modelos de Mott *para a resistência elétrica* e os modelos de Efros-Shklovskii e Fukuyama-Yosida para a magnetorresistência para ajustarmos as curvas das amostras isolantes. A determinação da energia do limite de mobilidade E_c será um fator importante para entendermos a origem dos efeitos observados em cada filme. A descrição do comportamento de E_c com relação às energias térmica, de Fermi e de Zeeman nos dará uma visão geral sobre o que ocorre com o *transporte das cargas* quando submetido a variações de temperatura e de campo magnético.

No capítulo 7, estudaremos uma série de amostras com concentração fixa de Eu ($x = 0.05$), onde tentaremos variar a concentração de portadores, e veremos como essa variação influencia as propriedades de transporte dessas amostras. Veremos que a concentração de Eu onde ocorre a transição metal-isolante que foi observada nas ligas de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ pode ser influenciada pelas características de crescimento. Veremos que amostras que se encontram na região de transição metal-isolante (região

crítica) podem tender para um comportamento metálico ou isolante dependendo de como alguns fatores são alterados, como concentração de portadores e temperatura.

Por fim, no capítulo 8, reuniremos as conclusões a que chegamos baseadas nos resultados obtidos no decorrer do trabalho.

Capítulo 2

Características do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$

Neste capítulo, apresentaremos as principais características dos filmes epitaxiais de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ investigados no trabalho. Começaremos dando uma breve descrição das propriedades gerais do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ que serão importantes nos próximos capítulos para a compreensão dos resultados. Em seguida, trataremos as características de crescimento das amostras e passaremos para o método de caracterização elétrica por efeito Hall, apresentando o formalismo necessário para a análise dos resultados experimentais. Apresentaremos então as propriedades de transporte obtidas por meio do efeito Hall e, por fim, faremos uma breve descrição dos mecanismos de espalhamento presentes no sistema.

2.1 Propriedades gerais do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$

O PbTe é um semicondutor do grupo IV-VI que apresenta características particulares que o diferenciam dos outros semicondutores. Entre elas, está sua complexa estrutura de bandas caracterizada por uma acentuada não parabolicidade e por múltiplos vales fortemente anisotrópicos. Ele também apresenta valores bastante elevados dos fatores g de Landé e valores relativamente baixos de massas efetivas. Além disso, os compostos IV-VI são semicondutores degenerados que apresentam comportamento metálico, porém, com concentração de portadores algumas ordens de grandeza menor que nos metais comuns. A característica metálica se deve ao fato de que os estados de elétrons/buracos são ressonantes com a banda de condução/valência, mesmo em $T = 0$ K [11].

O átomo de Európio (Eu) é introduzido no PbTe para formar a liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ criando, assim, um semicondutor magnético diluído onde o orbital $4f$ semi-preenchido (*spin* total $S = 7/2$) do átomo de Eu fornece o caráter magnético dessa liga. Um

semicondutor magnético diluído pode ser considerado como dois sub-sistemas interagentes [12]. O primeiro deles é composto pelos elétrons das bandas de condução e valência, enquanto que o segundo é formado pelos momentos magnéticos localizados associados aos íons magnéticos distribuídos aleatoriamente pela rede. Assim, a principal característica do semicondutor magnético diluído é que o caráter magnético dos íons introduzidos altera as propriedades do semicondutor através da interação de troca entre os momentos magnéticos localizados e o *spin* dos portadores de carga.

O $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ possui a estrutura cristalina do NaCl (figura 2.1) que permanece inalterada desde o PbTe puro ($x = 0$) até o EuTe ($x = 1$) [13]. A inclusão do Eu possibilita uma considerável variação do *gap* de energia mesmo para baixas concentrações introduzidas no PbTe. Isso permite que filmes desse material sejam utilizados como material básico na construção de sensores e dispositivos de detecção, que podem operar desde o infravermelho até a região da luz visível [14].

Veremos no decorrer desta seção que a variação da quantidade de Eu na liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ pode afetar de forma considerável as propriedades do material. Na subseção 2.1.1, apresentaremos o tipo da estrutura de bandas do PbTe e a forma como a inclusão de Eu afeta a anisotropia das massas características desse material. Na subseção 2.1.2, mostraremos como podemos calcular o *gap* de energia do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ em função de x e da temperatura T . Em seguida, na subseção 2.1.3, verificaremos como as tensões presentes na rede podem afetar o transporte nesse material e como devemos tratar os efeitos dessas tensões. Por fim, em 2.1.4, mostraremos que os fatores g de Landé sofrem grandes alterações quando o Európio é introduzido.

Figura 2.1: Estrutura cristalina cúbica, do tipo NaCl, do PbTe. As esferas maiores representam o chumbo (Pb) e as menores o telúrio (Te).

2.1.1 Estrutura de bandas

A estrutura de bandas para os semicondutores do grupo IV-VI já foi calculada por meio de vários métodos teóricos [15]. Atualmente, para o caso do PbTe, a estrutura de bandas de energia é bem conhecida [16, 15] e sabe-se que ela tem um pequeno *gap* direto no ponto L da zona de Brillouin composta por 4 elipsóides de revolução com seus eixos principais nas direções $\langle 111 \rangle$ (ver figura 2.2). A estrutura de bandas calculada utilizando o método do pseudopotencial é apresentada na figura 2.3 [15].

Figura 2.2: Primeira zona de Brillouin com os elipsóides de revolução orientados nas direções $[111]$, $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$ e $[11\bar{1}]$.

Para o cálculo correto da estrutura de bandas do PbTe é necessário levar em conta a interação *spin*-órbita existente entre os níveis de energia [15, 17]. Uma representação esquemática da estrutura de bandas do PbTe pode ser observada na figura 2.4. Nesse diagrama, vemos o resultado dos cálculos quando a interação *spin*-órbita dos níveis é levada em consideração. É essa interação que dá origem à alta anisotropia das superfícies de energia do PbTe.

Para determinar a anisotropia das massas efetivas, calculamos a relação entre as massas efetivas longitudinal e transversal m_l/m_t (m_l paralela e m_t perpendicular à direção $[111]$) que fornece 10.3 para o PbTe. Para materiais onde não existe anisotropia, essa relação é igual a unidade. Com a inclusão do Európio, as massas efetivas são alteradas e podem ser calculadas, em função da concentração x de Eu, pelas expressões [8]:

$$m_l = (0.213 + 3.23x) m_0 \quad (2.1.1)$$

Figura 2.3: Estrutura de bandas do PbTe calculada utilizando o método empírico do pseudopotencial [15]. A densidade de estados também pode ser visualizada no lado direito da figura.

Figura 2.4: Representação esquemática da estrutura de bandas do PbTe no ponto L da zona de Brillouin. Sem *spin*-órbita (esquerda) e com *spin*-órbita (direita) [18].

$$m_t = (0.0207 + 0.453x) m_0 \quad (2.1.2)$$

onde m_0 é a massa de repouso do elétron.

A figura 2.5 mostra o comportamento do fator de anisotropia em função da concentração de Európio calculado utilizando as equações (2.1.1) e (2.1.2).

Conforme veremos no próximo tópico, a introdução de Eu aumenta o *gap* do material, diminuindo as interações interbandas. Isso explica a diminuição da anisotropia com o aumento de Eu (ver figura 2.5). A anisotropia (m_l/m_t) varia de 10.3 para 7.3 entre $x = 0$ e $x = 1$.

Figura 2.5: Variação da anisotropia $K = m_l/m_t$ com a concentração de Európio para o $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$.

2.1.2 *Gap* de energia

Uma característica bastante interessante do PbTe é a variação do *gap* com a temperatura que, ao contrário da maioria dos semicondutores, diminui quando a temperatura é reduzida. O valor do *gap* de energia em $T = 300$ K para $x = 0$ é de 321 meV. Em $T = 4.2$ K o valor cai para 190 meV. Veremos agora como o *gap* é alterado quando os átomos de Eu são introduzidos na liga.

O valor do *gap* em função da temperatura T e da concentração x de Eu pode ser calculado utilizando a seguinte expressão [14]:

$$\varepsilon_g(x, T) = 189.7 + 0.48T^2 \frac{(1 - 7.56x)}{T + 29} + 4480x \quad (2.1.3)$$

Figura 2.6: (a) Variação do gap do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com a temperatura e para alguns valores de x . (b) Gap de energia em função de x para as temperaturas de 300 e 4.2 K.

A expressão (2.1.3) está em unidades de meV e só é válida para valores de x até 0.1.

Na equação (2.1.3), a energia é dada em meV e a temperatura em kelvin (K). A figura 2.6 (a) mostra o comportamento do gap de energia do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com a temperatura e para os valores de $x = 0, 0.01, 0.05$ e 0.1 . A variação do gap em 300 K é de 348.7 meV entre $x = 0$ e $x = 0.1$. Em 4.2 K a variação é de 447.8 meV entre os mesmos valores de x . Essa diferença de aproximadamente 100 meV se deve ao fato de que o gap de energia cai muito mais rapidamente para $x = 0$ do que para $x = 0.1$ quando a temperatura é reduzida. A figura 2.6 (b) mostra o gap de energia em função de x para as temperaturas de 300 e 4.2 K. Podemos observar nessa figura que ε_g varia muito mais rapidamente com o aumento de Eu para a temperatura de 4.2 K.

2.1.3 Tensões na rede

As tensões na rede (“*strain*”), surgem devido à diferença entre os parâmetros de rede do substrato e do filme que é crescido sobre ele. Os filmes investigados nesse trabalho foram crescidos sobre substrato de BaF_2 . Na temperatura ambiente, os parâmetros de rede do BaF_2 e dos semicondutores IV-VI tem valores muito próximos, sendo de 6.2 Å para o BaF_2 e de 6.46 Å para o PbTe , representando uma diferença de 4 % [18]. Porém, o BaF_2 e o PbTe possuem diferentes coeficientes de expansão térmica; de forma que seus parâmetros de rede se alteram a taxas diferentes conforme a temperatura diminui. Em decorrência disso, as tensões na rede aumentam e distorcem

Figura 2.7: (a) Estrutura de bandas em $T = 4.2$ K sem o efeito de *strain*, com as bandas 1 e 2 ocupadas, onde 1 representa os vales oblíquos e 2 o vale na direção [111]. (b) O efeito do *strain* desloca as energias de forma que a diferença entre as bandas de condução dos dois vales seja de 10 meV. Se a energia de Fermi (E_F) for menor que 10 meV, somente o vale na direção [111] estará populado (vale 2).

a simetria cúbica alterando as propriedades elétricas do sistema.

Um dos efeitos dessas tensões é a quebra de degenerescência dos quatro vales no ponto L da zona de Brillouin. Para um filme de PbTe crescido na direção [111], sobre substrato de BaF_2 , o vale com seu eixo principal orientado nessa direção tem um deslocamento em energia com relação aos outros 3 vales oblíquos, ficando, para a banda de condução, 10 meV abaixo dos outros vales [18].

Para a banda de condução, o efeito do deslocamento de energia das bandas pode ocasionar uma transferência dos portadores de carga dos vales oblíquos para o vale na direção [111] [19], conforme diagrama mostrado na figura 2.7. Na figura 2.7 (a), a estrutura de bandas é mostrada em $T = 4.2$ K sem o efeito das tensões. Nessa situação, as bandas 1 e 2 estão ocupadas, onde 1 representa os vales oblíquos e 2 representa o vale na direção [111]. Em 2.7 (b), o efeito do *strain* desloca as energias de forma que a diferença entre as bandas de condução dos dois vales seja de 10 meV. Se a energia de Fermi (E_F) for menor que 10 meV, somente o vale na direção [111] estará populado.

Para o caso das amostras do tipo p , onde a condução de cargas ocorre na banda de valência, o processo inverso ocorre. O deslocamento das energias dos vales faz com

Figura 2.8: Variação da energia de Fermi com a inclusão de Eu para os filmes de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p investigados nesse trabalho. A energia de Fermi se torna menor que 10 meV para $x = 0.03$.

que os portadores sejam transferidos do vale na direção $[111]$ para os 3 vales oblíquos [20]. O vale na direção $[111]$ só estará populado para concentrações suficientemente altas de portadores ou elevada temperatura (o que reduz o efeito das tensões).

Na figura 2.8, vemos a variação da energia de Fermi com a inclusão de Eu para os filmes de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p investigados nesse trabalho. Nessa figura, fica claro que a energia de Fermi se torna menor que 10 meV para $x = 0.03$. Portanto, para $x > 0.03$ esperamos que a transferência de portadores deva ter ocorrido de acordo com o processo descrito no parágrafo anterior.

2.1.4 Fator g de Landé anisotrópico

Para uma análise mais detalhada do fator g de Landé na liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ é necessário verificar o efeito das interações *spin*-órbita e de troca entre o *spin* dos portadores de carga e o momento magnético dos íons de Eu. Patnaik e Tripathi [21] descreveram em seu trabalho as alterações provocadas nos fatores g e nas massas efetivas devido às mudanças na superfície de Fermi quando o Európio é introduzido.

O Hamiltoniano para um elétron na presença de um potencial periódico $V(\vec{r})$, de um campo magnético externo B e incluindo ainda as interações *spin*-órbita e de troca H_{ex} é dado por:

$$H = \frac{1}{2m} \left(\vec{\pi} + e\vec{A} \right)^2 + V(\vec{r}) + \frac{1}{2} g_0 \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + H_{ex} \quad (2.1.4)$$

com

$$H_{ex} = \frac{1}{2} \sum_{R_i} \zeta \left(\vec{r} - \vec{R}_i \right) \vec{\sigma} \cdot \vec{S}_i$$

onde $\vec{\pi}$ é o operador de momento na presença de interação *spin*-órbita, g_0 é o fator de Landé na ausência de impurezas magnéticas e μ_B é o magneton de Bohr. ζ é a intensidade da interação de troca de um elétron de condução com *spin* $\frac{1}{2}\vec{\sigma}$ e a impureza magnética localizada no i -ésimo sítio com momento angular de *spin* $\vec{S}_i$.

A solução do Hamiltoniano dada pela equação (2.1.4), utilizando a representação de massa efetiva, permite obter um fator g efetivo total dado por:

$$g_T^{eff} = g_0^{eff} + g_i^{eff} \quad (2.1.5)$$

onde g_0^{eff} e g_i^{eff} representam os fatores g efetivos na ausência e na presença de interações de troca, respectivamente. As contribuições g_0^{eff} e g_i^{eff} possuem componentes longitudinal (g_0^l e g_i^l ao longo da direção $[111]$) e transversal (g_0^t e g_i^t ao longo da direção $[\bar{1}\bar{1}2]$). A forma como essas componentes se somam vai depender da direção do campo magnético aplicado.

No caso do PbTe, temos 4 vales nas direções $[111]$, $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$ e $[\bar{1}\bar{1}1]$. Quando o campo magnético é aplicado na direção $[111]$, o vale nessa mesma direção fornece uma contribuição longitudinal (g^{LO}) para o g efetivo e os vales nas direções $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, $[1\bar{1}\bar{1}]$ e $[\bar{1}\bar{1}1]$ fornecem uma contribuição oblíqua (g^{OB}). Podemos calcular g^{LO} e g^{OB} de acordo com as expressões:

$$g^{LO} = g^l \quad (2.1.6)$$

$$g^{OB} = \frac{9g^l g^t}{8g^l + g^t} \quad (2.1.7)$$

As tabelas 2.1 e 2.2 mostram os resultados teóricos obtidos no trabalho de Patnaik e Tripathi para as bandas de condução e de valência. Nessas tabelas, podemos ver os valores calculados para as componentes longitudinal e transversal do fator g , na ausência (g_0^l e g_0^t) e na presença (g_i^l e g_i^t) da interação de troca, e os resultados para as contribuições do vale longitudinal (g_0^{LO} e g_i^{LO}) e dos vales oblíquos (g_0^{OB} e g_i^{OB}) de acordo com as equações (2.1.6) e (2.1.7).

Tabela 2.1: Componentes longitudinal e transversal para os fatores g efetivos, na ausência e na presença da interação de troca [21], e os resultados para as contribuições do vale longitudinal e dos vales oblíquos, para a banda de condução para um campo magnético aplicado na direção [111].

x	g_0^l	g_0^t	g_0^{LO}	g_0^{OB}	g_i^l	g_i^t	g_i^{LO}	g_i^{OB}
0	49.46	14.35	49.46	15.58	0	0	0	0
0.0130	35.51	10.80	35.51	11.70	-1.82	-0.47	-1.8	-0.51
0.0200	30.40	9.50	30.40	10.28	-2.80	-0.72	-2.8	-0.78
0.0343	22.86	7.58	22.86	8.18	-4.80	-1.24	-4.8	-1.34

Tabela 2.2: Componentes longitudinal e transversal para os fatores g efetivos, na ausência e na presença da interação de troca [21], e os resultados para as contribuições do vale longitudinal e dos vales oblíquos, para a banda de valência para um campo magnético aplicado na direção [111].

x	g_0^l	g_0^t	g_0^{LO}	g_0^{OB}	g_i^l	g_i^t	g_i^{LO}	g_i^{OB}
0	49.73	13.78	49.73	14.98	0	0	0	0
0.0130	35.78	10.23	35.78	11.11	2.33	2.69	2.33	2.64
0.0200	30.67	8.93	30.67	9.69	3.58	4.14	3.59	4.06
0.0343	23.13	7.01	23.13	7.59	6.155	7.09	6.15	6.97

Os valores totais das contribuições do vale longitudinal e dos vales oblíquos podem ser calculados de acordo com a equação (2.1.5):

$$g_T^{LO} = g_0^{LO} + g_i^{LO} \quad (2.1.8)$$

$$g_T^{OB} = g_0^{OB} + g_i^{OB} \quad (2.1.9)$$

Os resultados para g_T^{LO} e g_T^{OB} , utilizando as equações (2.1.8) e (2.1.9), são apresentados na tabela 2.3. É importante notar que os valores de g_T^{LO} e g_T^{OB} tendem a ficar menores para a banda de condução comparados com os seus valores para a banda de valência, conforme a quantidade de Eu aumenta. Isso se deve ao fato de que as contribuições g_i^{LO} e g_i^{OB} têm sinais negativos para a banda de condução. Podemos visualizar melhor o comportamento de g_T^{LO} e g_T^{OB} para as bandas de condução e de valência por meio da figura 2.9. Na figura 2.9 (a), observamos que o valor de g_T^{LO} diminui mais rapidamente para a banda de condução que para a banda de valência quando a quantidade de Eu aumenta. Na figura 2.9 (b), vemos que o valor de g_T^{OB} também diminui para a banda de condução com a introdução de Eu mas permanece praticamente constante para a banda de valência.

Conforme descrito na seção 2.1.3, para filmes de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com concentrações de Eu menores que 0.03, devemos ter a contribuição dos 4 vales no processo de transporte. Para concentrações maiores, somente os vales oblíquos de-

Tabela 2.3: Resultados para g_T^{LO} e g_T^{OB} para a banda de valência e para a banda de condução.

	Condução		Valência	
x	g_T^{LO}	g_T^{OB}	g_T^{LO}	g_T^{OB}
0	49.46	15.58	49.73	14.98
0.0130	33.69	11.19	38.1	13.75
0.0200	27.6	9.49	34.26	13.76
0.0343	18.06	6.84	29.28	14.57

(a)

(b)

Figura 2.9: Fator g efetivo total para a banda de condução e de valência para a liga $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$: (a) para o vale na direção [111] (longitudinal) e (b) para os vales oblíquos. Os valores de g diminuem mais rapidamente para a banda de condução que para a banda de valência conforme a quantidade de Európio (x) aumenta.

vem ser importantes devido ao processo de transferência de cargas causado pelo efeito de *strain*. Assim, para $x \leq 0.03$ os fatores g_T^{LO} e g_T^{OB} deverão ser levados em conta na análise dos resultados experimentais, enquanto que para $x > 0.03$, somente os valores de g_T^{OB} serão relevantes.

A diferença de comportamento dos fatores g_T^{LO} e g_T^{OB} na banda de condução e de valência, com o aumento de Eu, será muito importante na análise dos resultados experimentais que faremos no capítulo 4.

2.2 Características de crescimento

Antes de apresentarmos a técnica de caracterização utilizada nesse trabalho (seção 2.3), faremos uma breve descrição das características de crescimento das amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , tais como temperatura do substrato, taxa de crescimento, tempo de deposição, etc.

As amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p foram produzidas no Laboratório Associado de Sensores e Materiais (LAS) do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE). As amostras foram crescidas sobre substratos de BaF_2 clivados na direção [111] por meio de epitaxia por feixe molecular utilizando um sistema MBE. O sistema é equipado com três células de efusão, sendo elas de PbTe , Te_2 e Eu . O fluxo do feixe de cada célula foi medido utilizando um monitor de fluxo “*ion-gauge*”. A temperatura do substrato foi mantida fixa em $208,5^\circ\text{C}$ durante o crescimento, que durou em média 2h. A taxa de deposição foi de $3.89 \text{ \AA/s}$, resultando em uma espessura de $2.8 \mu\text{m}$ para todas as amostras. Para obter as diferentes concentrações de Eu , foram variadas as razões entre os fluxos de PbTe e Eu . Na tabela 2.4, temos os parâmetros de crescimento utilizados na produção das amostras.

A célula de Te_2 foi utilizada como “ajuste” estequiométrico uma vez que a célula de $\text{Pb}_{1-y}\text{Te}_y$ tem excesso de chumbo, com $y = 0.495$. Desde que vacâncias de Pb funcionam como fonte de buracos no PbTe [11], é possível controlar o tipo de portadores substituindo átomos de Pb por átomos de Te através da variação do fluxo da célula de Te_2 . Assim, um excesso do fluxo de Te_2 foi mantido durante o crescimento para que amostras do tipo p fossem obtidas.

A caracterização elétrica das amostras foi feita utilizando a técnica do efeito Hall, que será melhor detalhada na seção 2.3, e os resultados são exibidos na tabela 2.5 para $T = 10 \text{ K}$. A amostra com $x = 0.08$ não pôde ser caracterizada por ter apresentado valores de resistência elétrica superiores ao limite de medida do equipamento, possivelmente devido a algum problema ocorrido durante o crescimento.

As amostras foram preparadas segundo a geometria de Van der Pauw e, para os contatos, foram utilizados fios de ouro soldados com índio na superfície dos filmes. Essa escolha se deve ao fato de o índio ter apresentado melhor qualidade (baixo ruído, menor resistividade, etc.) de contato quando fixado sobre o filme PbEuTe .

2.3 Caracterização elétrica por efeito Hall

É muito comum a utilização do efeito Hall para a obtenção da densidade de portadores e, em conjunto com as medidas de resistividade, da mobilidade das cargas em função da temperatura. A densidade de portadores nos permite determinar parâmetros importantes como energia de Fermi e densidade de estados. Por outro lado, as características de uma curva de mobilidade podem ajudar a verificar a qualidade de

Tabela 2.4: Parâmetros de crescimento das amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , onde T é a temperatura da célula de efusão e ϕ o fluxo do elemento.

	PbTe		Te ₂		Eu	
$x(\%)$	$T(^{\circ}\text{C})$	$\phi(\times 10^{-7}\text{Torr})$	$T(^{\circ}\text{C})$	$\phi(\times 10^{-8}\text{Torr})$	$T(^{\circ}\text{C})$	$\phi(\times 10^{-9}\text{Torr})$
0	654	4.7	335	9.0	-	-
1	655	4.8	335	9.0	329.8	0,45
2	654	4.5	335	9.0	352	0,85
3	654	4.7	335	9.0	366	1,5
4	652	4.5	335	9.0	370	1,6
5	652	4.2	335	9.0	381.3	2,1
6	652	4.5	335	9.0	386	2,8
7	652	4.1	335	9.0	392	2,7
8	652	4.2	335	9.0	397	3,3
9	652	4.2	335	9.0	402	3,8
10	652	4.1	335	9.0	407	4,3

Tabela 2.5: Propriedades elétricas da série de amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com x variando de 0 até 0.1 para $T = 10$ K. A amostra com $x = 0.08$ não pôde ser medida. Vemos na tabela a concentração de portadores p , a resistência elétrica R e a mobilidade μ .

x	p (10^{23}m^{-3})	R (ohms)	$\mu(\text{m}^2/\text{V.s})$
0	1.22	0.1	182.75
0.01	3.10	2.092	3.4
0.02	1.06	25.42	0.83
0.03	0.080	280.4	0.98
0.04	0.163	154.8	0.88
0.05	0.0138	1790	0.90
0.06	0.0008	54200	0.51
0.07	0.0258	1328	0.65
0.09	0.0014	149100	0.10
0.1	0.059	43220	0.0087

uma amostra ou mesmo dar uma indicação dos mecanismos de espalhamento presentes no material. Nesta seção, apresentaremos as expressões teóricas necessárias para tratar os dados experimentais.

No item 2.3.1, apresentaremos a derivação do tensor condutividade, que fornece as componentes da condutividade em função do campo magnético aplicado B , a partir da força de Lorentz. Em seguida, em 2.3.2, utilizando as componentes do tensor condutividade, calculamos a constante Hall (R_H) através da qual é possível obter a concentração dos portadores de carga. Por fim, em 2.3.3, apresentaremos a expressão clássica para o cálculo da magnetorresistência e seus limites de validade.

De fato, os dados que serão apresentados na seção 2.5 foram obtidos utilizando as ferramentas que serão apresentadas agora. O desenvolvimento a seguir será feito para o caso onde os portadores de carga são elétrons e, posteriormente, utilizaremos os resultados para o caso de condução por buracos.

2.3.1 Tensor condutividade

A condução em um sólido resulta do equilíbrio entre o momento adquirido pela carga devido à aplicação de campos elétricos e magnéticos e sua dissipação devido a espalhamentos no material. Assumimos que esse processo pode ser descrito por um tempo de espalhamento τ de forma que a taxa de perda de momento seja dada por $\vec{p}/\tau$, onde $\vec{p}$ é o momento. Dessa forma, o equilíbrio pode ser descrito pela força de Lorentz [22]:

$$m_0 \frac{d\vec{v}}{dt} = (-e) \left(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B} \right) - \frac{\vec{p}}{\tau} \quad (2.3.1)$$

onde m_0 é a massa do elétron, $\vec{E}$ é o vetor campo elétrico, $\vec{B}$ a indução magnética e $\vec{v}$ é a velocidade do elétron. Se considerarmos que o campo elétrico $\vec{E}$ tem componentes somente nas direções x e y e que $\vec{B}$ é aplicado na direção z , podemos escrever¹:

$$\vec{E} = E_x \hat{i} + E_y \hat{j} \quad (2.3.2)$$

$$\vec{B} = B \hat{k} \quad (2.3.3)$$

Como no equilíbrio a aceleração da carga é zero, utilizamos as equações (2.3.2) e (2.3.3) para rearranjar a equação (2.3.1) de forma a relacionar o campo elétrico

¹No caso das amostras tratadas nesse trabalho, essa suposição é correta uma vez que as amostras são camadas epitaxiais com espessura de alguns micra.

aplicado $\vec{E}$ com a velocidade $\vec{v}$. Assim:

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_0/(-e\tau) & -B \\ B & m_0/(-e\tau) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} \quad (2.3.4)$$

Lembrando que a densidade de corrente em função da velocidade dos elétrons é $\vec{J} = n(-e)\vec{v}$, podemos representar o vetor velocidade como:

$$\begin{pmatrix} v_x \\ v_y \end{pmatrix} = -\frac{1}{ne} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} \quad (2.3.5)$$

de modo que (2.3.4) assume a forma:

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_0 & B/ne \\ -B/ne & \rho_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} \quad (2.3.6)$$

ou simplesmente

$$\vec{E} = \rho \vec{J} \quad (2.3.7)$$

com $\rho_0 = m_0/ne^2\tau$ e ρ é o tensor resistividade. O tensor condutividade pode ser definido como:

$$\sigma = \rho^{-1} \quad (2.3.8)$$

Calculando a matriz inversa do tensor resistividade, obtemos

$$\sigma = \frac{ne^2}{m_0} \begin{pmatrix} \tau/(1 + \omega_c^2\tau^2) & -\omega_c\tau^2/(1 + \omega_c^2\tau^2) \\ \omega_c\tau^2/(1 + \omega_c^2\tau^2) & \tau/(1 + \omega_c^2\tau^2) \end{pmatrix} \quad (2.3.9)$$

com $\omega_c = eB/m_0$. Para $B = 0$, obtemos a expressão clássica do modelo de Drude para a condutividade na ausência de campo:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_0} \quad (2.3.10)$$

Vale lembrar que a expressão (2.3.10), embora simples, é uma importante ferramenta para a caracterização de materiais, uma vez que ela relaciona uma grandeza macroscópica (σ) com grandezas microscópicas, como a densidade de portadores de carga e o tempo de espalhamento.

Para o cálculo do tensor condutividade (equação (2.3.9)), consideramos que a condutividade se origina de um conjunto de elétrons todos se comportando da mesma

forma com velocidade uniforme. Na verdade, existe uma distribuição de elétrons através da banda de condução em equilíbrio dinâmico mantido entre a energia em forma de calor, juntamente com energia eletromagnética, e os processos de espalhamento que tendem a tornar aleatórios os momentos. Assim, um tratamento mais rigoroso deveria ser realizado considerando a evolução da distribuição de elétrons sob a ação de forças aplicadas e termodinâmicas. A expressão para a condutividade obtida da equação de Boltzmann leva em conta essas considerações. A expressão resultante tem a mesma forma da expressão do modelo de Drude (ver equação 2.3.10) e fica:

$$\sigma = \frac{ne^2 \langle \tau \rangle}{m^*} \quad (2.3.11)$$

onde m^* é a massa efetiva. A média de uma função qualquer $f(\tau)$ é dada por:

$$\langle f(\tau) \rangle = \frac{\int_0^\infty f(\tau) \varepsilon^{3/2} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon}{\int_0^\infty \varepsilon^{3/2} \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} d\varepsilon} \quad (2.3.12)$$

Na equação (2.3.12), ε é a energia do portador de carga.

Além disso, os componentes do tensor (2.3.9) devem ser substituídos por suas médias:

$$\sigma = \frac{ne^2}{m^*} \begin{pmatrix} \langle \tau / (1 + \omega_c^2 \tau^2) \rangle & \langle -\omega_c \tau^2 / (1 + \omega_c^2 \tau^2) \rangle \\ \langle \omega_c \tau^2 / (1 + \omega_c^2 \tau^2) \rangle & \langle \tau / (1 + \omega_c^2 \tau^2) \rangle \end{pmatrix}$$

Na maioria dos casos, existe mais de um processo de espalhamento presente durante o transporte de cargas de forma que $\langle \tau \rangle$ pode ser escrito como [23]:

$$\langle \tau \rangle = \left\langle \frac{1}{\tau_1^{-1} + \tau_2^{-1} + \tau_3^{-1} + \dots} \right\rangle$$

Se todos os tempos de relaxação forem independentes da energia, como é o caso com elétrons degenerados, e se os vários processos de espalhamento forem independentes um do outro, a taxa de espalhamento total é somente a soma dos espalhamentos individuais [24]:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i} \quad (2.3.13)$$

A equação (2.3.13) é conhecida como regra de Matthiessen e é muito utilizada em semicondutores como uma primeira aproximação. Podemos ainda reescrever a equação (2.3.13) da seguinte forma:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_0} + \sum_{i>0} \frac{1}{\tau_i} \quad (2.3.14)$$

onde τ_0 é o tempo de espalhamento elástico.

2.3.2 Efeito Hall

Para o cálculo da constante Hall, consideramos que as características geométricas das amostras são bem conhecidas. Consideramos então uma densidade de corrente estabelecida na direção x , um campo magnético aplicado na direção z e a inexistência de fluxo de corrente na direção y . Da equação (2.3.7) podemos escrever:

$$\vec{J} = \rho^{-1} \vec{E} = \sigma \vec{E} \quad (2.3.15)$$

ou

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & -\sigma_{xy} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} \quad (2.3.16)$$

onde

$$\sigma_{xx} = \left\langle \frac{ne^2\tau/m^*}{1 + \omega_c^2\tau^2} \right\rangle \quad (2.3.17)$$

e

$$\sigma_{xy} = \left\langle \frac{ne^2\omega_c\tau^2/m^*}{1 + \omega_c^2\tau^2} \right\rangle \quad (2.3.18)$$

Se $J_y = 0$, teremos

$$E_y = -\frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}} E_x \quad (2.3.19)$$

e

$$J_x = \frac{E_x}{\sigma_{xx}} (\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2) \quad (2.3.20)$$

A constante Hall é definida como

$$R_H = \frac{E_y}{BJ_x} \quad (2.3.21)$$

Podemos substituir (2.3.19) e (2.3.20) em (2.3.21) para obter

$$R_H = -\frac{\sigma_{xy}}{(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2) B}$$

ou

$$R_H = -\frac{r_H}{ne} \quad (2.3.22)$$

onde $r_H = \langle \tau^2 \rangle / \langle \tau \rangle^2$ e B é suficientemente pequeno de forma que $\omega_c \tau \ll 1$. r_H é o fator de espalhamento Hall que é, geralmente, da ordem da unidade. O maior valor possível para r_H ocorre para o caso de espalhamento por impurezas ionizadas onde $r_H = 1.93$ [25]. No nosso caso, devido ao elevado valor da constante dielétrica do PbTe, esse tipo de espalhamento não deve estar presente. Na prática, sempre existe uma mistura de mecanismos de espalhamento de modo que r_H é quase sempre menor que 1.93.

Para o caso de condução por buracos, obtemos um sinal positivo quando medimos R_H e substituímos n (elétrons) por p (buracos) na equação (2.3.22). Assim, por meio da constante Hall, é possível determinar a concentração de portadores, que será de extrema importância no decorrer deste trabalho.

2.3.3 Magnetorresistência

A magnetorresistência corresponde à variação da resistência da amostra devido à presença de um campo magnético aplicado. Por meio desse efeito, é possível observar os fenômenos de interferência quântica em amostras metálicas ou mesmo obter a mobilidade dos portadores de carga.

O aumento da resistência induzida por um campo magnético (comportamento clássico) é devido a mudanças na resistividade da amostra semicondutora e a efeitos geométricos. A mudança na resistividade relacionada à anisotropia do processo de condução, condução por mais de um tipo de portador ou processos de espalhamento dependentes da energia, é chamada de *magnetorresistência física* [26, 27]. Se a amostra é uma barra retangular longa e de largura pequena, com um campo magnético aplicado perpendicularmente ao plano da amostra, as forças de Lorentz sofridas pelos portadores de carga são balanceadas por um campo elétrico Hall que surge através da barra. A magnetorresistência física ocorre quando as cargas com energia acima e abaixo da energia média são sub- ou sobre-compensadas pelo campo Hall resultando no aumento de resistência [27]. Se a amostra possui contatos separados por uma distância grande em relação aos contatos onde a corrente é aplicada,

o campo Hall tende a um valor nulo. Nesse caso, também observamos uma variação na resistência da amostra mesmo que não haja magnetorresistência física. Esse efeito é conhecido como *magnetorresistência geométrica* e pode ser muito maior que a magnetorresistência física.

A seguir, apresentaremos as expressões para a magnetorresistência física e geométrica.

Para baixo campo ($\omega_c \tau \ll 1$), as quantidades σ_{xx} e σ_{xy} (equações 2.3.17 e 2.3.18) podem ser expandidas em primeira ordem de forma que obtemos:

$$\sigma_{xx} = \left\langle \frac{ne^2 \tau / m^*}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \rightarrow \frac{ne^2}{m^*} [\langle \tau \rangle - \omega_c^2 \langle \tau^3 \rangle] \quad (2.3.23)$$

e

$$\sigma_{xy} = \left\langle \frac{ne^2 \omega_c \tau^2 / m^*}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle \rightarrow \frac{ne^2 \omega_c}{m^*} [\langle \tau^2 \rangle - \omega_c^2 \langle \tau^4 \rangle] \quad (2.3.24)$$

A condutividade σ fica:

$$\sigma = \frac{(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2)}{\sigma_{xx}} \simeq \sigma_0 [1 - \xi_F R_H^2 \sigma_0^2 B^2] \quad (2.3.25)$$

onde σ_0 é a condutividade quando o campo magnético é nulo e ξ_F é o coeficiente de magnetorresistência física, dado por:

$$\xi_F = \frac{\langle \tau^3 \rangle \langle \tau \rangle}{\langle \tau^2 \rangle^2} - 1$$

Na verdade, ao invés da condutividade, é a resistividade elétrica a quantidade que usualmente medimos no laboratório, de forma que é conveniente escrever uma expressão para a magnetorresistência em termos da resistividade. A magnetorresistência é dada por:

$$\frac{\Delta \sigma(B)}{\sigma_0} = \rho_0 \left[\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho_0} \right] = -\frac{\Delta \rho(B)}{\rho} \quad (2.3.26)$$

Se a variação de resistividade $\Delta \rho(B)$ for muito pequena, podemos fazer $\rho \rightarrow \rho_0$ de forma que a expressão (2.3.26) possa ser escrita como

$$\frac{\Delta \sigma(B)}{\sigma_0} \simeq -\frac{\Delta \rho(B)}{\rho_0} \quad (2.3.27)$$

Utilizando a equação (2.3.25) obtemos

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho_0} = \xi_F r_H^2 \mu^2 B^2 \quad (2.3.28)$$

onde

$$\mu = \frac{e}{m^*} \langle \tau \rangle \quad (2.3.29)$$

A equação (2.3.28) pode ainda ser reescrita na forma:

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho_0} = \mu_F^2 B^2 \quad (2.3.30)$$

com

$$\mu_F = \xi_F^{1/2} r_H \mu \quad (2.3.31)$$

sendo a mobilidade da magnetorresistência física.

Algumas configurações permitem que E_y seja próximo de zero, i.e., quando os contatos ficam muito distantes um do outro, diferentemente da configuração de barra Hall, que é estreita. Nesse caso, podemos escrever:

$$j_x = \sigma_{xx} E_x = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 - \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle E_x \quad (2.3.32)$$

Da mesma forma feita para o caso da magnetorresistência física, consideramos $\omega_c \tau \ll 1$ de modo que

$$\sigma = \sigma_0 [1 + \xi_G \mu^2 B^2] \quad (2.3.33)$$

onde ξ_G é o coeficiente de magnetorresistência geométrica dado por

$$\xi_G = \frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle^3} \quad (2.3.34)$$

ξ_G varia de 1 até 1.25 dependendo do tipo de espalhamento [27].

A magnetorresistência, para esse caso, se torna

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho_0} = \mu_G^2 B^2 \quad (2.3.35)$$

com

$$\mu_G = \xi_G^{1/2} \mu \quad (2.3.36)$$

sendo a mobilidade da magnetorresistência geométrica.

A magnetorresistência geométrica é devida somente à geometria da situação. Entretanto, é geralmente um efeito mais intenso que a magnetorresistência física. Como exemplo extremo, para elétrons degenerados, $\xi_G = 1$ enquanto que $\xi_F = 0$ [25].

As equações (2.3.30) e (2.3.35) fornecem o comportamento parabólico clássico para a magnetorresistência quando $\omega_c \tau \ll 1$. Para materiais degenerados, $\mu_G = \mu$ enquanto que $\mu_F = 0$. Assim, podemos ajustar as curvas experimentais de magnetorresistência conforme a equação (2.3.35) de forma a obter a mobilidade da amostra.

2.4 Método van der Pauw

Em 1958 van der Pauw [28] desenvolveu uma técnica para realizar medidas de efeito Hall que hoje leva o seu nome. Sua técnica é, atualmente, uma das mais utilizadas pelos experimentais. Embora não seja a configuração ideal, ela fornece uma maneira rápida para obter a resistividade da amostra por não precisar incluir nos cálculos as dimensões dos contatos, como no caso da barra Hall. Consideremos o diagrama da figura 2.10 que representa uma amostra com geometria van der Pauw. A resistência pode ser calculada pela expressão:

$$R_{ij,kl} = V_{kl}/I_{ij} \quad (2.4.1)$$

Na equação 2.4.1, a corrente é aplicada entre os contatos i e j e $V_{kl} = V_k - V_l$ é a diferença de potencial entre os contatos k e l . A resistividade pode ser calculada como uma média da permutação entre os contatos e invertendo-se a corrente para todas as permutações de acordo com a expressão:

$$\rho = \frac{\pi d}{\ln(2)} \frac{1}{8} [(R_{21,34} - R_{12,34} + R_{32,41} - R_{23,41}) f_A + (R_{43,12} - R_{34,21} + R_{14,23} - R_{41,23}) f_B] \quad (2.4.2)$$

onde d é a espessura da amostra e f_A e f_B são próximos de 1 quando a amostra apresenta contatos ôhmicos.

Também podemos calcular a constante Hall (R_H) utilizando a geometria de van der Pauw cruzando os contatos da corrente e da tensão. A expressão para R_H é dada por:

Figura 2.10: Representação esquemática de uma amostra mostrando os contatos elétricos utilizando a geometria de van der Pauw.

$$R_H = \frac{d}{B} \frac{1}{8} [R_{31,42}(+B) - R_{13,42}(+B) + R_{42,13}(+B) - R_{24,13}(+B) + R_{13,42}(-B) - R_{31,42}(-B) + R_{24,13}(-B) - R_{42,13}(-B)] \quad (2.4.3)$$

Na equação (2.4.3), foi tirada uma média dos valores das resistências para as combinações de corrente e campo magnético quando são invertidas suas polaridades.

Assim, para um campo magnético fixo, podemos calcular o valor de R_H utilizando (2.4.3) e depois obtermos a concentração de buracos (p) por meio da equação (2.3.22).

De acordo com as equações (2.3.11) e (2.3.29), a mobilidade dos portadores pode ainda ser escrita como:

$$\mu = \frac{\sigma}{pe} = \frac{1}{\rho pe} \quad (2.4.4)$$

Em resumo, as equações (2.4.2), (2.4.3) e (2.4.4) nos permitem determinar as principais propriedades elétricas das amostras.

2.5 Propriedades elétricas

Os dados apresentados nesta seção referem-se às medidas realizadas para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p e foram obtidos utilizando as expressões descritas na seção anterior. Veremos que as propriedades elétricas também sofrem grande alteração à medida que aumentamos a quantidade de európio na liga. Uma das mais interessantes, e que é o principal tópico desse trabalho, é a transição metal-isolante que ocorre quando a quantidade de Eu ultrapassa um dado valor de x .

A figura 2.11 mostra as resistências elétricas normalizadas em 140 K para as amostras com concentrações de Eu variando de $x = 0$ até $x = 0.1$, em função da

Figura 2.11: Resistência elétrica de filmes finos de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com concentração de Eu variando de $x = 0$ até $x = 0.1$, em função da temperatura, normalizada para o valor da resistência em $T = 140$ K. Uma transição metal-isolante ocorre em torno de 0.05.

temperatura. Nessa figura, fica bem claro que as amostras apresentam comportamento metálico para x variando de 0 até 0.04, *i.e.*, a resistência diminui com a temperatura. Para a amostra com $x = 0.05$, a resistência oscila com a temperatura indicando que essa amostra se encontra numa região próxima da transição. De $x = 0.06$ em diante, as amostras já apresentam um comportamento isolante. Uma transição metal-isolante em torno de $x = 0.05$ já foi observada por outros autores em amostras do tipo p de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ [10]. Para amostras do tipo n essa transição ocorre para concentrações em torno de 0.1 [8].

Na figura 2.12 temos a densidade de buracos em função da concentração x para as temperaturas de 1.8 e 10 K. Vemos que o aumento de Eu causa uma diminuição de buracos e que a variação de temperatura parece não alterar o valor de p para um dado valor de x , uma vez que os pontos em 10 e 1.8 K estão praticamente sobrepostos.

Na figura 2.13, podemos observar o comportamento das resistências R_{xx} e das mobilidades com a concentração x para $T = 10$ K. Com a inclusão de Eu, a resistência aumenta 3 ordens de grandeza mesmo para a pequena variação de x entre 0 e 0.03, conforme figura 2.13(a). Na figura 2.13(b), vemos que a mobilidade também

Figura 2.12: Densidade de buracos em função da concentração x para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p para as temperaturas de 1.8 e 10 K.

sofre uma drástica redução com o aumento de Eu.

Os regimes de condução metálico e isolante podem ser diferenciados através do produto $k_F l$, onde o número de onda k_F é dado por:

$$k_F = \left(3\pi^2 \frac{p}{N}\right)^{1/3} \quad (2.5.1)$$

p é a densidade de buracos e N o número de vales ocupados do material. O livre caminho médio l pode ser escrito como:

$$l = \frac{\hbar k_F}{e} \mu \quad (2.5.2)$$

Todas as variáveis que aparecem nas equações (2.5.1) e (2.5.2) podem ser obtidas por meio das equações apresentadas na seção 2.4.

No regime metálico, temos $k_F l \gg 1$ enquanto que para o regime isolante devemos observar $k_F l \ll 1$. Na figura 2.14 vemos a variação de $k_F l$ com a concentração x . Vemos que para $x = 0.05$ o produto $k_F l$ se torna menor que 1 e concorda com a transição observada na figura 2.11. Veremos que essa transição ocorre devido ao espalhamento de curto alcance originado da desordem produzida pela inclusão de Eu.

Figura 2.13: Resistências R_{xx} em (a) e as mobilidades das amostras em (b) para amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p como função da concentração x de Eu para $T = 10$ K.

Figura 2.14: Variação de $k_F l$ para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p em função da concentração de Eu. Para $x = 0.05$ o produto $k_F l$ torna-se menor que 1 e concorda com a transição observada na figura 2.11.

Uma outra característica bastante particular do PbTe é o elevado valor da constante dielétrica ϵ que aumenta com a queda de temperatura, atingindo valores de até 1350 em 4.2 K [3]. Essa propriedade cria uma blindagem das impurezas ionizadas presentes no material permitindo que a mobilidade atinja valores elevados, da ordem de $10^2 \text{ m}^2/\text{Vs}$ em baixas temperaturas [4].

Na figura 2.15 (a) temos a mobilidade para as amostras de $x = 0, 0.02, 0.04$ e 0.05 , medidas em função da temperatura, entre 10 e 300 K. Em $T = 300 \text{ K}$, a mobilidade μ cai de aproximadamente $3 \times 10^{-2} \text{ m}^2/\text{Vs}$ para $2.5 \times 10^{-3} \text{ m}^2/\text{Vs}$, quando a concentração x sobe de 0 para 0.05, representando uma diminuição de aproximadamente uma ordem de grandeza. Para $T = 10 \text{ K}$, a mobilidade é de aproximadamente $1.83 \times 10^2 \text{ m}^2/\text{Vs}$ para $x = 0$ e de $9.0 \times 10^{-1} \text{ m}^2/\text{Vs}$ quando $x = 0.05$, o que implica em uma diminuição de duas ordens de grandeza aproximadamente. Assim, a introdução de Eu diminui a mobilidade tanto em alta como em baixas temperaturas. Entretanto, essa diminuição é maior para as temperaturas mais baixas, conforme podemos ver na figura 2.15 (a) e pela análise que acabou de ser feita.

A figura 2.15 (b) mostra o ajuste da mobilidade em função da temperatura, de acordo com a expressão $\mu = AT^{-\alpha}$. Uma vez que a concentração de portadores não varia muito com a temperatura nos IV-VI [29], a mobilidade é, em geral, determinada pelo espalhamento por fônons para $T > 80 \text{ K}$. A redução de mobilidade observada nos semicondutores mais comuns, em baixas temperaturas, não é observada no PbTe. O alto valor da constante dielétrica, que blindava o potencial Coulombiano das impurezas, e as pequenas massas efetivas são responsáveis pelo elevado valor da mobilidade em temperaturas menores que 80 K. A aparente saturação de μ em baixas temperaturas deve-se, principalmente, ao espalhamento por defeitos na rede. Para $T > 80 \text{ K}$, espera-se um comportamento do tipo $\mu \sim T^{-5/2}$ devido ao espalhamento por fônons [4]. Para a amostra com $x = 0$, obtemos $\alpha = 2.3$ através do ajuste da curva. Para $x > 0$, porém, as curvas de mobilidade desviam-se desse comportamento e o expoente α diminui de valor, conforme mostrado na figura. Para $x = 0.05$ temos $\alpha = 0.6$, provavelmente devido ao espalhamento pela liga [10, 30].

A concentração apresentada na figura 2.12 é obtida por meio da constante Hall quando aplicamos um campo fixo nas amostras. Entretanto, como veremos nos próximos capítulos, na região onde as amostras apresentam um comportamento isolante, esse método se torna mais limitado e é necessário que se façam correções. Veremos também que a definição de livre caminho médio perde o sentido nessa região e, conseqüentemente, devemos tomar certo cuidado na interpretação de $k_F l$. Na verdade, os cálculos de $k_F l$, da mobilidade e de p só têm uma interpretação clara

Figura 2.15: (a) Mobilidade em função da temperatura para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x=0, 0.02, 0.04$ e 0.05 . (b) Ajuste de $\mu \sim T^{-\alpha}$ para as curvas de mobilidade. O expoente α diminui com o aumento de x .

até $x = 0.05$.

2.6 Mecanismos de espalhamento

Apresentaremos agora uma breve descrição dos mecanismos de espalhamento mais comuns nesse tipo de sistema e, utilizando as grandezas calculadas nos itens anteriores, faremos a verificação de como esses mecanismos evoluem nas amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p em função de parâmetros como temperatura e concentração de Eu. Para o cálculo da energia de Fermi, quando necessário, consideramos que os 4 vales estão ocupados até o valor de $x = 0.03$ conforme discutido no item 2.1.3.

2.6.1 Espalhamento por fônons

O espalhamento por fônons tem sua origem nas vibrações da rede e depende diretamente da temperatura. Como vimos na seção 2.5, esse é o principal mecanismo de espalhamento no PbTe para $T > 80$ K. Precisamos verificar agora como esse mecanismo se comporta quando introduzimos o Eu.

Para o cálculo do tempo de espalhamento por fônons (τ_F), precisamos ter conhecimento da densidade de estados quando as bandas não são parabólicas como é

o caso do PbTe. A densidade de estados, para o PbTe, pode ser escrita como [31]:

$$D(E_F) = \frac{2^{1/2} m_d^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} E_F^{1/2} \left(1 + \frac{E_F}{\varepsilon_g}\right)^{1/2} \left(1 + \frac{2E_F}{\varepsilon_g}\right) \quad (2.6.1)$$

onde

$$m_d = N^{2/3} (m_l m_t^2)^{1/3} \quad (2.6.2)$$

é a massa efetiva da densidade de estados, N é o número de vales e ε_g é dada pela equação (2.1.3). A energia de Fermi é dada por:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 \frac{p}{N})^{2/3} \quad (2.6.3)$$

O tempo de espalhamento devido aos fônons é dado por [31]:

$$\tau_F^{-1} = (\tau_F^{(0)})^{-1} \left[1 - \frac{8}{3} \frac{y(1+y)}{(1+2y)^2} \right] \quad (2.6.4)$$

com

$$(\tau_F^{(0)})^{-1} = \frac{\pi k_B T D(E)}{\hbar c_1 N} \Xi^2$$

e

$$y = \frac{E_F}{\varepsilon_g}$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, c_1 é a combinação do módulo elástico e Ξ é o potencial de deformação. Os valores de c_1 e Ξ são 7.1×10^{10} N/m² e 3.8×10^{-18} J respectivamente.

Os tempos de espalhamento por fônons, calculados a partir da equação (2.6.4), para todas as concentrações de Eu, são mostrados na figura 2.16. Podemos perceber que o tempo de espalhamento sofre variações com a inclusão de Eu. Para verificarmos com mais clareza o que ocorre, plotamos na figura 2.17 os tempos de espalhamento em função de x para as temperaturas fixas em 300 e 4 K. Em (a), τ_F é praticamente constante de 0 a 0.03 de Eu e em seguida ocorre um rápido aumento desse tempo até 0.06. Na figura 2.17 (b), observamos o mesmo comportamento para a temperatura de 4 K, porém, o tempo de espalhamento é duas ordens de grandeza maior.

Evidentemente, para $x > 0.06$, o transporte é cada vez menos difusivo e a equação (2.6.4) perde sua validade. Assim, devemos considerar que até $x = 0.05$, nosso

Figura 2.16: Tempos de espalhamento por fônons calculados a partir da equação (2.6.4) para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p .

resultado é mais coerente.

2.6.2 Espalhamento da liga

O espalhamento pela liga se origina da desordem presente no sistema causada pela troca de átomos de Pb por Eu. Tal desordem introduz uma flutuação aleatória no potencial cristalino que limita a mobilidade em ligas semicondutoras [32, 33].

O tempo de espalhamento pela liga pode ser calculado utilizando a expressão:

$$\frac{1}{\tau_L} = \frac{2\pi}{\hbar} D(E_F) N_0 x(1-x) |V|^2 \quad (2.6.5)$$

onde N_0 é o número de cátions por unidade de volume dado por

$$N_0 = \left[\frac{a_0^3}{4} \right]^{-1}$$

com V sendo o “*offset*” da banda de condução dividido por N_0 e a_0 é o raio de Bohr. Vemos por meio da equação (2.6.5) que o espalhamento pela liga é independente da temperatura e depende somente das características da amostra. A figura 2.18 mostra os tempos de espalhamento pela liga, τ_L , em função da concentração de Eu

Figura 2.17: Tempos de espalhamento por fônons para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p em função de x para as temperaturas fixas de 300 K em (a) e de 4 K em (b).

para x variando de 0.01 até 0.05. Nessa figura observamos que τ_L sofre variações com o aumento de Eu, mas não grandes o suficiente para que a ordem de grandeza seja alterada, ao menos até $x = 0.05$.

Figura 2.18: Tempo de espalhamento pela liga para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p em função da concentração de Eu.

2.6.3 Espalhamento por íons magnéticos

O espalhamento magnético ocorre quando existem íons magnéticos presentes na rede. No caso da liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$, o Európio, devido ao seu elevado *spin* ($S = 7/2$),

possui propriedades magnéticas. Precisamos verificar se o espalhamento resultante da interação desses íons magnéticos com o *spin* do portador tem alguma influência nas propriedades de transporte.

Durante o processo de espalhamento da carga pelo íon magnético, o *spin* eletrônico pode permanecer inalterado ou sofrer uma “rotação”. Assim, podemos escrever os tempos de espalhamento magnético τ_s^z (“*non-spin-flip*”) e τ_s^t (“*spin-flip*”) da seguinte forma [34]:

$$\frac{1}{\tau_s^z(B)} = \frac{1}{\tau_s} \frac{\langle (S^z)^2 \rangle}{S(S+1)} \quad (2.6.6)$$

$$\frac{1}{\tau_s^t(B)} = \frac{1}{\tau_s} \frac{\langle S^z \rangle}{2S(S+1)} \frac{\alpha/2}{\sinh^2(\alpha/2)} \quad (2.6.7)$$

com

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{2\pi}{\hbar} D(E_F) c \Omega J^2 S(S+1)$$

$$\alpha = \frac{g_s \mu_B B}{k_B T}$$

$$\langle S^z \rangle = S B_s(S\alpha)$$

$$\langle (S^z)^2 \rangle = S(S+1) - \langle S^z \rangle \coth(\alpha/2)$$

onde $S = 7/2$, c é a média de concentração atômica das impurezas magnéticas, Ω é o volume atômico médio da liga, g_s é o fator de Landé, J é a integral de troca e $B_s(S\alpha)$ é a função de Brillouin dada por:

$$B_s(S\alpha) = \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S} S\alpha\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{1}{2S} S\alpha\right) \quad (2.6.8)$$

Podemos ver através as equações (2.6.6) e (2.6.7) que os tempos de espalhamento magnético são sensíveis à aplicação de um campo magnético e a variações de temperatura.

Para verificar o comportamento dos tempos de espalhamento magnético em função da concentração de Eu e para temperaturas fixas, a figura 2.19 mostra os tempos de espalhamento sem “*spin-flip*”, τ_s^z , em (a) e com “*spin-flip*”, τ_s^t , em (b) em função da quantidade de Európio para $B \rightarrow 0$ (veremos o efeito do campo mag-

Figura 2.19: Tempos de espalhamento sem “*spin-flip*” (τ_s^z) em (a) e com “*spin-flip*” (τ_s^t) em (b) para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo-*p* em função da concentração de Eu.

nético em τ_s^z e τ_s^t no capítulo 3). Os parâmetros utilizados foram: $J = 25 \times 10^{-3}$ eV [35, 36], $S = 7/2$ e $\Omega = 6.62 \times 10^{-29}$ m⁻³. Em ambas as figuras temos os tempos de espalhamento para alta e baixa temperatura, 300 e 4 K respectivamente, e podemos constatar que os tempos de espalhamento parecem ser independentes da temperatura das amostras. Vemos também que o tempo de espalhamento sem “*spin-flip*” da figura 2.19 (a) é 2 ordens de grandeza menor que o tempo de espalhamento com “*spin-flip*” na figura 2.19(b).

Assim, os tempos de espalhamento magnético parecem não variar consideravelmente (a ponto de variar uma ordem de grandeza) com o aumento de x , de acordo com a figura 2.19 (a) e (b).

2.6.4 Espalhamento elétron-elétron

Vimos, através das curvas de mobilidade, que o espalhamento por impurezas ionizadas não exerce grande influência no transporte do nosso sistema. Atribuímos esse fato ao elevado valor da constante dielétrica do PbTe que blindar o potencial Coulombiano dos íons presentes na rede. Entretanto, esse não é o único tipo de espalhamento Coulombiano presente em semicondutores. O espalhamento elétron-elétron também depende da interação Coulombiana. Esse tipo de interação ocorre quando uma partícula 1, inicialmente com vetor de onda $\vec{k}_1$, colide com uma partícula 2, com vetor de onda inicial $\vec{k}_2$. A colisão causa uma mudança no vetor de onda de ambas as partículas, que passam a ter vetores de onda $\vec{k}_1'$ e $\vec{k}_2'$.

O tempo de espalhamento elétron-elétron pode ser calculado utilizando a seguinte

expressão [37]:

$$\frac{1}{\tau_{ee}} = \frac{2\pi e^4}{\varepsilon^2 V \sqrt{2\overline{m}^*} E_{12}^{3/2}} \left[\ln \left(1 + \frac{4}{x} \right) - \frac{1}{1+x} - \frac{\pi}{2} \left\{ \frac{1}{1+x \left(1 + \frac{x}{4} \right)} \right\} \right] \quad (2.6.9)$$

com

$$E_{12} = \frac{\hbar^2 K_{12}^2}{2\overline{m}^*}$$

$$\overline{m}^* = \frac{m^*}{2}$$

$$K_{12} = \left| \frac{k_1 - k_2}{2} \right|$$

$$x = \frac{\hbar^2 \lambda^2}{2\overline{m}^* E_{12}}$$

onde λ é o comprimento de blindagem dado por

$$\lambda = \left(\frac{6\pi n e^2}{\varepsilon E_F} \right)^{1/2} \quad (2.6.10)$$

n é o número de portadores por unidade de volume e V é o volume do cristal.

Vemos na equação (2.6.9), que o tempo de espalhamento elétron-elétron é inversamente proporcional ao quadrado da constante dielétrica. Conforme citado anteriormente, essa constante possui um valor muito elevado no PbTe comparado com outros semicondutores mais comumente estudados. Além disso, o raio de blindagem dado pela equação (2.6.10) define uma região onde o portador de carga estaria sujeito ao potencial coulombiano. Fora dessa região, o portador estaria livre do efeito desse potencial. Novamente, podemos ver pela equação (2.6.10) que λ é reduzido pela constante dielétrica. Assim, o mecanismo de espalhamento elétron-elétron não deve ser de grande relevância nas amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$. Voltaremos a tratar esse tipo de interação no próximo capítulo.

As propriedades de transporte e os mecanismos de espalhamento calculados e apresentados nesse capítulo darão suporte para a análise dos resultados que será feita nos próximos capítulos.

Capítulo 3

Localização Fraca

Neste capítulo, apresentaremos o fenômeno de localização fraca. Começaremos com sua definição e passaremos para os modelos existentes que calculam a contribuição da localização para a condutividade na presença de diversos mecanismos de interação. Com os dados apresentados no capítulo anterior, poderemos identificar qual modelo se aplica melhor aos nossos resultados. Veremos que o fenômeno de localização é uma poderosa ferramenta para o estudo dos mecanismos de espalhamento presentes em um sistema.

3.1 Definição

Em sistemas desordenados, que apresentam condução metálica, as funções de onda dos elétrons podem sofrer interferência nos defeitos presentes na rede. Esse efeito de *interferência quântica* dá origem ao fenômeno conhecido como *localização de Anderson*, ou *localização fraca*, e foi primeiramente tratado por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan [38, 39] quando eles desenvolveram a teoria de escala para condutores bidimensionais. Esse fenômeno passou a ser investigado em metais e semicondutores que possuíam certo grau de desordem. Mais especificamente, a localização fraca pode ser observada nas anomalias presentes nas medidas de resistividade ou de magnetorresistência em baixas temperaturas [39].

Em um sistema metálico, sem desordem, a resistividade diminui quando a temperatura é reduzida. Em um sistema desordenado, a localização pode acontecer se a temperatura for baixa o suficiente. Nesse caso, a resistividade, ao invés de diminuir, passa a aumentar com a queda de temperatura.

Conforme visto no capítulo anterior, a magnetorresistência clássica tem uma dependência quadrática com a mobilidade e com o campo ($\mu^2 B^2$). Assim, devemos

observar um efeito mais intenso dessa magnetorresistência para amostras com maior mobilidade. Percebemos ainda que a magnetorresistência clássica é sempre positiva, ou seja, a *resistência aumenta* com o aumento do campo. Além disso, quando a amostra tende a uma região de transição metal-isolante essa contribuição clássica tende a diminuir uma vez que $\mu \rightarrow 0$ (ver figura 2.13(b)). Na presença de localização fraca, entretanto, é possível observar uma *redução da resistência* quando um campo magnético é aplicado, dando origem ao que chamamos de magnetorresistência negativa.

Conforme dito anteriormente, o efeito de localização fraca só pode ser observado em temperaturas relativamente baixas, geralmente quando $k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann e T é a temperatura) é da ordem de $\frac{\hbar}{\tau_i}$ (τ_i é um tempo de espalhamento inelástico). Nessa região de temperatura, precisamos distinguir dois tempos de espalhamento diferentes, o tempo de espalhamento elástico τ_0 e tempo de espalhamento inelástico τ_i . De forma simplificada, podemos definir τ_0 como o tempo que o elétron leva para mudar de um estado de momento k para um estado k' , sem perder energia, enquanto que τ_i se refere ao tempo de espalhamento em que há perda de energia. Em altas temperaturas, esses tempos são praticamente da mesma ordem. Entretanto, em temperaturas muito reduzidas, τ_i pode ser algumas ordens de grandeza maior que τ_0 . Como consequência, um elétron pode ser espalhado várias vezes pelas impurezas sem que o elétron perca energia, de modo que a função de onda não altera sua fase, possibilitando a interferência construtiva.

A condutividade de Boltzmann (σ , apresentada no capítulo anterior) não leva em conta a interferência entre as funções de onda espalhadas pelas impurezas. Isso gera um erro que deve ser corrigido calculando-se a contribuição do efeito de localização sobre a condutividade. Veremos mais adiante os modelos que calculam essa contribuição. Primeiramente, tentaremos dar uma explicação mais simples para o fenômeno de localização fraca.

3.1.1 Probabilidade de retorno do elétron

A localização fraca corresponde a um aumento de probabilidade de se “encontrar” um elétron em um dado sítio da rede. O aumento de probabilidade ocorre devido à interferência das funções de ondas eletrônicas que se propagam no mesmo caminho mas em sentidos diferentes. Para isso, é necessário que o tempo de espalhamento inelástico seja muito longo comparado com o tempo de espalhamento elástico.

Para entendermos melhor o mecanismo de localização fraca, consideremos um

Figura 3.1: (a) Representação esquemática de alguns possíveis caminhos de um elétron viajando de A até A' . (b) Trajetórias que se cruzam.

elétron indo de um sítio A para um sítio A' , conforme figura 3.1 (a). Uma vez que o movimento é difusivo, o elétron espalha elasticamente várias vezes durante o percurso. A probabilidade de que o elétron atinja o ponto A' é calculada somando-se todos os possíveis caminhos:

$$P(A \rightarrow A') = \left| \sum_i C_i \right|^2 = \sum_i |C_i|^2 + \sum_{i \neq j} C_i C_j^* \quad (3.1.1)$$

onde C_i é a amplitude de propagação ao longo do caminho i . O primeiro termo da equação (3.1.1) é a probabilidade clássica e o segundo se refere ao termo de interferência.

A mudança de fase ao longo de cada trajetória é dada por

$$\Delta\varphi = \frac{1}{\hbar} \int_A^{A'} \vec{p} \cdot d\vec{l} \quad (3.1.2)$$

onde $\vec{p}$ é o vetor momento do elétron e $d\vec{l}$ é seu deslocamento ao longo de uma trajetória.

Assim, cada caminho acrescentará uma diferença de fase diferente para as funções de onda, de forma que a coerência se perde e a interferência se anula. Desse modo, o segundo termo da equação (3.1.1) tende a zero e obtemos somente o resultado clássico:

$$P(A \rightarrow A') = \sum_i |C_i|^2 \quad (3.1.3)$$

Por outro lado, se A e A' forem o mesmo ponto, digamos que seja um ponto O ,

as duas ondas que viajam no mesmo caminho, mas em sentidos diferentes, sofrem a mesma diferença de fase e podem interferir construtivamente. Assim, a probabilidade se torna o dobro da probabilidade clássica (figura 3.1 (b)):

$$P(O \rightarrow O) = \left| \sum_{i=1}^2 C_i \right|^2 = \sum_{i=1}^2 |C_i|^2 + \sum_{i \neq j} C_i C_j^* = 2 \sum_{i=1}^2 |C_i|^2 = 4|C|^2 \quad (3.1.4)$$

O aumento de probabilidade de o elétron se encontrar no ponto O significa uma diminuição da probabilidade de que ele chegue ao ponto A' . Isso implica em uma redução da condutividade e um aumento da resistividade elétrica da amostra.

Qualquer interação que possa reduzir a coerência de fase das ondas tende a destruir a interferência e a localização deixa de existir. A aplicação de um campo magnético, espalhamento por fônons ou o aparecimento de acoplamento *spin*-órbita são exemplos de efeitos que podem destruir a interferência.

3.1.2 Correção para a condutividade

Em três dimensões, a correção para a condutividade, devido ao efeito de localização fraca, é dada por [40, 41]:

$$\Delta\sigma(T) = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} (D\tau_i)^{-1/2} \quad (3.1.5)$$

onde

$$D = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m^{*2}} \tau_0 \quad (3.1.6)$$

é a constante de difusão, k_F é o número de onda dado pela equação (2.5.1), apresentada no capítulo 2, e τ_0 é o tempo espalhamento elástico.

Para o caso do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$, a correção para a condutividade devido ao efeito de localização deve levar em conta a contribuição dos 4 vales. Supondo que a contribuição dos 3 vales oblíquos nas direções $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$ e $[11\bar{1}]$ sejam equivalentes, podemos escrever:

$$\Delta\sigma(T) = \Delta\sigma_1(T) + 3\Delta\sigma_2(T) \quad (3.1.7)$$

onde

$$\Delta\sigma_1(T) = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} (D_t\tau_i)^{-1/2} \quad (3.1.8)$$

é a contribuição do vale longitudinal na direção [111] e

$$\Delta\sigma_2(T) = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} (D_c\tau_i)^{-1/2} \quad (3.1.9)$$

é a contribuição de um vale oblíquo. As constantes de difusão são reescritas como:

$$D_t = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m_t^2} \tau_0 \quad (3.1.10)$$

e

$$D_c = \frac{1}{3} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m_c^2} \tau_0 \quad (3.1.11)$$

A massa transversal m_t é calculada utilizando a equação (2.1.2) e a massa ciclotrônica m_c pode ser calculada de acordo com a equação:

$$\frac{1}{m_c^2} = \frac{1}{m_t} \left(\frac{1}{m_t} \frac{1}{9} + \frac{1}{m_l} \frac{2}{3} \right) \quad (3.1.12)$$

É importante notar que as correções dadas pelas equações (3.1.8) e (3.1.9) dependem do tempo de espalhamento inelástico τ_i . No próximo capítulo, veremos como esse tempo pode ser obtido através do ajuste das curvas medidas experimentalmente.

Devemos lembrar que o efeito de localização fraca ocorre em um sistema que ainda se encontra no regime metálico. Se a desordem aumentar consideravelmente, de forma que o produto $k_F l$ se torne da ordem de 1, então devemos tratar o sistema como próximo da região de transição e a correção dada por (3.1.5) não é mais válida.

Para verificarmos o limite de validade da correção para a condutividade, podemos comparar o valor fornecido pela equação (3.1.7) com a condutividade das amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p em função de x . Na figura 3.2, vemos a condutividade σ , juntamente com a correção $\Delta\sigma$, calculada para $x = 0, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04$ e 0.05 em $T = 4.2$ K.

A condutividade σ , mostrada na figura 3.2, foi obtida dos dados experimentais. Para isso, a partir da medida da resistência elétrica R , foi calculada a resistividade $\rho = Rd$, onde d é a espessura da amostra, e então a condutividade foi calculada utilizando a expressão $\sigma = 1/\rho$. Para o cálculo de $\Delta\sigma$, utilizamos a equação (3.1.7). Na tabela 3.1 temos os parâmetros utilizados para o cálculo de σ e $\Delta\sigma$. A tabela 3.2 mostra os tempos de espalhamento elástico (τ_0) e inelástico (τ_i) utilizados nos cálculos.

Em baixas temperaturas, podemos considerar que τ_0 é muito menor que os outros tempos de espalhamento presentes no processo de transporte de carga ($\tau_0 \ll \tau_i$), de

forma que a equação (2.3.14) nos permite aproximar $\tau \sim \tau_0$. Assim, o tempo de espalhamento elástico foi obtido por meio da equação (2.3.29) da seguinte forma:

$$\tau_0 = \frac{m^*}{\mu e} \quad (3.1.13)$$

Os valores das massas efetivas também são exibidos na tabela 3.2 juntamente com os tempos de espalhamento. O tempo de espalhamento inelástico foi obtido do ajuste das curvas de magnetorresistência para as amostras de $x = 0.01, 0.02, 0.03, 0.04$ e 0.05 . Para a amostra de $x = 0$, foi feita uma extrapolação da curva de τ_i em função de x . As curvas de magnetorresistência e o procedimento de ajuste serão apresentados no próximo capítulo.

Na figura 3.2, vemos que, à medida que a concentração de Eu aumenta, a correção $\Delta\sigma$ fica cada vez maior e se torna da ordem da condutividade em torno de 0.04. Assim, para $x \geq 0.04$, a variação da condutividade não pode mais ser tratada como uma correção e os modelos teóricos ficam limitados. Na verdade, nessa região de transição, os processos de transporte não são bem conhecidos e deveremos ter cautela na aplicação dos modelos existentes.

Figura 3.2: Variação da condutividade σ , para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , em função da concentração de Eu, em $T = 4.2$ K juntamente com a correção $\Delta\sigma$.

Tabela 3.1: Valores de x , densidade de portadores p , resistência R , resistividade ρ , mobilidade μ e condutividade σ para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p para $T = 4.2$ K.

x	$p(10^{23}\text{m}^{-3})$	$R(\text{ohm})$	$\rho(10^{-7}\text{ohm.m})$	$\mu(\text{m}^2/\text{Vs})$	$\sigma(10^5\text{ohm.m})^{-1}$
0	1.22	0.108	3.0	6.13	33.06
0.01	3.1	2.102	59.0	1.03	1.7
0.02	1.1	25.52	714.6	0.27	0.14
0.03	0.08	278.5	7798.0	0.07	1282
0.04	0.15	156.75	4389.0	0.06	2278
0.05	0.013	2005.0	56140.0	0.88	178.13

Tabela 3.2: Massa transversal (m_t) e de ciclotron (m_c) e os tempos de espalhamento elástico (τ_0) e inelástico (τ_i) para $T=4.2$ K

x	$m_t(10^{-32}\text{kg})$	$m_c(10^{-32}\text{kg})$	$\tau_0(10^{-13}\text{s})$	$\tau_i(10^{-12}\text{s})$	$\Delta\sigma(\text{ohm.m})^{-1}$
0.0	1.88	4.49	7.18	101.0	26.4
0.01	2.29	5.42	3.46	52.0	72.1
0.02	2.71	6.34	1.08	3	902.9
0.03	3.12	7.26	0.33	3	4379.5
0.04	3.53	8.18	0.30	4.6	3345.5
0.05	3.94	9.10	4.95	1.3	4020.7

3.1.3 Correção para a magnetocondutividade

Na presença de um campo magnético, a variação da condutividade com o campo e com a temperatura pode ser escrita como [40, 41]:

$$\Delta\sigma(B, T) = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar l_B} F(\delta) \quad (3.1.14)$$

onde

$$l_B = \left(\frac{\hbar}{eB} \right)^{1/2} \quad (3.1.15)$$

é o comprimento magnético e $F(\delta)$ é a função de Kawabata dada por

$$F(\delta) = \sum_{N=0}^{\infty} \left\{ 2 \left(\sqrt{N+1+\delta} - \sqrt{N-\delta} \right) - \frac{1}{N+\frac{1}{2}+\delta} \right\} \quad (3.1.16)$$

com

$$\delta = \frac{l_B^2}{4D\tau_i} \quad (3.1.17)$$

A função (3.1.16) é valida somente se as seguintes condições forem satisfeitas:

$$\frac{\hbar\omega_c}{E_F} \ll 1 \quad (3.1.18)$$

$$\omega_c\tau \ll 1 \quad (3.1.19)$$

$$\left(\frac{eB}{\hbar}\right)^{1/2} l \ll 1 \quad (3.1.20)$$

Na expressão (3.1.19) temos $\omega_c = eB/m^*$. A condição (3.1.18) indica que o campo magnético aplicado não pode ser forte o bastante de forma que a energia $\hbar\omega_c$, fornecida por ele, seja superior a energia de Fermi. A condição (3.1.19) implica que o tempo de espalhamento produzido pelo campo deve ser superior ao tempo de espalhamento do portador de carga e a condição (3.1.20) impõe que o livre caminho médio deve ser menor que o comprimento de espalhamento produzido pelo campo (raio de ciclotron).

A equação (3.1.14) calcula a contribuição do efeito de localização para a magnetocondutividade no caso de condução por um único vale e na ausência de anisotropia. Vimos no capítulo 2 que o PbTe possui uma estrutura de bandas composta por múltiplos vales fortemente anisotrópicos. Entretanto, para que a contribuição de todos os vales possa ser levada em conta no cálculo da magnetocondutividade, é necessário que se tenha conhecimento da direção da corrente aplicada (na amostra) com relação a cada um dos vales [42, 14]. A geometria de van der Pauw, utilizada para as medidas experimentais das amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , não permite que uma corrente seja fixa em uma única direção (ver capítulo 2 seção 2.4). Voltaremos a tratar esse problema no capítulo 4 onde apresentaremos os resultados experimentais para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p no regime metálico.

A contribuição da localização para a magnetocondutividade, descrita acima, não leva em conta os efeitos de interações que podem estar presentes no material como, por exemplo, interações por efeito *spin*-órbita ou espalhamento magnético. A seguir, veremos alguns modelos que levam em conta as interações mais comumente presentes no sistema.

3.2 Efeito de interações na localização fraca

3.2.1 Efeito Zeeman e acoplamento *spin*-órbita

Conforme vimos no capítulo anterior, o PbTe apresenta um elevado valor do fator g tanto para as componentes transversais quanto para as longitudinais. Devemos lembrar que a liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p apresenta um comportamento diferente da liga do tipo n no que se refere à variação de g com o aumento de Eu. Desse modo, espera-se uma contribuição significativa do efeito Zeeman na localização fraca. Além disso, o elevado valor do número atômico do Pb ($Z = 82$) pode dar origem ao acoplamento *spin*-órbita de forma que esse efeito também deve estar presente no sistema. Veremos a seguir como os efeitos Zeeman e de *spin*-órbita afetam a localização fraca.

O acoplamento *spin*-órbita ocorre quando existe uma interação entre o momento angular orbital do portador e seu *spin*. O momento angular orbital, nesse caso, é entre o buraco e os átomos da rede mesmo que o buraco não esteja ligado a eles. O momento angular total deve ser conservado, mas o buraco pode ocupar diferentes estados de energia (de *spin* ou orbital) [43]. Quando isso acontece, a fase do estado de *spin* é alterada afetando a coerência de fase das funções de onda que descrevem as cargas. Hikami *et al* [44] e Maekawa e Fukuyama [45] verificaram que, na presença de acoplamento *spin*-órbita, é possível observar uma queda logarítmica da resistividade com a diminuição de temperatura. Esse comportamento é exatamente o oposto do que ocorre com a resistividade na presença de localização fraca, i.e, a resistividade deveria aumentar quando a temperatura diminui. Isso significa que, na presença de acoplamento *spin*-órbita, a localização é destruída quando os estados de *spins* são alterados, levando ao que chamamos de *antilocalização*.

Outro fenômeno importante, conhecido como efeito Zeeman, ocorre quando aplicamos um campo magnético no sistema. Esse efeito foi observado pelo físico holandês Pieter Zeeman em 1896, quando ele estudava os efeitos do campo magnético no espectro ótico dos átomos. Ele observou que uma linha espectral se divide em diversos componentes na presença de um campo magnético estático.

Em 1981, Fukuyama e Hoshino [46] propuseram uma correção para a magnetococondutividade que leva em conta tanto a interação *spin*-órbita quanto o efeito Zeeman:

$$\frac{\Delta\sigma(B,T)}{A} = \sqrt{h}F\left(\frac{1+t}{h}\right) + 0.5\sqrt{\frac{h}{1-\gamma}}\left\{F\left(\frac{t_+}{h}\right) - F\left(\frac{t_-}{h}\right)\right\} -$$

$$\frac{1}{\sqrt{1-\gamma}} \left(\sqrt{t_-} - \sqrt{t_+} \right) + \sqrt{t} - \sqrt{t+1} \quad (3.2.1)$$

com

$$A = \frac{\sqrt{3}e^2}{2\pi^2\hbar l} \sqrt{\frac{\tau_0}{\tau_{so}}}$$

$$h = \left(\frac{l}{l_B} \right)^2 \left(\frac{\tau_{so}}{3\tau_0} \right)$$

$$t = \left(\frac{\tau_{so}}{4\tau_i} \right)$$

$$t_{\pm} = t + 0.5 \left(1 \pm \sqrt{1-\gamma} \right)$$

$$\gamma = \left(\frac{1}{2\hbar} g^* \mu_B B \tau_{so} \right)^2$$

F é a função de Kawabata dada em (3.1.16), τ_i e τ_{so} são os tempos de espalhamento inelástico e de interação *spin*-órbita respectivamente, l é o livre caminho médio dado pela equação (2.5.2) e μ_B é o magneton de Bohr. O efeito Zeeman é levado em consideração através do termo γ que, de acordo com a equação (3.2.1), deve ser menor que 1. Uma vez que as amostras possuem um elevado valor do fator g , a expressão (3.2.1) só pode ser utilizada para baixos valores de campo magnético. Assim, temos mais uma condição além das condições (3.1.18), (3.1.19) e (3.1.20).

Da mesma forma que escrevemos a expressão para a correção da condutividade devido ao efeito de localização (ver equação (3.1.7)), levando em conta os múltiplos vales do PbTe, escrevemos para a magnetocondutividade:

$$\Delta\sigma(B, T) = \Delta\sigma 1(B, T) + 3.\Delta\sigma 2(B, T) \quad (3.2.2)$$

onde $\Delta\sigma 1(B, T)$ é a correção para a magnetocondutividade do vale longitudinal na direção [111] e $3.\Delta\sigma 2(B, T)$ é a contribuição dos vales oblíquos nas direções $[\bar{1}11]$, $[1\bar{1}1]$ e $[11\bar{1}]$.

Conforme visto no capítulo anterior, os valores do fator g de Landé são alterados de forma diferente na banda de condução e de valência à medida em que o Európio é introduzido no $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$. Podemos utilizar a equação 3.2.2 e os valores de g

para as bandas de condução e de valência e verificar a diferença de comportamento da magnetorresistência para elétrons e buracos, levando em conta os múltiplos vales. Para $x = 0.03$, temos $g_T^{LO} = 18.06$ e $g_T^{OB} = 6.84$ na banda de condução enquanto que na banda de valência temos $g_T^{LO} = 29.28$ e $g_T^{OB} = 14.57$, conforme os dados teóricos apresentados na tabela 2.3 no capítulo 2. Utilizando os dados da tabela 3.1 e supondo uma razão $\tau_{so}/\tau_i = 0.2$, calculamos a magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ para $x = 0.03$, em $T = 4.2$ K. A figura 3.3 mostra esse resultado. Nessa figura, podemos observar que a amplitude da magnetorresistência positiva (antilocalização) é maior no caso de condução por buracos que para elétrons, supondo a presença de acoplamento *spin*-órbita. De fato, a magnetorresistência positiva, ou antilocalização, está presente nas amostras tratadas nesse trabalho, conforme veremos no capítulo 4.

Para concentrações maiores de Eu, a amplitude da antilocalização para elétrons deve ser ainda menor, uma vez que os valores de g , na banda de condução, diminuem com o aumento de x (ver figura 2.9).

Figura 3.3: Contribuição da antilocalização para a magnetorresistência, para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ para $x=0.03$, levando em conta a interação *spin*-órbita e o efeito Zeeman segundo a expressão (3.2.2).

3.2.2 Efeito do espalhamento magnético

A presença de átomos magnéticos pode causar o espalhamento dos spins. Nessa situação, a fase das ondas dos portadores pode ser alterada e a coerência de fase entre as ondas dos buracos fracamente localizados pode ser destruída. Isso ocorre devido à interação de troca entre os spins dos buracos e os momentos magnéticos localizados do Eu, sem que o momento angular orbital esteja envolvido. Nesse caso, o spin do portador é rotacionado de um pequeno ângulo quando ele “passa” próximo de um centro espalhador [39].

No capítulo anterior, vimos que existem dois tempos de espalhamento distintos que caracterizam o espalhamento magnético, o tempo com *spin-flip* (τ_s^t) e sem *spin-flip* (τ_s^z) (ver seção 2.6.3). Ambos dependem do campo magnético e, para o caso do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$, são praticamente independentes da temperatura (ver seção 2.6.3, figura 2.19). O tempo τ_s^z não altera a fase do *spin* do elétron e, portanto, não interfere na localização. Para verificarmos o comportamento dos tempos de espalhamento magnético, utilizamos as expressões (2.6.6) e (2.6.7). Escolhemos a amostra com $x = 0.04$, como exemplo, por considerarmos que existem íons de Eu suficientes para apresentar efeitos magnéticos, mas sem que a amostra esteja na região de transição metal-isolante. Os parâmetros utilizados foram: $J = 25 \times 10^{-3}$ eV [35, 36], $c = 0.04$, $g = 14.57$ (valor para a banda de valência dos vales oblíquos) e $S = 7/2$. Para o cálculo do volume atômico médio Ω , utilizamos a expressão:

$$\Omega = \frac{a_0^3}{4} \quad (3.2.3)$$

onde a_0 é o parâmetro de rede da ordem de 6.42 Å que resulta em um volume atômico médio de 6.62×10^{-29} m³ aproximadamente.

A figura 3.4 mostra como os tempos de espalhamento, calculados utilizando os dados apresentados acima, evoluem com um campo magnético aplicado. Verificamos que a aplicação do campo leva a um aumento do tempo τ_s^t (*spin-flip*), indicando que o *spin* do buraco leva um tempo cada vez maior para ser alterado quando o campo magnético aumenta. Assim, espera-se que, com o aumento do campo, esse espalhamento afete cada vez menos a localização. Por outro lado, o tempo τ_s^z (sem *spin-flip*) diminui com o aumento do campo, indicando que o buraco espalha cada vez mais rápido sem que o *spin* seja alterado.

O tempo τ_s^t (*spin-flip*) indica quanto tempo o *spin* do buraco leva para ser alterado dando uma indicação da importância desse efeito para a localização, uma vez que a alteração do *spin* leva a uma alteração da fase do elétron. De acordo

Figura 3.4: Os tempos de *spin-flip* (τ_s^t) e sem *spin-flip* (τ_s^z) calculado para uma amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ para $x=0.04$.

com a figura 3.4, esse tempo aumenta com a aplicação do campo. Como resultado, o tempo de espalhamento τ_s^t (*spin-flip*) parece ser uma ordem de grandeza maior que os tempos de espalhamento inelásticos encontrados no ajuste das amostras que serão apresentados no capítulo 4.

A expressão desenvolvida por Amaral em 1990 [34] leva em conta, além dos efeitos Zeeman e de acoplamento *spin*-órbita, a contribuição do espalhamento magnético para a magnetorresistência. A expressão é dada por:

$$\frac{\Delta\sigma}{C} = \sqrt{B} \left\{ F\left(\frac{B'}{B}\right) + \frac{1}{2\sqrt{1-\gamma'}} \left[F\left(\frac{B_+}{B}\right) - f_3\left(\frac{B_-}{B}\right) \right] \right\} \\ + 2 \left(\sqrt{B'} - \sqrt{B'(0)} \right) + \frac{1}{\sqrt{1-\gamma'}} \left(\sqrt{B_+} - \sqrt{B_-} \right) - \left(\sqrt{B_+(0)} - \sqrt{B_+(0)} \right) \quad (3.2.4)$$

onde

$$C = \frac{e^2}{2\pi^2\hbar} \sqrt{\frac{e}{\hbar}} \\ \gamma' = \left(\frac{3g^*\mu_B B}{8eD(B_{so} - 3B_s^t)} \right)^2 \\ B_j = \frac{\hbar}{4eD\tau_j}$$

$$\frac{1}{\tau'} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{2}{\tau_s^t}$$

$$\frac{1}{\tau_{\pm}} = \frac{1}{\tau_i} + \frac{2}{3\tau_{so}} + \frac{2}{\tau_s^z} + \frac{2}{\tau_s^t} \pm 2 \left(\frac{1}{3\tau_{so}} - \frac{1}{\tau_s^t} \right) \sqrt{1 - \gamma'}$$

onde F é a função de Kawabata e D é a constante de difusão dada pela equação (3.1.6).

Devemos notar que γ' também deve ser menor que 1 no modelo descrito acima. Entretanto, no modelo de Fukuyama, γ tende a 1 muito mais lentamente que no modelo de Amaral, quando aplicamos um campo magnético, conforme pode ser visto na figura 3.5. Para o cálculo de γ' apresentado na figura 3.5, utilizamos os mesmos parâmetros usados no cálculo de τ_s^t e τ_s^z e supomos $\tau_{so} = 5 \times 10^{-12}$ s. No modelo de Amaral, $\gamma' = 1$ para $B = 0.07$ T enquanto que no modelo de Fukuyama $\gamma = 1$ para $B = 0.33$ T.

Podemos comparar as magnetoresistências calculadas através dos modelos de Fukuyama e de Amaral fazendo o ajuste de uma curva experimental. Para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.04$, em $T = 1.6$ K (a mais baixa temperatura medida), e utilizando as equações (3.2.1) e (3.2.4), calculamos a magnetorresistência prevista pelos dois modelos (Fukuyama e Amaral) e comparamos com a curva experimental dessa amostra. O resultado é apresentado na figura 3.6. De acordo com essa figura, os modelos são capazes de ajustar a curva experimental para campos de até 6×10^{-2} T. Para campos maiores que esse valor, o ajuste não é possível. Os tempos de espalhamento obtidos desses dois modelos são apresentados na tabela 3.3. Vemos que os tempos de espalhamento obtidos nos dois modelos são da mesma ordem, embora o tempo de espalhamento inelástico, τ_i , seja 14 % maior no modelo de Amaral que no de Fukuyama. Já o tempo de espalhamento *spin*-órbita, τ_{so} , é 32 % maior no modelo de Fukuyama que no de Amaral. Uma vez que a inclusão do espalhamento magnético destrói a antilocalização, é esperado que haja um aumento do tempo de espalhamento inelástico e uma redução do tempo de espalhamento por *spin*-órbita, no modelo de Amaral, para que se obtenha um bom ajuste o que, de fato, ocorreu. Entretanto, não é possível afirmar que esse mecanismo esteja presente nas amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$. Na verdade, de acordo com a figura (3.4), o tempo de espalhamento com *spin*-flip é da ordem de 10^{-10} s, o que representa um valor muito alto comparado com os valores de espalhamento inelásticos encontrados para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ (ver próximo capítulo).

Figura 3.5: A variação de γ nos modelos de Fukuyama e Amaral. No modelo de Fukuyama, γ tende a 1 muito mais lentamente que no modelo de Amaral.

Tabela 3.3: Tempos de espalhamento inelásticos τ_i e spin-órbita τ_{so} , obtidos dos ajustes dos modelos de Fukuyama e Amaral, para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.04$, em $T = 1.6$ K

	τ_i ($\times 10^{-12}\text{s}$)	τ_{so} ($\times 10^{-12}\text{s}$)
Amaral	20.3	10.5
Fukuyama	17.4	15.5

3.2.3 Interação elétron-elétron

O efeito de interação elétron-eletron (IEE) pode ser considerado como uma correção para a densidade de estados e só deve ocorrer se o movimento dos elétrons for difusivo e para altas taxas de espalhamento elástico. O espalhamento de elétrons em materiais ordenados pode ser descrito com $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$ quando um elétron com vetor de onda $\vec{k}$ é espalhado para um estado $\vec{k}'$ e $\vec{q}$ é o vetor de onda de um fônon. Por outro lado, em um sistema desordenado, os vetores $\vec{k}$ não são bem definidos e possuem uma incerteza da ordem de $1/l$, onde l é o livre caminho médio. A IEE se torna importante quando $ql < 1$ (o livre caminho médio se torna muito pequeno).

A IEE pode se originar dos canais partícula-buraco ou partícula-partícula. O primeiro é devido à interação entre partículas similares em energia e momento. Nesse caso, a interação é do tipo Coulombiana e esse termo é conhecido como canal

Figura 3.6: Magnetorresistências de acordo com os modelos de Fukuyama e Amaral (equações (3.2.1) e (3.2.4)) para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.04$, em $T = 1.6 \text{ K}$. Os pontos medidos são representados pelas caixas abertas.

de difusão. No canal partícula-partícula, o momento total das partículas é pequeno, os vetores $\vec{k}$ são opostos e similares em energia. As partículas interagem mediadas por interações com fônons, o que pode levar à supercondutividade em baixas temperaturas. Esse canal também é conhecido como canal de Cooper.

No canal de difusão, existem duas partes que contribuem para a IEE: o termo de troca e o termo de Hartree. O primeiro é devido à interação entre cargas com pequenas diferenças de energia e pequenas transferências de momento (q pequeno). A difusão torna os estados de energia acessíveis no espaço k , que no movimento balístico não são possíveis de serem alcançados. Já o termo de Hartree está relacionado com a localização fraca. Na IEE, existe interferência entre dois elétrons que percorrem o mesmo caminho, mas em direções opostas.

Um elétron que percorre um circuito fechado (após uma série de espalhamentos elásticos) pode interferir com ele mesmo e criar uma espécie de “memória” ou “holograma de carga” que contém toda a informação sobre as impurezas [47]. Essa informação corresponde à diferença de fase entre a onda original e a onda de retorno. Um segundo elétron que é espalhado pelas mesmas impurezas, geralmente sofre a mesma mudança de fase. Entretanto, se ele for espalhado pelo “holograma de carga”

a defasagem é reajustada e obtemos uma interferência construtiva das ondas do segundo elétron. Para que esse processo ocorra, é necessário que haja não somente difusão mas também coerência.

A correção para a magnetocondutividade devido às interações elétron-elétron pode ser calculada utilizando a expressão desenvolvida por Y. Isawa *et. al.* [48] para baixos campos, e é dada por:

$$\Delta\sigma(T, B) = -\frac{15e^2}{32\pi^{3/2}} \left(\frac{k_B T}{2\hbar D}\right)^{1/2} \zeta\left(\frac{5}{2}\right) \left[F \left(\frac{g\mu_B B}{2\pi k_B T}\right)^2 + \frac{5}{12} F \left(\frac{a\hbar}{2\pi k_B T}\right)^2 \right] \quad (3.2.5)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann, D é a constante de difusão, $\zeta\left(\frac{5}{2}\right) = 1.341$, $a = 4Dl_B^{-2}$ (l_B é dado pela equação (3.1.15)), g é o fator de Landé e μ_B é o magneton de Bohr.

Em (3.2.5) F é um parâmetro dado por:

$$F = 2D(E) \left\langle \frac{4\pi e^2}{|\vec{k} - \vec{k}'| \varepsilon(\vec{k} - \vec{k}')} \right\rangle \quad (3.2.6)$$

onde $D(E)$ é a densidade de estados, $\varepsilon(\vec{k} - \vec{k}')$ é a constante dielétrica e $\langle \dots \rangle$ é a média sobre $\vec{k}$ e $\vec{k}'$ na superfície de Fermi.

Na verdade, a equação (3.2.5) contém as contribuições dos canais partícula-partícula e partícula-buraco e é idêntica à expressão desenvolvida por Lee e Ramakrishnan [49] na ausência da contribuição partícula-partícula. O primeiro termo de (3.2.5) também leva em conta o efeito Zeeman. Devemos lembrar que, no caso do PbTe, a constante dielétrica ε possui um valor muito elevado (da ordem de 1350 em $T = 4.2$ K) o que deve tornar o fator F muito pequeno de acordo com a equação (3.2.6). Assim, esperamos que a contribuição da IEE para a magnetocondutividade dada por (3.2.5) tenda a ser desprezível no nosso sistema. De fato, nos resultados que serão apresentados no próximo capítulo, não observamos qualquer evidência de que a IEE esteja presente nas amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p .

Fazendo uso dos modelos teóricos apresentados neste capítulo, é possível obter os diversos tempos de espalhamento por meio dos ajustes das curvas teóricas com as curvas experimentais e compará-los, quando possível, com o tempos calculados no final do capítulo anterior. Assim, no próximo capítulo, utilizaremos os modelos de Kawabata e Fukuyama, citados acima, para obtermos informações a respeito dos efeitos de interações presentes nas amostras. Desse modo, será possível obter um

perfil de como esses mecanismos evoluem com a variação de quantidades como a concentração de Európio (x), a concentração de buracos (p) e a temperatura (T).

Capítulo 4

Resultados no Regime de Localização Fraca

Neste capítulo, apresentaremos os resultados para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com x variando de 0 até 0.05. Sabemos que a desordem causada pela introdução de Eu é responsável pelo efeito de localização fraca observado nessas amostras. Porém, ao contrário de amostras do tipo n , as amostras do tipo p também apresentam magnetorresistência positiva, indicando a presença do efeito que conhecemos como *antilocalização*. Faremos uso do modelo proposto por Fukuyama e Hoshino, que leva em conta a contribuição do efeito de *spin*-órbita e do efeito Zeeman para a localização, para ajustarmos as curvas de magnetorresistência. Através desses ajustes, obteremos os tempos de espalhamento inelástico e de *spin*-órbita e, em seguida, verificaremos como esses mecanismos se comportam quando variamos a concentração de európio e a temperatura.

4.1 Medidas de magnetorresistência

Na figura 4.1, temos as medidas de magnetorresistência para as amostras com $x = 0$, 0.01, 0.02, 0.03, 0.04 e 0.05 de Eu. As medidas foram realizadas para campos magnéticos de até 11 T. Entretanto, nas amostras de 0 até 0.03 (figuras de (a) até (d)), mostramos os resultados para valores de B menores que 1 T para que seja possível observar as variações da magnetorresistência com o campo e com a temperatura. Na figura 4.1 (a), temos as curvas experimentais para a amostra com $x = 0$. Essa amostra apresenta o resultado clássico (comportamento quadrático da magnetorresistência com o campo) para valores muito pequenos de B (ver subseção 2.3.3).

Conforme B aumenta, as curvas apresentam um comportamento quase linear com o campo. Atribuímos esse comportamento à anisotropia das bandas. Para $x = 0.01$, figura 4.1 (b), observamos que as curvas exibem o resultado clássico para as temperaturas variando de 4.3 até 9 K, onde a magnetorresistência é sempre positiva e aumenta aproximadamente com o quadrado do campo. Em 2.1 K, porém, vemos uma pequena amplitude positiva em torno de $B = 0$. Na figura 4.1 (c), para $x = 0.02$, observamos um comportamento anômalo para temperaturas menores que 2.3 K. Para $x = 0.03$, figura 4.1 (d), não é mais possível observar o comportamento clássico na escala em que os gráficos são exibidos. As curvas obtidas para as amostras de 0.04 e 0.05, figuras 4.1 (e) e (f), exibem comportamentos característicos de localização (magnetorresistência negativa) e antilocalização (magnetorresistência positiva).

Os resultados observados na figura 4.1 indicam a presença de fenômenos de interferência nas amostras. Entretanto, as curvas medidas exibem uma “mistura” dos efeitos de interferência com os efeitos clássicos. Para que uma análise mais precisa possa ser feita, devemos subtrair a contribuição clássica das curvas apresentadas na figura 4.1 a fim de podermos observar com mais clareza a intensidade dos efeitos de localização e/ou antilocalização.

Conforme vimos no capítulo 2, a contribuição clássica para a magnetorresistência é dada por $\mu^2 B^2$ para baixos valores de campos magnéticos ($\omega_c \tau \ll 1$). Assim, podemos calcular a magnetorresistência clássica utilizando as mobilidades presentes na tabela 4.1, apresentada mais adiante, e subtraí-la dos valores de magnetoresistência medidos. A diferença dessas duas magnetoresistências deve fornecer as curvas contendo principalmente os resultados provenientes dos efeitos de interferência.

Na figura 4.2 temos as curvas de magnetorresistência calculadas utilizando a previsão clássica, $\mu^2 B^2$, juntamente com as curvas medidas. Para que as figuras ficassem mais claras, mostramos somente a temperatura mais alta e a mais baixa para cada amostra. Por meio dessas figuras podemos ver até onde a aproximação quadrática é válida. Por exemplo, para a amostra com $x = 0$, podemos considerar que a aproximação é válida para campos de até 0.1 T, aproximadamente, tanto para a mais alta quanto para a mais baixa temperatura, enquanto que para a amostra de $x = 0.01$, a dependência quadrática pode ser considerada para campos de até 0.35 T aproximadamente. Para a amostra com $x = 0.05$, não é possível observar nenhuma contribuição clássica, razão pela qual essa amostra não está na figura 4.2.

O passo seguinte é calcular a diferença entre as curvas medidas e a contribuição clássica. Para $x = 0$ (PbTe puro), esperamos que não existam efeitos de localização,

Figura 4.1: Curvas de magnetorresistência para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) Para $x = 0$, observamos o comportamento quadrático da magnetorresistência com o campo para valores muito pequenos de B . Conforme B aumenta, as curvas apresentam um comportamento quase linear com o campo. (b) Para $x = 0.01$, observamos o comportamento clássico para as temperaturas variando de 4.3 até 9 K. Em 2.1 K, vemos uma pequena amplitude positiva em torno de $B = 0$. (c) Para $x = 0.02$, observamos um comportamento anômalo para $T < 2.3$ K e na figura (d), para $x = 0.03$, não é mais possível observar o comportamento clássico. As curvas obtidas para as amostras de 0.04, figura (e) e 0.05, figura (f), exibem comportamentos característicos de localização (magnetorresistência negativa) e antilocalização (magnetorresistência positiva).

uma vez que o sistema não possui a desordem causada pelo Eu. Dessa forma, ao subtraírmos a curva medida da curva clássica o resultado deve ser nulo na região de campo onde a aproximação quadrática é válida. A figura 4.3 comprova essa expectativa. Nela podemos ver os pontos medidos, para $T = 1.8$ K, juntamente com a curva clássica calculada utilizando a aproximação quadrática. A diferença entre as duas curvas (curva vermelha tracejada) é nula para campos de até 0.1 T, conforme esperado.

O tratamento feito para a amostra com $x = 0$, e apresentado na figura 4.3, foi realizado para as demais amostras até $x = 0.04$ e é apresentado na figura 4.4. Os limites de validade para esse tratamento podem ser determinados por meio da figura 4.2, onde é possível observar os valores de campo B para os quais a aproximação quadrática diverge das curvas medidas. Assim, os valores de magnetorresistência apresentadas na figura 4.4, para campos fora da região de validade, não tem significado físico. Na figura 4.4 (a), para $x = 0.01$, observamos pequenas oscilações nas curvas de magnetorresistência para $B < 0.35$ T, entretanto, não é possível afirmar que essas oscilações sejam uma indicação da presença de efeitos de interferência. Na amostra com $x = 0.02$, figura 4.4 (b), fica clara a presença do efeito de antilocalização (magnetorresistência positiva) para temperaturas menores que 3.2 K e B próximo de zero. A amostra com $x = 0.03$, 4.4 (c), apresenta valores positivos de magnetorresistência para todas as temperaturas enquanto que a amostra de $x = 0.04$, 4.4 (d), apresenta valores tanto positivos quanto negativos.

Conforme citado anteriormente, para a amostra com $x = 0.05$, não é possível visualizar a contribuição clássica devido à baixa mobilidade. Entretanto, podemos subtrair a contribuição clássica, utilizando a mobilidade calculada através do efeito Hall utilizando a expressão $\mu = 1/\rho_{pe}$ (ver capítulo 2 seção 2.4), e verificar qual a mudança na curva de magnetorresistência nessa amostra. A figura 4.5 mostra esse resultado para $T = 1.4$ K. Podemos ver que, ao subtraírmos a contribuição clássica, a curva mantém sua forma e sofre um pequeno deslocamento que se torna mais evidente a partir de 0.25 T aproximadamente. Além disso, conforme visto no capítulo anterior, os modelos disponíveis não nos permitem fazer uma análise para campos muito superiores a 0.1 T. Assim, podemos tratar diretamente os dados medidos da amostra com $x = 0.05$ sem que seja necessária a subtração da contribuição clássica.

Para verificarmos como os efeitos de localização e antilocalização evoluem com a concentração de európio, fixamos a temperatura em torno de 4 K e comparamos as curvas de magnetorresistência das amostras. A figura 4.6 mostra as curvas de magnetorresistência para as amostras com x variando de 0 até 0.05 para a tempera-

Figura 4.2: Magnetorresistência calculada com $\mu^2 B^2$ (linhas tracejadas) juntamente com as curvas medidas (linhas cheias) para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) Na amostra com $x = 0$, vemos que a aproximação é válida para campos de até 0.1 T, aproximadamente, tanto para a mais alta quanto para a mais baixa temperatura. Para $x = 0.01$, figura (b), a dependência quadrática pode ser considerada para campos de até 0.35 T. Na figura (c), para $x = 0.02$, a aproximação quadrática é válida até $B \sim 1$ T. Na figura (d), para $x = 0.03$, essa aproximação é válida na região de campo onde $0.5 < B < 1$ T enquanto que para $x = 0.04$, figura (e), temos a validade dentro da região onde $1.5 < B < 2.5$ T.

Figura 4.3: Magnetorresistência para a amostra de PbTe ($x = 0$). Curva experimental para $T = 1.8$ K juntamente com a curva clássica calculada utilizando a aproximação quadrática. A diferença entre as duas é nula (curva vermelha tracejada) até ~ 0.1 T.

tura em torno de 4 K. Para $x = 0$, observamos somente o comportamento clássico. A curva mostra valores positivos e se origina da força de Lorentz onde a amplitude varia com a mobilidade.

Para $x = 0.01$, observamos o aparecimento de uma pequena contribuição negativa próxima de $B = 0$, que desaparece quando o campo aumenta. Isso indica que, mesmo para baixas concentrações de Eu, o efeito de localização fraca parece já estar presente nessa temperatura.

Para $x = 0.02$, observamos uma magnetorresistência positiva entre 0 e 1 T, aproximadamente, que se origina do efeito de antilocalização e não tem relação com o efeito clássico.

Para $x = 0.03$, podemos observar que a amplitude positiva atinge um valor máximo com relação às outras amostras. Para $x = 0.04$ e 0.05 , a amplitude da magnetorresistência positiva parece ser a mesma enquanto que a magnetorresistência negativa é mais evidente na amostra de 0.05 . É importante lembrar que para $x = 0.05$ o sistema já se encontra próximo da região de transição metal-isolante, de forma que devemos ter cuidado na interpretação dos resultados nessa região.

Conforme visto no capítulo 2, o sistema deve se encontrar na região de transição quando tivermos $k_F l \sim 1$. Para valores menores que 1, o sistema deve se comportar como um isolante. Na tabela 4.1 apresentamos algumas propriedades das amostras

Figura 4.4: Curvas de magnetorresistência obtidas quando subtraímos a contribuição clássica dos pontos medidos para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo-*p*. (a) Para $x = 0.01$ observamos pequenas oscilações nas curvas para $B < 0.35$ T mas não é possível afirmar que sejam uma indicação da presença de efeitos de interferência. (b) Para $x = 0.02$ fica clara a presença do efeito de antilocalização para temperaturas menores que 3.2 K. (c) Para $x = 0.03$, vemos valores positivos de magnetorresistência para todas as temperaturas. (d) A amostra de $x = 0.04$ apresenta valores tanto positivos quanto negativos. Valores de magnetorresistência para B fora da região de validade não têm significado físico (ver figura 4.2).

Figura 4.5: Curva medida e curva obtida da subtração da contribuição clássica para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.05$. A curva mantém sua forma e sofre um pequeno deslocamento, que se torna mais evidente a partir de 0.25 T, aproximadamente.

Tabela 4.1: Concentração de Eu (x), concentração de portadores (p), mobilidade μ , o produto $k_F l$ e a energia de Fermi para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ para $T = 4.2$ K

x	$p(\text{m}^{-3})$	$\mu(\text{m}^2/\text{V.s})$	$k_F l$	$E_F(\text{meV})$
0	1.2×10^{23}	6.13	94.8	43.2
0.01	3.1×10^{23}	1.03	29.8	66.5
0.02	1.1×10^{23}	0.28	3.86	27.3
0.03	8.1×10^{21}	0.07	0.48	4.3
0.04	1.6×10^{22}	0.06	0.24	5.8
0.05	1.3×10^{21}	0.88	0.65	0.9

em $T = 4.2$ K. Conforme mostra essa tabela, o produto $k_F l$ se torna menor que 1 quando a concentração x atinge o valor de 0.03. Entretanto, sabemos que as amostras sofrem a transição em torno de 0.05 (no capítulo 2 vimos que abaixo de 0.05 todas as amostras apresentam comportamento metálico para temperaturas acima de 10 K). Essa aparente discrepância pode ser causada pela presença da localização fraca quando o sistema se encontra em baixas temperaturas ($T < 10$ K).

Na figura 4.7 apresentamos a resistência elétrica normalizada (em $T = 20$ K) em função da temperatura. Nessa figura, é possível observar que na amostra com $x = 0.01$, a resistência começa a aumentar em torno de 15 K. Para $x = 0.02$ o aumento de resistência ocorre de forma mais lenta, enquanto que para $x = 0.03$ a resistência cai abruptamente com a queda de temperatura. Para $x = 0.04$, a

Figura 4.6: Curvas de magnetorresistência para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com x variando de 0 até 0,05, para uma temperatura em torno de 4 K. Para $x = 0,01$, observamos o aparecimento de uma pequena contribuição negativa próxima de $B = 0$ que desaparece quando o campo aumenta. Para $x = 0,02$, observamos uma magnetorresistência positiva entre 0 e 1 T, aproximadamente, e que se origina do efeito de antilocalização. Para $x = 0,03$, podemos observar que a amplitude positiva atinge um valor máximo com relação às outras amostras. Para $x = 0,04$ e 0,05, a amplitude máxima atingida pela magnetorresistência positiva parece ser a mesma, enquanto que a magnetorresistência negativa é mais evidente na amostra de 0,05.

resistência cai até $T = 10$ K, a partir de onde começa a aumentar. Para $x = 0.05$, observamos somente um aumento da resistência quando a temperatura diminui.

O aumento de resistividade nas amostras com $x = 0.01$ e 0.02 pode ser causado pelo efeito de localização fraca, que está presente mesmo que as amostras sejam metálicas. A queda da resistividade em $x = 0.03$, numa região onde existe localização fraca, pode indicar a presença de espalhamento por acoplamento *spin*-órbita. Conforme citado no capítulo anterior, a presença de acoplamento *spin*-órbita pode destruir o efeito de localização causando uma diminuição da resistividade (antilocalização). Isso explicaria o comportamento da resistência da amostra de 0.03 . De fato, essa constatação concorda com a figura 4.4 (d) e 4.6, onde o efeito de antilocalização é mais evidente. Entretanto, conforme a concentração de európio aumenta, a mobilidade da amostra tende a diminuir devido ao espalhamento da liga (ver capítulo 2). Na amostra de 0.04 , para $T = 10$ K, o súbito aumento da resistência pode indicar que o espalhamento da liga está anulando o acoplamento *spin*-órbita. Assim, podemos também interpretar o aumento da resistividade em $x = 0.05$, como um efeito da localização, onde o acoplamento *spin*-órbita foi anulado pelo espalhamento da liga.

4.2 Ajustes das curvas de magnetorresistência

A seguir, apresentaremos os resultados obtidos utilizando o modelo de Fukuyama e Hoshino [46], que leva em conta a interação *spin*-órbita e o efeito Zeeman, para os ajustes das medidas da magnetorresistência. Fizemos uso da equação (3.2.2), apresentada no capítulo 3, para os ajustes das curvas de magnetorresistência apresentadas na figura 4.4 do item 4.1. O resultado dos ajustes é apresentado na figura 4.8 para as amostras com concentrações de 0.02 , 0.03 , 0.04 e 0.05 de Eu, uma vez que essas amostras apresentaram claramente características dos efeitos de interferência. Na figura 4.8 (a), temos os resultados para a amostra com $x = 0.02$ para a qual foi possível realizar um bom ajuste até 3.7 K e para valores de B até 0.1 T. Em (b), para $x = 0.03$, o ajuste foi possível para valores máximos de $B \sim 0.05$ T. Em (c), para $x = 0.04$, obtivemos um bom ajuste das curvas para valores de B até 0.1 T. Nessa mesma amostra, para $T = 6.8$ e 5.4 K, observamos uma pequena amplitude negativa da magnetorresistência. Acreditamos que esse efeito, entretanto, deve ser causado por problemas na medida. A amostra com $x = 0.05$, por uma questão de clareza, foi dividida em duas partes (figura 4.8 (d) e (e)). Nessa amostra, para as temperaturas mais altas, figura 4.8 (e), o ajuste foi possível até $B \sim 0.1$ T. Para

Figura 4.7: Resistência normalizada para as amostras de $Pb_{1-x}Eu_xTe$ do tipo p , em $T = 20$ K, em função da temperatura. Na amostra com $x = 0.01$, a resistência começa a aumentar em torno de 15 K. Para $x = 0.02$ o aumento de resistência ocorre mais lentamente, enquanto que para $x = 0.03$ a resistência cai abruptamente com a queda de temperatura. Para $x = 0.04$, a resistência cai até $T = 10$ K, a partir de onde começa a aumentar. Para $x = 0.05$, observamos somente um aumento da resistência quando a temperatura diminui.

as temperaturas mais baixas, figura 4.8 (d), um bom ajuste foi possível para as temperaturas de 1.6 e 2.6 (para valores de B até 0.05 T), 3.5 e 5.8 K (para valores de B até 0.1 T). Para a temperatura mais baixa medida nessa amostra ($T = 1.4$ K), foi possível ajustar a curva na região de campo até 0.02 T. Note que os ajustes foram realizados dentro das regiões de campo definidas pela análise apresentada na figura 4.2.

Cada curva ajustada na figura 4.8 fornece dois tempos de espalhamento: um tempo de espalhamento inelástico (τ_i) e um tempo de espalhamento por acoplamento *spin*-órbita (τ_{so}). Assim, para cada amostra, obtemos os tempos de espalhamento em função da temperatura que são apresentados na figura 4.9. Na figura 4.9 (a), para $x = 0.02$, observamos que τ_i aumenta com a queda de temperatura, enquanto que τ_{so} é praticamente constante, exceto para o ponto correspondente à temperatura de 5.6 K. Em (b), para $x = 0.03$, τ_i e τ_{so} aumentam com a queda de temperatura, embora τ_{so} varie muito lentamente com T . Em (c), para $x = 0.04$, τ_i aumenta com a queda de temperatura até o valor de 4 K e passa a ser praticamente constante a partir desse ponto. Para essa mesma temperatura, τ_{so} sofre uma pequena oscilação. Em (d), para $x = 0.05$, ambos τ_i e τ_{so} parecem variar muito pouco com a redução de temperatura até 4K. A partir dessa temperatura, tanto τ_i quanto τ_{so} aumentam quando a temperatura é reduzida.

Com exceção da amostra com $x = 0.05$, o tempo de espalhamento *spin*-órbita parece depender muito fracamente de T na região de temperatura onde as medidas foram realizadas. As tabelas 4.2, 4.3, 4.4 e 4.5 contêm os parâmetros utilizados nos ajustes das curvas teóricas, apresentadas na figura 4.8, juntamente com os tempos de espalhamento obtidos para as amostras. O tempo de espalhamento elástico foi calculado utilizando a equação (3.1.13).

É interessante calcular a razão entre os tempos, τ_i/τ_{so} , pois ela nos fornece uma visão mais direta da “competição” entre os dois mecanismos. Por exemplo, se $\tau_i/\tau_{so} > 1$, significa que o mecanismo de *spin*-órbita está sendo mais efetivo do que o inelástico. A razão τ_i/τ_{so} em função da temperatura é mostrada na figura 4.10. Na figura 4.10 (a), para $x = 0.02$, o aumento de τ_i/τ_{so} indica que o efeito de *spin*-órbita se torna cada vez mais importante quando a temperatura diminui concordando com o evidente efeito de antilocalização observado na figura 4.8 (a). Em (b), para $x = 0.03$, também observamos um aumento de τ_i/τ_{so} com a queda de temperatura, porém, com uma amplitude menor. Em (c), para $x = 0.04$, τ_i/τ_{so} segue o comportamento da amostra com $x = 0.03$. Em (d), para $x = 0.05$, a razão τ_i/τ_{so} é praticamente independente da temperatura para $T > 4$ K. Para tempe-

Figura 4.8: Ajustes para as amostras com diferentes concentrações de Eu. (a) Resultados para a amostra com $x = 0.02$. Foi possível realizar um bom ajuste até 3.7 K e para valores de B até 0.1 T. (b) Para $x = 0.03$, o ajuste foi possível para valores máximos de $B \sim 0.05$ T. (c) Para $x = 0.04$, um bom ajuste foi possível para valores de B até 0.1 T. (d) Amostra com $x = 0.05$ para as temperaturas mais baixas. Um bom ajuste foi possível para as temperaturas de 1.6 e 2.6 K (para valores de B até 0.05 T), 3.5 e 5.8 K (para valores de B até 0.1 T). Para a temperatura mais baixa medida nessa amostra ($T = 1.4$ K), foi possível ajustar a curva na região de campo até 0.02 T. (e) Amostra com $x = 0.05$ para as temperaturas mais altas. O ajuste foi possível até $B \sim 0.1$ T.

Figura 4.9: Tempos de espalhamento inelástico (τ_i) e *spin*-órbita (τ_{so}) obtidos através dos ajustes para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) Para $x = 0.02$, observamos que τ_i aumenta com a queda de temperatura, enquanto que τ_{so} é praticamente constante, exceto para o ponto correspondente à temperatura de 5.6 K. Em (b), para $x = 0.03$, τ_i e τ_{so} aumentam com a queda de temperatura, embora τ_{so} aumente muito lentamente com T . Em (c), para $x = 0.04$, τ_i aumenta com a queda de temperatura até o valor de 4 K e passa a ser praticamente constante a partir desse ponto. Para essa mesma temperatura, τ_{so} sofre uma pequena oscilação. Em (d), para $x = 0.05$, ambos τ_i e τ_{so} parecem variar muito pouco com a redução de temperatura até $T = 4$ K. A partir dessa temperatura, tanto τ_i quanto τ_{so} aumentam quando a temperatura é reduzida.

raturas menores, observamos uma aparente diminuição de τ_i/τ_{so} com a queda de temperatura se considerarmos que o último ponto (para $T = 1.4$ K) está incorreto. Isso indica uma redução do acoplamento *spin*-órbita e concorda com a sequência de curvas de magnetorresistência nas temperaturas 5.8, 3.5 e 1.6 K dessa amostra (ver figura 4.8 (d) e (e)).

Podemos ajustar as curvas de τ_i , mostradas na figura 4.9, com a expressão $\tau_i = AT^{-\alpha}$ e verificar o valor do coeficiente α a fim de identificar a origem do espalhamento inelástico. A figura 4.11 mostra os resultados dos ajustes para os tempos de espalhamento inelásticos juntamente com os valores de α e A . Os valores encontrados para o coeficiente α são de aproximadamente 2.2, 0.76, 2.15 e 0.86 para as amostras com $x = 0.02, 0.03, 0.04$ e 0.05 respectivamente.

O aumento de τ_i com a queda de temperatura, para todas as amostras, pode ser uma indicação de que o espalhamento por fônons seja o mecanismo dominante de espalhamento inelástico, em baixas temperaturas, para o caso do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo *p*.

A previsão teórica para o tempo de espalhamento inelástico, em função da temperatura, é de $\tau_i \propto T^{-3}$ devido aos fônons quando $k_F l \gg 1$ [50, 51], i.e, variação clássica em metais puros, e $\tau_i \propto T^{-2}$ na presença de desordem para $k_F l > 1$ também devido aos fônons [39]. Para um sistema fortemente desordenado, $k_F l < 1$, ainda não há um acordo geral sobre qual deveria ser o comportamento de τ_i em função da temperatura. Os trabalhos de Thouless [52], Rammer e Schmid [53] e Reizer e Sergeyev [54], preveem um comportamento de T^{-4} enquanto que os trabalhos de Takayama [55], Kagan e Zhernov [56] e Belitz e Das Sarma [57] preveem um comportamento de T^{-2} .

As previsões teóricas citadas acima, entretanto, não levam em conta a anisotropia das bandas. O tempo de espalhamento por fônons, calculado no capítulo 2, leva em consideração a anisotropia das bandas mas não leva em conta a desordem causada pela introdução de európio e exibe uma dependência do tipo $\tau_i \propto T^{-1}$. Os valores encontrados para o expoente α podem ser o resultado do efeito da desordem e da anisotropia dos vales no mecanismo de espalhamento inelástico.

Na figura 4.12, temos os tempos de espalhamento calculados de acordo com a expressão $\tau_i = AT^{-\alpha}$ (onde os valores de A e α foram apresentados na figura 4.11) em função da concentração de európio (x) e para temperaturas fixas de 1, 2, 3, 4, 5 e 10 K. Para as temperaturas de 3, 4 e 5 K, τ_i varia muito pouco com a alteração da quantidade de Eu. Para temperaturas mais altas ou mais baixas que esses valores, não fica claro como τ_i evolui com o aumento de Eu. Para todas as amostras, o

espalhamento diminui com a queda de temperatura.

Tabela 4.2: Parâmetros utilizados no ajuste da magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.02$

$T(\text{K})$	$p(10^{23}\text{m}^{-3})$	$\mu(\text{m}^2/\text{Vs})$	$\rho_0(10^{-5}\text{ohm.m})$	$\tau_0(10^{-14}\text{s})$	$\tau_i(10^{-12}\text{s})$	$\tau_{so}(10^{-12}\text{s})$
1.4	1.06	0.26	7.11	4.3	22.0	5.9
1.6	1.06	0.26	7.05	4.4	12.0	5.9
2.3	1.06	0.27	3.56	4.6	11.0	5.2
3.2	1.05	0.27	14.3	4.6	4.0	5.7
3.7	1.05	0.28	7.14	4.6	3.0	5.0
5.6	1.06	0.26	7.14	4.3	0.8	0.85

Tabela 4.3: Parâmetros utilizados no ajuste da magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.03$

$T(\text{K})$	$p(10^{21}\text{m}^{-3})$	$\mu(\text{m}^2/\text{Vs})$	$\rho_0(10^{-4}\text{ohm.m})$	$\tau_0(10^{-14}\text{s})$	$\tau_i(10^{-12}\text{s})$	$\tau_{so}(10^{-12}\text{s})$
2.7	8.44	0.19	7.47	3.70	5.0	11
5.4	8.08	0.07	7.79	1.44	3.0	10
6.9	8.05	0.08	7.83	1.67	2.7	8.5
8.5	8.07	0.09	7.85	1.92	2.0	8.5

Tabela 4.4: Parâmetros utilizados no ajuste da magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.04$

$T(\text{K})$	$p(10^{22}\text{m}^{-3})$	$\mu(\text{m}^2/\text{Vs})$	$\rho_0(10^{-4}\text{ohm.m})$	$\tau_0(10^{-14}\text{s})$	$\tau_i(10^{-12}\text{s})$	$\tau_{so}(10^{-12}\text{s})$
1.4	1.65	0.089	4.43	1.98	6.0	13.0
1.6	1.65	0.047	4.44	1.05	6.0	13.0
3.9	1.55	0.060	4.39	1.34	5.0	13.0
4.3	1.55	0.060	4.39	1.34	4.6	8.5
5.4	1.55	0.064	4.36	1.43	2.5	7.0
6.8	1.63	0.062	4.36	1.39	1.6	7.4

Tabela 4.5: Parâmetros utilizados no ajuste da magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$

$T(\text{K})$	$p(10^{21}\text{m}^{-3})$	$\mu(\text{m}^2/\text{Vs})$	$\rho_0(10^{-3}\text{ohm.m})$	$\tau_0(10^{-13}\text{s})$	$\tau_i(10^{-12}\text{s})$	$\tau_{so}(10^{-12}\text{s})$
1.4	1.06	0.39	14.8	0.97	4.0	29.7
1.6	1.04	0.45	13.1	1.12	5.0	210
2.6	1.24	0.80	6.2	1.97	2.0	89
3.5	1.26	0.86	5.7	2.12	1.45	13
3.8	1.27	0.87	5.6	2.15	1.3	95
5.8	1.35	0.89	5.2	2.20	1.18	69
6.3	1.35	0.89	5.1	2.21	1.1	69
6.8	1.35	0.89	5.1	2.21	1.1	69
7.5	1.36	0.89	5.1	2.21	1	65
8.8	1.37	0.89	5.08	2.20	0.9	5
9.9	1.38	0.89	5.04	2.20	0.75	5

As medidas de magnetorresistência apresentadas nesse capítulo nos permitiram observar os efeitos de localização fraca causados pela inclusão de Eu. Diferentemente das amostras do tipo n , nas amostras do tipo p estudadas aqui, foi possível verificar o efeito de antilocalização originado do acoplamento *spin*-órbita. Até onde sabemos, esse efeito nunca foi observado em amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo n . Acreditamos que uma das possíveis causas desse fenômeno pode estar relacionada ao efeito Zeeman que parece influenciar com maior intensidade a antilocalização nas amostras do tipo p do que nas amostras do tipo n .

Infelizmente, não ficou claro como os tempos de espalhamento inelásticos, obtidos por meio dos ajustes, evoluem com a variação do európio (ver figura 4.12). Embora tenhamos obtido os valores dos tempos de espalhamento inelástico para cada concentração fixa de Eu, não sabemos que outras propriedades das amostras variam quando a concentração de Eu é alterada e, conseqüentemente, não podemos determinar se existem outros fatores influenciando o espalhamento inelástico.

Figura 4.10: A razão τ_i/τ_{so} em função da temperatura para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) Para $x = 0.02$, o aumento de τ_i/τ_{so} indica que o efeito de *spin*-órbita se torna cada vez mais importante quando a temperatura diminui, concordando com a análise feita e apresentada na figura 4.9. (b) Para $x = 0.03$, também observamos um aumento de τ_i/τ_{so} , porém, com uma amplitude menor. (c) Para $x = 0.04$, τ_i/τ_{so} segue o comportamento da amostra com $x = 0.03$. (d) Para $x = 0.05$, a razão τ_i/τ_{so} é praticamente independente da temperatura para $T > 4$ K. Para temperaturas menores, observamos claramente a diminuição de τ_i/τ_{so} com a queda de temperatura. Isso indica uma redução do acoplamento *spin*-órbita e concorda com a seqüência de curvas de magnetorresistência nas temperaturas 5.8, 3.5 e 1.6 K dessa amostra (ver figura 4.8 (d) e (e)).

Figura 4.11: Ajustes para os tempos de espalhamento inelásticos utilizando a expressão $\tau_i = AT^{-\alpha}$.

Figura 4.12: Tempo de espalhamento inelástico, τ_i , variando com a concentração de európio (x) para as temperaturas fixas de 1, 2, 3, 4, 5 e 10 K. Para as temperaturas de 3, 4 e 5 K, τ_i varia muito pouco com a alteração da quantidade de Eu. Para temperaturas mais altas ou mais baixas que esses valores, não fica claro como τ_i evolui com a concentração de Eu. Para todas as amostras, o espalhamento diminui com a queda de temperatura.

Capítulo 5

Transição metal-isolante

Neste capítulo, faremos a introdução dos conceitos necessários para tratarmos o transporte no regime isolante. Começaremos apresentando a definição de semicondutores que apresentam condução metálica ou isolante e verificaremos como a condução é alterada na presença de estados localizados introduzindo o conceito de limite de mobilidade. Em seguida, apresentaremos a definição de transição de Anderson e mostraremos quais as condições para que ela ocorra. Por fim, no final deste capítulo, faremos uma breve introdução sobre a transição do tipo Mott que, ao contrário do tipo Anderson, não é causada pela desordem no sistema. Na verdade, na transição Mott também ocorre localização das funções de onda, porém, nesse caso, a localização origina-se de correlações eletrônicas, sendo um efeito de muitos corpos. Mostraremos que o critério para que ocorra uma transição do tipo Mott não é satisfeita e que, de fato, a transição metal-isolante observada nas amostras tratadas nesse trabalho é do tipo Anderson.

5.1 Semicondutores metálicos e isolantes

Em sistemas desordenados, podemos analisar o tipo de condução por meio da densidade de estados $D(E)$. Na ausência de desordem, nos materiais em que a $D(E)$ é finita na energia de Fermi (E_F), a condutividade tende a um valor finito em baixas temperaturas, o que caracteriza os compostos metálicos. No caso em que a E_F se encontra em um *gap* de energia, de forma que $D(E)$ seja nula, a condutividade se comporta como $\exp(-w/k_B T)$, com w sendo uma energia de ativação, caracterizando os semicondutores ou isolantes. Nos metais, a condutividade depende somente dos elétrons que têm energia próxima de E_F e de suas interações com fônons e impurezas [58].

Se o sistema apresenta desordem e $D(E)$ vai a zero, significa que o material é um semicondutor, mas se $D(E) \neq 0$, não significa necessariamente que σ tende a um valor finito quando T tende a zero. Se os estados com E_F estão localizados, a condução ocorrerá por saltos e σ tenderá a zero com T , normalmente como $\exp(-const/T^{1/4})$. Materiais que apresentam essas características são conhecidos como “*vidros de Fermi*”, termo primeiramente utilizado por Anderson em 1970 [59]. Um semicondutor dopado e compensado se comporta como um vidro de Fermi em baixas temperaturas. Nessa situação temos um gás de elétrons degenerado no qual os estados em E_F são estados localizados. Em altas temperaturas a condução é devida à excitação térmica dos elétrons para estados não localizados (estendidos). Assim, em um sistema desordenado, o material pode apresentar características tanto metálicas quando isolantes, dependendo da posição da energia de Fermi com relação aos estados localizados.

Conforme vimos no capítulo 2 seção 2.5, também podemos verificar o regime de condução de um sistema por meio do produto $k_F l$. De acordo com a teoria de condução clássica de Boltzmann, o sistema deve se comportar como um metal se $k_F l \gg 1$. Para $k_F l \sim 1$, o resultado clássico não é mais válido e o sistema se encontra numa região próxima da transição metal-isolante. Para $k_F l < 1$, o material deve se comportar como um isolante. Na verdade, na presença de desordem, mesmo que tenhamos $k_F l \gg 1$, os estados localizados já devem existir no sistema.

5.2 Estados localizados e limite de mobilidade

Ioffe e Regel [60] foram os primeiros a observar que valores de l , tais que $k_F l < 1$, não fazem muito sentido. Nessa situação, o transporte difusivo não ocorre mais e a energia de Fermi deve encontrar-se em uma região de estados localizados. Podemos pensar nesses estados localizados como “armadilhas”. Assim, temos uma densidade de estados cujas energias correspondem a estados de armadilhas. Uma vez em um estado localizado, o portador de carga necessita de uma energia de ativação para que ele “salte” para um outro estado. A separação entre os estados localizados e não localizados é chamada de limite de mobilidade E_c e foi primeiramente indicada por Mott em 1967 [61]. Dessa forma, uma vez que o nível de Fermi passa de uma região de estados não localizados (estados estendidos) para uma região de estados localizados, passando pela energia E_c , uma transição deve ocorrer. A condução, nesse caso, passa de metálica para uma condução por saltos. Esse tipo de efeito chama-se transição de Anderson e é causado pela desordem do sistema.

A condução por saltos, nos estados localizados, pode ser resumida em três tipos: (i) condução por excitação dos portadores por fônons para o extremo de mobilidade, (ii) excitação por fônons de um estado localizado para o estado, também localizado, mais próximo no espaço e (iii) condução por VRH (“*Variable Range Hopping*”). No primeiro caso, a condução é descrita pela expressão [62]:

$$\sigma_1 = \sigma_1^0 \exp \left[-\frac{(E_c - E_F)}{k_B T} \right] \quad (5.2.1)$$

onde σ_1^0 é a condutividade no extremo de mobilidade.

O segundo tipo ocorre quando a condução é realizada por impurezas, onde um elétron move-se diretamente de um átomo de impureza para outro por tunelamento [63]. Em cada salto entre os sítios, o elétron emite ou absorve um fônon. Dessa forma, a condução necessita de uma energia de ativação ε , e é dada pela expressão:

$$\sigma_2 \propto \exp(-\varepsilon/k_B T) \quad (5.2.2)$$

A condutividade dada pela expressão (5.2.2) tende a zero em baixas temperaturas e a condução passa a ser do tipo VRH que é o terceiro tipo mencionado. No regime de VRH, o salto não ocorre para o estado mais próximo espacialmente. O portador pode saltar para um estado mais distante porém com energia mais próxima de forma que a ativação por fônon não é necessária. A condução, nesse processo, pode ser expressa como

$$\sigma_3 \propto \exp(-B/T^{1/4}) \quad (5.2.3)$$

onde B pode assumir valores diferentes dependendo do tipo de condução, que pode ser do tipo Mott ou do tipo Efros-Shklovskii. Trataremos a expressão (5.2.3) com mais detalhes no próximo capítulo.

A figura 5.1 mostra esquematicamente os três mecanismos de condução descritos acima.

5.3 O formalismo de Kubo

Antes de estudarmos a transição de Anderson, veremos brevemente o formalismo existente para tratar um material que apresenta condução no regime intermediário, onde $k_F l \sim 1$.

É importante dizer que existe uma diferença entre um material cristalino com

Figura 5.1: Os 3 mecanismos de condução nos estados localizados. No caso 1, o portador é ativado para os estados acima do limite de mobilidade. No caso 2, o portador salta para o estado mais próximo e no caso 3 para o estado com a energia mais próxima.

defeitos e um material desordenado. Em um material cristalino, sem defeitos, as funções de onda de Bloch estão em perfeita coerência através do cristal. O número de onda k descreve a relação entre as funções de onda entre dois pontos do espaço sendo assim um bom número quântico. Em um cristal com defeitos, a coerência de fase existe somente em uma pequena região do espaço e k deixa de ser um bom parâmetro de descrição uma vez que a periodicidade da rede foi perdida. Nesse sistema, ainda podemos utilizar os estados de Bloch e os defeitos são tratados como fonte de espalhamento. Os defeitos misturam dois estados $|k\rangle$ e $|k'\rangle$ destruindo a coerência de fase, e as propriedades macroscópicas do sistema passam a ser descritas por um tempo de espalhamento médio $\langle \tau \rangle$. Esse tratamento é o que chamamos de *aproximação de Boltzmann*.

Em um sistema desordenado, existem estados localizados e estados estendidos (não localizados). Os estados estendidos, embora ocupem todo o volume do cristal, não são estados de Bloch. Entretanto, ainda podemos tratar os estados estendidos em termos de um comprimento de coerência de fase. O formalismo de Kubo fornece uma expressão para a condutividade levando em conta esse conceito [37] o que é bastante útil em sistemas onde existe um forte espalhamento ($k_F l \sim 1$).

A condutividade calculada para um sistema desordenado ($k_F l \sim 1$), utilizando o formalismo de Kubo, é dada pela expressão:

$$\sigma = \frac{2\pi e^2 \hbar^3 \Omega}{m^{*2}} |D_E|^2_M \{D(E)^2\} \quad (5.3.1)$$

Ω é o volume do sistema e $D_E = \int \psi_{E'}^* \frac{\partial}{\partial x} (\psi_E) d^3x$. “ M ” representa uma média sobre todos os estados E e todos os estados E' .

Se o espalhamento é fraco e o livre caminho médio l é longo ($k_F l \gg 1$) o tratamento de Kubo fornece o resultado clássico de Boltzmann. Ou seja, para uma superfície de Fermi esférica, temos:

$$\sigma = \frac{ne^2 \langle \tau \rangle}{m^*} \quad (5.3.2)$$

n é a densidade de elétrons por unidade de volume e $\langle \tau \rangle$ é o tempo de espalhamento médio.

5.4 Localização de Anderson

Um sistema desordenado pode produzir soluções que são localizadas espacialmente quando resolvemos a equação de Schrödinger. O primeiro artigo que comprovou esse fato foi o trabalho publicado por P. W. Anderson em 1958 [1] e que forneceu critérios quantitativos para a localização.

Dada a equação de Schrödinger [64],

$$\nabla^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0 \quad (5.4.1)$$

onde V é o potencial periódico da rede, para um arranjo cristalino de poços de potencial e utilizando o modelo de “*tight-binding*” para resolver (5.4.1) obtem-se uma banda estreita de níveis, com largura B , conforme figura 5.2.

Podemos supor que os poços são distantes o suficiente de tal modo que a superposição entre as funções de onda atômicas $\phi(\vec{r})$ é muito pequena. Se j descreve o j -ésimo poço e $\vec{R}_j$ sua posição na rede, a função de onda de Bloch para um elétron no cristal é

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_j \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_j) \phi(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (5.4.2)$$

Se tomarmos as funções ϕ como sendo esfericamente simétricas (funções s) e W_0 como o nível de energia para um elétron em um poço simples, então as energias para um elétron em uma rede cúbica simples são

$$E = W_0 + W_k \quad (5.4.3)$$

onde

Figura 5.2: Poços de potencial para uma rede cristalina que produz uma banda estreita de níveis com largura B .

$$W_k = -2I (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \quad (5.4.4)$$

I é a integral de transferência dada por

$$I = \int \phi^*(\vec{r} - \vec{R}_i) H \phi^*(\vec{r} - \vec{R}_{i+1}) d^3x \quad (5.4.5)$$

e H é o Hamiltoniano.

A massa efetiva m^* no fundo da banda é

$$m^* = \frac{\hbar}{2Ia^2} \quad (5.4.6)$$

onde a é a largura do poço e a largura da banda B pode ser escrita como

$$B = 2zI \quad (5.4.7)$$

com z sendo o número de coordenação.

O problema é saber o que acontece com essa banda quando o potencial V não é periódico. Para resolver esse problema, Anderson supôs que V toma todos os valores aleatoriamente entre $\pm V_0$, conforme figura 5.3.

Se V_0 for pequeno, podemos considerar a existência de um livre caminho médio. Utilizando a aproximação de Born [65] calculamos l , que fica então:

$$\frac{1}{l} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} V_0 \right)^2 a^3 \frac{D(E)}{u} \quad (5.4.8)$$

A energia E e a velocidade u são calculadas no nível de Fermi. No caso da

Figura 5.3: Poços de potencial para uma rede de Anderson e a densidade de estados.

superfície de Fermi ser esférica, a densidade de estados é dada por

$$D(E) = \frac{(Em^*3/2)^{\frac{1}{2}}}{\pi^2 \hbar^3} \quad (5.4.9)$$

onde a orientação dos *spins* já foi levada em consideração. Utilizando (5.4.9) a equação (5.4.8) pode ser escrita como

$$\frac{a}{l} = \frac{(V_0/I)^2}{32\pi} \quad (5.4.10)$$

A regra de Ioffe-Regel afirma que o menor livre caminho médio possível ocorre quando a função de onda perde sua memória no percurso de um átomo para outro. Assim, ao invés da função de onda do tipo (5.4.2) temos

$$\sum_j A_j \phi(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (5.4.11)$$

onde A_j tem fases e amplitudes aleatórias conforme diagrama na figura 5.4 (a).

Nesse caso podemos escrever para o livre caminho médio

$$l \sim a$$

Segundo a equação (5.4.10), isso ocorre para

$$V_0/I \simeq \sqrt{32\pi} \sim 10$$

Se o número de coordenação z for 6, teremos

$$V_0/B \simeq 0.83 \quad (5.4.12)$$

Figura 5.4: Diagramas das funções de onda. (a) quando $l \sim a$ e em (b) quando os estados estão localizados

Para um elétron colocado em um dos poços da figura 5.3 em $t = 0$, Anderson verificou o que acontece com esse elétron quando $t \rightarrow \infty$. Ele descobriu que nessa situação não existe difusão se V_0/B é maior do que uma constante que depende do número de coordenação z . Isso significa que se V_0/B for maior do que essa constante, todas as funções de onda estão localizadas em uma pequena região do espaço e decaem com uma distância r da vizinhança de algum poço j conforme diagrama na figura 5.4 (b). Esse efeito é o que chamamos de *localização de Anderson*. As funções de onda dos estados localizados não serão mais da forma dada pela equação (5.4.11) mas substituídas pela expressão

$$\sum A_j \phi(\vec{r} - \vec{R}_j) \exp(-\alpha r) \quad (5.4.13)$$

os coeficientes A_j tem fases aleatórias como antes. $\alpha = (2m^*W_0)^{1/2}$ de forma que $\exp(-\alpha r)$ é a taxa com a qual a função de onda em um poço simples cai com a distância. Dessa forma, a determinação do valor de V_0/B determina se o sistema está localizado ou não. Anderson [1] achou o valor de 5.5, utilizando um número de coordenação $z = 6$, para o qual a transição deve ocorrer e desde então vários autores tem achado diferentes valores de V_0/B dependendo da dimensão do sistema.

Se um elétron estiver sujeito a um potencial do tipo mostrado na figura 5.3 mas sem que o critério de Anderson tenha sido satisfeito, podem surgir estados localizados em uma região de energia e estados estendidos em outra. A condutividade será finita no meio da banda mas nula para energias próximas das extremidades conforme mostrado na figura 5.5. Na verdade, qualquer forma de potencial aleatório, por menor que seja, produzirá estados localizados nas extremidades da banda. Nesse

Figura 5.5: Densidade de estados. Os estados localizados correspondem às regiões sombreadas e os estados estendidos estão no centro da banda. E_c e E'_c separam as regiões de energia.

caso, a energia crítica E_c (limite de mobilidade) separa os estados localizados dos não localizados (estendidos). A energia E'_c , mostrada na figura 5.5, separa os estados no topo na banda. Se a energia de Fermi, em $T = 0$, se deslocar de uma posição abaixo de E_c para uma posição acima, a condutividade sairá de um valor nulo para um valor finito. A essa mudança damos o nome de *transição de Anderson*.

Se E_F estiver em uma região de estados localizados, então a condução se dará por meio de saltos ou por ativação térmica para o extremo de mobilidade conforme citado na seção 5.2 e representada esquematicamente na figura 5.1.

5.5 Transição de Anderson e o Efeito Hall

Conforme visto na seção 5.4, uma transição de Anderson ocorre quando a posição no nível de Fermi E_F , ou extremo de mobilidade E_c , é variada de forma que a diferença $E_c - E_F$ mude de sinal. Precisamos agora verificar o que ocorre com a constante Hall (R_H) quando o sistema se encontra no regime isolante uma vez que a determinação do valor dessa constante tem sido uma ferramenta importante durante o desenvolvimento desse trabalho.

O coeficiente Hall é muito útil na determinação da concentração de portadores nos materiais onde o transporte ocorre pela banda de condução ou de valência. A expressão clássica (ver subseção 2.3.2 do capítulo 2), que fornece a relação entre o

coeficiente Hall e a concentração n não é mais válida quando o transporte se dá por meio de ativação térmica ou saltos.

Na verdade, não está claro se devemos ou não observar o efeito Hall no regime de saltos perto da transição metal-isolante. Para portadores livres, se movendo em uma região de estados estendidos com um livre caminho médio bastante longo, o portador pode ser defletido de uma distância infinitesimal quando o campo magnético é aplicado. Para cargas saltando entre estados localizados, não é claro que a força originada pelo campo magnético possa produzir um deslocamento e que isso possa produzir uma tensão transversa contínua e linear com o campo.

A expressão clássica para a constante Hall, apresentada no capítulo 2, é dada por

$$R_H = -\frac{1}{ne} \quad (5.5.1)$$

onde n é o número de portadores de carga por unidade de volume. A expressão (5.5.1) parece ser válida para um gás degenerado mesmo no regime onde $l \sim a$ [66]. Entretanto, essa expressão não é válida para o caso isolante.

No regime onde a condução ocorre nos estados localizados o coeficiente Hall pode ser escrito como [67]:

$$R'_H = R_0 \exp(T_{0H}/T)^{1/4} \quad (5.5.2)$$

R_0 é o limite de R'_H para altas temperaturas, $T \gg T_{0H}$. Nas proximidades da região de transição metal-isolante (MIT) $T_{0H} \rightarrow 0$. Nesse caso, R_0 também pode ser considerado como um limite de baixas temperaturas para um T fixo. Nesse limite, a relação $1/neR_0$ é 20 % menor que o valor calculado pela expressão (5.5.1) [67]. Para a amostra de maior concentração de európio tratada nesse trabalho (onde a condução ocorre no regime isolante) um valor de n (p no caso de buracos) com um erro de 20 % implicaria num erro de somente 5 % na determinação de E_c (parâmetro que será fundamental para descrever as amostras no regime de salto). Dessa forma, podemos calcular as concentrações nas amostras isolantes através da medida da constante Hall utilizando (5.5.1) e fazendo as correções necessárias.

5.6 Transição de Mott

Diferentemente da transição de Anderson, a transição do tipo Mott é originada de correlações eletrônicas e não da desordem. Na presença de impurezas (íons), a condução será metálica se houver um número suficiente de portadores livres para

blindar o potencial Coulombiano entre os portadores e os íons de sinais opostos. Para isso, deve haver uma concentração mínima de portadores para a qual a transição ocorra. Essa condição é dada pela relação [68]:

$$n^{1/3}a_H \simeq 0.25 \quad (5.6.1)$$

onde $a_H = \hbar^2\varepsilon/m^*e^2$ é o raio de Bohr efetivo e ε é a constante dielétrica.

O potencial Coulombiano originado pelos íons positivos pode ser escrito na forma:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} \exp(-r/\lambda) \quad (5.6.2)$$

onde λ é o raio de blindagem e r é a distância do íon. Se o potencial $V(r)$ for forte o suficiente, o elétron pode ser “aprisionado” e formar um estado ligado com o íon. Assim, um baixo valor da concentração n pode causar o aumento do potencial resultando na transição metal-isolante.

No caso da série de amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ medidas nesse trabalho, a transição ocorre para uma concentração de európio em torno de $x = 0.05$. Para a amostra com $x = 0.07$, onde a transição já ocorreu, a concentração n de portadores (buracos, nesse caso) é de aproximadamente $2 \times 10^{21} \text{ m}^{-3}$. De acordo com a condição (5.6.1), a concentração crítica para a qual deveria ocorrer a transição metal-isolante nessa amostra seria da ordem de 10^{17} m^{-3} . Ou seja, a transição deveria ocorrer para concentrações abaixo desse valor. Como a amostra de $x = 0.07$ apresenta uma concentração de portadores 4 ordens de grandeza maior que essa previsão, podemos assegurar que a transição metal-isolante observada nessas amostras não é do tipo Mott. Não podemos afirmar, entretanto, que os mecanismos de Mott e Anderson não possam estar presentes em um mesmo sistema. Se um sistema apresentar desordem e ao mesmo tempo íons não blindados, é bem provável que o tipo de transição seja uma mistura dos dois mecanismos. No caso das amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ porém, devido ao alto valor da constante dielétrica ε , os potenciais Coulombianos provenientes dos íons devem estar blindados o suficiente para evitar as correlações eletrônicas.

No próximo capítulo, faremos a análise dos resultados das amostras que apresentam comportamento isolante. Utilizaremos os modelos existentes que descrevem a condução por saltos para obtermos E_c e E_F . A partir desses dados esperamos explicar algumas propriedades interessantes observadas nessas amostras.

Capítulo 6

Resultados do Transporte no Regime Isolante

Neste capítulo, apresentaremos os resultados para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com x variando de 0.07 até 0.1. Veremos os modelos existentes que descrevem a condutividade e a magnetorresistência nesse regime bem como seus limites de validade. Sabendo de antemão as propriedades das amostras analisadas, poderemos determinar qual o formalismo que se aplica em cada caso. Deveremos tratar cada amostra detalhadamente uma vez que cada uma apresenta características particulares.

6.1 Condutividade

Existe uma diferença básica na dependência da resistividade com a temperatura nos regimes metálico e isolante. Vimos que no regime metálico, na presença de desordem fraca, é necessária que seja feita uma correção na resistividade para levar em conta o efeito de localização (ver capítulo 3). No regime fortemente localizado (isolante) a resistividade tem uma dependência exponencial com a temperatura, o transporte não é mais difusivo e são necessários outros modelos que descrevam a condução nessa situação.

Quando o sistema se encontra no regime isolante, as funções de onda dos portadores de carga estão localizadas em torno de sítios da rede. Um buraco em um estado localizado pode trocar energia com um fônon e realizar um “salto” entre sítios diferentes. Esse tipo de condução por salto foi primeiramente sugerido nos trabalhos de T. Kasuya e S. Koida em 1958 [69] e A. Miller e E. Abrahams em 1960 [70].

O salto pode ocorrer entre os sítios mais próximos (NNH, que significa "*Nearest Neighbor Hopping*") ou entre os sítios mais distantes (VRH que quer dizer "*Variable Range Hopping*") dependendo da região de temperatura.

A condução por NNH está associada com a energia de Coulomb entre os sítios mais próximos e é representada pela expressão (5.2.2) apresentada no capítulo 5.

Em temperaturas suficientemente baixas, os buracos podem saltar distâncias maiores, além dos sítios mais próximos, desde que a diferença de energia entre os sítios seja suficientemente pequena, e a condução passa a ser do tipo VRH. De acordo com o trabalho de N. F. Mott de 1968 [61], para um sistema 3D com uma densidade de estados constante próxima do nível de Fermi, a condutividade varia com a temperatura de acordo com a expressão:

$$\sigma \propto \exp\left(-\frac{T_0}{T}\right)^\alpha \quad (6.1.1)$$

onde

$$T_0 \sim \frac{1}{k_B D(E) \xi^3}$$

e

$$\alpha = \frac{1}{4}$$

$D(E)$ é a densidade de estados e ξ é o comprimento de localização que aumenta com a proximidade da região de transição metal-isolante.

Segundo o trabalho de Efros-Shklovskii (ES) [71], devido à interação elétron-elétron de longo alcance entre os estados localizados, a densidade de estados perto do nível de Fermi (E_F) tende a zero dando origem a um *gap* de Coulomb. Nesse caso, o valor de α da equação (6.1.1) muda para 1/2. Um tratamento mais detalhado para os dois casos (Mott e ES) foi realizado por T. G. Castner [72] que escreveu de forma mais completa o parâmetro T_0 :

$$T_{Mott} \simeq \frac{18}{k_B D(E_F) \xi^3} \quad (6.1.2)$$

$$T_{ES} = \frac{2.8e^2}{k_B \varepsilon \xi} \quad (6.1.3)$$

ε é a constante dielétrica. Olhando para as equações (6.1.2) e (6.1.3), observamos que, para um mesmo comprimento de localização ξ , quanto maior for o valor de T_{Mott} menor será o número de estados localizados no nível de Fermi enquanto que

um alto valor de T_{ES} indica uma diminuição da constante dielétrica ε . A distância, ou comprimento de salto entre os sítios, para os casos Mott (R_{Mott}) e ES (R_{ES}), é dada pelas seguintes expressões:

$$R_{Mott} \simeq \frac{3\xi}{8} \left(\frac{T_{Mott}}{T} \right)^{1/4} \quad (6.1.4)$$

$$R_{ES} = \frac{\xi}{4} \left(\frac{T_{ES}}{T} \right)^{1/2} \quad (6.1.5)$$

Ainda em seu trabalho, Castner fez uma análise dos dois tipos de condução para verificar os critérios de validade de cada modelo. Para isso, ele fez uma comparação entre as energias necessárias para os saltos e a energia do *gap* de Coulomb originada da interação Coulombiana entre os sítios. As expressões utilizadas para o cálculo dessas energias são dadas por:

$$\Delta_{Mott} = \frac{1}{4} k_B T^{3/4} T_{Mott}^{1/4} \quad (6.1.6)$$

$$\Delta_{ES} = \frac{1}{2} k_B T^{1/2} T_{ES}^{1/2} \quad (6.1.7)$$

$$\Delta_{GC} = \frac{e^3 D(E)^{1/2}}{(\varepsilon)^{3/2}} \quad (6.1.8)$$

onde Δ_{Mott} , Δ_{ES} e Δ_{GC} , são as energias de salto para Mott, ES e *gap* de Coulomb, respectivamente. Para o auxílio do cálculo, é importante obter as relações entre as temperaturas características T_{Mott} , T_{ES} e a temperatura associada ao gap de Coulomb T_{GC} dada por:

$$T_{GC} = \frac{\Delta_{GC}}{k_B} \quad (6.1.9)$$

No regime crítico, próximo da transição metal-isolante, $\varepsilon \rightarrow 4\pi e^2 D(E) \xi^2$, assim podemos obter as relações entre as temperaturas:

$$\frac{T_{Mott}}{T_{ES}} \simeq 81 \quad (6.1.10)$$

$$\frac{T_{Mott}}{T_{GC}} \simeq 802 \quad (6.1.11)$$

$$\frac{T_{ES}}{T_{GC}} \simeq 9.9 \quad (6.1.12)$$

Segundo a análise de Castner, espera-se que a condução seja do tipo Mott se $\Delta_{Mott} > 2\Delta_{GC}$. Utilizando as equações (6.1.6) e (6.1.9) podemos escrever

$$\frac{1}{4}T^{3/4}T_{Mott}^{1/4} > 2T_{GC}$$

e de (6.1.11) obtemos

$$T > \frac{1}{465.7}T_{Mott} \quad (6.1.13)$$

a equação (6.1.13) é a condição para observarmos condução do tipo Mott no regime de VRH.

Para que seja observado o tipo ES devemos ter $\Delta_{ES} < \Delta_{GC}$. Utilizando o mesmo procedimento para escrever a condição para condução do tipo Mott, obtemos para o caso ES:

$$T < \frac{1}{2000}T_{ES} \quad (6.1.14)$$

Na secção 6.3, verificaremos essas condições utilizando os dados medidos das amostras.

6.2 Efeito do campo magnético

O efeito do campo magnético, quando aplicado em um sistema no regime isolante, pode exibir características semelhantes aos observados nos filmes no regime metálico. A magnetorresistência (MR) pode assumir valores tanto positivos quanto negativos porém, com origens completamente diferentes das que foram observadas nas amostras metálicas e cujos resultados foram apresentados no capítulo 4.

No regime metálico, para um sistema fracamente desordenado, a MR se origina das forças de Lorentz e da interferência quântica entre as funções de onda (ver capítulo 3). Nesse caso, o sistema (embora possua um certo grau de desordem) ainda se comporta como um metal ($k_F l > 1$).

No regime fortemente localizado ($k_F l \ll 1$), o movimento de cargas não é mais difusivo e, em baixas temperaturas, a condução pode ser realizada por meio de saltos, conforme foi descrito na secção 6.1. Para o nosso caso em particular, devemos estudar o efeito do campo magnético para amostras onde a condução é do tipo Mott no regime de VRH. Justificaremos a escolha do tipo Mott na próxima secção, quando faremos uma análise detalhada dos dados experimentais.

Para um sistema no regime de VRH do tipo Mott, Efros e Shklovskii [73] pro-

puseram um modelo bastante simples que prevê uma *magnetorresistência positiva* (MRP) na presença de campo magnético. Segundo o modelo apresentado por eles, o comprimento de localização ξ sofre uma redução quando o campo magnético é aplicado. Isso diminui a superposição das funções de onda reduzindo a probabilidade de salto entre os sítios e causando o aumento de resistividade. Nesse modelo, a expressão para a magnetorresistência positiva é dada por:

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho_0} = \exp(K_S B^2) - 1 \quad (6.2.1)$$

para $B < B_c$, e

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho_0} = \exp(f(B)) - 1 \quad (6.2.2)$$

para $B > B_c$. Com

$$K_S = \frac{t [e^2 a_H^4] [T_0/T]^{3/4}}{\hbar^2} \quad (6.2.3)$$

$$f(B) = [T_0(B)/T]^{1/3} \quad (6.2.4)$$

e

$$T_0(B) = \frac{2eB}{D(E)\hbar a_H k_B} \quad (6.2.5)$$

B_c é o campo crítico que dá o limite entre os regimes de campo forte e fraco e é escrito como

$$B_c = \frac{\hbar}{e} [D(E)k_B T]^{1/4} a_H^{-5/4} \quad (6.2.6)$$

a_H é o raio de Bohr efetivo em campo nulo e $t = 5/2016$.

Para o PbEuTe sabemos que o efeito Zeeman é muito relevante devido ao elevado valor do fator g (ver capítulo 2). Em 1979, Fukuyama e Yosida [74] propuseram um modelo que descreve a magnetorresistência no regime de VRH levando em conta a separação (“*splitting*”) dos níveis de energia. Segundo eles, a aplicação de um campo magnético, para um dado auto-estado, leva a um “*splitting*” dos estados com *spins* em direções opostas (efeito Zeeman) induzindo uma repopulação entre os estados localizados de Anderson. O estado com maior energia se aproxima da energia do extremo de mobilidade E_c e a função de onda correspondente se estende espacialmente. Por outro lado, o estado de menor energia fica ainda mais longe de E_c e a função de onda para esse estado decai mais rapidamente. Os estados com maior energia ofere-

cem uma maior superposição das funções de onda aumentando a condução elétrica. O resultado desse processo é o surgimento de uma *magnetorresistência negativa* (MRN) cuja expressão pode ser escrita como:

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho_0} = [\cosh(a_1 B)]^{-1} - 1 \quad (6.2.7)$$

com

$$a_1 = \frac{s\beta d}{2} g \left[\frac{\mu_B}{(E_c - E_F)} \right] \left(\frac{T_0}{T} \right)^s \quad (6.2.8)$$

$s = 1/4$, β é um parâmetro da ordem de 1, d é a dimensão do sistema, g é o fator de Landé e μ_B é o magneton de Bohr.

Na próxima seção, apresentaremos os resultados experimentais das amostras que apresentam comportamento isolante e utilizaremos os modelos teóricos que melhor descrevem as curvas de resistividade e magnetorresistência justificando a escolha de tais modelos.

6.3 Resultados experimentais

6.3.1 Medidas de resistência elétrica

Embora tenhamos as expressões bem conhecidas para a condutividade nos regimes de VRH e NNH, apresentadas na seção 6.1, suas formas gráficas são muito semelhantes, o que exige certo cuidado quando comparadas com as curvas dos dados experimentais. Como as grandezas medidas são as resistências das amostras, reescrevemos a equação (6.1.1) a fim de podermos comparar as curvas experimentais com as teóricas. Assim, a equação (6.1.1) fica:

$$R_{xx} = R_{xx}^0 \exp\left(\frac{T_0}{T}\right)^\alpha \quad (6.3.1)$$

Na figura 6.1 (a), (b) e (c), apresentamos as medidas das resistências elétricas, em função da temperatura, juntamente com os ajuste para os modelos de Mott, ES e NNH para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.07, 0.09$ e 0.1 . Vale lembrar que o produto $k_F l$ é menor que 1 para todas essas amostras, indicando que elas não estão mais no regime metálico (ver capítulo 2). Conforme dito anteriormente, as três curvas teóricas tem formas muito semelhantes e, além disso, todas parecem corresponder aos pontos medidos dependendo da região de temperatura.

Outro fato que podemos observar nessa figura é que a resistência para a amostra com $x = 0.1$ apresenta uma inesperada redução em sua inclinação a partir de 20 K. Discutiremos essa particularidade mais adiante.

Figura 6.1: Resistências elétricas medidas para baixas temperaturas. Ajuste para os modelos de Mott, ES e NNH para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . (a) $x = 0.07$, (b) $x = 0.09$ e (c) $x = 0.1$.

A tabela 6.1 mostra os valores utilizados para os ajustes das curvas teóricas apresentadas na figura 6.1.

Na seção 6.1 mostramos as condições apresentadas por T. G. Castner para as quais a condutividade do tipo Mott ou ES deveria ser observada. Vimos que a condução no regime de VRH seria do tipo ES para $T < T_0/2000$. De acordo com o valores de T_0 mostrados na tabela 6.1, para $\alpha = 1/2$, esse tipo de condução deve ocorrer para temperaturas muito abaixo das medidas nesse trabalho. A condição de Mott, $T > T_0/466$, para $\alpha = 1/4$, é satisfeita somente para as amostras com

Tabela 6.1: Valores utilizados para os ajustes das curvas teóricas nos regimes de VRH ($\alpha = 1/4$ para Mott ou $\alpha = 1/2$ para ES) e NNH ($\alpha = 1$) para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.07, 0.09$ e 0.1 . Os valores do comprimento de salto R_s são para $T = 4.2$ K. Todas as grandezas estão em unidades do S.I.

	0.07			0.09			0.10		
α	1/4	1/2	1	1/4	1/2	1	1/4	1/2	1
R_{xx}^0	1024	1189	1278	0.012	1.213	11.9	7.4×10^3	1.5×10^4	2.3×10^4
T_0	0.031	0.079	0.24	2.2×10^4	62.94	6.7	175.6	21.07	13.4
ξ	5.8×10^{-7}	7.4×10^{-6}		6.9×10^{-9}	9.4×10^{-9}		3.6×10^{-8}	2.8×10^{-8}	
R_s	6.4×10^{-8}	2.6×10^{-7}		2.1×10^{-8}	9.1×10^{-9}		3.4×10^{-8}	1.6×10^{-8}	

$x = 0.07$ e 0.1 na região de temperatura onde as medidas foram realizadas e onde a resistividade tem um comportamento isolante. Para a amostra com $x = 0.09$, a previsão teórica é que o comportamento isolante deveria ocorrer para $T > 47$ K discordando da observação experimental. Vale lembrar que a equação (6.1.2) é um resultado aproximado e ainda necessita de uma constante.

Conforme citado anteriormente, a condução por NNH tem origem coulombiana e, devido ao elevado valor da constante dielétrica do PbEuTe , não se espera que esse tipo de condução ocorra nas amostras. Assim, na próxima seção, consideraremos que a condução no regime de VRH será do tipo Mott.

Figura 6.2: As energias para os saltos entre sítios para o caso Mott (equação (6.1.6)) e ES (equação (6.1.7)) juntamente com a energia do gap de Coulomb (equação (6.1.8)) em função da temperatura para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . A energia térmica $k_B T$ também é apresentada. Em (a) para $x = 0.09$ e (b) para $x = 0.1$.

A figura 6.2 mostra as energias necessárias para os saltos entre sítios para o caso Mott (equação (6.1.6)) e ES (equação (6.1.7)) juntamente com a energia do *gap* de Coulomb (equação (6.1.8)) em função da temperatura. A energia térmica $k_B T$ também é apresentada. Na figura 6.2 (a), para a amostra com $x = 0.09$, vemos que a condição $\Delta_{Mott} > 2\Delta_{CG}$ é satisfeita para temperaturas maiores que 4 K e a condição $\Delta_{ES} < \Delta_{CG}$ para temperaturas inferiores a 2 K aproximadamente. Em (b), para a amostra de 0.10, $\Delta_{Mott} > 2\Delta_{CG}$ acontece para $T > 20$ K enquanto que $\Delta_{ES} < \Delta_{CG}$ é válida para $T < 4$ K aproximadamente.

Figura 6.3: A inclinação dR_{xx}/dT para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p . Em (a) $x = 0.09$ e (b) $x = 0.1$. As mudanças na inclinação tem sinais diferentes para as duas amostras e ocorrem nas temperaturas onde $\Delta_{Mott} \sim 2\Delta_{CG}$ (ver figura 6.2).

No início dessa seção chamamos a atenção para o fato de que a amostra com $x = 0.1$ apresenta uma rápida mudança na inclinação da curva de resistência em torno de 20 K. A amostra com $x = 0.09$ também apresenta uma alteração abrupta em sua inclinação para $T = 4$ K porém com sinal diferente (ver figura 6.1). A figura 6.3 mostra as derivadas das curvas de resistência com relação à temperatura, dR_{xx}/dT , para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p para $x = 0.09$ em (a) e $x = 0.1$ em (b). As temperaturas onde as taxas dR_{xx}/dT sofrem uma variação abrupta correspondem às temperaturas onde $\Delta_{Mott} \sim 2\Delta_{CG}$ (ver figura 6.2). A energia térmica $k_B T$, no entanto, é superior à energia de Mott para a amostra com $x = 0.1$ e inferior no caso da amostra com $x = 0.09$ na região onde $\Delta_{Mott} \sim 2\Delta_{CG}$. Isso pode ser uma possível causa para a diferença de sinal na inclinação das curvas de

resistência. Para o caso da amostra com $x = 0.09$, como a energia térmica é inferior às energias para o salto, a resistência aumenta abruptamente para $T < 4K$. Para $x = 0.1$, a energia térmica é maior que as energias necessárias para o salto, podendo assim promover a condução de uma maneira mais eficaz e causando uma diminuição de resistência elétrica.

6.3.2 Medidas de magnetorresistência

Na figura 6.4 temos as medidas de magnetorresistência para a amostra de $Pb_{1-x}Eu_xTe$ do tipo p para $x = 0.1$ nas temperaturas de 2.7, 6.1, 7.1, 8.4 e 9.9 K e para campos magnéticos de até 5 T. A oscilação em torno de 1 T para $T = 2.7$ K corresponde a uma ligeira variação de temperatura durante a medida. Observamos que essa amostra apresenta magnetorresistência tanto positiva quanto negativa à medida que aumentamos o valor do campo magnético B . Assim, deveremos fazer uso dos modelos de Efros e Shklovskii (para a magnetorresistência positiva) e Fukuyama e Yosida (para a magnetorresistência negativa), apresentados na seção 6.2, para o tratamento das curvas experimentais.

Figura 6.4: Magnetorresistência para a amostra de $Pb_{1-x}Eu_xTe$ do tipo p com $x = 0.1$. A oscilação em torno de 1 T para $T = 2.7$ K corresponde a uma ligeira variação de temperatura durante a medida.

Para o ajuste das curvas da figura 6.4, utilizamos as equações (6.2.1), (6.2.2)

e (6.2.7) apresentadas na seção 6.2. Primeiramente, precisamos calcular o campo crítico B_c para estabelecer o limite de validade das expressões (6.2.1) e (6.2.2). O valor calculado para B_c é de aproximadamente 0.2 T entre $T = 2.7$ K e $T = 9.9$ K. Assim, as curvas devem ser ajustadas dentro de duas regiões (de alto e baixo campo) cujo limite está nas proximidades de 0.2 T.

Podemos escrever a magnetorresistência total como uma combinação das equações (6.2.1), (6.2.2) e (6.2.7), de forma a obter duas expressões que contenham as duas contribuições positiva e negativa:

$$\frac{\Delta\rho(B)_T}{\rho_0} = \exp(K_S B^2) + [\cosh(a_1 B)]^{-1} - 2 \quad (6.3.2)$$

para $B < B_c$, e

$$\frac{\Delta\rho(B)_T}{\rho_0} = \exp(f(B)) + [\cosh(a_1 B)]^{-1} - 2 \quad (6.3.3)$$

para $B > B_c$.

A fig. 6.5 mostra os ajustes para as regiões de alto e baixo campo, para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.1$, utilizando as expressões (6.3.2) e (6.3.3).

Figura 6.5: Ajuste para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.1$. (a) Ajuste para baixo campo e (b) para alto campo utilizando (6.3.2) e (6.3.3).

Na figura 6.5 (a) temos os ajustes das curvas para valores de B até 0.7 T. Consideramos que esses valores de campo ainda estão dentro da região de validade da expressão (6.3.2). Na figura 6.5 (b) são mostrados os ajustes para alto campo utilizando a equação (6.3.3). Nessa mesma figura ainda é possível verificar os ajustes

para baixo campo mas com uma resolução menor. Fica claro que existe um valor máximo da MR, para cada curva, a partir do qual a magnetorresistência passa de positiva para negativa. Vemos também que as amplitudes das magnetorresistências dependem da temperatura. A seguir, daremos uma interpretação em termos das energias E_c , obtidas dos ajustes mostrados na figura 6.5, para explicar esses comportamentos.

De acordo com o modelo proposto por Efros e Shklovskii, a magnetorresistência positiva (MRP) origina-se da diminuição do comprimento de localização quando o campo magnético é aplicado. Um comprimento de localização cada vez menor significa menos superposição das funções de onda. Isso causa um aumento da “dificuldade” de condução por saltos entre sítios e aumenta a resistência elétrica. Verificamos também a relação entre o raio ciclotrônico e o comprimento de localização (l_B/ξ). Esperamos que quando a relação l_B/ξ for da ordem de 1, a localização possa ser reforçada por um efeito de “confinamento”. O raio ciclotrônico pode ser calculado utilizando a equação (3.1.15) e o comprimento de localização através da equação (6.1.2). Utilizando os dados da tabela 6.1, para $x = 0.1$, encontramos o valor de campo magnético $B = 0.5$ para o qual $l_B \sim \xi$. Conforme esperado, esse valor de campo se encontra dentro da região onde observamos magnetoresistência positiva. Para esse cálculo, consideramos um valor fixo de ξ , entretanto, sabemos que a aplicação do campo reduz esse comprimento de forma que o valor de B deve ser ainda menor que 0.5.

Precisamos verificar qual é a influência da temperatura sobre o sistema nessas condições. Na figura 6.4, ficou claro que a amplitude da MRP diminui com o aumento da temperatura. Isso se deve ao fato de que, quando a temperatura aumenta, a energia térmica dos buracos se aproxima da diferença ($E_c - E_F$). Quando $k_B T$ é da ordem de ($E_c - E_F$), a probabilidade de que os buracos sejam promovidos para estados estendidos aumenta, diminuindo assim a resistência da amostra e a amplitude da MRP. Para verificarmos essa afirmação, analisamos as energias na figura 6.6. Na figura 6.6 (a) temos a energia do limite de mobilidade E_c obtida dos ajustes apresentados na figura 6.5 e a energia de Fermi E_F calculada a partir dos valores de concentração de buracos. Conforme esperado, a energia de Fermi se encontra abaixo do limite de mobilidade, em uma região de estados localizados, para todas as temperaturas mostradas. Tanto E_c quanto E_F não sofrem grandes variações na região de temperatura onde foram realizadas as medidas. Na figura 6.6 (b), vemos os valores de $k_B T$ comparados com a diferença ($E_c - E_F$). O valor de $k_B T$ tende ao valor de ($E_c - E_F$) conforme a temperatura aumenta, concordando com as afirmações feitas

até aqui.

Figura 6.6: Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.1$. (a) Energia do limite de mobilidade E_c obtida dos ajustes e a energia de Fermi E_F calculada a partir dos valores de concentração de buracos. (b) Valores de $k_B T$ comparados com a diferença $(E_c - E_F)$.

Ainda na figura 6.4, vemos que a magnetorresistência em todas as temperaturas medidas sofre uma mudança na sua inclinação e passa a diminuir a partir de um dado valor de B . Nesse caso, devemos fazer uso do modelo proposto por Fukuyama e Yosida, que leva em conta o efeito Zeemann, para explicar esse comportamento. Segundo o modelo, a aplicação do campo magnético aumenta a probabilidade de deslocalização dos buracos conforme a energia de Zeeman ($\sim g\mu_B B$) tende ao valor da diferença $(E_c - E_F)$. Nessa situação, os portadores recebem uma energia do campo que é suficiente para promovê-los para estados deslocalizados. Na figura 6.6 (a) podemos observar que a diferença de energia $(E_c - E_F)$ parece variar muito pouco com a temperatura. De fato, por meio de um ajuste para $T > 2.7$ K, obtemos uma expressão que varia muito lentamente com a temperatura:

$$(E_c - E_F) = \Delta E(T) = 7.9 \times 10^{-4} + 5.3 \times 10^{-6} T \quad (6.3.4)$$

O valor de E_c , obtido do ajuste da curva de magnetorresistência para $T = 2.7$ K, não parece estar de acordo com o comportamento observado para as demais temperaturas. Isso pode ter sido causado por alguma limitação do modelo ou mesmo pela oscilação da temperatura durante essa medida. De acordo com a expressão

(6.3.4), encontramos $\Delta E(6.1K) = 0.82$ meV e $\Delta E(9.9K) = 0.84$ meV. Assim, a deslocalização dos portadores deve ocorrer para valores de campo magnético onde a energia Zeeman se encontra na região entre 0.82 meV e 0.84 meV. A figura 6.7 mostra os valores $\Delta E(6.1K) = 0.82$ meV e $\Delta E(9.9K) = 0.84$ meV juntamente com a energia Zeeman em função do campo. De acordo com essa figura, a deslocalização deve ocorrer para valores de B entre 2.5 e 3 T. A partir desse valor, a magnetorresistência deveria passar a diminuir com o aumento do campo independentemente do valor da temperatura. Essa previsão concorda com o comportamento observado na figura 6.4.

Figura 6.7: Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.1$. Energia de Zeeman e as diferenças $(E_c - E_F)$ para as temperaturas medidas. Os pontos de interseção indicam o ponto onde a magnetorresistência deveria mudar de inclinação.

Assim, os modelos de Efros-Shklovskii e Fukuyama-Yosida parecem descrever muito bem o comportamento da magnetorresistência na amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.1$. Passaremos então para a análise das demais amostras utilizando o tratamento realizado até aqui.

A figura 6.8 apresenta as medidas de MR para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.09$. As medidas foram compreendidas entre as temperaturas de 1.8 K e 10.1 K e para campos de até 2 T. Através dessa figura fica bem claro que, dentro da região de temperatura onde as medidas foram realizadas, essa amostra só apresenta MRN. A ausência de MRP, entretanto, não significa que os mecanismos que causam esse efeito não estejam presentes. Como sempre, deve haver uma competição entre os efeitos de

forma que um deles se torne mais evidente quando aplicamos o campo magnético. Nesse caso, o efeito predominante parece ser a deslocalização dos portadores que gera a MRN.

Figura 6.8: Magnetorresistência para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.09$. Essa amostra só apresentou valores negativos de magnetorresistência dentro da região de temperatura onde as medidas foram realizadas.

Figura 6.9: Ajustes para as curvas medidas da amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.09$ e apresentadas na figura 6.8. Espera-se que as curvas teóricas sejam válidas nas proximidades de 0.1 T. Para as temperaturas maiores que 4.9 K a dependência da magnetorresistência com o campo é muito pequena.

Figura 6.10: Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.09$. (a) As energias E_c e E_F em função da temperatura e (b) Valores da diferença de energia ($E_c - E_F$) comparados com a energia térmica $k_B T$, em função da temperatura.

A figura 6.9 mostra os ajustes das medidas apresentadas na figura 6.8 utilizando a equação (6.3.2) para as temperaturas de 1.8, 2.2, 3.1, 3.6, 4.0 e 4.9 K. Para as

demais temperaturas, a magnetorresistência é praticamente independente do campo magnético. O campo crítico B_c é da ordem de 0.1 T nessa região de temperatura, ou seja, os ajustes devem ser válidos nas proximidades desse valor de campo. De fato, vemos na figura 6.9 que para $B > 0.5$ T as curvas teóricas divergem dos pontos experimentais.

Na figura 6.10 (a) temos as energias E_c e E_F em função da temperatura. As duas energias estão muito próximas e possuem praticamente o mesmo valor. Diferentemente da amostra com $x = 0.1$, é necessário um valor muito baixo de campo, da ordem de $\sim 10^{-2}$ T, para que a energia Zeeman se torne igual a $(E_c - E_F)(\sim 10^{-3}$ meV). Assim, para campos da ordem de $\sim 10^{-2}$ T já devemos ter MRN causada pela deslocalização dos portadores. Isso explica porque essa amostra apresentou somente valores negativos de MR conforme constatado na figura 6.8. Além disso, como $(E_c - E_F)$ se torna cada vez menor com a queda de temperatura, devemos observar uma maior amplitude da magnetorresistência negativa conforme a temperatura diminua o que de fato ocorre.

A figura 6.10 (b) mostra os valores da diferença de energia $(E_c - E_F)$ comparados com a energia térmica $k_B T$, em função da temperatura. Vemos nessa figura que a energia térmica é superior à diferença $(E_c - E_F)$ para toda a região de temperatura. Assim, não seria mesmo possível observar qualquer magnetorresistência positiva para essa amostra. Embora a energia térmica seja tão elevada, ainda devem existir portadores em estados localizados para $T < 4.9$ K. Do contrário não seria possível observar variações da resistência com o campo. A pequena dependência da magnetorresistência com o campo magnético, para temperaturas maiores que 4.9 K, pode indicar que, acima dessa temperatura, a quantidade de portadores em estados localizados não é suficiente para que vejamos o efeito do campo dentro dessa escala. Essa constatação concorda com o comportamento da resistência dessa amostra visto na figura 6.1 (b) e com a taxa dR_{xx}/dT na figura 6.3 (a), onde fica claro o aumento da resistência para $T < 4.9$ K.

A figura 6.11 mostra as curvas medidas para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.07$. Podemos ver nessa figura que as magnetorresistências apresentam valores positivos e negativos mas, diferentemente da amostra com $x = 0.10$, a transição de MRP para MRN ocorre de maneira abrupta para $T < 5.7$ K. Não podemos deixar de lembrar que essa amostra se encontra perto da região da transição metal-isolante e os modelos utilizados até agora podem não levar em conta todas as propriedades necessárias para explicar o comportamento das curvas. Podemos supor que existem determinadas “regiões” de estados localizados que podem ser descritas

de forma aproximada pelos modelos aplicados até aqui.

Figura 6.11: Curvas de magnetorresistência medidas para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.07$. Uma mudança drástica de comportamento ocorre para $T < 5.7$ K.

A figura 6.12 mostra os ajustes para as curvas experimentais mostradas na figura 6.11. Em (a) vemos as curvas para todas as temperaturas e em (b) somente para as temperaturas mais altas e que apresentam magnetorresistência positiva e negativa.

Seguindo a mesma análise feita para as duas amostras anteriores, a figura 6.13 apresenta as energias E_c e E_F em (a) e a diferença $(E_c - E_F)$ em (b) comparada com a energia térmica $k_B T$. Em (a) fica bem claro que $E_c \sim E_F$ para $T < 5.7$ K. Essa alteração implica que a probabilidade de deslocalização aumenta rapidamente abaixo dessa temperatura, configurando uma situação semelhante a da amostra de 0.09 (para $T < 4.9$ K), onde só foi possível observar MRN. Em (b) vemos que $k_B T > (E_c - E_F)$ abaixo dessa mesma temperatura reforçando ainda mais a deslocalização. A rápida redução de E_c numa região próxima da energia térmica, parece ser responsável pela mudança abrupta no comportamento das curvas de magnetorresistência para $T < 5.7$ K. Uma dependência linear de E_c com a temperatura foi sugerida em alguns trabalhos [75, 76] e pode estar relacionada com a variação da densidade de estados com a temperatura.

Uma outra propriedade importante, que pode estar presente nessa amostra, é o surgimento de um nível $4f$ de Eu, localizado dentro da banda de valência do

Figura 6.12: Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.07$. Ajustes para as curvas experimentais mostradas na figura 6.11. Em (a) temos as curvas para todas as temperaturas e em (b) somente para as temperaturas mais altas.

$\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ [77]. Para valores de x abaixo de um valor crítico (x_c), o nível $4f$ fica localizado entre 1.2 e 1.5 eV abaixo do topo da banda de valência. Para $x = x_c$, o nível $4f$ se torna ressonante com o topo da banda de valência. Para $x > x_c$, o nível $4f$ se encontra dentro do *gap* do material. A evolução do nível $4f$ dentro da banda de valência pode ser descrito de acordo com o modelo proposto por M. Lida [77], baseado em medidas experimentais, conforme a figura 6.14. De acordo com esse modelo, temos $x_c = 0.07$.

Em resumo, o modelo de Mott para a resistência elétrica e os modelos de Efros-Shklovskii e Fukuyama-Yosida para a magnetorresistência parecem descrever muito bem as características observadas nas amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p para os valores de $x = 0.09$ e 0.1 . A determinação da energia do limite de mobilidade E_c mostrou-se um fator importante para entendermos a origem dos efeitos observados em cada filme. A descrição do comportamento de E_c com relação às energias térmica, de Fermi e de Zeeman mostrou ser capaz de dar uma visão geral sobre o que ocorre com o transporte das cargas quando submetidos a variações de temperatura e de campo magnético. Devemos acrescentar, ainda, que a diferença $(E_c - E_F)$ é duas ordens de grandeza maior para a amostra de 0.1 do que para a de 0.09 , indicando que o aumento da quantidade de Eu reforça a localização, como já era esperado.

Figura 6.13: Amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com $x = 0.07$. (a) Energias E_c e E_F e em (b) a diferença $(E_c - E_F)$ comparada com a energia térmica $k_B T$.

Figura 6.14: Modelo proposto por M. Lida para o nível 4f dentro da banda de valência no filme de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ (ref. [77]).

Capítulo 7

Região de Transição Metal-Isolante

Neste capítulo, veremos que a transição metal-isolante observada nas ligas do tipo p de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ pode ser influenciada pelas características de crescimento. Veremos que amostras que se encontram na região crítica ($k_F l \sim 1$) podem tender para um comportamento metálico ou isolante dependendo de como alguns fatores são alterados, entre eles a concentração de portadores e temperatura.

Para verificar até onde esses fatores são determinantes, foi estudada uma série de amostras com o valor fixo de Eu ($x = 0.05$), onde foi variada a concentração de buracos por meio da inclusão de Telúrio, afim de observar como essa variação influencia as propriedades de transporte dessas amostras.

Na seção 7.1, apresentaremos as características de crescimento das amostras e as curvas de resistividade. Na seção 7.2, utilizaremos um modelo teórico para calcular a resistividade na região crítica e analisar as medidas experimentais. Por último, na seção 7.3, utilizaremos o modelo de Fukuyama e Yosida para a magnetorresistência no regime de VRH e o modelo de Fukuyama para a localização fraca, e tentaremos interpretar as curvas de magnetorresistência discutindo os resultados obtidos dos modelos teóricos.

7.1 Características da série

A tabela 7.1 mostra os parâmetros de crescimento para a série de amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com uma concentração fixa de $x = 0.05$. A primeira coluna identifica cada amostra. Nas demais colunas podemos ver a temperatura e os fluxos de cada célula (PbTe, Te₂ e Eu) sob os quais foi crescida cada amostra. Vemos que as temperaturas das células de PbTe e de Eu foram mantidas praticamente constantes enquanto que a temperatura da célula de Te₂ variou de 263 °C até 343 °C. Assim,

devemos observar um aumento da concentração de buracos para as amostras com maior quantidade de telúrio (maior temperatura de evaporação). Esse excesso de telúrio garante que as amostras serão do tipo p .

Tabela 7.1: Parâmetros de crescimento para a série de amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com uma concentração fixa $x = 0.05$.

	PbTe		Te ₂		Eu	
Identificação	T(°C)	$\phi(10^{-7}\text{Torr})$	T(°C)	$\phi(10^{-8}\text{Torr})$	T(°C)	$\phi(10^{-8}\text{Torr})$
829	622	4.9	263	8.1	322	2.5
830	623	5.0	259	7.7	322	2.5
831	623	4.9	268	9.4	322	2.5
832	624	5.0	273	16.0	322	2.5
833	624	5.1	278	18.0	322	2.5
834	624	5.1	283	18.0	322	2.5
835	624	4.9	293	43.0	322	2.5
836	624	4.9	298	50.0	322	2.5
837	624	4.8	308	81.0	322	2.4
838	624	4.8	318	130.0	322	2.5
839	625	4.9	328	190.0	322	2.4
840	625	4.9	333	190.0	322	2.3
841	625	4.8	338	240.0	323	2.3
842	625	4.8	343	210.0	323	2.3

Na figura 7.1 temos as concentrações de buracos para algumas amostras que foram escolhidas do início e do final da série (as concentrações foram obtidas por meio da técnica do efeito Hall). De fato, na figura 7.1, vemos que as amostras com menor concentração de buracos são as amostras que foram crescidas com as menores temperaturas da célula de telúrio (ver tabela 7.1). Para $T = 300$ K, as concentrações das amostras 841 e 839 são da ordem de 10^{24} m^{-3} enquanto que para as amostras de 831, 835, 836 temos o valor de 10^{23} m^{-3} . Diminuindo-se a temperatura, a concentração de buracos das amostras 841 e 839 permanece praticamente constante, enquanto que para as amostras 831, 835, 836 a concentração de portadores diminui até a ordem de 10^{20} m^{-3} .

A figura 7.2 mostra os fluxos da célula de Te mantidos durante o crescimento de cada amostra juntamente com a concentração de portadores medida em $T = 300$ K. Nessa figura é possível observar que a concentração de portadores permanece praticamente constante até a amostra 835 embora o fluxo de Te aumente ao longo de toda a série. A partir da amostra 838 verificamos um aumento abrupto da concentração de portadores que coincide com um aumento considerável do fluxo de Te. Aparentemente a concentração de portadores não aumenta juntamente com o

fluxo de Te, mas somente a partir de um certo valor deste que, no caso da amostra 838, começa em torno de 1.3×10^{-6} torr.

Na figura 7.3 temos as medidas das resistividades normalizadas em 300 K para as amostras dessa série. Algumas amostras não puderam ser medidas para temperaturas menores que 100 K uma vez que suas resistividades crescem rapidamente a partir dessa temperatura ultrapassando a escala dos medidores. Para as demais amostras foi possível medir até temperaturas mais baixas, principalmente as que apresentam maior concentração de portadores. Todas as amostras medidas parecem “tender” para um comportamento isolante indicando que o regime de condução encontra-se na região crítica ($k_F l \sim 1$).

Figura 7.1: Concentração de buracos para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$. As amostras com menor concentração foram crescidas com um menor fluxo de Te (ver tabela 7.1).

A seguir, utilizaremos um modelo teórico para a análise das curvas de resistividade apresentadas na figura 7.3.

Figura 7.2: Fluxos da célula de Te mantidos durante o crescimento de cada amostra juntamente com a concentração de portadores medida para $T = 300 \text{ K}$ para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x=0.05$.

Figura 7.3: Resistividades para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$, em função da temperatura, normalizadas em 300 K .

7.2 Resistividade no regime crítico

Atualmente, não existe um modelo definitivo para tratar as propriedades de transporte no regime crítico. Para termos uma indicação de como podemos tratar as amostras descritas na seção 7.1, faremos uso da seguinte expressão para a resistividade [78, 79, 80]:

$$\rho(T) = AT^{-\beta} \quad (7.2.1)$$

com

$$A = \left(\frac{\hbar^2}{e^2 p_F} \right) \left(\frac{E_F}{k_B} \right)^\beta$$

onde p_F é o momento de Fermi.

A equação (7.2.1) é válida no regime crítico ($k_F l \sim 1$) e o valores teóricos esperados de β devem estar compreendidos no intervalo $0.33 < \beta < 1$.

Por meio da expressão (7.2.1) podemos fazer o ajuste das resistividades das amostras apresentadas na figura 7.3. O resultado dos ajustes é apresentado na figura 7.4. Escolhemos somente 4 amostras para que os resultados apresentados na figura 7.4 ficassem mais claros.

Figura 7.4: Ajuste das resistividades para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$. Apresentamos somente 4 amostras, escolhidas do início e do fim da série, para uma melhor visualização.

Dos ajustes apresentados na figura 7.4, os valores obtidos para os parâmetros A e β são mostrados na tabela 7.2. Nessa tabela, podemos ver que o menor valor para o expoente β é de 1.3 e o maior é de 2.3. Esses resultados não estão de acordo com a previsão teórica ($0.33 < \beta < 1$). Valores menores que 0.33 do expoente β foram observados para amostras de Ge do tipo n [81]. Naquele caso, os baixos valores de β foram atribuídos ao fato de que, embora as amostras se encontrassem numa região de transição, elas estavam do lado metálico dessa região. Valores de $\beta > 1$, que é o nosso caso, também já foram observados para filmes de Carbono dopados com Boro [80]. De modo análogo ao caso do Ge, podemos supor que os valores de β são maiores que 1 devido ao fato das amostras se encontrarem no lado isolante da região de transição. Além disso, é importante citar que o valor do produto $k_F l$ é menor que 1 para todas as amostras da série tratada nesse capítulo.

Tabela 7.2: Valores obtidos para os parâmetros A e β para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$.

Amostra	A	β
835	11.7	1.3
336	377.5	1.8
839	1189	2.3
841	1413	2.3

Devemos notar que as amostras que possuem maior concentração de buracos (839 e 841) são as que apresentaram maior valor de β , conforme podemos ver na tabela 7.2. Esse fato pode indicar que a inclusão de Telúrio contribui para a desordem que leva à transição metal-isolante.

7.3 Magnetoresistência

De acordo com os resultados obtidos na seção anterior, as amostras do tipo p de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$, para $x = 0.05$, com maior concentração de buracos tendem a apresentar comportamento isolante. Na figura 7.5 mostramos as curvas de resistividade medidas para as amostras 834 ($p \sim 10^{22} \text{ m}^{-3}$) e 841 ($p \sim 10^{24} \text{ m}^{-3}$). Nessa figura fica claro que a amostra 841, que apresenta maior concentração de buracos, exibe um comportamento isolante dentro da região de temperatura medida (10 K até 300 K). De fato, a resistividade da amostra 841, parece ser do tipo VRH conforme podemos verificar na figura 7.6. O ajuste apresentado na figura 7.6, utilizando a expressão para a resistividade do tipo Mott (equação 6.3.1 para $\alpha = 1/4$), fornece

$T_0 = 1.25 \times 10^4$ K (este valor é necessário para o cálculo de ξ , que será discutido mais adiante). A amostra 834 exibe um comportamento que não pode ser classificado como isolante (mesmo com $k_F l < 1$) ou metálico, uma vez que seu comportamento se altera dependendo da região de temperatura, conforme podemos ver na figura 7.5.

Figura 7.5: Curvas de resistividade medidas para as amostras 834 ($p \sim 10^{22} \text{ m}^{-3}$) e 841 ($p \sim 10^{24} \text{ m}^{-3}$) de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$.

Figura 7.6: Resistividade da amostra 841 de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$.

As curvas de magnetorresistência para as amostras 834 e 841 são mostradas na figura 7.7. Na figura 7.7 (a), as curvas apresentam um perfil característico do efeito de localização fraca para $B < 1$ T. Entretanto, sabemos que essa amostra não é metálica ($k_F l \sim 10^{-3}$) de forma que os modelos existentes para a localização fraca não podem ser aplicados na análise dessa amostra. Nenhum valor de magnetorresistência positiva devido ao efeito clássico foi observado, provavelmente devido à baixa mobilidade dessa amostra ($\mu \sim 10^{-5} \text{ m}^2/\text{Vs}$).

Considerando que a amostra 841 está no lado isolante da região de transição, utilizamos o modelo de Fukuyama e Yosida para o ajuste das curvas de magnetorresistência apresentadas na figura 7.7. O resultado dos ajustes é apresentado na figura 7.8 para os campos de -1.5 até 1.5 T. Nessa figura, vemos que o modelo parece ajustar bem as curvas medidas.

Figura 7.7: Curvas de magnetorresistência para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$. (a) Amostra 841. (b) Amostra 834.

Figura 7.8: Ajustes das curvas de magnetorresistência para a amostra 841, de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$, utilizando o modelo de Fukuyama e Yosida. As linhas tracejadas correspondem as curvas teóricas.

Seguindo o mesmo procedimento adotado no capítulo anterior, obtemos a energia do limite de mobilidade E_c e comparamos com a energia de Fermi e a energia térmica. Na figura 7.9 (a), temos a energia do limite de mobilidade comparada com a

energia de Fermi. Conforme esperado, o nível de Fermi se encontra abaixo do limite de mobilidade numa região de estados localizados. Também fica claro que a energia E_c diminui com a queda de temperatura. Uma dependência linear de E_c com a temperatura foi sugerida em alguns trabalhos [75, 76] e pode estar relacionada com a variação da densidade de estados quando a temperatura diminui. Na figura 7.9 (b), temos a diferença $E_c - E_F$ comparada com a energia térmica $k_B T$. Vemos que a energia térmica está muito próxima dos valores de $E_c - E_F$ para $T < 15$ K, aumentando a tendência de que os buracos sejam promovidos para estados estendidos. Por outro lado, a energia Zeeman necessária para causar magnetorresistência negativa requer um valor de campo B muito elevado que varia entre 1 e 4 T, da mais baixa para a mais alta temperatura medida, o que não corresponde ao comportamento das curvas de magnetorresistência observadas na figura 7.7 (a). Dessa forma, a magnetorresistência negativa observada nessa amostra pode se originar principalmente da excitação térmica de buracos para estados deslocalizados.

Uma vez que, na amostra 841, para todas as temperaturas medidas temos $k_B T < (E_c - E_F)$ e a energia Zeeman necessária para deslocalizar os buracos é muito elevada, era esperado o surgimento de uma magnetoresistência positiva (MRP) devido à redução do comprimento de localização quando um campo B é aplicado. No capítulo 6 vimos que a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.1$ apresentou magnetoresistência positiva sob condições semelhantes a da amostra 841 estudada aqui. Verificamos também que o raio ciclotrônico era da ordem do comprimento de localização ($l_B \sim \xi$) para $B = 0.5$ T na amostra com $x = 0.1$, o que correspondia à região onde a MRP era observada. Para amostra 841, o valor de campo necessário para se obter $l_B \sim \xi$ seria de 30 T aproximadamente, o que pode ser uma possível causa para a ausência de MRP nas curvas da amostra 841.

As curvas de magnetoresistência da amostra 834, apresentadas na figura 7.7 (b) não podem ser analisadas por meio do modelo de Fukuyama e Yosida para o regime de VRH, uma vez que essa amostra, diferentemente da amostra 841, não apresentou um comportamento isolante. Embora o produto $k_F l$ seja menor que 1 ($k_F l \sim 0.15$) para a amostra 834, utilizaremos o modelo de Fukuyama para a correção da magnetorresistência devido ao efeito de localização fraca e faremos uma comparação com os resultados obtidos para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , para $x = 0.05$, estudada no capítulo 4.

Os ajustes das curvas de magnetoresistência apresentadas na figura 7.7 (b) são exibidas na figura 7.10. Para essa amostra, foi possível obter um bom ajuste na região de temperaturas menores que 7.4 K. O tempo de espalhamento inelástico

Figura 7.9: Amostra 841 de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.05$. (a) Energia do limite de mobilidade E_c comparada com a energia de Fermi E_F . (b) Diferença $E_c - E_F$ comparada com a energia térmica $k_B T$.

(τ_i) obtido dos ajustes apresentados na figura 7.10 são apresentados na figura 7.11. Considerando uma dependência de $\tau_i \propto T^{-\alpha}$ encontramos $\alpha = 0.82$. O valor de α encontrado para a amostra com $x = 0.05$ ($k_F l \sim 0.30$) discutida no capítulo 4 foi de 0.86. Esse resultado semelhante pode indicar que as condições físicas das amostras foram reproduzidas mesmo sendo amostras de séries diferentes. Vale lembrar que o modelo de Fukuyama para a localização fraca foi aplicado em uma região onde, em princípio, não teria mais validade e pode não levar em conta todos os parâmetros necessários para uma descrição completa do sistema.

Figura 7.10: Ajustes das curvas de magnetorresistência para a amostra 834 de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p apresentadas na figura 7.7 (b).

Figura 7.11: Tempo de espalhamento inelástico para a amostra 834 obtido dos ajustes apresentados na figura 7.10.

Nesse capítulo vimos que as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , com concentração fixa de $x = 0.05$, podem exibir curvas de resistividade com perfis diferentes dependendo da sua “posição” dentro da região crítica conforme sugerido na referência [80]. As amostras com maior concentração de buracos apresentaram um comportamento isolante enquanto que as amostras com concentrações mais baixas apresentaram comportamento que oscila entre metálico e isolante. Para a amostra 841, com maior concentração de buracos, analisamos as curvas de magnetorresistência utilizando o modelo de Fukuyama e Yosida para o regime de VRH e os resultados parecem descrever de forma adequada o comportamento dessa amostra. Para a amostra 834, com menor concentração de buracos, utilizamos o modelo de Fukuyama para a localização fraca a fim de analisarmos as curvas de magnetorresistência. Os resultados são semelhantes aos da amostra com $x = 0.05$ tratada no capítulo 4. Em resumo, embora todas as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p tratadas nesse capítulo tenham uma concentração fixa de $x = 0.05$, vemos que é possível que essas amostras apresentem um comportamento isolante quando a concentração de buracos é alterada pela introdução de átomos de Te. Acreditamos que ao aumentarmos a quantidade de átomos de Te na liga, acabamos por aumentar a desordem do sistema. Isso seria a causa das amostras estarem no lado isolante da região crítica.

Capítulo 8

Conclusões

Neste trabalho, foi realizado o estudo da transição metal-isolante e da localização de Anderson na liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p para x variando de 0 até 0.1. As propriedades de transporte nessa liga (mobilidade, concentração de portadores e resistividade elétrica) foram obtidas utilizando o método de caracterização elétrica por efeito Hall entre as temperaturas de 300 K e 10 K. Nessa região de temperatura, foi possível observar uma transição metal-isolante para $x > 0.05$. Verificamos que a transição é do tipo Anderson e ocorre devido à desordem presente na liga. Para baixas temperaturas ($T < 10$ K), verificamos a presença de magnetorresistência positiva e negativa para as amostras com $x > 0.01$ aplicando campos magnéticos de até 11 T. Os valores positivos e negativos da magnetoresistência têm origens diferentes dependendo do regime de condução (metálico ou isolante). Por esse motivo, o estudo dos resultados experimentais apresentados nesse trabalho foi dividido em duas partes: uma parte que trata as amostras metálicas (região de desordem fraca) e outra parte para as amostras isolantes (região de desordem forte).

Considerando as amostras que apresentaram comportamento metálico, i.e., a resistividade diminui com a queda de temperatura, apresentamos no capítulo 4 os resultados para as amostras do tipo p de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ com x variando de 0 até 0.05. Devemos lembrar que a amostra com $x = 0.05$ apresentou um comportamento que oscila entre os dois regimes (metálico e isolante) indicando que essa amostra se encontra na região de transição. As amostras com $x > 0.01$ apresentaram magnetorresistência negativa causada pelo efeito de *localização fraca*. Um fato interessante observado nessas amostras foi que, ao contrário de amostras do tipo n , as amostras do tipo p apresentaram magnetoresistência positiva (MRP), indicando a presença do efeito de *antilocalização*. As medidas de magnetorresistência foram realizadas para temperaturas fixas (a menor foi em torno de 1.3 K) e o ajuste de cada curva

foi feito utilizando o modelo teórico de Fukuyama e Hoshino que prevê uma magnetoresistência negativa devido à localização fraca e uma magnetoresistência positiva devido ao efeito de *spin*-órbita. Esse modelo também inclui o efeito Zeeman que é bastante significativo nessas amostras devido ao elevado valor do fator g de Landé. Nossos resultados mostraram que o efeito Zeeman reforça o efeito de antilocalização (ver capítulo 3). O fato de o fator g de Landé ser maior em amostras do tipo p pode ser um dos motivos pelo qual o efeito de antilocalização pode ser observado nesses filmes.

Os ajustes realizados nas amostras do tipo p de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$, utilizando o modelo Fukuyama e Hoshino, forneceram dois tempos de espalhamento: um tempo de espalhamento inelástico τ_i e um tempo de espalhamento *spin*-órbita τ_{so} . Assim, foi possível verificar o comportamento de τ_i e τ_{so} em função da temperatura (ver figura 4.9) e da concentração de Eu (x) (ver figura 4.12). O aumento de τ_i com a queda de temperatura, para todas as amostras, pode ser uma indicação de que o espalhamento por fônons seja o mecanismo dominante de espalhamento inelástico, em baixas temperaturas, para o caso do $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p .

Ajustando os tempos de espalhamento inelásticos de acordo com a lei $\tau_i = AT^{-\alpha}$, obtivemos os valores para α de 2.2, 0.76, 2.15 e 0.86 para as amostras com $x = 0.02$, 0.03, 0.04 e 0.05 respectivamente.

A previsão teórica para o tempo de espalhamento inelástico, em função da temperatura, é de $\tau_i \propto T^{-3}$ devido aos fônons quando $k_F l \gg 1$, i.e., variação clássica em metais puros, e $\tau_i \propto T^{-2}$ na presença de desordem para $k_F l > 1$ também devido aos fônons. Para um sistema fortemente desordenado, $k_F l < 1$, ainda não há um acordo geral sobre qual deveria ser o comportamento de τ_i em função da temperatura. Os trabalhos de Thouless [52], Rammer e Schmid [53] e Reizer e Sergeyev [54], preveem um comportamento de T^{-4} enquanto que os trabalhos de Takayama [55], Kagan e Zhernov [56] e Belitz e Das Sarma [57] preveem um comportamento de T^{-2} . Essas previsões teóricas, entretanto, não levam em conta a anisotropia das bandas. O tempo de espalhamento por fônons, calculado no capítulo 2, leva em consideração a anisotropia das bandas mas não leva em conta a desordem causada pela introdução de Európio e exibe uma dependência do tipo $\tau_i \propto T^{-1}$. Na amostra com $x = 0.02$ ($k_F l \sim 10$), o valor de α parece estar próximo da previsão teórica para $k_F l > 1$. Para a amostra com $x = 0.05$ ($k_F l \sim 1$), o valor de α é muito próximo de 1 de forma que não é possível afirmar com certeza o que está ocorrendo conforme aumentamos concentração de Eu. Os valores encontrados para o expoente α podem ser o resultado do efeito da desordem e da anisotropia dos vales que variam com a

introdução do Eu.

No capítulo 5, vimos que em um sistema desordenado, existem estados localizados separados dos estados deslocalizados pela energia E_c (limite de mobilidade). O posicionamento do nível de Fermi dentro da região de estados localizados ($E_F < E_c$) leva à transição metal-isolante que observamos nessas amostras e para a qual damos o nome de transição de Anderson [1].

As amostras que exibiram comportamento isolante foram tratadas no capítulo 6, onde apresentamos os resultados para as amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p com $x = 0.07, 0.09$ e 0.1 . Foram observados valores positivos e negativos da magnetorresistência na amostra com $x = 0.07$ e 0.1 e somente valores negativos na amostra com $x = 0.09$. Para a análise das curvas experimentais, fizemos uso dos modelos de Efros-Shklovskii (para a magnetorresistência positiva) e Fukuyama-Yosida (para a magnetorresistência negativa) considerando que a condutividade é do tipo Mott no regime de VRH (*Variable Range Hopping*). As três amostras, embora tenham apresentado curvas de magnetorresistência com perfis bastante diferentes, parecem ser bem descritas pelos modelos teóricos. Utilizando esses modelos, foi possível descrever o comportamento das curvas em termos das energias do limite de mobilidade E_c , da energia de Fermi E_F e da energia térmica $k_B T$. A magnetorresistência positiva observada nas amostras de $x = 0.07$ e 0.1 , de acordo com o modelo de Efros-Shklovskii, origina-se da diminuição do comprimento de localização ξ quando o campo magnético é aplicado. Um comprimento de localização cada vez menor significa menos superposição das funções de onda. Isso causa um aumento da “dificuldade” de condução por saltos entre sítios e aumenta a resistência elétrica. A magnetoresistência negativa, observada em todas as amostras, parece ser causada pelo efeito Zeemann segundo o modelo proposto por Fukuyama-Yosida. De acordo com esse modelo, a aplicação do campo magnético aumenta a probabilidade de deslocalização dos buracos conforme a energia de Zeeman ($\sim g\mu_B B$) tende ao valor da diferença ($E_c - E_F$). Nessa situação, os portadores recebem uma energia do campo que é suficiente para promovê-los para estados deslocalizados diminuindo a resistência. Também verificamos qual é o efeito da temperatura na amplitude da MRP. Através das curvas de magnetorresistência para as amostras de $x = 0.07$ e 0.1 , ficou claro que a amplitude da MRP diminui com o aumento da temperatura. Isso se deve ao fato de que, quando a temperatura aumenta, a energia térmica dos buracos se aproxima da diferença ($E_c - E_F$). Quando $k_B T$ é da ordem de ($E_c - E_F$), a probabilidade de que os buracos sejam promovidos para estados estendidos aumenta, diminuindo assim a resistência da amostra e a amplitude da MRP. Por apresentar

valores de $k_B T$ maiores que a diferença ($E_c - E_F$), a amostra de $x = 0.09$ só apresentou valores negativos de magnetoresistência. A variação de E_c com a temperatura, observada na amostra com $x = 0.07$, pode estar relacionada com a variação da densidade de estados com a temperatura. Entretanto, não existem dados suficientes para afirmar com certeza se este é o caso dessa amostra. Vimos ainda que a diferença ($E_c - E_F$) é duas ordens de grandeza maior para a amostra com $x = 0.1$ do que para a com $x = 0.09$, indicando que o aumento da quantidade de Eu reforça a localização, como já era esperado.

No capítulo 7, vimos que a concentração de Eu onde ocorre a transição metal-isolante, observada nas ligas de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$, pode ser influenciada pelas características de crescimento. Vimos que amostras que se encontram na região de transição metal-isolante ($k_F l \sim 1$) podem tender para um comportamento metálico ou isolante dependendo de como alguns fatores são alterados, como concentração de portadores e temperatura. Estudamos uma série de amostras com o valor fixo de Eu ($x = 0.05$), onde variamos a concentração de buracos aumentando o fluxo da célula de Te_2 . Vimos que essas amostras exibiram curvas de resistividade com perfis diferentes dependendo da sua “posição” dentro da região crítica. Ao aumentarmos a concentração de buracos, aumentando a quantidade de Te, acabamos por produzir desordem adicional no sistema mesmo com a concentração fixa de Eu (fonte primária de desordem). Assim, as amostras do tipo p de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$, para $x = 0.05$, com maior concentração de buracos tendem a apresentar comportamento isolante. Isso seria a causa das amostras estarem no lado isolante da região crítica. Para as medidas de magnetoresistência em baixa temperatura utilizamos duas amostras com baixa e alta concentração de buracos: 834 ($p \sim 10^{22} \text{ m}^{-3}$, $k_F l \sim 0.15$) e 841 ($p \sim 10^{24} \text{ m}^{-3}$, $k_F l \sim 10^{-3}$).

A resistividade da amostra 841, para $T < 10\text{K}$, parece ser do tipo VRH. Levando em conta o fato da amostra se encontrar no lado isolante da região crítica e da resistividade tender a um comportamento do tipo Mott para $T < 10\text{K}$, a utilização do modelo de Fukuyama e Yosida pareceu ser adequada para a análise das curvas experimentais de magnetoresistência para amostra 841. Seguindo o mesmo procedimento adotado no capítulo 6, obtivemos a energia do limite de mobilidade E_c e comparamos com a energia de Fermi e a energia térmica. Conforme esperado, o nível de Fermi se encontrava abaixo do limite de mobilidade numa região de estados localizados. A diminuição de E_c com a temperatura é similar ao comportamento observado para a amostra de $x = 0.07$ tratada no capítulo 6.

As curvas de magnetoresistência da amostra 834 não puderam ser analisadas

por meio do modelo de Fukuyama e Yosida para o regime de VRH, uma vez que essa amostra, diferentemente da amostra 841, não apresentou um comportamento isolante. Embora o produto $k_F l$ seja menor que 1 ($k_F l \sim 0.15$) para a amostra 834, utilizamos o modelo de Fukuyama para a correção da magnetorresistência devido ao efeito de localização fraca, e foi feita uma comparação com os resultados obtidos para a amostra de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , para $x = 0.05$, estudada no capítulo 4. Considerando uma dependência de $\tau_i \propto T^{-\alpha}$, encontramos $\alpha = 0.82$. O valor de α encontrado para a amostra com $x = 0.05$ ($k_F l \sim 0.30$) discutida no capítulo 4 foi de 0.86. Esse resultado semelhante pode indicar que as condições físicas das amostras foram reproduzidas mesmo sendo amostras de séries diferentes.

Em resumo, foi feito o estudo da transição metal-isolante e a localização de Anderson da série de amostras de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p , com x variando de 0 até 0.1. O estudo foi dividido em duas partes: uma que tratou as amostras no regime metálico ($k_F l > 1$) e outra que tratou as amostras no regime isolante ($k_F l < 1$). A partir dessa divisão, e utilizando os modelos teóricos disponíveis na literatura, foi possível fazer uma análise das medidas experimentais de magneto-transporte. Como resultado, identificamos os principais mecanismos de interação (espalhamento inelástico, efeito Zeeman, acoplamento *spin*-órbita, etc.) que interferem no transporte e nos efeitos de localização e antilocalização. A compreensão de como esses mecanismos afetam o transporte na liga de $\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ do tipo p torna possível o estudo de outros sistemas baseados nesse tipo de material. Como próximo passo, seria interessante estudar os efeitos de localização e antilocalização em poços quânticos de $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{Te}$ onde um gás de elétrons/buracos é submetido a um campo magnético. Atualmente, esses poços quânticos têm sido estudados com o intuito de contribuir para futuras aplicações em *spintrônica* (eletrônica baseada nos estados de *spin* dos portadores de carga) onde uma boa descrição de como os diversos mecanismos de interação afetam o *spin* eletrônico é fundamental.

Referências Bibliográficas

- [1] P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
- [2] Z. Feit, M. McDonald, R. J. Woods, V. Archambault, P. Mak, Appl. Phys. Lett. **68**, 738 (1996).
- [3] G. Grabeck, Materials Science-Poland, **24**, 591 (2006).
- [4] G. Springholz, G. Bauer, G. Ihninger, J. Cryst. Growth **127**, 302 (1993).
- [5] G. Grabeck, J. Wróbel, T. Dietl, E. Papis, E. Kamisca, A. Piotrowska, G. Springholz, G. Bauer, Physica E **13**, 649 (2002).
- [6] S. A. Wolf, D. D. Awschalon, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M.L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, D. M. Treger, Science **294**, 1488 (2001).
- [7] I. N. Krivorotov, N. C. Emley, J. C. Sankey, S. I. Kiselev, D. C. Ralph, R. A. Buhrman, Science **307**, 228 (2005).
- [8] A. Prinz, G. Bauer, Y. Ueta, G. Springholz, G. Bauer, Phys. Rev. B **59**, 12983 (1999).
- [9] M. L. Peres, V. A. Chitta, G. M. Gusev, N. F. Oliveira Jr., P. H. O. Rappl, A. Y. Ueta, E. Abramof, Inter. J. Mod. Phys. B **21**, 1519 (2007).
- [10] J. A. H. Coaquira, V. A. Chitta, N. F. Oliveira Jr., P. H. Rappl, A. Y. Ueta, E. Abramof, G. Bauer, J. of Superconductivity **16**, 115 (2003).
- [11] N. J. Parada, G. W. Pratt Jr., Phys. Rev. Lett. **22**, 180 (1969).
- [12] J. K. Furdyna, J. Appl. Phys. **64**, R29 (1988).
- [13] H. Krenn, W. Herbst, H. Pascher, Y. Ueta, G. Springholz, G. Bauer, Phy. Rev. B **60**, 8117 (1999).

-
- [14] A.Y. Ueta, Ph. D. Thesis, Johannes Kepler Universität, Lins, Austria (1997).
- [15] G. Martinez, M. Schulter, M. L. Cohen, Phys. Rev. B **11**, 651 (1975).
- [16] F. Herman, R. L. Kortum, L. B. Outenburger, J. P. Van Dyke, J. Phys. (Paris) **29**, (suppl. C4) 62 (1968).
- [17] R. L. Bernick, L. Kleinman, Solid State Commun. **8**, 569 (1970).
- [18] J. Singleton, E. Kress-Rogers, A. V. Lewis, R. J. Nicholas, E. J. Fantner, G. Bauer, A. Otero, J. Phys. C: Solid State Phys. **19**, 77 (1986).
- [19] J. R. Burke, G. P. Carver,, Phys. Rev. B **17**, 2719 (1978).
- [20] J. Oswald, B. B. Goldberg, G. Bauer, P. J. Stiles, Phys. Rev. B **40**, 3032 (1989).
- [21] R. C. Patnaik, G. S. Tripathi, Solid State Commun. **112**, 669 (1999).
- [22] D. A. Anderson, N. Apsley, Semicond. Sci. Technol. **1**, 187 (1987).
- [23] David C. Look, “*Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*”, p. 91, John Wiley & Sons, England (1989).
- [24] Jasprit Singh, “*Physics of Semiconductors and Their Heterostructures*”, p. 434 (1993).
- [25] David C. Look, “*Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*”, p. 57, John Wiley & Sons, England (1989).
- [26] D. K. Schroder, “*Semiconductor Material and Device Characterization*”, John Wiley & Sons, Inc., p. 528 (New York , 1998).
- [27] T. R. Jervis, E. F. Johnson, Solid-State Electronics **13**, 181 (1970).
- [28] L. J. van der Pauw, Philips Res. Rep. **13**, 1 (1958).
- [29] A. M. P. dos Anjos, E. Abramof, P. H. O. Rappl, A. Y. Ueta, H. Closs, Brazilian J. of Phys. **34**, 653, (2004).
- [30] David C. Look, “*Electrical Characterization of GaAs Materials and Devices*”, p. 75, John Wiley & Sons, England (1989).
- [31] Yu. I. Ravich, B. A. Efimova, V. I. Tamarchenko, Phys. Stat. Sol. (b) **43**, 11 (1971).

-
- [32] C. Weisbuch, B. Vinter, “*Quantum Semiconductor Structures*”, Academic Press, San Diego (1991).
- [33] G. Bastard, “*Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*” Editions de Physique, Les Ulis, (1988).
- [34] V. S. Amaral, J. Phys.: Condens. Matter **2**, 8201 (1990).
- [35] G. Bauer, H. Pascher, W. Zawadzki, Semicond. Sci. Technol., **7**, 703 (1992).
- [36] F. Geist, D. Mejia-Garcia, H. Pascher, G. Bauer, G. Springholz, Mater. Sci. Forum Vols. **182-184**, 723 (1995).
- [37] Jasprit Singh, “*Physics of Semiconductors and Their Heterostructures*”, p.379, ed. McGraw-Hill (1993).
- [38] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [39] Gerd Bergmann, Phys. Reports **107**, 1 (1984).
- [40] A. Kawabata, Solid State Commun. **34**, 432 (1980).
- [41] A. Kawabata, J. Phys. Soc. Jpn. **49**, 628 (1980).
- [42] B. L. Altshuler, A. G. Aronov, “*Electron-electron interaction in disordered conductors*”, eds. A. L. Efros e M. Polak (Elsevier Science, Amsterdam, 1985) p.1.
- [43] E. D. Black, California Institute of Technology, Physics **77** (2006).
- [44] S. Hikami, A. I. Larkin, Y. Nagaoka, Prog. Theor. Phys. **63**, 707 (1980).
- [45] S. Maekawa, H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **50**, 2516 (1981).
- [46] H. Fukuyama, K. Hoshino, J. Phys. Soc. Jpn. **50**, 2131 (1981).
- [47] G. Bergmann, Phys. Rev. B **35**, 4205 (1987).
- [48] Y. Isawa, K. Hoshino, H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 3262 (1982).
- [49] P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985).
- [50] P. Santhanam, S. Wind, D. E. Prober, Phys. Rev. B **35**, 3188 (1987).
- [51] W. E. Laurence, A. B. Meador, Phys. Rev. B **18**, 1154 (1978).

- [52] D. J. Thouless, Phys. Rep. **67**, 5 (1980); Solid State Commun. **34**, 683 (1980).
- [53] J. Rammer, A. Schmid, Phys. Rev. B **34**, 1352 (1986).
- [54] M. Y. Reizer, A. V. Sergeyev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **90**, 1056 (1986) [Sov. Phys. JETP **63**, 616 (1986)].
- [55] H. Takayama, Z. Phys. **263**, 329 (1973).
- [56] Yu. Kagan, A. P. Zhernov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **50**, 1107 (1966) [Sov. Phys. JETP **23**, 737 (1966)].
- [57] D. Belitz, S. Das Sarma, Phys. Rev. B **36**, 7701 (1987).
- [58] N. F. Mott, E. A. Davis, “*Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*”, p.3, 2nd ed. (1979).
- [59] P. W. Anderson, Comments Solid State Phys. **2**, 193 (1970).
- [60] A. F. Ioffe, A. R. Regel, Prog. Semicond. **4**, 237 (1960).
- [61] N. F. Mott, J. Non-Crys. Solids **1**, 1 (1968).
- [62] Jasprit Singh, “*Physics of Semiconductors and Their Heterostructures*”, p.749 (1993).
- [63] N. F. Mott, E. A. Davis, “*Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*”, p.42, 2nd ed. (1979).
- [64] N. F. Mott, E. A. Davis, “*Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*”, p.15, 2nd ed. (1979).
- [65] N. F. Mott, H. S. W. Massey, “*The Theory of Atomic Collisions*”, p.86, 3rd ed. Claredon Press, Oxford (1965).
- [66] N. F. Mott, E. A. Davis, “*Electronic Processes in Non-Crystalline Materials*”, p.56, 2nd ed. (1979).
- [67] D. W. Koon, T. G. Castner, Solid State Commun. **64**, 11 (1987).
- [68] N. F. Mott, Phil. Mag. **6**, 287 (1961).
- [69] T. Kasuya, S. Koida, J. Phys. Soc. Jpn **13**, 1287(1958).

-
- [70] A. Miller, E. Abrahams, Phys. Rev. **120**, 745 (1960).
- [71] A. L. Efros, B. I. Shklovskii, J. Phys. C **8**, L49 (1975).
- [72] T. G. Castner, in *“Hopping Transport in Solids”*, editado por M. Pollak e B. Shklovskii, p. 1 (North-Holland, Amsterdam, 1991).
- [73] B. I. Shklovskii and A. L. Efros, in *“Electronic properties of Doped Semiconductors”*, p. 210 editado por M. Cardona (Springer-Verlag, Berlin, 1984).
- [74] H. Fukuyama, K. Yosida, J. Phys. Soc. Jpn. **46**, 102 (1979).
- [75] V. Premachandran, K. L. Narasimhan, D. R. Bapat, Phys. Rev. B **12**, 7073 (1984).
- [76] W. E. Spear, Haifa Al-Ani, P. G. LeComber, Philos. Mag. B **43**, 781 (1981).
- [77] M. Lida, T. Shimizu, H. Enomoto, H. Ozaki, Jpn. J. Appl. Phys. **32**, 4449 (1993).
- [78] W. L. Macmillan, Phys. Rev. B **24**, 2739 (1981).
- [79] A. I. Larkin, D. E. Khmel’nitskii, Sov. Phys. JETP **56**, 647 (1982).
- [80] P. N. Vishwakarma, S. V. Subramanyam, J. Appl. Phys. **100**, 113702 (2006).
- [81] H. F. Hess, K. de Conde, T. F. Rosenbaum, G. A. Thomas, Phys. Rev. B **25**, 5578 (1982).