



Interações Magnéticas e Elétricas em GaMnAs

Gabriel Teófilo Dias Pedrosa

Orientador: Professor Doutor Marco Aurélio Boselli

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de Uberlândia (InFis-UFU) do estado de Minas Gerais.

Universidade Federal de Uberlândia

Instituto de Física

Interações Magnéticas e Elétricas em GaMnAs

Discente: Gabriel Teófilo Dias Pedrosa

Orientador: Prof. Dr. Marco Aurélio Boselli

Dissertação orientada pelo Prof. Dr. Marco Aurélio Boselli e apresentada à Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos necessários para a conclusão do curso de pós-graduação em Física, em nível de mestrado.

Uberlândia-MG, 27 de Julho de 2016

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

P372i
2016 Pedrosa, Gabriel Teófilo Dias, 1990-
Interações magnéticas e elétricas em GaMnAs / Gabriel Teófilo Dias
Pedrosa. - 2016.
68 f. : il.

Orientador: Marco Aurélio Boselli.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Programa de Pós-Graduação em Física.
Inclui bibliografia.

1. Física - Teses. 2. Green, Funções de - Teses. 3. Espalhamento
(Física) - Teses. I. Boselli, Marco Aurélio. II. Universidade Federal de
Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Título.

CDU: 53

Agradecimentos

Os meus sinceros agradecimentos ao Instituto de Física e à Universidade Federal de Uberlândia, pela oportunidade de aprender a linguagem da natureza. Ao órgão de fomento CAPES, pelo financiamento de meus estudos. Ao querido Professor Orientador Doutor Marco Aurélio Boselli, por sua atenção e dedicação em educar-me na arte das funções de Green. Aos meus amantíssimos pais Lélío e Lígia, por seus dispêndios energéticos em guiar-me moralmente e a doação de ter-me longe do lar acolhedor. Por fim, porém não menos importante, minha querida e amada Fran, por sua paciência em aguardar o meu egoístico momento de crescimento profissional.

Resumo

No presente trabalho, trataremos em conjunto as propriedades magnéticas e elétricas de um semicondutor em particular, o *GaMnAs*. O tratamento será feito analiticamente na primeira parte do trabalho, seguindo com o método computacional para simulação dos sistemas físicos, através da implementação das expressões obtidas na primeira parte. Todo o estudo da contribuição magnética será feito utilizando-se uma interação do tipo Kondo, através de uma abordagem por funções de Green. A parte elétrica, que consiste nas interações Coulombianas entre portadores e íons de Mn, será tratada dentro da aproximação do espalhamento múltiplo. A implementação do método aqui proposto será calcular as funções de Green convergidas como solução de espalhamento múltiplo e usá-las como ponto de partida para o cálculo das interações magnéticas efetivas entre íons de Mn mediada por portadores de carga. Foram variados os parâmetros de concentração de íons de Mn e concentração de portadores. A combinação destes dois parâmetros podem levar a amostras isolantes, metálicas com portadores no nível de Fermi com baixa ou alta mobilidade. Como resultado obtivemos uma correlação entre a mobilidade dos portadores e a intensidade da interação magnética. Quanto maior a mobilidade, maior a intensidade da interação.

Palavras Chave: DMS, função de Green, espalhamento múltiplo, interação magnética, interação tipo Kondo.

Abstract

In this paper, we will address together the magnetic and electrical properties of a particular semiconductor, the *GaMnAs*. The treatment will be done analytically in the first part of the work, according to the computational method for simulation of physical systems through the implementation of the expressions obtained in the first part. All study of magnetic contribution will be made using an interaction Kondo type, using an approach by Green functions. The electrical part, which consists of the Coulomb interactions between carriers and Mn ions, will be treated within the approach of multiple scattering. The implementation of the proposed method will calculate the Green functions converged as multiple scattering solution and use them as a starting point for the calculation of the effective magnetic interactions between Mn ions mediated charge carriers. The concentration parameters were varied for Mn ions and carriers as well. The combination of these two parameters can lead to insulating, metal samples with carriers in Fermi level to low or high mobility. As a result a correlation between the obtained carrier mobility and the strength of magnetic interaction. The greater mobility, the greater the intensity of the interaction.

Key-words: DMS, Green's function, multiple scattering, magnetic interaction, Kondo like interaction.

Sumário

Resumo	iv
Abstract	v
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	4
2.1 O Material GaMnAs	4
2.2 Interações Magnéticas	8
2.3 Espalhamento Coulombiano	10
3 Teoria	11
3.1 Abordagem Geral do Problema	12
3.2 Termo Coulombiano	15
3.3 Termo Magnético	20
3.3.1 Interação RKKY Modificada	26
3.4 Associação dos Termos Magnético e Coulombiano	31
4 Resultados e Discussões	34
5 Conclusão	57

Capítulo 1

Introdução

Os materiais semicondutores são sólidos com características eletrônicas distintas dos demais, apresentando altas resistências se comparadas com metais, porém baixas se comparadas com os isolantes. Mas sua utilidade não está somente em sua característica eletrônica. Esses materiais mudam as suas propriedades quando dopados, e isso pode ser utilizado para inserir impurezas magnéticas ao semicondutor, tornando-o magnético. Essa categoria de semicondutores é denominada semicondutores magnéticos diluídos (DMS na sigla em inglês). O estudo do DMS está concentrado nos semicondutores II-IV, como o CdTe e o ZnSe, que dopados com Mn, apresentam características magnéticas à baixas temperaturas de transição (T_C) [1].

Outro DMS de interesse a ser tratado é o *GaMnAs*, que é uma liga de Arseneto de Gálio (GaAs) dopado com Manganês (Mn). O manganês isolado, possui um momento magnético de $\frac{5\hbar}{2}$ que está relacionado com a distribuição dos elétrons nos orbitais[2]. O dopante, é um semi metal da família *3d*, cuja configuração de seus orbitais, captura um elétron e um buraco será doado à rede como portador, realizando assim a troca de informações tanto de natureza magnética quanto elétrica. A magnetização espontânea é um efeito coletivo deste material, que ocorre na ausência de um campo externo aplicado. O portador interagir-se-á com esta impureza da rede e transportará a informação trocada com ele. E como consequência, o material pode mostrar uma fase ferromagnética a campo magnético externo zero.

Ohno e colaboradores mostram a dependência da concentração de dopantes com a temperatura de transição (T_c) e a concentração de portadores. Mostraram ainda que a temperatura de transição é aproximadamente proporcional com a concentração de impurezas magnéticas inseridas na rede até uma concentração da ordem de 0,053, depois disso começando a decrescer. Da mesma forma, a concentração de portadores também atinge seu máximo para a mesma concentração de dopantes, depois começa a decrescer [3]. Em 1997 H. Ohno et al. realizou o estudo das propriedades magnéticas e de transporte em ligas de *GaMnAs* com diferentes concentrações de Mn. Os autores mostraram que para uma concentração otimizada, a temperatura crítica chegou a 70 K, superando outros registros da época. H. Ohno et al. observaram uma transição isolante-metal para uma concentração de manganês em torno de 5% e outra transição metal-isolante para 7%. As maiores temperaturas de transição ocorrem na fase metálica. Estes trabalhos pioneiros deram origem a uma série de estudos, tanto teóricos quanto experimentais. Em particular do ponto de vista teórico, as transições de fase magnéticas e a sua relação com as transições de fase isolante-metal-isolante ainda não foram tratadas em conjunto.

As propriedades magnéticas dessa liga diluída na presença de portadores livres, são usualmente descritas pela interação de Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY), que é uma teoria de perturbação em segunda ordem que descreve a interação entre momentos magnéticos localizados mediados por portadores. Através da modificação do hamiltoniano que descreve essa interação, vamos além do RKKY convencional através do uso de funções de Green e a teoria espectral.

As funções de Green em física da matéria condensada, podem ser entendidas como um propagador de um portador que interage com o meio. Isso nos possibilita tratar o problema de muitos corpos. Através dessa abordagem e a partir do modelo de rede Kondo, que consiste em uma rede de momentos magnéticos localizados, calculamos as interações de troca entre esses momentos, mediadas pelos portadores. Não levamos em consideração a interação portador-portador e entre os átomos intersticiais da rede (fônons). As interações coulombianas entre portadores e íons de Mn, serão tratadas usando a aproximação do espalhamento múltiplo.

A motivação do presente trabalho se deve ao fato de, mesmo vinte anos após os trabalhos experimentais pioneiros de Ohno e seu grupo, não haver um tratamento teórico que consiga descrever as transições metal-isolante em conjunto com as propriedades magnéticas.

Na sequência, faremos uma revisão bibliográfica, apresentando trabalhos prévios que nos permitiram desenvolver este estudo. Em seguida, descreveremos na seção Teoria, o desenvolvimento analítico para a interação entre portadores e íons e para portadores e momentos magnéticos localizados. Uma breve descrição da implementação computacional vem em seguida. Após, são apresentados os resultados e discussões, e por fim a conclusão do trabalho.

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 O Material GaMnAs

Um dos pioneiros em heteroestruturas baseadas em *GaMnAs*, testando experimentalmente seu caráter ferromagnético, através do crescimento desse material pelo método MBE (Epitaxia de feixe molecular), foi Ohno et. al [4]. Tais estruturas exibem propriedades magnéticas e propriedades de transporte únicas, que surgem do acoplamento entre portadores de carga e os momentos magnéticos localizados.

O Arsenieto de Gálio, ou ainda, Arseneto de Gálio (*GaAs*) per si, é um semicondutor de vasto interesse para a indústria eletrônica. Embora *GaAs* seja de maior custo comparado ao Silício (*Si*), este apresenta maior eficiência na transmissão da informação, pois possui maior saturação eletrônica que, em se tratando de propriedade magnética de materiais, é a condição na qual um aumento na força magnética não mais produz um aumento no fluxo magnético, e também maior mobilidade eletrônica. Tais propriedades implicam em maior velocidade de corrente e conseqüentemente mais rápida resposta do dispositivo. Essas estruturas são relativamente menos sensíveis a aquecimentos, reduzindo o consumo de energia.

O *Mn*, por sua vez, é um metal de transição, cuja configuração eletrônica dada por $[Ar]4s^23d^5$ nos mostra que, pela Regra de Hund, ele possui um momento magnético localizado $5\hbar/2$. Podemos observar também que o *Mn* no *GaAs*, é um aceitador, portanto ele é um doador de buracos. Assim, a liga de *GaMnAs* pos-

sui momentos magnéticos localizados e portadores livres, possibilitando a interação desses momentos magnéticos através dos portadores.

O ferromagnetismo é uma propriedade de certos materiais apresentarem magnetização espontânea, ou seja, possuírem orientação de seus momentos magnéticos a uma dada temperatura. Com o aumento da temperatura, esses momentos magnéticos tendem a se desalinharem devido ao acréscimo de energia térmica, perdendo seu caráter ferromagnético e se tornando paramagnético. Esse fenômeno ocorre geralmente a nível local, portanto apenas alguns domínios do material apresentarão fenômeno ferromagnético em dada direção abaixo de certa temperatura denominada temperatura de Curie (T_C). O entendimento do comportamento ferromagnético nessas estruturas ainda não é completamente explicado. Sabemos que há correlação entre a presença dos buracos doados pelo Manganês e a magnetização do material [3, 5].

As heteroestruturas de *GaMnAs* são ideais para desenvolvimento da spintrônica em sistemas semicondutores. Essas heteroestruturas têm vasta aplicação e versatilidade, podendo ser utilizado no crescimento de nanofios baseados em GaMnAs, na intenção de desenvolver nanodispositivos unidimensionais atrelado a spintrônica, eletrônica de nanoestruturas e na fotônica [6]. Utiliza-se também o *GaMnAs* para aplicação do Efeito Zeeman Gigante através da magneto-ótica (MO). A técnica para o estudo da MO é o Dicroísmo circular magnético (MCD na sigla em inglês), que é a diferença de absorção da luz circularmente polarizada que incide no material [7]. Trabalhos também foram realizados com o intuito de controlar os níveis quânticos em semicondutores ferromagnéticos com poços quânticos baseados em heteroestruturas de Arseneto de Gálio dopado com Manganês e barreiras duplas [8]. Em uma mesma perspectiva, o material possibilita, através da fabricação de camadas de poços quânticos, uma melhor manipulação dos níveis quânticos, utilizando eletrodos de poço quântico.

São desenvolvidas tecnologias baseadas em espectroscopia de tunelamento ressonante com dependência de spin (momento magnético intrínseco), a partir desse DMS [9]. A espectroscopia por tunelamento ressonante é um método poderoso para

investigar a estrutura de banda, pois os níveis ressonantes contém informações relevantes ao estudo do material, como massa efetiva, configuração de estrutura bandas e energia de Férmi.

O GaMnAs ainda é considerado um DMS promissor atualmente, devido a sua alta temperatura de Curie. Segundo alguns trabalhos experimentais [10], alterando-se a concentração de Manganês podemos atingir temperatura de 81 a 185K, mas há trabalhos mostrando temperaturas da ordem de 245K[11], o que são temperaturas altas comparadas com os demais DMSs. A temperatura mais alta relatada neste material ocorreu para uma concentração de 12.5% de dopante, num filme espesso de 23nm. O DMS em questão, possui propriedades micro magnéticas e de transporte que superam a eficiência das demais ligas semicondutoras [12] e que em temperaturas dessa ordem, possibilitam melhor manipulação e controle, permitindo então, avanços ainda maiores no campo da spintrônica. Embora saibamos muito sobre esses materiais e suas vastas aplicações, as origens de altas temperaturas críticas e detalhes dos mecanismos de interação, são perguntas que ainda não foram completamente respondidas [13].

Os efeitos que a dopagem de Mn exerce sobre a liga de Arseneto de Gálio, também são controversos. Alguns trabalhos publicados, tanto teóricos quanto experimentais, afirmam que, para baixas concentrações de Manganês, a dependência dessa concentração com a temperatura de transição pode ser desconsiderada [14]. Porém, a dependência da temperatura de transição com a concentração ainda é relevante para o entendimento dessas heteroestruturas, se consideradas as concentrações de dopantes mais elevadas, a dependência com a temperatura se torna evidente.

Estudos recentes no crescimentos de filmes finos dessa heteroestrutura através de feixe de epitaxia molecular (MBE na sigla em inglês), explicam que o crescimento desses filmes através da técnica MBE depende da temperatura e do aprimoramento da solubilidade do Manganês. Isso implica que a melhor distribuição do dopante na estrutura, eleva consideravelmente T_C [15, 16].

A investigação da modulação da temperatura de Curie em uma dopagem δ de Mn para poços quânticos largos possibilitou o estudo da dependência de propriedades

magnéticas com a injeção de elétrons por campo elétrico. O método numérico auto-consistente levou em conta o potencial de Hartree e a interação de troca de spins $p - d$. Concluíram que, para poços de potencial largos ($> 20nm$), obtém-se maiores valores de T_C [17].

A natureza da banda de valência abaixo do nível de Fermi, em *GaMnAs* metálico, foi pouco explorada do ponto de vista ótico. Porém alguns trabalhos propõem que essas propriedades nesse semiconductor com alta dopagem, são consistentes com a desordem da banda de valência próximas ao nível de Fermi. A abordagem neste artigo, é referente às propriedades óticas, mas nosso interessante com relação a este trabalho, é o estudo desenvolvido a respeito do nível de Fermi para diferentes ordens de concentração de *Mn*, nos regimes metálico e isolante. Mostraram que para baixas concentrações de dopante, a característica da banda de impureza é consistente com o material isolante e que há favorecimento de desordem para o sistema metálico altamente dopado [18].

Em 2008, V. Novák et al. efetuaram um trabalho experimental de crescimento de filmes finos de *GaMnAs* utilizando a técnica de annealing, que constitui em dopagem de sucessivas camadas intercaladas com a diminuição da temperatura. O grupo otimizou o material, elevando sua temperatura de transição, obtiveram rendimento que superou os trabalhos anteriores atingindo a temperatura de $180K$. Essa técnica permitiu um melhor arranjo das zonas de alta dopagem de manganês, evitando regiões anti-ferromagnéticas [19]. Utilizando-se a mesma técnica para um sistema de gás de buracos bidimensional (2DHG), observou-se além de um efeito Hall anômalo uma alta T_C para a dopagem $\delta - Mn$ e para o método de recozimento atingindo temperaturas acima de $240K$. A técnica consiste de sucessivas dopagens, aumentando e diminuindo a temperatura entre $300^\circ C$ a $600^\circ C$, aplicando um campo elétrico para a inserção de impurezas [11].

Através do método de Monte Carlo (MC), estudou-se o termo de troca simulando sistemas $2D$ realistas [20]. Utilizando diferentes espessuras de camadas do semiconductor *GaMnAs* para poços quânticos, de modo a otimizar os parâmetros para controlar a temperatura de transição T_C através de um campo elétrico. O

processo computacional distribuí de forma aleatória, porém bem distribuída, devido ao método estocástico, o que é equivalente aos trabalhos experimentais utilizando δ -doping, citada acima, reproduzindo uma boa distribuição de dopantes evitando ilhas de impurezas. O método MC apresenta temperaturas de transição consideravelmente menores se comparadas com o método de Hartree- Fock, mostrando-se mais próximas às temperaturas obtidas experimentalmente [21].

Foi feito o estudo para explicar a formação magnética do par polaron-polaron e sua interação através de uma abordagem estatística [22]. O polaron é a interação entre o portador e o íon da rede. O par polaron-polaron, seria um par de portadores desta rede que interagem entre si. Mostraram que a interação entre esse par pode ser praticamente considerada independente da temperatura, e que sua interação ferromagnética pode dominar sobre a amostra alinhando o par de polarons.

Utilizando a relação da condutividade de Einstein

$$\sigma = N(E_F)De^2,$$

onde D é a constante de difusão, σ a condutividade e $N(E_F)$ a densidade de estado no nível de Fermi, mostrou-se [23] que a densidade de estados na energia de Fermi pode ser obtida por medidas da condutividade. O grupo desenvolveu experimentalmente diferentes amostras com variadas dimensões e concentrações, provando que quanto menor a largura da amostra em questão maior a condutividade, mantendo o filme a baixas temperaturas, justamente para estudar a interação entre portadores, que ocorre neste regime e que também foi estudado em [24].

2.2 Interações Magnéticas

Aprofundando um pouco mais na teoria de interações magnéticas, podemos utilizar diferentes técnicas para tratar estas interações, como por exemplo Monte Carlo, teoria de perturbação, grupo de renormalização e funções de Green. Aqui, discutimos apenas, a última técnica citada. As funções de Green para sistemas magnéticos se baseiam em três modelos de Hamiltonianos: os hamiltonianos de Hubbard, Ander-

son e Kondo. Neste trabalho, abordaremos o Hamiltoniano tipo Kondo, utilizando um tratamento chamado Modelo de Rede Kondo, KLM na sigla em inglês.

Nesta seção, discorreremos sobre a interação entre portador e impureza magnética localizada, mediante termo de troca. A interação descreve a troca de spins entre o caroço e seus elétrons de condução, os elétrons mais externos. Tal interação foi proposta por C. Kittel e M.A. Ruderman da Universidade da Carolina, nos Estados Unidos da América, sendo mais tarde aprimorada por T. Kasuya da Universidade de Nagoya, no Japão, e por K. Yosida, também da Universidade da Carolina. Utilizamos aqui a Interação RKKY, porém a modificamos para adequá-la ao formalismo das funções de Green, a partir de trabalhos anteriores publicados por W. Nolting et al. [25], chamando-a portanto de Interação RKKY Modificada.

Essa interação modificada não considera uma interação de troca direta entre os spins d localizados. Aqui será observado, o acoplamento indireto dos spins da camada d mediado pela troca com os spins $p-d$. A interação tipo Kondo que descreve a interação entre o momento magnético localizado e portador, é dado pela expressão abaixo

$$\mathcal{H}_{p-d} = -J \sum_i \hat{\sigma}_i \cdot \mathbf{S}_i \quad (2.1)$$

onde J é a constante de troca [26]. Nos nossos cálculos, seguimos a proposição de W. Nolting. Trata-se de aproximar o hamiltoniano que descreve a rede do tipo Kondo, chegando assim num hamiltoniano efetivo e a uma interação RKKY modificada. Esta RKKY modificada consiste num tratamento em expansões de segunda ordem das funções de Green para a descrição da interação magnética mediada por portadores.

O problema das interações magnéticas através de um hamiltoniano efetivo, será feito por uma aproximação para se encontrar o valor esperado dos operadores dos portadores (criação e aniquilação) e dos operadores de spin:

$$\langle \hat{S}^\sigma c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle \longrightarrow \hat{S}^\sigma \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} \rangle.$$

Este método foi proposto por Tyablykov [27], para a abordagem de função de Green

para muitos corpos.

2.3 Espalhamento Coulombiano

No que concerne as interações Coulombianas, ou seja, de caráter elétrico, trabalhamos com a chamada aproximação do Espalhamento Múltiplo (MS, da sigla em Inglês, Multiple Scattering). Quando os portadores livres caminham pelo material, que se constitui de uma rede qualquer, com íons distribuídos aleatoriamente em seus sítios, sofrem espalhamentos pelo dopante através de um potencial atrativo. Consideramos o espalhamento do portador com as impurezas, a temperatura igual a zero Kelvin. A esta temperatura, as impurezas podem ser consideradas estáticas. Assim, o espalhamento se dá pelas cargas e não pela distorção na rede, fônons. No hamiltoniano que descreve o espalhamento Coulombiano, o portador é descrito como uma posição na rede (\mathbf{r}) e a impureza localizada num sítio \mathbf{R}_i .

O espalhamento Coulombiano pode ser tratado de diversas formas, sendo a mais usual a aproximação de Born [28], aqui optamos pela aproximação do espalhamento múltiplo de Klauder, que nos permite calcular as interações em materiais semicondutores dopados, usando o potencial de coulomb real da impureza ($1/r$) que é o caso do Arseneto de Gálio dopado com Manganês. Ela é adequada para tratar as concentrações de íons normalmente registradas para estes materiais. Dentro dessa aproximação proposta por Serre e Ghazali, faremos ainda a aproximação de que os elétrons não interagem entre si.

Capítulo 3

Teoria

Em nosso tratamento, usaremos um Hamiltoniano que englobará os termos cinético, magnético e coulombiano. O Hamiltoniano completo pode ser expresso por

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_{pd} \quad (3.1)$$

Onde o primeiro termo refere-se à parte cinética, o segundo à parte coulombiana e o último termo refere-se à parte magnética.

Explicitando cada termo isoladamente, temos o termo cinético

$$\mathcal{H}_s = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \quad (3.2)$$

onde m^* é a massa efetiva, \hbar é a constante de Planck e ∇^2 é o Laplaciano.

O termo Coulombiano

$$\mathcal{H}_c = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{[i,j]} \frac{e^2}{R_{i,j}} \quad (3.3)$$

onde e é a carga elementar do elétron, r é a distância entre o elétron e o íon, e ϵ a constante dielétrica do material. Consideramos a aproximação dos elétrons não interagentes. O potencial é referente a interação elétron núcleo.

E por fim, o termo magnético (2.1) descrito anteriormente e explicitado abaixo como

$$\mathcal{H}_{p-d} = - \sum_i JS(\mathbf{R}_i) \cdot \hat{\sigma}(\mathbf{r})\delta(\mathbf{R}_i - \mathbf{r})$$

onde J é a constante de acoplamento, representando as interações dos portadores $\hat{\sigma}(\mathbf{r})$ com os momentos magnéticos localizados \mathbf{S}_i .

Utilizamos a notação para as funções de Green, como mostrado abaixo

$$G(E) = \langle \Psi(0) | (A(\hat{E})B(\hat{E})) | \Psi(0) \rangle \rightarrow G(E) = \langle \langle \hat{A}; \hat{B} \rangle \rangle_E,$$

onde \hat{A} e \hat{B} são operadores, $|\Psi(0)\rangle$ é o autoestado no tempo zero. Para mostrar que a função de Green está em função da energia utilizamos a notação $\langle \langle \rangle \rangle_E$.

3.1 Abordagem Geral do Problema

Nosso objetivo nesta seção, é encontrar as propriedades do sistema através de um hamiltoniano completo, fornecendo uma descrição sem aproximações para a parte cinética, coulombiana e magnética. Partiremos do hamiltoniano abaixo

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},j} U(\mathbf{k} - \mathbf{q}) e^{-i\mathbf{R}_j \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q})} \sum_{\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{q}\sigma} + \\ & - \frac{J}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},j} e^{-i\mathbf{R}_j \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{q})} \left[S_j^z (c_{\mathbf{k}+}^\dagger c_{\mathbf{q}+} - c_{\mathbf{k}-}^\dagger c_{\mathbf{q}-}) + \right. \\ & \left. + S_j^+ c_{\mathbf{k}-}^\dagger c_{\mathbf{q}+} + S_j^- c_{\mathbf{k}+}^\dagger c_{\mathbf{q}-} \right]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde os termos acima encontram-se em segunda quantização no espaço dos momentos. O primeiro termo refere-se a parte cinética, o segundo ao potencial coulombiano e por fim a parte magnética. Os operadores de criação e aniquilação $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ e $c_{\mathbf{k}\sigma}$, respectivamente, descrevem a criação e aniquilação de portadores fermiônicos, com vetor de onda \mathbf{k} e polarização de spin $\sigma = \pm$. S^z e S^\pm são operadores de spin, que atuam sobre σ . A partir da equação do movimento de Heisenberg no espaço das posições, como descrita abaixo

$$EG_{ij}^\sigma(E) = \hbar\delta_{ij} + \langle \langle [c_{i\sigma}, \hat{H}]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_E \quad (3.5)$$

faremos a transformada de Fourier, obtendo para um caso geral

$$E\langle\langle\hat{A};\hat{B}\rangle\rangle_E = \hbar\langle[\hat{A};\hat{B}]_{\pm}\rangle + \langle\langle[\hat{A},\hat{H}];\hat{B}\rangle\rangle_E. \quad (3.6)$$

Substituindo os operadores \hat{A} e \hat{B} pelos operadores de criação e aniquilação e fazendo as devidas anticomutações, encontraremos os termos cinético, coulombiano e magnético. A equação de movimento poderá ser escrita de modo exato, como segue

$$\begin{aligned} [E - \epsilon(\mathbf{k}')]G_{\mathbf{k}}^{\sigma'}(E) = \hbar + \sum_j U(\mathbf{k}' - \mathbf{q})e^{-i\mathbf{R}_j \cdot (\mathbf{k}' - \mathbf{q})}G_{\mathbf{q},\mathbf{k}}^{\sigma'}(E) + \\ - \frac{J}{N} \sum_{qj} e^{-i\mathbf{R}_j \cdot (\mathbf{k}' - \mathbf{q})} \left(\langle\langle S_j^z c_{\mathbf{q}+}; c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \rangle\rangle_E \delta_{\sigma'+} - \langle\langle S_j^z c_{\mathbf{q}-}; c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \rangle\rangle_E \delta_{\sigma'-} \right. \\ \left. \langle\langle S_j^+ c_{\mathbf{q}+}; c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \rangle\rangle_E \delta_{\sigma'-} + \langle\langle S_j^- c_{\mathbf{q}-}; c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger \rangle\rangle_E \delta_{\sigma'+} \right). \end{aligned} \quad (3.7)$$

O que faremos a seguir, é aplicar novamente a equação de movimento às novas funções de Green, que são produto das comutações da parte magnética. Veja que cada qual possui um operador de Spin associado e que não pode ser simplesmente removido da função de Green, pois nesta etapa do trabalho, estamos interessados em obter de modo exato o cálculo dessas equações.

Faremos um cálculo para uma comutação geral, e após este cálculo aplicaremos para diversos casos, de modo a reproduzir as funções de Green vistas acima. A parte cinética e a parte Coulombiana, por não possuírem operadores de spin, comutam com os operadores de criação e aniquilação, o operador de spin é simplesmente desacoplado nestes casos. Podemos definir um comutador geral como mostrado abaixo

$$[S_i^\alpha c_{\mathbf{p}\sigma'}; \hat{H}] = S_i^\alpha c_{\mathbf{p}\sigma'} \hat{H} - \hat{H} S_i^\alpha c_{\mathbf{p}\sigma'}$$

onde $\alpha = z, +, -$ e $\sigma' = +, -$.

A equação de movimento para o caso geral é demonstrado abaixo, sendo a primeira equação de movimento referente aos três valores de α dados acima.

$$\begin{aligned}
& \left[E - \epsilon(\mathbf{p}) \right] \langle \langle S_i^\alpha c_{\mathbf{p}\sigma'}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E = \hbar S_i^\alpha \delta_{\mathbf{p},\mathbf{k}_1} \delta_{\sigma'\sigma} + \\
& + \sum_{\mathbf{q}} U(\mathbf{p} - \mathbf{q}) e^{-i\mathbf{R}_i \cdot (\mathbf{p}-\mathbf{q})} \langle \langle S_i^\alpha c_{\mathbf{q}\sigma'}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E + \\
& - \frac{J}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{R}_i \cdot (\mathbf{k}-\mathbf{q})} \left(\langle \langle S_i^\alpha S_j^z c_{\mathbf{p}\sigma'} c_{\mathbf{k}_+}^\dagger c_{\mathbf{q}+}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E - \langle \langle S_i^\alpha S_j^z c_{\mathbf{p}\sigma'} c_{\mathbf{k}_-}^\dagger c_{\mathbf{q}-}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E \right. \\
& + \langle \langle S_j^z S_i^\alpha c_{\mathbf{k}_+}^\dagger c_{\mathbf{q}+} c_{\mathbf{p}\sigma'}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E - \langle \langle S_j^z S_i^\alpha c_{\mathbf{k}_-}^\dagger c_{\mathbf{q}-} c_{\mathbf{p}\sigma'}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E \\
& + \langle \langle S_i^\alpha S_j^+ c_{\mathbf{p}\sigma'} c_{\mathbf{k}_-}^\dagger c_{\mathbf{q}+}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E - \langle \langle S_j^+ S_i^\alpha c_{\mathbf{k}_-}^\dagger c_{\mathbf{q}+} c_{\mathbf{p}\sigma'}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E \\
& \left. + \langle \langle S_i^\alpha S_j^- c_{\mathbf{p}\sigma'} c_{\mathbf{k}_+}^\dagger c_{\mathbf{q}-}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E - \langle \langle S_j^- S_i^\alpha c_{\mathbf{k}_+}^\dagger c_{\mathbf{q}-} c_{\mathbf{p}\sigma'}; c_{\mathbf{k}_1\sigma_1}^\dagger \rangle \rangle_E \right). \quad (3.8)
\end{aligned}$$

A equação de movimento, referente a função de Green que acompanha o termo Coulombiano, está representado abaixo:

$$\begin{aligned}
& \left[E - \epsilon(\mathbf{k}) \right] \langle \langle c_{\mathbf{k}\sigma'}; c_{\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \rangle \rangle_E = \hbar \delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}} + \\
& + \sum_{\mathbf{q}'j} U(\mathbf{k} - \mathbf{q}') e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_i} \langle \langle c_{\mathbf{q}'\sigma'}; c_{\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \rangle \rangle_E + \\
& - \frac{J}{N} \sum_{\mathbf{q}'j} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{q}') \cdot \mathbf{R}_i} \left[\langle \langle S_j^z c_{\mathbf{q}'+}; c_{\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \rangle \rangle_E \delta_{\sigma'+} - \langle \langle S_j^z c_{\mathbf{q}'-}; c_{\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \rangle \rangle_E \delta_{\sigma'-} \right. \\
& \left. + \langle \langle S_j^+ c_{\mathbf{q}'+}; c_{\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \rangle \rangle_E \delta_{\sigma'-} + \langle \langle S_j^- c_{\mathbf{q}'-}; c_{\mathbf{q}\sigma'}^\dagger \rangle \rangle_E \delta_{\sigma'+} \right] \quad (3.9)
\end{aligned}$$

Juntas, elas formam o conjunto completo de equações que descrevem o sistema em segunda ordem. Veja ainda que podemos reproduzir a interação Coulombiana se a magnetização S^z for zero. Teremos termos cruzados, que acoplam magnetismo e espalhamento coulombiano.

Notamos que para termos de ordem superior, o número de operadores de spin nas funções de Green aumenta progressivamente, onde a ordem da equação de movimento corresponde ao número de operadores de spins. Devemos desacoplá-los se quisermos encontrar uma função de Green e a autoenergia associada.

Além disso, a possibilidade do spin flip previne uma solução exata para os termos coulombiano e magnético na forma acima. Assim, iremos propor uma solução ao problema, tratando o espalhamento coulombiano até ordem infinita e o espalhamento

magnético até primeira ordem para a autoenergia, essa aproximação será descrita nas seções seguintes.

3.2 Termo Coulombiano

Nesta seção, trataremos do método aproximativo do Espalhamento Múltiplo, onde este será útil para descrevermos as interações coulombianas da rede tipo Kondo. O espalhamento múltiplo consiste em selecionar da auto energia, espalhamentos que ocorrem várias vezes pela mesma impureza. Veja que aqui temos vários espalhamentos provenientes da mesma impureza, enquanto que a aproximação do espalhamento de Born considera apenas dois espalhamentos realizados a partir mesma impureza. A MS consegue tratar corretamente ligas com concentrações maiores que a aproximação de Born [29]. Antes de escrevermos as interações, definiremos os vetores de onda dos portadores como sendo $\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q}$ e \mathbf{q}' . Podemos agora escrever o Hamiltoniano total como sendo

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m^*} + \sum_i U(\mathbf{x}_i) + \mathcal{H}_{p-d} \rightarrow \mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{q}} U(\mathbf{q}) \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^\dagger c_{\mathbf{k}} + \mathcal{H}_{p-d}$$

onde o termo \mathcal{H}_{p-d} não explicitado é a parte relacionada as interações magnéticas. Nos capítulos seguintes explicitaremos melhor as interações magnéticas, mas por enquanto, focaremos em entender a aproximação do espalhamento múltiplo.

Definiremos, em seguida, um propagador de uma única partícula para um sistema homogêneo:

$$G(\mathbf{k}, t) = -i\hbar \langle \langle T[\tilde{a}_{\mathbf{k}}(t) \tilde{a}_{\mathbf{k}}^\dagger(0)] \rangle \rangle, \quad (3.10)$$

onde $\tilde{a}_{\mathbf{k}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t} a_{\mathbf{k}} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}$ e o propagador não-diagonal (gerador):

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t) = -i\hbar \langle \langle T[\tilde{a}_{\mathbf{k}}(t) \tilde{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger(0)] \rangle \rangle \quad (3.11)$$

$$= -i\hbar \Theta(t) \langle \langle \tilde{a}_{\mathbf{k}}(t) \tilde{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) \rangle \rangle + \quad (3.12)$$

$$+ i\hbar \Theta(-t) \langle \langle \tilde{a}_{\mathbf{k}'}^\dagger(0) \tilde{a}_{\mathbf{k}}(t) \rangle \rangle. \quad (3.13)$$

Aplicando a equação de movimento e efetuando as devidas comutações, chegamos na função de Green não diagonal

$$F(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; t) = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} G^0(\mathbf{k}, E) + G^0(\mathbf{k}, E) \sum_{\mathbf{q}} U(\mathbf{q}) F(\mathbf{k} + \mathbf{q}, \mathbf{k}'; E) \quad (3.14)$$

Resolvendo iterativamente, teremos:

$$G(\mathbf{k}, E) = F(\mathbf{k}, \mathbf{k}, E) = G^0(\mathbf{k}, E) + G^0(\mathbf{k}, E) U(0) G^0(\mathbf{k}, E) + \quad (3.15)$$

$$+ G^0(\mathbf{k}, E) U(\mathbf{q}) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}, E) U(-\mathbf{q}) G^0(\mathbf{k}, E) \quad (3.16)$$

$$+ \dots$$

O potencial coulombiano é dado por

$$U(\mathbf{q}) = \sum_i \int d^d \mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3.17)$$

$$= \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} \int d^d (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \quad (3.18)$$

$$= \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} v(\mathbf{q}). \quad (3.19)$$

onde

$$v(\mathbf{q}) = \int d^d \mathbf{r} v(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \quad (3.20)$$

Definiremos a densidade de impurezas como sendo

$$\rho_{imp}(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i), \quad (3.21)$$

sua transformada será dada por

$$\rho_{imp}(\mathbf{q}) = \int d^d \mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \rho_{imp}(\mathbf{r}) = \sum_i e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}. \quad (3.22)$$

E o potencial de Coulomb assume a forma abaixo [30]

$$U(\mathbf{q}) = \rho_{imp}(\mathbf{q})v(\mathbf{q}) \quad (3.23)$$

onde $v(\mathbf{r})$ é o potencial gerado por essas impurezas [29, 31]. O primeiro termo(ρ), representa uma densidade de dopantes inseridos aleatoriamente no material. O cálculo auto-consistente, através da iteração do potencial Coulombiano, é realizado para um gás de buracos bidimensionais com densidade superficial n_S , e com concentração n_i de impurezas ionizadas. Os parâmetros para os cálculos computacionais, n_i e n_S , são independentes. É de relevante interesse que estes dois parâmetros sejam independentes, pois sabemos que a densidade dos portadores livres no material ferromagnético em questão simboliza apenas uma pequena fração da concentração de Manganês. Além disso a concentração de portadores pode ser controlada por um potencial de gate [20].

Para um número muito extenso de impurezas, por exemplo, quando as propriedades macroscópicas da amostra se tornam independentes das configurações da impureza, podemos definir uma Função de Green das médias de impurezas como segue

$$\overline{G(\mathbf{k}, E)} = \frac{1}{V} \int d^d \chi_1 \frac{1}{V} \int d^d \chi_2 \cdots \frac{1}{V} \int d^d \chi_N G(\mathbf{k}, E)_{[\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_N]} \quad (3.24)$$

$$= \left\{ \prod_{i=1}^N \frac{1}{V} \int d^d \chi_i \right\} G(\mathbf{k}, E)_{[\chi_1, \chi_2, \dots, \chi_N]}. \quad (3.25)$$

A média nos produtos com a densidade é dada pelas equações que seguem

$$\overline{\rho_{imp}(\mathbf{q})} = N\delta_{\mathbf{q},0} \quad (3.26)$$

$$\overline{\rho_{imp}(\mathbf{q})\rho_{imp}(-\mathbf{q})} = N^2\delta_{\mathbf{q},0} + N \quad (3.27)$$

A aproximação do espalhamento múltiplo consistirá em selecionar da auto energia coulombiana, aqueles termos espalhados pela mesma impureza:

$$\Sigma^{coul}(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q}_1 v(\mathbf{q}_1) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1) v(-\mathbf{q}) + \quad (3.28)$$

$$+ \frac{1}{(2\pi)^{2d}} \int d^d \mathbf{q}_1 \times \quad (3.29)$$

$$\times \int d^d \mathbf{q}_2 v(\mathbf{q}_1) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1) v(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_2) v(-\mathbf{q}_2) + \quad (3.30)$$

$$+ \dots$$

Não escrevemos ainda, o argumento da energia no propagador. Como a energia é conservada no processo de espalhamento, consideraremos como sendo elástico. É conveniente, a este ponto, definirmos a função de Green:

$$K(\mathbf{k}, \mathbf{q}; E) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q}_1 v(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}) [Nv(-\mathbf{q}_1) + K(\mathbf{k}, \mathbf{q}; E)] \quad (3.31)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q}_1 v(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1) Nv(-\mathbf{q}_1) + \quad (3.32)$$

$$+ \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q}_1 \int d^d \mathbf{q}_2 v(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_1) \times \quad (3.33)$$

$$\times v(\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_1) G^0(\mathbf{k} + \mathbf{q}_2) Nv(-\mathbf{q}_2) + \dots \quad (3.34)$$

O que é concluído com a expressão abaixo

$$\Sigma^{coul}(\mathbf{k}, E) = K(\mathbf{k}, \mathbf{q} = 0, E). \quad (3.35)$$

Ordens superiores são incluídas, se trocarmos a função de Green sem perturbação por uma função de Green média para impurezas como mostrado abaixo

$$K(\mathbf{k}, \mathbf{q}; E) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q}' v(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \overline{G(\mathbf{k} + \mathbf{q}')} [Nv(-\mathbf{q}') + K(\mathbf{k}, \mathbf{q}'; E)]. \quad (3.36)$$

Fazendo uma mudança de variáveis

$$\mathbf{k} + \mathbf{q}' \rightarrow \mathbf{q}_1 \quad (3.37)$$

$$\mathbf{k} + \mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}'_1 \quad (3.38)$$

Portanto a eq.(3.36) se torna:

$$K(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1 - \mathbf{q}; E) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q}'_1 v(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}'_1) \overline{G(\mathbf{q}'_1)} [Nv(\mathbf{k} - \mathbf{q}'_1) + K(\mathbf{k}, \mathbf{q}'_1 - \mathbf{k}; E)]. \quad (3.39)$$

Definimos a função vértice $K_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1; E) \equiv K(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1 - \mathbf{k}; E)$ e a equação de Dyson se torna:

$$K_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}_1; E) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q}'_1 v(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}'_1) \overline{G(\mathbf{q}'_1)} [Nv(\mathbf{k} - \mathbf{q}'_1) + K(\mathbf{k}, \mathbf{q}'_1; E)], \quad (3.40)$$

uma vez que a auto energia é dada por

$$\Sigma^{coul}(\mathbf{k}, E) = K(\mathbf{k}, \mathbf{q} = 0; E), \quad (3.41)$$

teremos:

$$\Sigma^{coul}(\mathbf{k}, E) = K_1(\mathbf{k}, \mathbf{k}; E), \quad (3.42)$$

agora vemos que a auto energia são os termos diagonais da matriz K_1 , correspondendo a linha k e coluna k , calculada na energia E . Para fazer com que este formalismo seja operacional, mais uma mudança é necessária. Definimos a função U como segue [32]:

$$U(\mathbf{k}, \mathbf{q}; E) \equiv K_1(\mathbf{k}, \mathbf{q}; E) + Nv(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \quad (3.43)$$

Nesse caso, a eq.(3.40) se torna:

$$U(\mathbf{k}, \mathbf{q}; E) = Nv(\mathbf{k} - \mathbf{q}) + \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d \mathbf{q}'_1 v(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \overline{G(\mathbf{q}')} U(\mathbf{k}, \mathbf{q}'; E) \quad (3.44)$$

Com isso, temos uma equação de matriz linearizada:

$$[I - \tilde{v}\tilde{G}]\tilde{U} = N\tilde{v}, \quad (3.45)$$

esta será usada para efetuarmos os cálculos computacionais e implementação do método iterativo. Por questões de didática, faremos uma descrição do método computacional no final deste capítulo, após ter sido desenvolvido todo o trabalho teórico, de modo que o leitor possa acompanhar a técnica desenvolvida.

3.3 Termo Magnético

A partir do hamiltoniano magnético \mathcal{H}_m

$$\mathcal{H}_m = \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_{p-d} \quad (3.46)$$

onde o primeiro termo (\mathcal{H}_s) representa a energia cinética e o segundo (\mathcal{H}_{p-d}) a interação magnética de troca entre bandas, escrito como uma interação intra atômica entre o elétron itinerante ou de condução, de spin σ_i , e o momento magnético localizado S_i . Esta interação é dada por

$$\mathcal{H}_{pd} = -\frac{J}{2} \sum_{i\sigma} (z_\sigma S_i^z n_{i\sigma} + S_i^\sigma c_{i-\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \quad (3.47)$$

sendo $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$, $z_\sigma = \delta_{\sigma+} - \delta_{\sigma-}$ e por fim $S_i^\sigma = S_i^x + iz_\sigma S_i^y$. Este termo apresentado aqui de forma compacta, é o mesmo presente na eq.(3.4). O termo da energia cinética dos elétrons de condução é dado por

$$\mathcal{H}_s = \sum_{i,j,\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}. \quad (3.48)$$

Portanto, podemos escrever o hamiltoniano H de modo explícito como se segue:

$$\mathcal{H}_m = \sum_{ij\sigma} T_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \frac{J}{2} \sum_{i\sigma} (z_\sigma S_i^z n_{i\sigma} + S_i^\sigma c_{i-\sigma}^\dagger c_{i\sigma}). \quad (3.49)$$

Representam-se as funções de Green retardadas para os elétrons livres no material como segue

$$\begin{aligned} G_{ij}^\sigma(t-t') &= \langle\langle c_{i\sigma}(t); c_{j\sigma}^\dagger(t') \rangle\rangle \\ &= -i\Theta(t-t') \langle [c_{i\sigma}(t); c_{j\sigma}^\dagger(t')] \rangle. \end{aligned} \quad (3.50)$$

onde $\Theta(t - t')$ é chamada Função de Heaviside e também conhecida como Função Degrau, tal que $\Theta(t - t') = 1$ se $t > t'$ e $\Theta(t - t') = 0$ se $t < t'$.

Utilizamos a seguinte transformada de Fourier como mostrada abaixo

$$G_{AB}^{ret}(E) = \langle\langle \hat{A}; \hat{B} \rangle\rangle_E^{ret} \quad (3.51)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') G_{AB}^{ret}(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')}. \quad (3.52)$$

Aplicando a transformada de Fourier e a função de Green, definidas acima teremos

$$G_{ij}^{\sigma}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') G_{ij}^{\sigma}(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')} \quad (3.53)$$

$$EG_{ij}^{\sigma}(E) = E \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') G_{ij}^{\sigma}(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')} \quad (3.54)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') G_{ij}^{\sigma}(t - t') E e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')} \quad (3.55)$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') G_{ij}^{\sigma}(t - t') (-i\hbar) \frac{d}{dt} e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')} \quad (3.56)$$

$$= -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') G_{ij}^{\sigma}(t - t') \frac{d}{dt} e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')} \quad (3.57)$$

$$= -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') G_{ij}^{\sigma}(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')} \quad (3.58)$$

$$+ i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') \frac{d}{dt} G_{ij}^{\sigma}(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')}. \quad (3.59)$$

Pela transformada de Fourier, escrevemos a função de Green abaixo

$$G_{ij}^{\sigma}(E) = \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') G_{ij}^{\sigma}(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')} \quad (3.60)$$

portanto, escrevemos como segue

$$EG_{ij}^{\sigma}(E) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{ij}^{\sigma}(E) + i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d(t - t') \frac{d}{dt} G_{ij}^{\sigma}(t - t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t - t')}. \quad (3.61)$$

Podemos observar que o primeiro termo do lado direito de nossa equação se anula devido a derivada parcial com relação ao tempo, atuar sobre uma função independente do tempo. Nossa equação resume-se à igualdade abaixo

$$EG_{ij}^{\sigma}(E) = i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \frac{d}{dt} G_{ij}^{\sigma}(t-t') e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \quad (3.62)$$

ainda podemos escrever a igualdade acima usando a relação da função de Green com a referida Função de Heaviside (3.50), derivando os termos relacionados a t através da utilização a regra de derivação do produto como segue

$$\begin{aligned} EG_{ij}^{\sigma}(E) &= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \frac{d}{dt} \left\{ -i\Theta(t-t') \langle [c_{i\sigma}(t); c_{j\sigma}^{\dagger}(t')] \rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \\ &= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ -i \frac{d\Theta(t-t')}{dt} \langle [c_{i\sigma}(t); c_{j\sigma}^{\dagger}(t')] \rangle + \right. \\ &\quad \left. - i\Theta(t-t') \langle \left[\frac{dc_{i\sigma}(t)}{dt}; c_{j\sigma}^{\dagger}(t') \right] \rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')}. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Dentre as várias propriedades da função de Heaviside, utilizaremos a propriedade da derivada desta função $\Theta(t-t')$, que nos levará a uma delta de Dirac, definida como

$$\frac{d\Theta(t-t')}{dt} = \delta(t-t')$$

$$\begin{aligned} EG_{ij}^{\sigma}(E) &= i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \left\{ -i\delta(t-t') \langle [c_{i\sigma}(t); c_{j\sigma}^{\dagger}(t')] \rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} + \\ &+ i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \left\{ -i\Theta(t-t') \langle \left[i\hbar \frac{dc_{i\sigma}(t)}{dt}; c_{j\sigma}^{\dagger}(t') \right] \rangle \right\} e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Pela definição da Equação de Movimento de Heisenberg, dada por

$$i\hbar \frac{d\hat{O}(t)}{dt} = [\hat{O}(t); \mathcal{H}]$$

o termo

$$-i\Theta(t-t') \langle \left[i\hbar \frac{dc_{i\sigma}(t)}{dt}; c_{j\sigma}^{\dagger}(t') \right] \rangle$$

da igualdade acima, pode agora, ser substituído pela expressão que segue, utilizando para isso, a definição de função de Green definida anteriormente

$$\langle\langle [c_{i\sigma}(t); \mathcal{H}_m]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle.$$

Utilizando ainda, a definição da delta de Dirac, escrevemos

$$\begin{aligned} EG_{ij}^\sigma(E) &= \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \delta(t-t') \langle\langle [c_{i\sigma}(t); c_{j\sigma}^\dagger(t')] \rangle\rangle e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \langle\langle [c_{i\sigma}(t); \mathcal{H}_m]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle e^{\frac{i}{\hbar} E(t-t')} \\ &= \hbar \langle\langle [c_{i\sigma}(t); c_{j\sigma}^\dagger(t)] \rangle\rangle + \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_m]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \\ &= \hbar \delta_{ij} + \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_m]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Podemos concluir a equação que segue abaixo

$$EG_{ij}^\sigma(E) = \hbar \delta_{ij} + \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_m]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E. \quad (3.66)$$

Pela definição do hamiltoniano 3.46 e utilizando as propriedades de anticomutação, definida abaixo

$$\begin{aligned} [A, BC] &= ABC - BCA \\ &= ABC + (BAC - BAC) - BCA \\ &= (ABC + BAC) - (BAC + BCA) \\ &= (AB + BA)C - B(AC + CA) \\ &= \{A, B\}C - B\{A, C\} \end{aligned}$$

podemos então, anti-comutar e obter os termos entre os operadores fermiônicos e o hamiltoniano magnético.

$$EG_{ij}^\sigma(E) = \hbar \delta_{ij} + \sum_m T_{im} \langle\langle c_{m\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_{pd}]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \quad (3.67)$$

Utilizando as propriedades das funções delta, temos

$$\begin{aligned}
EG_{ij}^\sigma(E) &= \hbar\delta_{ij} + \sum_m T_{im} \langle\langle c_{m\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle + \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_{pd}]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \\
EG_{ij}^\sigma(E) - \sum_m T_{im} \langle\langle c_{m\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \hbar\delta_{ij} + \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_{pd}]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \\
\sum_m EG_{mj}^\sigma(E)\delta_{im} - \sum_m T_{im} \langle\langle c_{m\sigma}; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle &= \hbar\delta_{ij} + \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_{pd}]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E. \quad (3.68)
\end{aligned}$$

Agrupando os termos da última equação, podemos escrever como segue:

$$\sum_m (E\delta_{im} - T_{im})G_{mj}^\sigma(E) = \hbar\delta_{ij} + \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_{pd}]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \quad (3.69)$$

A eq.(3.69), é uma descrição geral do caso abordado por Santos e W. Nolting [25, 26].

Fazendo uso da transformada de Fourier como segue pela definição

$$G_{\mathbf{k}}^\sigma(E) = \frac{1}{N} \sum_{ij} G_{ij}^\sigma(E) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (3.70)$$

podemos escrever nossa função de Green no espaço dos momentos

$$EG_{ij}^\sigma(E) - \sum_m T_{im}G_{mj}^\sigma(E) = \hbar\delta_{ij} + \quad (3.71)$$

$$+ \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_{pd}]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \quad (3.72)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left\{ EG_{ij}^\sigma(E) - \sum_m T_{im}G_{mj}^\sigma(E) \right\} = \quad (3.73)$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{ij} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \left\{ \hbar\delta_{ij} \langle\langle [c_{i\sigma}, \mathcal{H}_{pd}]; c_{j\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \right\} \quad (3.74)$$

Definindo

$$\epsilon(\mathbf{k}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} T_{ij} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (3.75)$$

encontramos a equação abaixo

$$\left[E - \epsilon(\mathbf{k}) \right] G_{\mathbf{k}}^\sigma(E) = \hbar + \langle\langle [c_{\mathbf{k}\sigma}, \mathcal{H}_{pd}]; c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_E \quad (3.76)$$

Podemos ainda definir a auto-energia $\left[\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{mag}(E) \right]$ como sendo a aproximação:

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{mag}(E)G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(E) = \langle\langle [c_{\mathbf{k}\sigma}, \mathcal{H}_{pd}]; c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_E, \quad (3.77)$$

com isso, escrevemos a expressão a seguir

$$\left[E - \epsilon(\mathbf{k}) \right] G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(E) = \hbar + \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{mag}(E)G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(E), \quad (3.78)$$

$$\left[E - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{mag}(E) \right] G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(E) = \hbar. \quad (3.79)$$

Concluimos, portanto que

$$G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(E) = \frac{\hbar}{E - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{mag}(E) + i\delta^+}. \quad (3.80)$$

No caso da função de Green acima, na ausência de interações, podemos defini-la como uma função de Green de ordem zero, que seria o mesmo que representar o portador caminhando livremente pela rede. Define-se portanto

$$G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) = \frac{\hbar}{E - \epsilon(\mathbf{k}) + i\delta^+}. \quad (3.81)$$

A partir da função de Green de um único elétron e aplicando a teoria de densidade espectral, que nos diz que uma função de Green pode ser escrita como a média dos operadores que a compõem, podemos escrever:

$$G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(E) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}; c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle, \quad (3.82)$$

e do Teorema Espectral

$$-\frac{1}{N\hbar\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \text{Im}[G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(E)] = \quad (3.83)$$

$$= -\frac{1}{N\hbar\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \text{Im}\langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma}; c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle \quad (3.84)$$

$$= \langle c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \quad (3.85)$$

$$= \langle n_{\sigma} \rangle, \quad (3.86)$$

que é a média do número de ocupação. Utilizando a média desse operador, podemos associá-lo à autoenergia. Na referência [25] uma aproximação é utilizada para a autoenergia. Podemos escreve-la como segue

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{mag}(E) = -\frac{1}{2}Jz_{\sigma}\langle S^z \rangle + \frac{1}{4}J^2 D_{\mathbf{k}\sigma}(E) + O(J^3) + \dots \quad (3.87)$$

Esta aproximação é somente válida para o caso do limite de acoplamento fraco. O termo de primeira ordem, refere-se a magnetização local e é linearmente proporcional ao acoplamento J . O segundo termo, contendo $D_{\mathbf{k}\sigma}(E)$, está relacionado com J^2 , um termo de segunda ordem. Faremos uso, portanto, desta autoenergia em primeira ordem no limite de acoplamento fraco, definida abaixo como

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{mag}(E) = -\frac{1}{2}Jz_{\sigma}\langle S^z \rangle \quad (3.88)$$

o que significa que, com a aproximação do termo de primeira ordem, estamos apenas considerando a quebra dos spins devido ao termo $\langle S^z \rangle$, chamado Zeeman's Split, isto para o cálculo das funções de Green do espalhamento múltiplo.

3.3.1 Interação RKKY Modificada

Abrindo a eq.(2.1), referente a interação tipo Kondo, podemos obter uma outra expressão para o mesmo, da forma que se segue:

$$\mathcal{H}_{pd} = -\frac{J\hbar}{N} \sum_{i\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma\sigma'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma'} \quad (3.89)$$

Fazendo a aproximação do hamiltoniano efetivo(\mathcal{H}_d), teremos:

$$\mathcal{H}_{pd} \longrightarrow \langle \mathcal{H}_{pd} \rangle = \mathcal{H}_d$$

Podemos escrever o termo acima, em sua forma aproximada através da média dos elétrons de banda. Teremos, utilizando este desacoplamento,

$$\mathcal{H}_d = -\frac{J\hbar}{N} \sum_{i\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma\sigma'} \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma'} \rangle. \quad (3.90)$$

A partir da equação de movimento (3.76), fazendo uso da simetria da função de Green de ordem zero (3.82), abrangendo os casos para os operadores ativos sendo primeiro $c_{\mathbf{k}\sigma'}$ e em seguida $c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}$. Isso equivale a propagações simétricas e complementares, que nos levarão a uma solução completa. Abaixo estão as duas comutações, para os dois casos

$$[c_{\mathbf{k}\sigma'}, \mathcal{H}_{pd}] = -\frac{J\hbar}{N} \sum_{i\sigma''\mathbf{k}'} e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma'\sigma''} c_{\mathbf{k}'\sigma''} \quad (3.91)$$

$$[c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}, \mathcal{H}_{pd}] = -\frac{J\hbar}{N} \sum_{i\sigma''\mathbf{k}'} e^{-i[\mathbf{k}'-(\mathbf{k}+\mathbf{q})]\cdot\mathbf{R}_i} (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma''\sigma} c_{\mathbf{k}'\sigma''}. \quad (3.92)$$

Estamos calculando as duas propagações possíveis dos portadores e suas respectivas interações, logo que ambas são válidas, faremos a posteriori, uma superposição da solução. Após efetuarmos as duas comutações expostas acima, teremos as duas funções de Green que representam as duas possíveis interações dos portadores na rede

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) = G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) - \frac{J}{N} \sum_{i\sigma''\mathbf{k}'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma'\sigma''} G_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma''\sigma}(E) \quad (3.93)$$

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) = G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(0)}(E) - \frac{J}{N} \sum_{i\sigma''\mathbf{k}'} e^{i[\mathbf{k}'-(\mathbf{k}+\mathbf{q})]\cdot\mathbf{R}_i} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(0)}(E) (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma''\sigma} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\sigma'\sigma''}(E) \quad (3.94)$$

Somando os termos e utilizando a definição da delta de Kronecker, teremos a superposição das interações dos portadores expressos pelas funções de Green supracitadas e que nos fornece a solução geral como está mostrado a seguir

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) &= \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\mathbf{q},0} G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) + \\ &- \frac{J}{2N} \sum_{i\sigma''\mathbf{k}'} \left\{ e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma'\sigma''} G_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma''\sigma}(E) + \right. \\ &\left. + e^{-i[\mathbf{k}'-(\mathbf{k}+\mathbf{q})]\cdot\mathbf{R}_i} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(0)}(E) (\mathbf{S}_i + \hat{\sigma})_{\sigma''\sigma} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\sigma'\sigma''}(E) \right\}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

Ainda será utilizada a aproximação proposta por W. Nolting et.al [26]:

$$\begin{cases} G_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma''\sigma}(E) \longrightarrow \delta_{\sigma'',\sigma}\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma}(E) \\ G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^{\sigma'\sigma''}(E) \longrightarrow \delta_{\sigma',\sigma''}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}G_{\mathbf{k}}^{\sigma'}(E) \end{cases}$$

Se aplicarmos estas aproximações na equação anterior, que chegamos a partir da superposição das funções de Green, teremos

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) &\approx \delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{\mathbf{q},0}G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) \\ -\frac{J}{2N} \sum_{i\sigma''\mathbf{k}'} &\left\{ e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}_i} G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma}) \delta_{\sigma'',\sigma} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma}(E) + \right. \\ &\left. + e^{-i[\mathbf{k}'-(\mathbf{k}+\mathbf{q})]\cdot\mathbf{R}_i} G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(0)}(E) (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma''\sigma} \delta_{\sigma',\sigma''} \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}}^{\sigma'}(E) \right\} \quad (3.96) \end{aligned}$$

Assim podemos escrever a seguinte função de Green generalizada:

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) \approx \delta_{\sigma',\sigma}\delta_{\mathbf{q},0}G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) - \frac{J}{2N} \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma'\sigma} A_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) \quad (3.97)$$

Onde, podemos definir o termo interagente $A_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E)$ como sendo

$$A_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) = G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E)G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma}(E) + G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(0)}(E)G_{\mathbf{k}}^{\sigma'}(E) \quad (3.98)$$

Fazendo uso do teorema espectral, que nos diz, de modo geral, que uma função de Green pode ser entendida como uma média estatística dos operadores relacionados a ela, através da seguinte definição:

$$\langle \hat{B}(t')\hat{A}(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \frac{S_{AB}^{\eta}(E)}{e^{\beta} - \eta} e^{-i\frac{E(t-t')}{\hbar}} + \frac{1}{2}(1+\eta)D \quad (3.99)$$

onde

$$\eta = \begin{cases} -1, & \text{se férmions} \\ 1, & \text{se bósons} \end{cases} \quad (3.100)$$

e

$$S_{AB}^{\eta}(E) = \pm \frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{AB}^{ret,av}(E)], \quad (3.101)$$

podemos calcular a média estatística dos operadores de criação e aniquilação referentes a nossa função de Green e com isso, achar o hamiltoniano efetivo e os termos que dele se relacionam. Veja:

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma'} \rangle = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta_{\mathbf{q},0} \langle n \rangle + \frac{J\hbar}{N} \sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma'\sigma} D_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma'} \quad (3.102)$$

onde

$$D_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma'} = -\frac{1}{\pi\hbar N} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \text{Im}[A_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E)] \quad (3.103)$$

que é uma função de polarização.

O termo de Troca Efetiva pode ser encontrado por comparação com o Hamiltoniano de Heisenberg, escrito abaixo

$$\mathcal{H} = - \sum_{ij} \hat{J}_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.104)$$

com o termo (3.90) descrito com base nas funções de Green:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_d &= -\frac{J\hbar}{N} \sum_{i\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma\sigma'} \langle c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma'} \rangle \\ &= -\frac{J\hbar}{N} \sum_{i\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i} (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma\sigma'} \left[\frac{J}{2N} \sum_j e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j} (\mathbf{S}_j \cdot \hat{\sigma})_{\sigma'\sigma} D_{\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) \right] \\ &= \frac{J^2\hbar}{2N} \sum_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{q}} \left[e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} D_{\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) \right] \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \\ &= - \sum_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{q}} \left[\left(-\frac{J^2\hbar}{2N} D_{\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) \right) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} \right] \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.105) \end{aligned}$$

O termo em parênteses dentro dos colchetes, referente a última igualdade, é o termo que estamos procurando, chamado de Termo de Troca efetiva

$$J(\mathbf{q}) = -\frac{J^2\hbar}{4N} \sum_{\sigma} D_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma}. \quad (3.106)$$

Aqui, utilizamos a propriedade de $D_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma}$ referente a sua simetria de inversão descrita abaixo

$$D_{\mathbf{q}}^{\uparrow\downarrow} = D_{\mathbf{q}}^{\downarrow\uparrow} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} D_{\mathbf{q}}^{\sigma\sigma} \quad (3.107)$$

escrevemos o hamiltoniano efetivo como segue

$$\mathcal{H}_d = - \sum_{ij} \sum_{\sigma\sigma'} \left[\sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \right] \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (3.108)$$

onde o termo em colchetes acima pode ser escrito como uma transformada de Fourier, visto abaixo

$$J_{ij} = \sum_{\mathbf{q}} J(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}, \quad (3.109)$$

podemos reproduzir a eq.(3.47).

Chegamos assim, no termo de Troca efetiva. Deixando explícito os termos, temos:

$$J(\mathbf{q}) = \frac{J^2}{2N\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma\sigma'} \text{Im} \left[G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma}(E) + G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(0)}(E) G_{\mathbf{k}}^{\sigma'}(E) \right] \quad (3.110)$$

Para o nosso caso, onde os termos de spin up e spin down serão tratados isoladamente, podemos escrever

$$J(\mathbf{q}) = \frac{J^2}{4N\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \sum_{\mathbf{k}\sigma} \text{Im} \left[G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma}(E) \right], \quad (3.111)$$

onde apenas a segunda função de Green possui dependência magnética.

Aplicando as propriedades de simetria de inversão de $D_{\mathbf{q}}$ descritas acima, a chamada simetria de inversão, obtemos o fator 4, que evita as contagens duplas das interações dos spins contrários. Podemos agora, com este resultado, implementar nossa autoenergia (3.88) na função de Green acima, não só a parte magnética mas também o implemento do espalhamento múltiplo.

O termo acima nos permite reproduzir, através da expressão em primeira ordem da função de Green (3.97), a interação RKKY, o que seria equivalente a escrever (3.111) substituindo $G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma}(E)$ pelo seu termo em ordem zero. Logo teremos

$$J_{ij}^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} J^{(1)}(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \quad (3.112)$$

pois $J_{ij}^{(1)}$ pode ser escrito a partir de (3.97), e obtendo

$$J_{\mathbf{q}}^{(1)} = -\frac{1}{2}J^2 D_{\mathbf{q}}^{(1)} \quad (3.113)$$

$$= \frac{J^2}{2N\pi} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \text{Im} \left[G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(0)}(E) \right]. \quad (3.114)$$

Utilizando o teorema do Valor Principal de Cauchy,

$$\frac{1}{E - \epsilon(\mathbf{k}) \pm i\delta^+} = P \frac{1}{E - \epsilon(\mathbf{k})} \mp i\pi\delta(E - \epsilon(\mathbf{k})). \quad (3.115)$$

Onde P é o valor principal de Cauchy e $\delta(E - \epsilon(\mathbf{k}))$ é a delta de Dirac. Podemos escrever com as funções de Green de ordem zero a interação RKKY como

$$\begin{aligned} J_{\mathbf{q}}^{(1)} &= -\frac{J^2\hbar^2}{2N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \left[\frac{\delta(E - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{E - \epsilon(\mathbf{k})} + \frac{\delta(E - \epsilon(\mathbf{k}))}{E - \epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})} \right] \\ &= -\frac{J^2\hbar^2}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{-}[\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q})] - f_{-}[\epsilon(\mathbf{k})]}{\epsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \epsilon(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (3.116)$$

Note que N é varrido do denominador, devido a soma em \mathbf{k} efetuada sobre as deltas. Concluindo que a aproximação da função de Green (3.97), reproduz as interações RKKY, já muito bem estabelecidas na literatura, escrita acima, com o formalismo das funções de Green. Isso também nos leva a afirmar, que a interação de troca efetiva (3.111), está bem definida pelas considerações e aproximações adotadas em [26] e que, neste trabalho.

3.4 Associação dos Termos Magnético e Coulombiano

Nas seções anteriores tratamos isoladamente o termo de espalhamento coulombiano e o termo de espalhamento magnético. É necessário agora recuperar a ideia inicial de tratar os dois termos juntos, para atendermos à transição metal isolante e às propriedades magnéticas de interesse.

Temos como equação de movimento para a função de Green a expressão

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) = \delta_{\sigma'\sigma}\delta_{\mathbf{q},0}G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) + \quad (3.117)$$

$$+G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) \sum_{j,\mathbf{k}'} U(\mathbf{k}' - \mathbf{q}) e^{-i\mathbf{R}_j \cdot (\mathbf{k}' - \mathbf{q})} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) + \quad (3.118)$$

$$-G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) \sum_{\mathbf{q},j} \frac{J}{N} e^{-i\mathbf{R}_j \cdot (\mathbf{k}' - \mathbf{q})} (\mathbf{S}_i \cdot \hat{\sigma})_{\sigma'\sigma} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E). \quad (3.119)$$

Formalmente, podemos escreve-la em forma de auto energia

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) = \delta_{\sigma'\sigma}\delta_{\mathbf{q},0}G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) + G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E)\Sigma_{\mathbf{k}}^{COUL}(E)G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E) \\ +G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E)\Sigma_{\mathbf{k}}^{MAG}(E)G_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma'\sigma}(E). \quad (3.120)$$

Assim, a equação de Dyson para este sistema ficaria

$$G_{\mathbf{k}}^{\sigma}(E) = \frac{\hbar}{E - \epsilon(\mathbf{k}) - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{MAG}(E) - \Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{COUL}(E)}. \quad (3.121)$$

sobre a eq.(3.119), ela é uma solução formal. Já vimos na seção 3.1 que uma solução exata para esta função de Green não é possível. Aqui adotaremos a aproximação da autoenergia magnética por

$$\Sigma_{\mathbf{k}\sigma}^{MAG}(E) = -\frac{1}{2}Jz_{\sigma}\langle S^z \rangle \quad (3.122)$$

no cálculo de (3.121).

Este termo significa uma simples renormalização na energia em função de $z_{\sigma} = \pm 1$, e portanto simples de ser introduzida na função de Green do espalhamento múltiplo. Cabe mencionar que as tentativas de incluir o termo magnético em segunda ordem levou o sistema autoconsistente a não convergir.

Neste ponto, vamos usar o *Ansatz* de introduzir a função de Green (3.121) na expressão (3.106). Esta aproximação significa o uso da forma funcional de $J(\mathbf{q})$ com a função de Green magnética em primeira ordem, mas com toda a informação da mobilidade dos portadores, fornecido pelo cálculo do espalhamento múltiplo. Assim, é possível calcular a interação magnética entre os íons de manganês, respeitando o caráter metálico e/ou isolante dos portadores.

Então a expressão abaixo será calculada com (3.121)

$$J(\mathbf{q}) = \frac{J^2}{4N\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) \sum_{\mathbf{k}\sigma} \text{Im} \left[G_{\mathbf{k}}^{(0)}(E) G_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{\sigma}(E) \right]. \quad (3.123)$$

A transformada de Fourier de $J(\mathbf{q})$, nos proporcionará a interação no espaço direto, aqui para efeitos de cálculos numéricos, utilizaremos a transformação integral

$$J_{ij} = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{+\infty} d\mathbf{q} J(\mathbf{q}) e^{-i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}. \quad (3.124)$$

O produto escalar pode ser expresso em forma de cosseno, chegando assim, nas equações de Bessel:

$$J_{ij} = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{\pi} q J(q) e^{iqR_{ij}\cos\theta} d\theta dq \quad (3.125)$$

onde o termo referente a parte angular possui soluções na função de Bessel, $J_0(q|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|)$.

$$J_{ij} = \frac{1}{A} \int_{-\infty}^{+\infty} q J(q) J_0(q|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) dq \quad (3.126)$$

Finalizando, faremos uma breve descrição dos passos realizados para se efetuar o cálculo computacional, implementando as expressões analíticas desta seção.

1. O primeiro passo é a solução auto-consistente das funções de Green pela aproximação do espalhamento múltiplo, aqui corrigindo a auto energia com o termo magnético em primeira ordem, expressa analiticamente pela equação (3.88)
2. O segundo passo é o cálculo de $J(\mathbf{q})$, dado pela expressão (3.111).
3. Obtido os valores numéricos de $J(\mathbf{q})$, é feita a transformada de Fourier e obtido os valores de J_{ij} .

Este procedimento foi aplicado a várias amostras de GaMnAs, onde foram variados os parâmetros n_i , a concentração de impurezas e n_s , a concentração de portadores.

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Nosso escopo, nesta seção, é mostrar as propriedades do material em questão através da apresentação de gráficos, a partir de simulações computacionais do sistema físico, utilizando os resultados analíticos desenvolvidos neste trabalho. Partindo da relação entre a temperatura de transição (T_C) e o operador de troca [27], que para o nosso caso particular, tratar-se-á do operador de troca efetiva no espaço das posições (J_{ij}), temos

$$\frac{J_{ij}}{K_B T_C} = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) = 0.44069.$$

Sem entrarmos em detalhes referente a descrição da relação acima, que surge das descrições estatísticas do comportamento da magnetização, que por sua vez está ligada com a intensidade das interações, podemos entender como se comporta a temperatura com relação aos dados obtidos através do termo de troca efetiva.

A relação nos mostra que, quanto maior a intensidade das interações maior será a temperatura de transição, pois mais estáveis serão os portadores na magnetização estabelecida, com isso maior a energia que deve ser fornecida para que seja quebrado a orientação magnética de seus spins.

Na discussão que segue, compararemos diferentes valores de J_{ij} para diferentes concentrações de Manganês e buracos e variando também os valores da polarização de $\langle S^z \rangle$. A polarização é dado como a resposta à variação de temperatura. Polarização nula implica em $T > T_C$, a medida que aumentamos $\langle S^z \rangle$ temos $T < T_C$.

Quanto mais polarizado mais próximo de $T = 0$, portanto mais próximo de uma ordem ferromagnética. A transição de fase ocorre à temperatura de Curie, sendo fundamental compararmos diferentes polarizações, entendendo como a interação se comporta abaixo de T_C .

Devemos ressaltar que a teoria do espalhamento múltiplo foi obtida a partir de $T = 0$. O que nos permite discutir temperaturas diferente de zero, é apenas a liberdade analítica de se manipular as autoenergias na função de Green modificada (3.121), associando $\langle S^z \rangle$ a T .

Não apenas variamos a concentração de manganês, como também variamos as concentrações dos portadores, assim podemos entender por completo a dependência de J_{ij} com relação a esses parâmetros de entrada.

A escolha dos pontos para análise, não ocorreu de forma arbitrária, mas sim baseada em estudos prévios [33]. No referente artigo, realizou-se o estudo das bandas de impurezas em $GaMnAs$, apresentando a relação das fases de transição para diferentes concentrações de impurezas e portadores, como mostrado na figura 4.1.

Nos gráficos que serão aqui apresentados, n_h será a concentração buracos, que são os intermediadores das interações. O Mn , por sua vez, serão representados como os íons magnéticos, as impurezas da rede.

Apresentamos abaixo, uma tabela contendo os parâmetros do GaAs. Onde m_0 é a massa do elétron não relativístico, $m_{h,dos}$ é a massa efetiva dos buracos e $m_{e,dos}$ a massa efetiva dos elétrons.

Tabela 4.1: Tabela contendo alguns parâmetros do composto GaAs à temperatura ambiente.

Est. Cristalina	a	Dens. atômica	$m^* (m_{e,dos}/m_0)$	$m^* (m_{h,dos}/m_0)$	$J(eV)$
Zinc blende	5.65\AA	$5.32g/cm^3$	0.063	0.51	1.2

Veja na figura 4.2, de onde escolhemos dois valores para as concentrações de Mn, $n_i = 6 \times 10^{12}cm^{-2}$ e $n_h = 10 \times 10^{12}cm^{-2}$. Para estas duas concentrações de

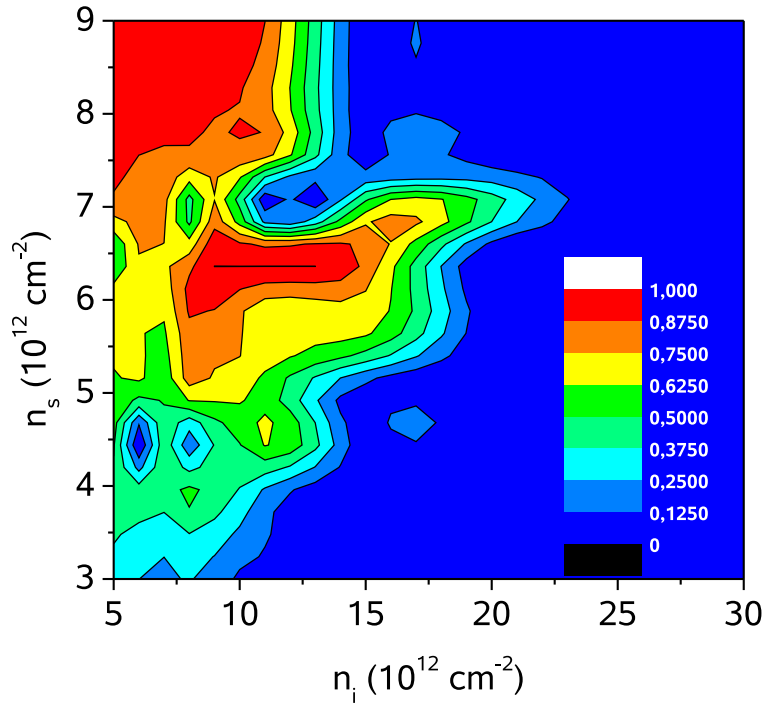


Figura 4.1: Mapa de cores do caráter de mobilidade da densidade de impurezas pela densidade de portadores, onde vermelho representa as amostras de maior mobilidade, e azul para mobilidades menores. Figura publicada por Dias Cabral, E. et al. na referência [33].

Mn, foram feitos cálculos para diferentes concentrações de buracos ($3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ à $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$). Para este conjunto de parâmetros, obtivemos J_{ij} em função da distância entre íons.

Note que todas as curvas decrescem com o aumento da distância entre os sítios da rede, o que era de se esperar. Podemos ver que a intensidade das interações são mais acentuadas para os valores das concentrações de portadores da ordem de $8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. A concentração de portadores referente ao valor de $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, expressa-se com valores próximos de zero, o que nos mostra que a diminuição de portadores desfavoreceu a interação.

À medida que se aumenta a polarização (figuras de 4.3 a 4.7), a amostra de maior valor de J_{ij} , vai aumentando sua intensidade de interação. Diante do modelo

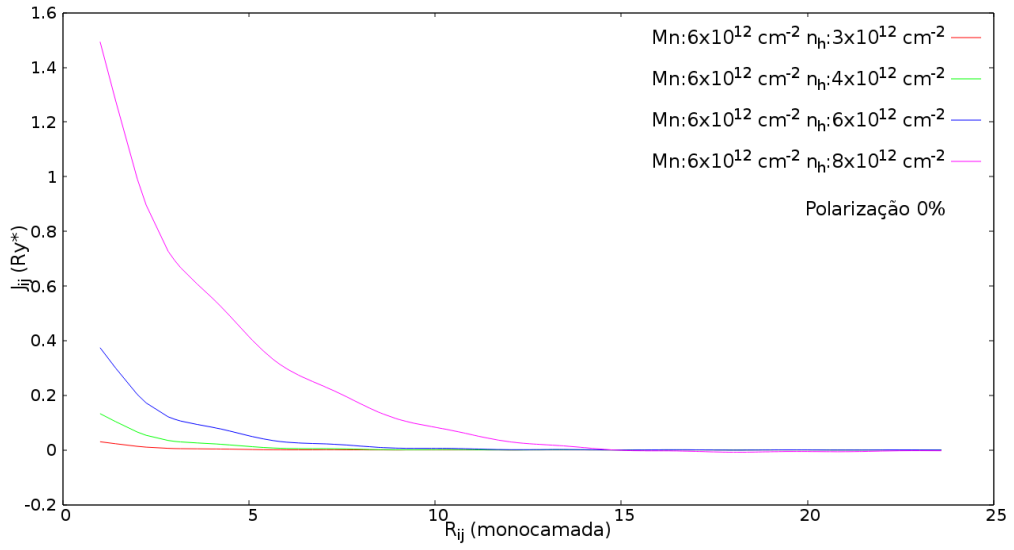


Figura 4.2: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de dopantes (Mn) no valor de $6 \times 10^{12} cm^{-2}$, variando a concentração de portadores, sem polarização.

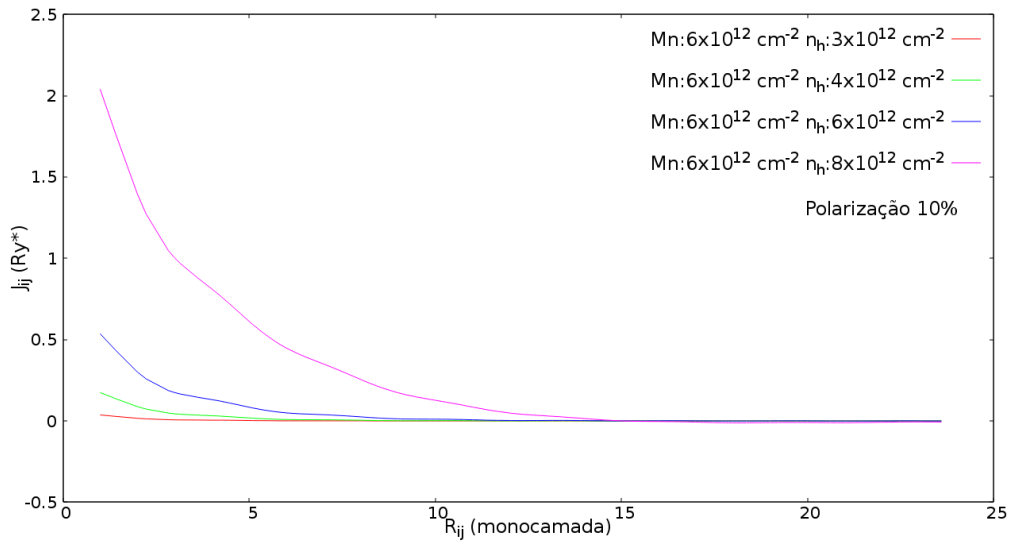


Figura 4.3: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de dopantes (Mn), variando a concentração dos portadores, com 10% de Polarização.

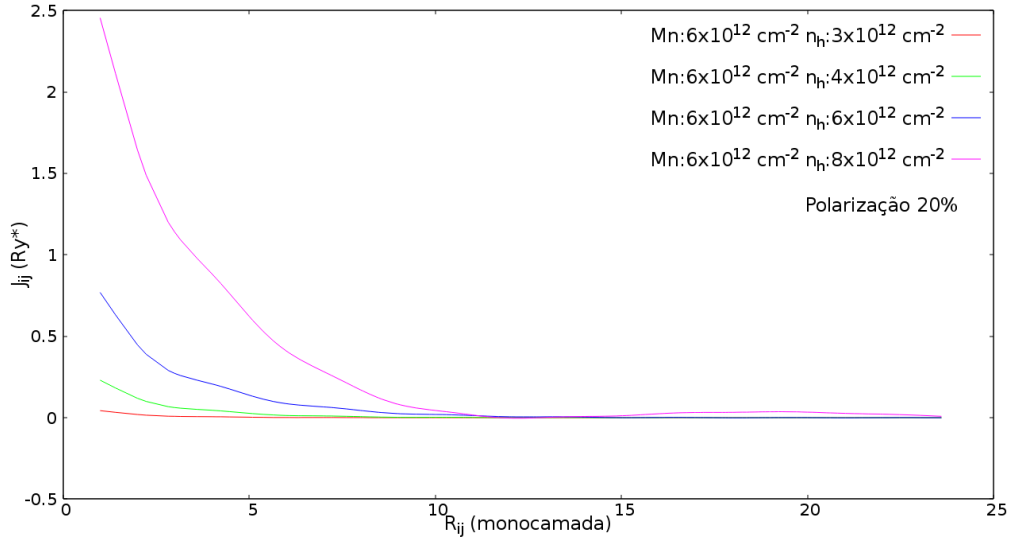


Figura 4.4: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de dopantes (Mn), variando a concentração dos portadores, com 20% de Polarização.

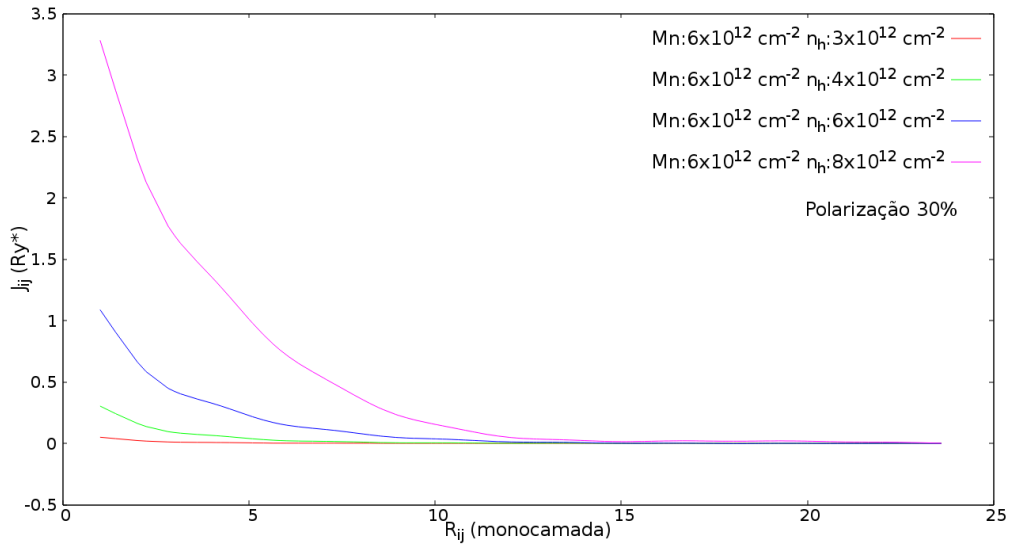


Figura 4.5: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de dopantes (Mn), variando a concentração dos portadores, com 30% de Polarização.

adotado, este aumento se explica pelo fato de a mobilidade dos portadores no nível de Fermi ser maior. Este fato pode ser observado pelas características da função

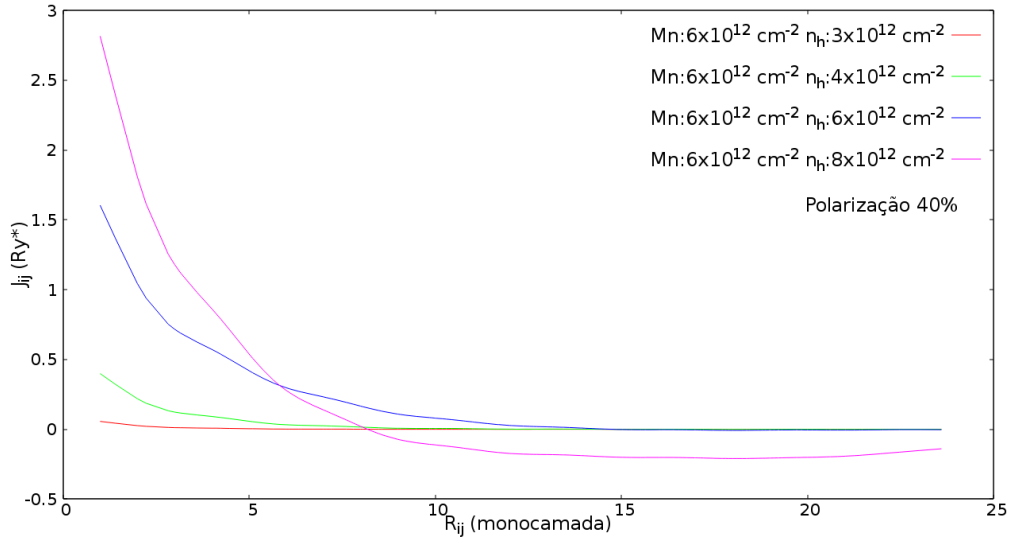


Figura 4.6: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de dopantes (Mn), variando a concentração dos portadores, com 40% de Polarização.

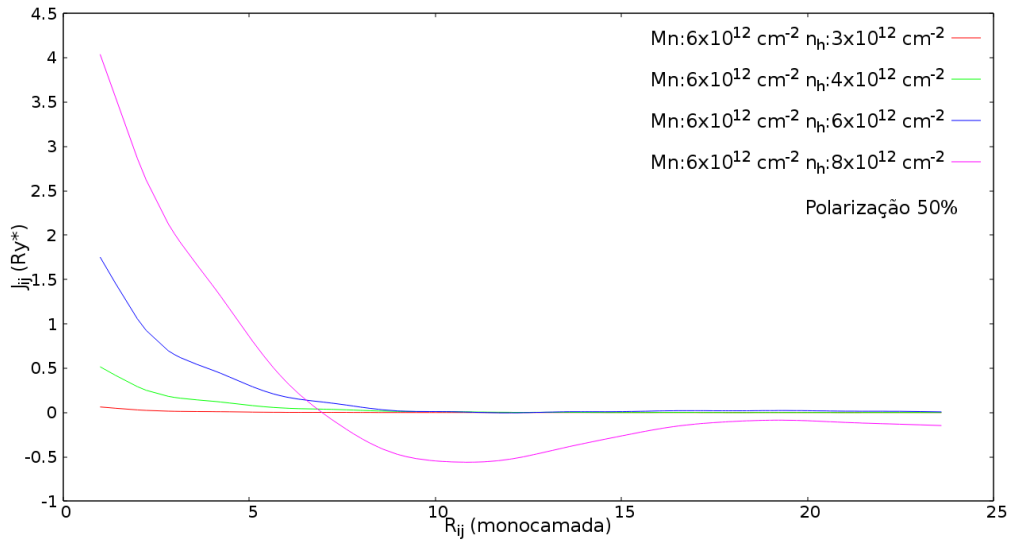


Figura 4.7: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de dopantes (Mn), variando a concentração dos portadores, com 50% de Polarização.

espectral no nível de Fermi, figura 4.8. Os valores de menor concentração de portadores ainda se mantém com baixos valores de J_{ij} , independente do aumento da

polarização, nos mostrando que, para essas concentrações, as interações magnéticas mudam pouco. A expressão analítica da função espectral é dada por:

$$D(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{\pi} \text{Im}[G(\mathbf{k}, E)]$$

Uma forma de estudarmos a mobilidade dos portadores, é analisarmos o formato dos módulos das funções espectrais geradas pelo nosso método analítico. A relação se dá com a largura do pico formado pelo módulo dessas funções, de tal forma que quanto mais estreito for a meia altura deste pico, maior mobilidade dos portadores relacionados àquela função, e quanto mais larga a meia altura deste pico, menor a mobilidade, ou ainda, mais a amostra tende a características de isolante. Na figura 4.8, comparamos diferentes funções espectrais das amostras de maior interesse.

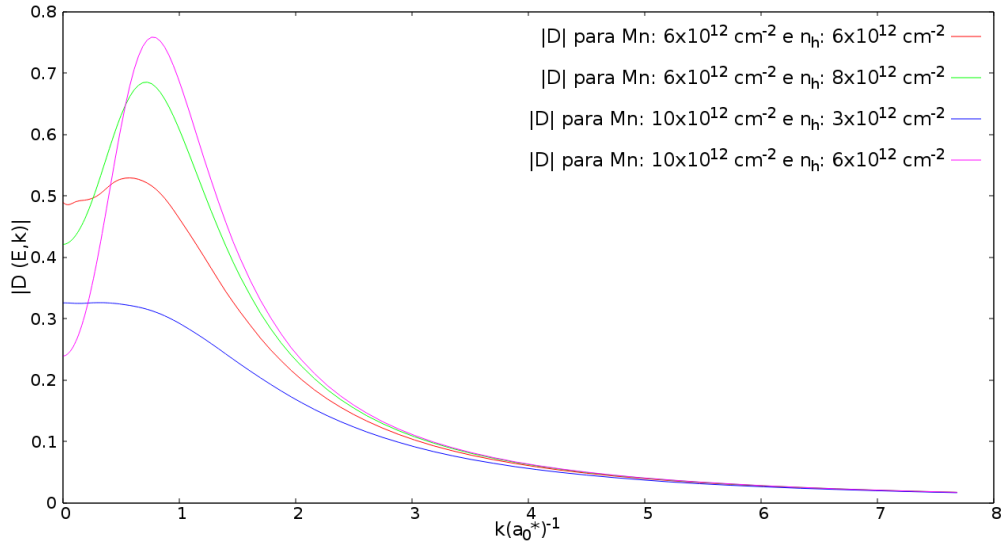


Figura 4.8: Módulo da função espectral $D_{\mathbf{k}}$ por \mathbf{k} de quatro pontos diferentes.

A amostra contendo $Mn = 10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_h = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, possui o pico mais estreito, portanto maior mobilidade, por sua vez, a amostra contendo $Mn = 10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_h = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, possui caráter alongado, com um pico pouco pronunciado e por conta disso tem baixa mobilidade. Vemos na figura 4.8 que a amostra com maior número de portadores não é aquela com maior mobilidade.

Na figura 4.9, aumentamos a concentração de impurezas entre de $6 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ à $12 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, mostrando a relação entre o aumento da concentração de impurezas com a mobilidade, de modo que o aumento do número de manganês aumentando o espalhamento e com isso diminuindo a mobilidade. Provando que a relação entre a inserção de manganês de modo crescente não leva a um aumento contínuo da mobilidade.

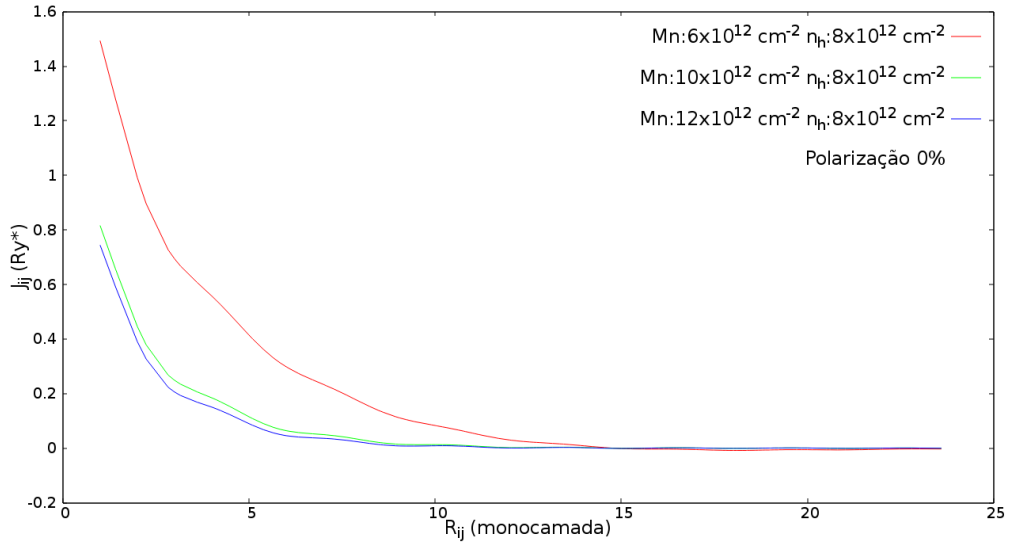


Figura 4.9: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} , variando a densidade Mn , mantendo constante a concentração de portadores a $n_h = 8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$. Sem polarização.

Agora, vejamos na figura 4.10 como se dá o comportamento de J_{ij} pela distância, para uma concentração fixa de dopantes de Mn igual a $10 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, variando novamente a concentração de portadores.

Para uma maior polarização, representada a figura 4.11, observa-se que, novamente, a polarização leva a um aumento da intensidade de J_{ij} .

Para a concentração de manganês em $6 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, observamos que o aumento de portadores favoreceu os valores de J_{ij} , no entanto para o caso $10 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, ao aumentarmos a concentração de portadores acima de certa concentração ($6 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$), há um decréscimo de mobilidade, isso implica que a resposta ao acréscimo

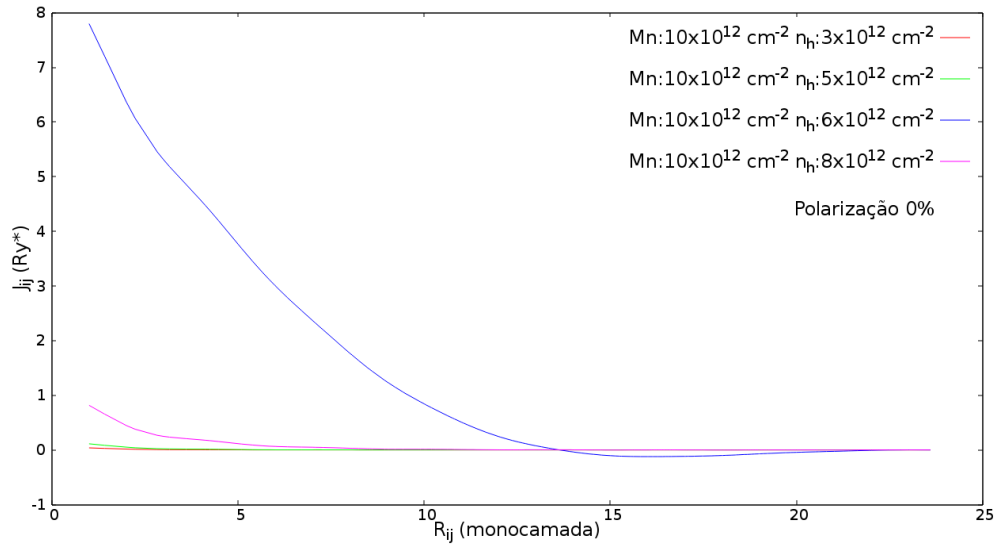


Figura 4.10: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de dopantes (Mn) no valor de $10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de portadores, sem polarização.

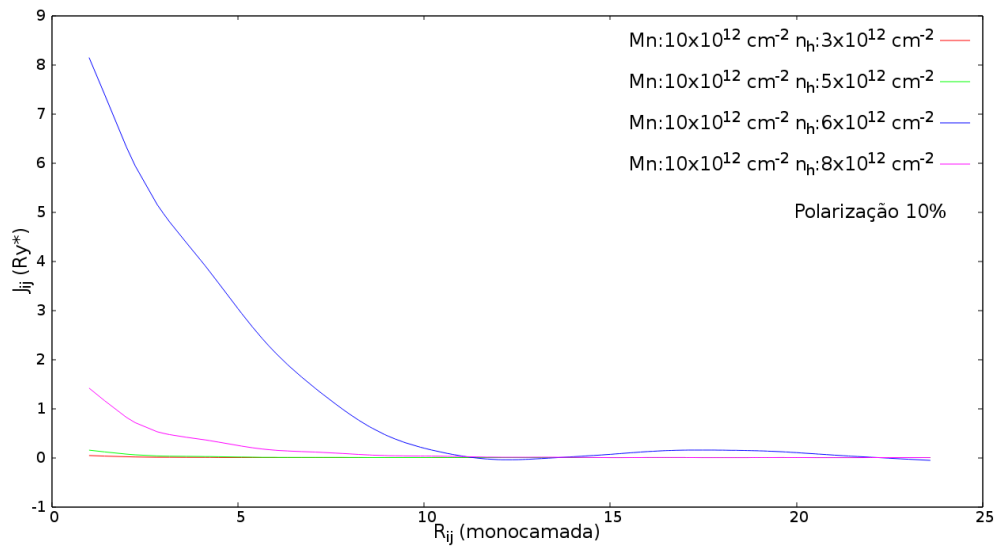


Figura 4.11: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de dopantes (Mn) no valor de $10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de portadores, para uma polarização de 10%.

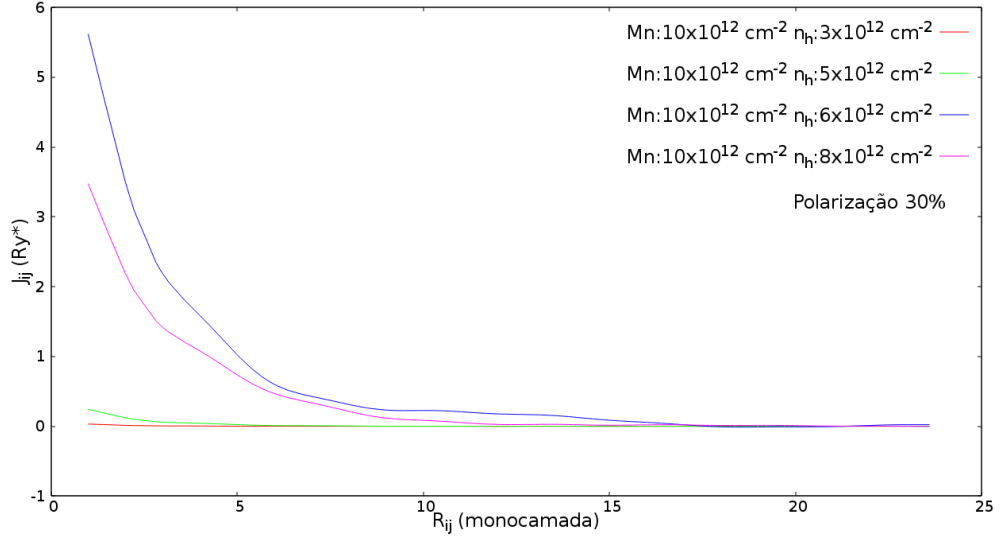


Figura 4.12: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de dopantes (Mn) no valor de $10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de portadores, para uma polarização de 30%.

de portadores não responde linearmente à mobilidade. Esse decréscimo em J_{ij} se deve ao efeito coletivo, resultado do tratamento de muitos corpos. Na figura 4.10, vimos que há uma concentração ótima para o número de portadores, e como estes são devido as impurezas, conseqüentemente há uma concentração ótima de impurezas.

Representando na figura 4.13, comparamos a dependência de J_{ij} pela distância, com relação a variação da concentração de Manganês para $6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, mantendo constante em $n_h = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. O valor de J_{ij} para a concentração de $10 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ de íons de manganês, é ligeiramente maior comparada com a concentração de $6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Isso nos mostra que o aumento de impurezas não altera de modo acentuado as interações dadas por J_{ij} , nesta região onde o conjunto de parâmetros n_i e n_h leva a uma faixa de baixa mobilidade para os portadores.

Está explícito na figura 4.14, onde mantivemos constante os portadores em $n_h = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, que o aumento da concentração de Mn favoreceu o aumento da magnitude da interação. Isto acontece na fase de alta mobilidade. Mas sabemos por trabalhos anteriores [33] apresentado aqui pela figura 4.1, que para certo limite de

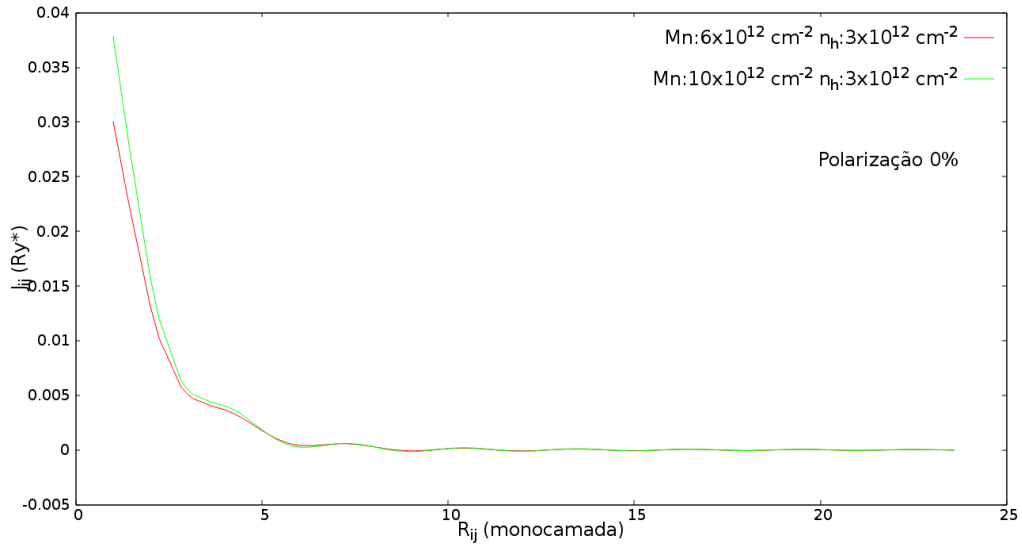


Figura 4.13: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a mesma densidade de portadores no valor de $3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra não polarizada.

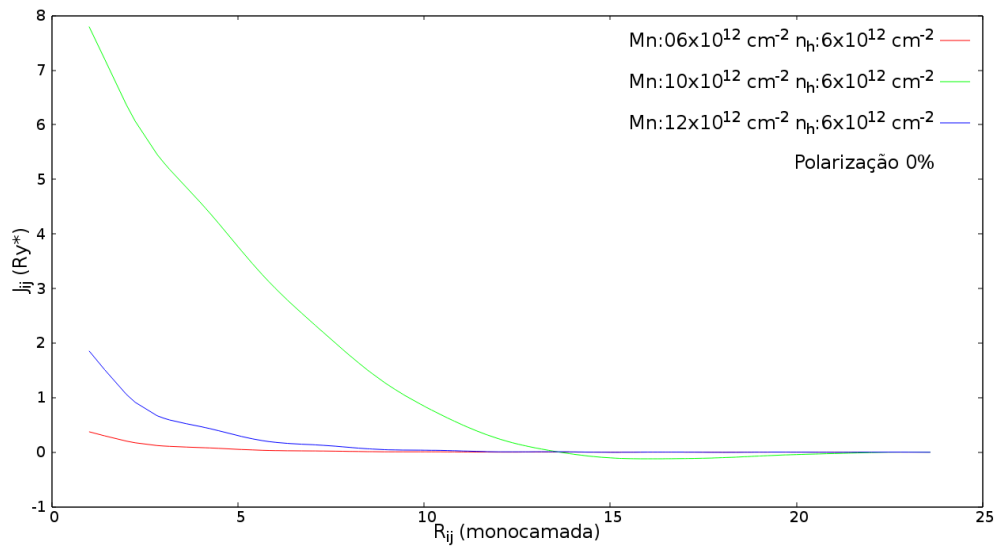


Figura 4.14: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra não polarizada.

impurezas, atinge-se uma saturação e como consequência tem uma diminuição na mobilidade dos portadores.

Temos ainda, para menores concentrações de Mn , mantendo-se constante os portadores em $4 \times 10^{12} cm^{-2}$ e variando entre 5 e $6 \times 10^{12} cm^{-2}$ a concentração de Mn , no caso sem polarização, representado na figura 4.15, e amostras polarizadas entre 10% a 100%.

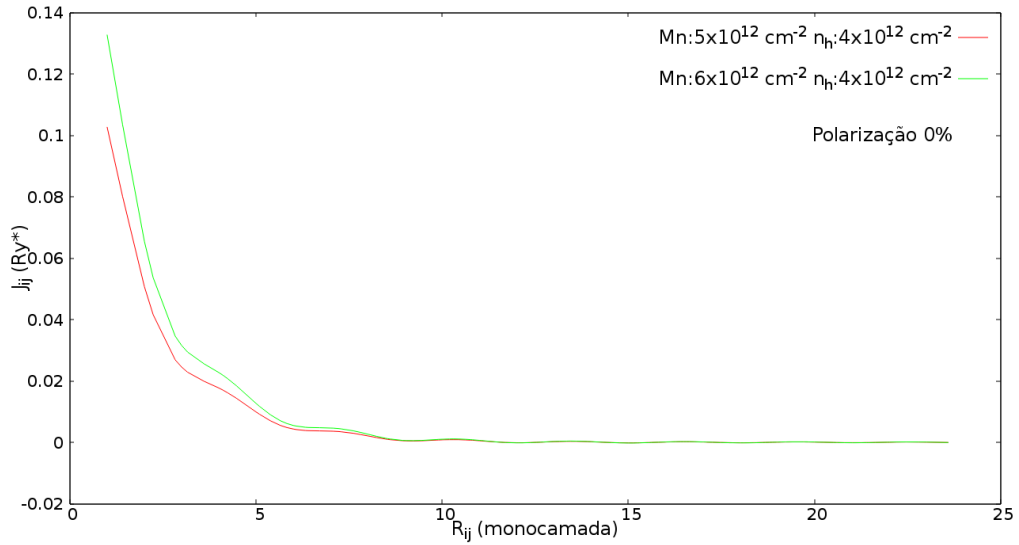


Figura 4.15: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} cm^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra não polarizada.

Notamos claramente que entre os gráficos 4.16 a 4.25, não há uma mudança expressiva em J_{ij} , e que ambas as curvas estão muito próximas, o que implica que nas concentrações tratadas, a resposta não é acentuada quanto em amostras onde as concentrações de portadores são mais elevadas.

Até aqui, pudemos notar que os pontos de maior mobilidade ocorrem em $n_i = 6 \times 10^{12} cm^{-2}$ e $n_h = 8 \times 10^{12} cm^{-2}$ e em $n_i = 10 \times 10^{12} cm^{-2}$ e $n_h = 6 \times 10^{12} cm^{-2}$. Com esses resultados, podemos observar na figura 4.26, que a mobilidade do ponto com $n_i = 10 \times 10^{12} cm^{-2}$ e $n_h = 6 \times 10^{12} cm^{-2}$, é maior.

Veja que para a amostra contendo $n_i = 10 \times 10^{12} cm^{-2}$ e $n_h = 6 \times 10^{12} cm^{-2}$, se

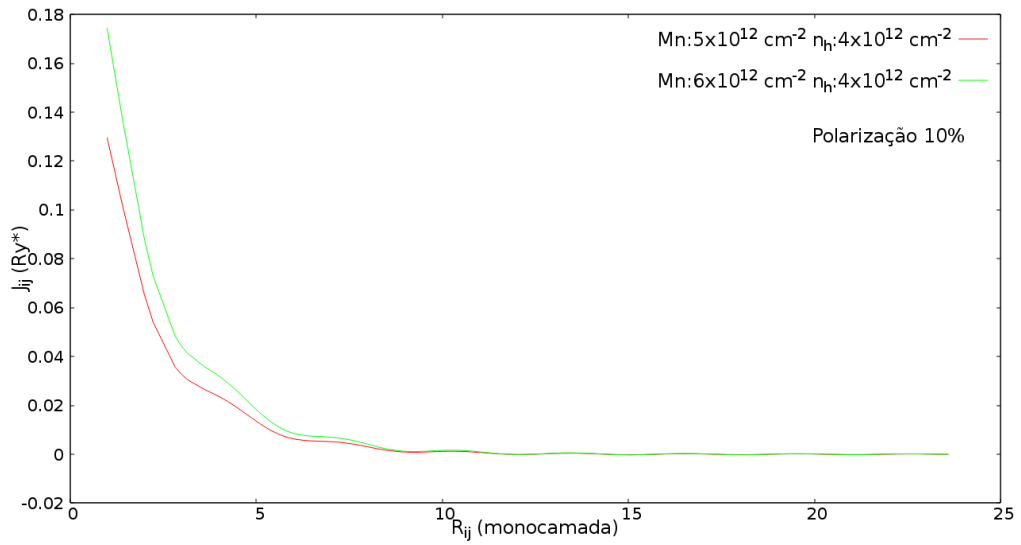


Figura 4.16: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} cm^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 10% polarizada.

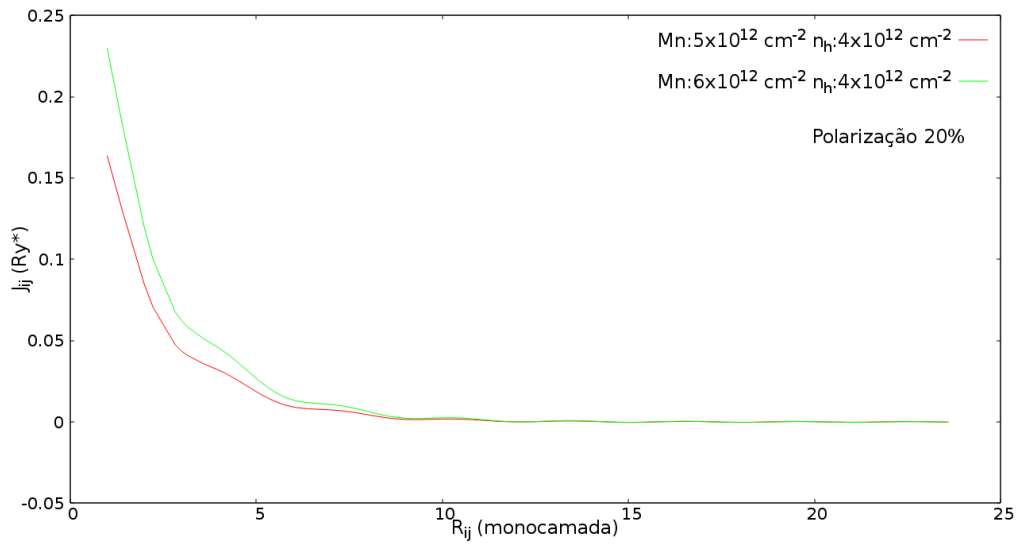


Figura 4.17: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} cm^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 20% polarizada.

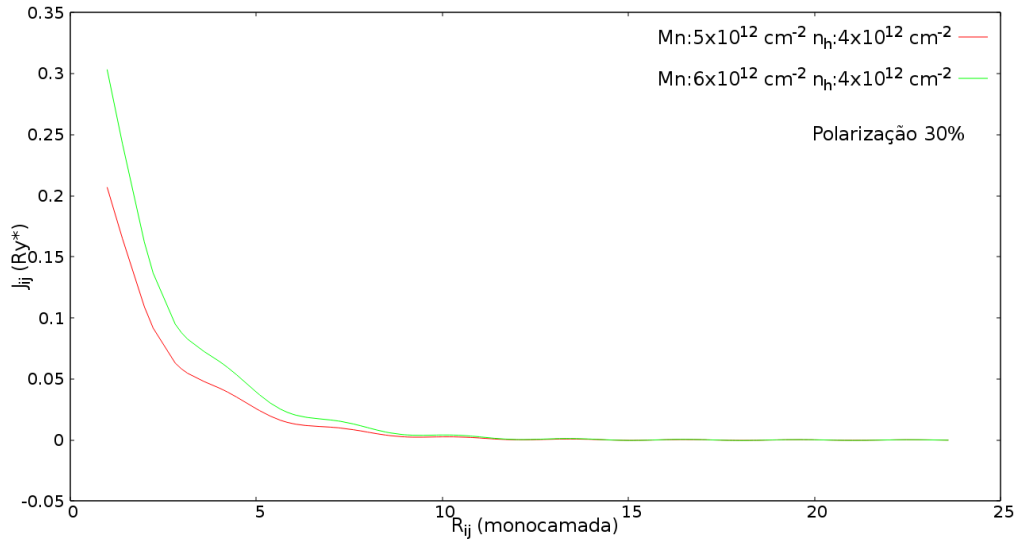


Figura 4.18: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} cm^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 30% polarizada.

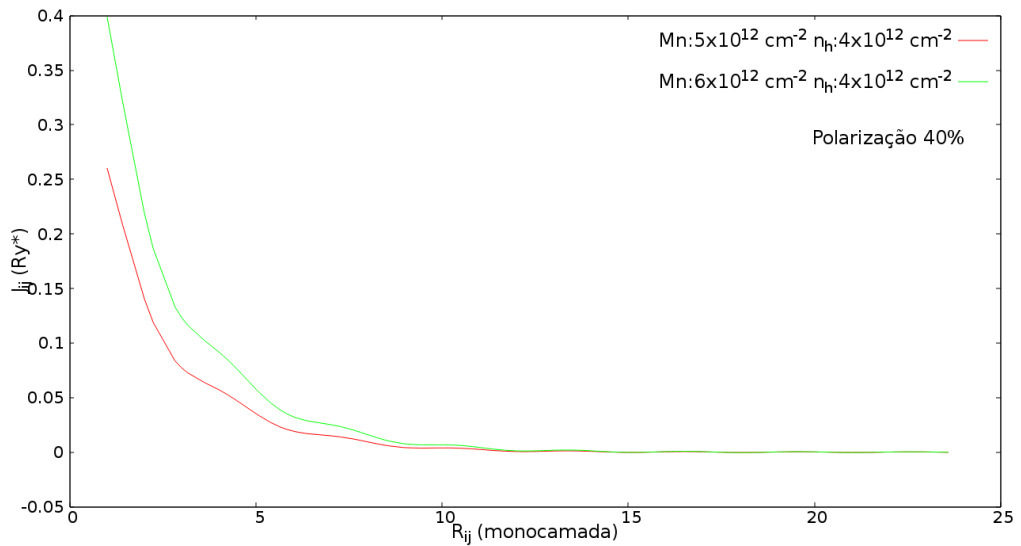


Figura 4.19: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} cm^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 40% polarizada.

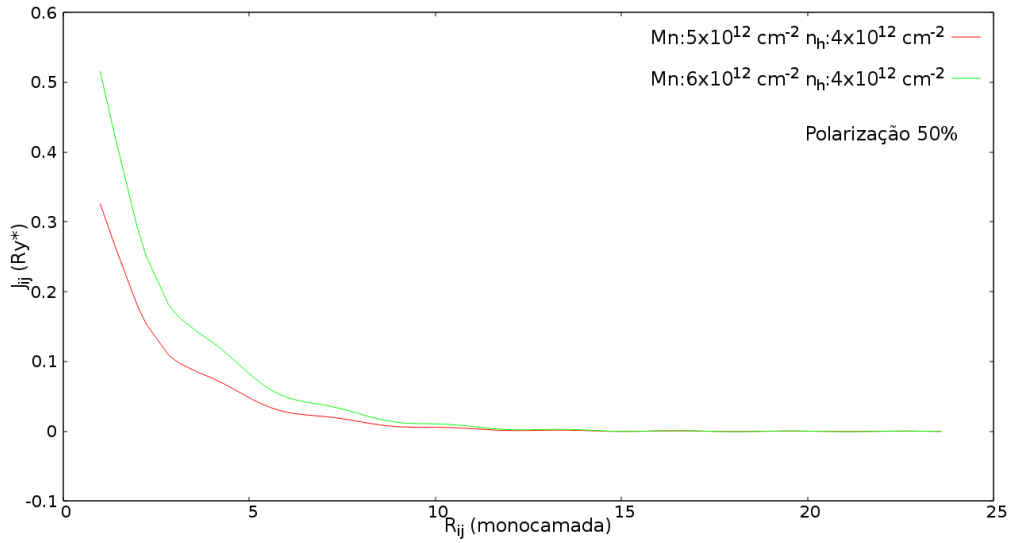


Figura 4.20: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 50% polarizada.

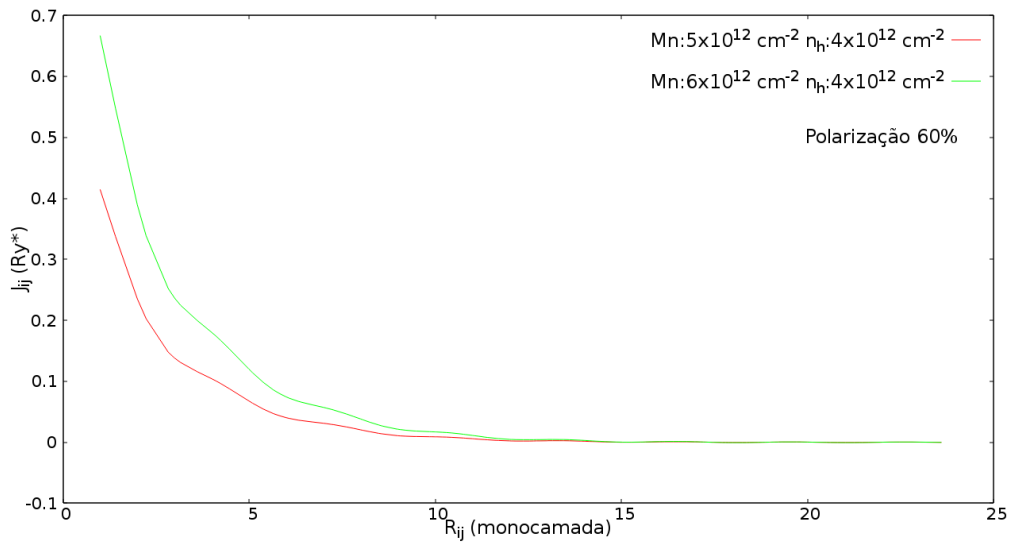


Figura 4.21: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 60% polarizada.

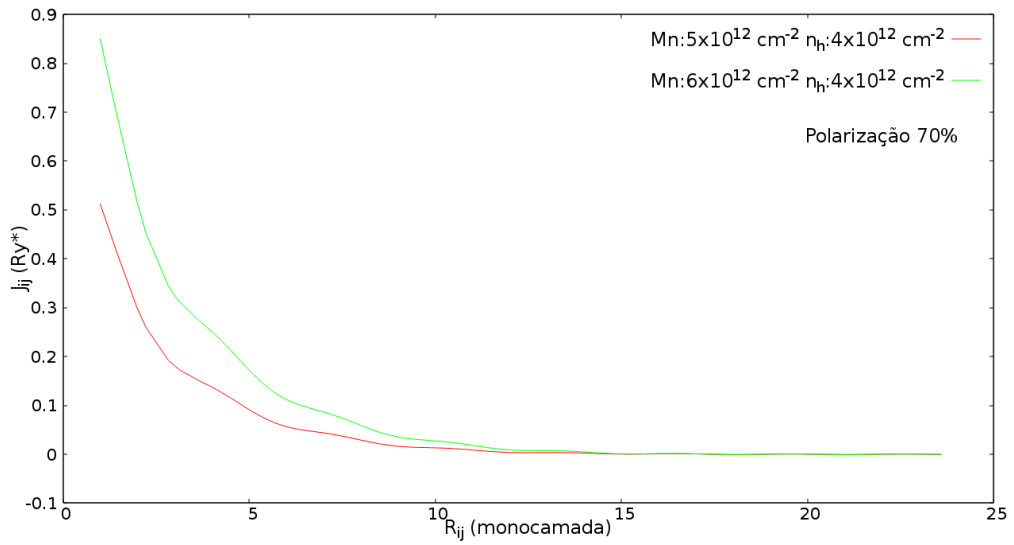


Figura 4.22: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 70% polarizada.

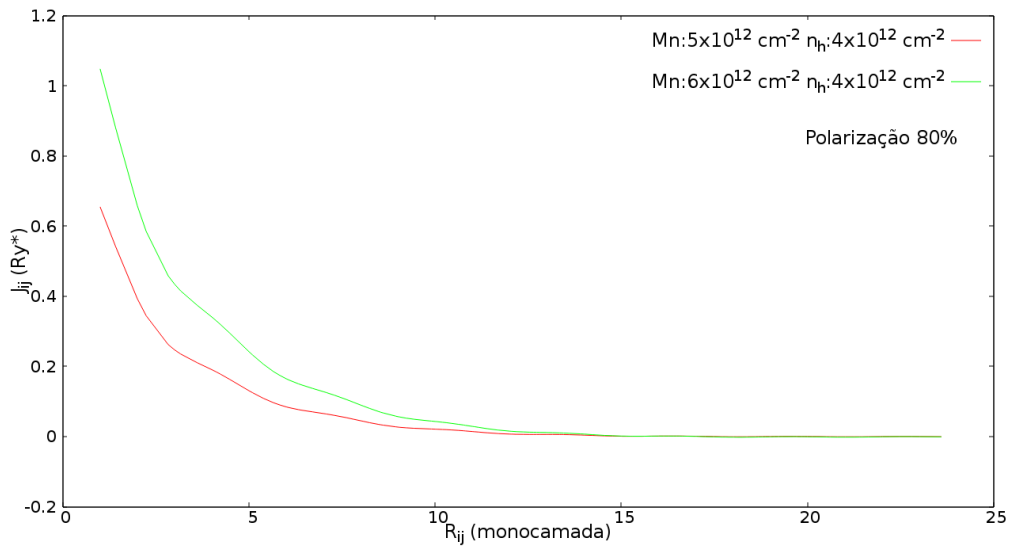


Figura 4.23: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 80% polarizada.

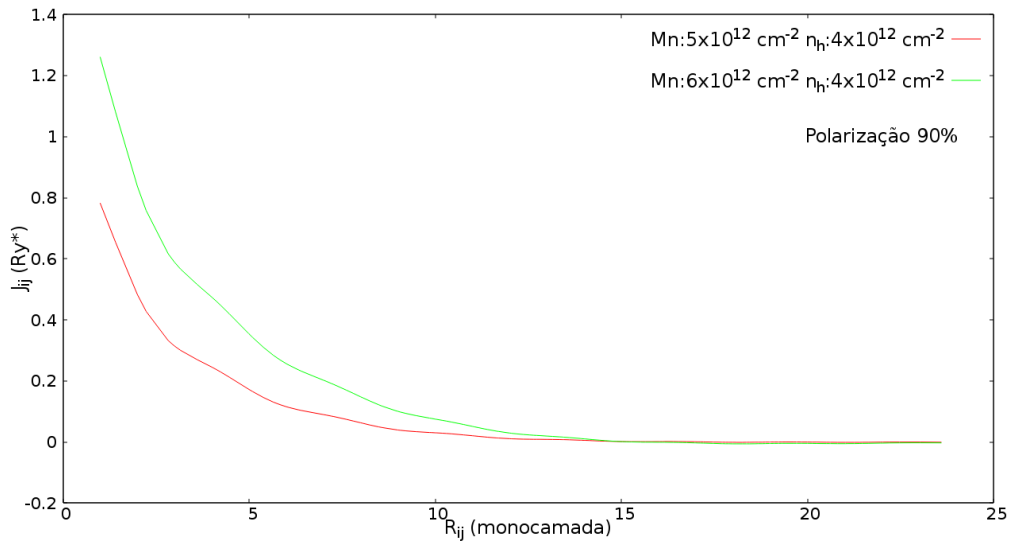


Figura 4.24: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 90% polarizada.

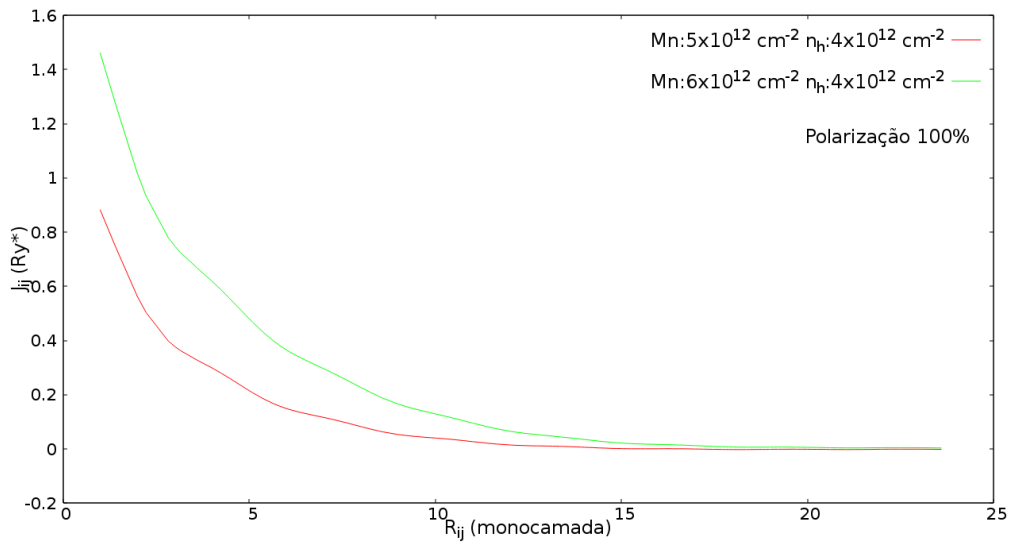


Figura 4.25: Comportamento de J_{ij} pela distância R_{ij} para a densidade constante de portadores no valor de $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, variando a concentração de Mn . Amostra 100% polarizada.

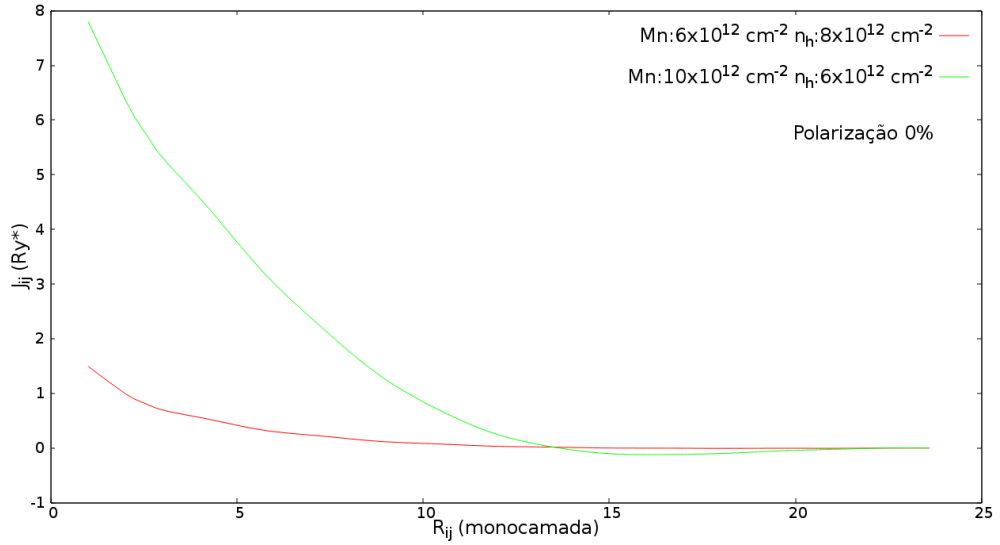


Figura 4.26: Comparação do valor de J_{ij} entre os pontos de maior mobilidade. Sem polarização.

apresenta com valores bem mais elevados de J_{ij} , mostrando que esse ponto é mais favorável à mobilidade dos portadores. Para valores mais elevados de polarização, a amostra de maior concentração de Mn, se mostra com maior mobilidade (figura 4.28).

A densidade de estado (DOS da sigla em inglês, density of states) é o número de estados em determinado intervalo de energia, no caso dos estados acessíveis dos portadores, sua expressão analítica pode ser dada como

$$DOS = \frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im}[G(\mathbf{k}, E)].$$

Nos será útil neste ponto, mostrarmos a densidade de estados para compararmos a mobilidade de amostras que possuem valores elevados de J_{ij} . Comparamos a densidade de estados para dois tipos de amostras, uma bem definida, com baixa concentração de dopantes, apresentando bandas de impurezas e condução bem separadas, com outras duas amostras com densidade de impurezas mais elevadas.

A medida em que vamos dopando o material, essas bandas vão se fundindo de tal forma que os portadores podem saltar para a banda de condução mais facilmente,

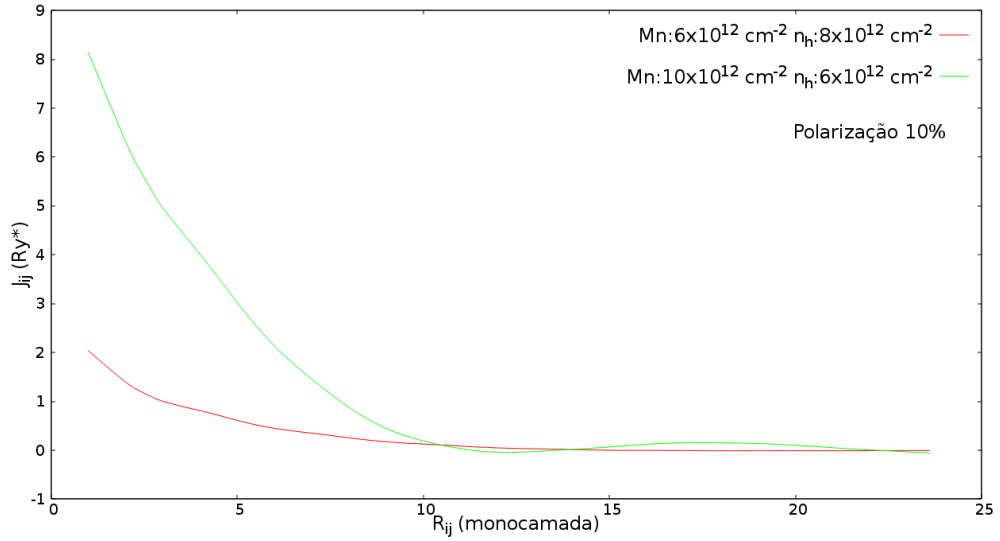


Figura 4.27: Comparação do valor de J_{ij} entre os pontos de maior mobilidade. Amostra 10% polarizada.

pois o nível de Fermi se desloca em sentido da banda de condução, aumentando sua mobilidade e conseqüentemente sua interação.

Além do deslocamento do nível de Fermi, as bandas vão se tornando cada vez menos distintas uma da outra, até se tornarem curvas mais suaves, observado nas figuras 4.29 e 4.30.

Em concordância com o que temos dito a respeito da densidade de estados, podemos citar um trabalho Ghazali e Serre [34], que comprova de modo satisfatório, os resultados expostos aqui. Mostra-se que quanto maior a densidade de dopantes, mais as curvas das bandas de impurezas e condução tendem a se fundirem.

Com a aproximação do espalhamento múltiplo, inserindo na função de Green convergida a aproximação em primeira ordem da autoenergia magnética, ganhamos a quebra de degenerescência dos estados de spins, e com isso o deslocamento do nível de Fermi, como visto nas figuras 4.31 e 4.32. O deslocamento do nível de Fermi, favorece a interação devido ao incremento do número de portadores de alta mobilidade.

Nas figuras 4.31, 4.32, temos diferentes níveis de Fermi para duas polarizações

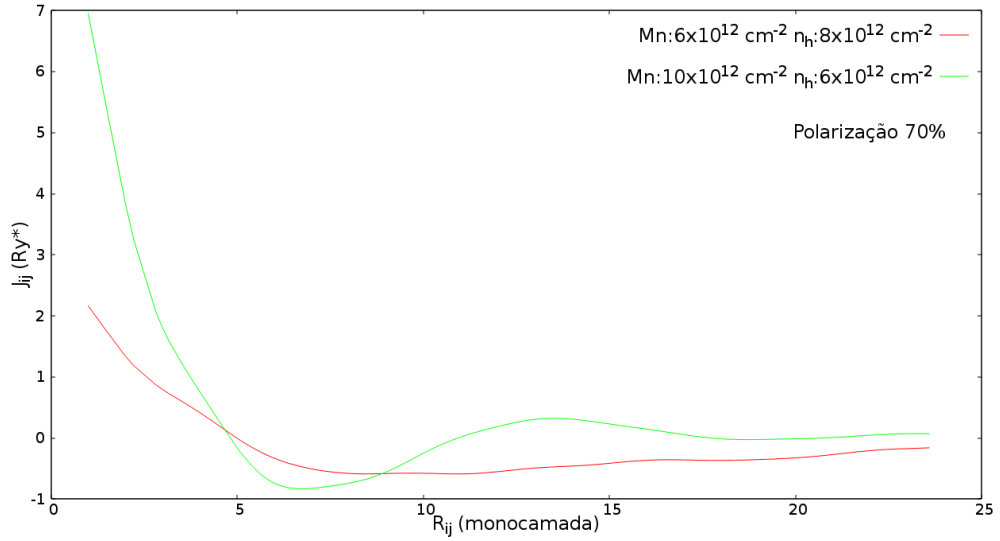


Figura 4.28: Comparação do valor de J_{ij} entre os pontos de maior mobilidade. Amostra 80% polarizada.

diferentes, uma a 50% e outra a 100% respectivamente, para a concentração de $n_i = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_h = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Na tabela 4.2, fazemos a comparação dos dados obtidos através do método aqui desenvolvido, e o mapa de cores dado em [31], e que está representado na figura 4.1, à polarização de 0%. A tabela mostra a primeira coluna contendo as diferentes concentrações de Mn [$n_i (10^{12} \text{ cm}^{-2})$], enquanto a primeira linha mostra a concentração de portadores [$n_s (10^{12} \text{ cm}^{-2})$]. Os elementos da tabela mostram a mobilidade (figura 4.1) seguida do valor teórico de J_{ij} , encontrado no trabalho, para a região de 2.5 monocamadas.

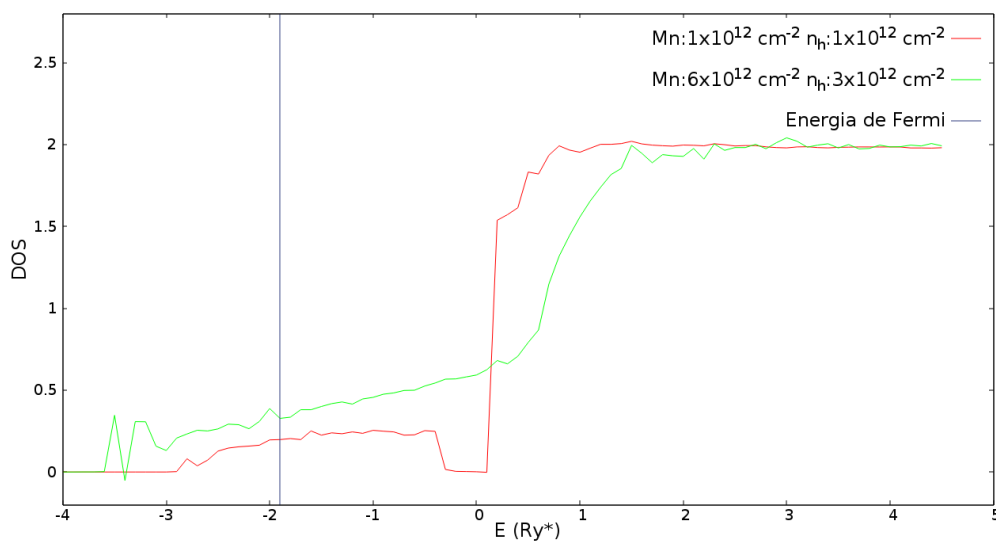


Figura 4.29: Densidade de estados pela energia. Deslocamento da energia de Fermi para uma amostra contendo $Mn = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_h = 3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

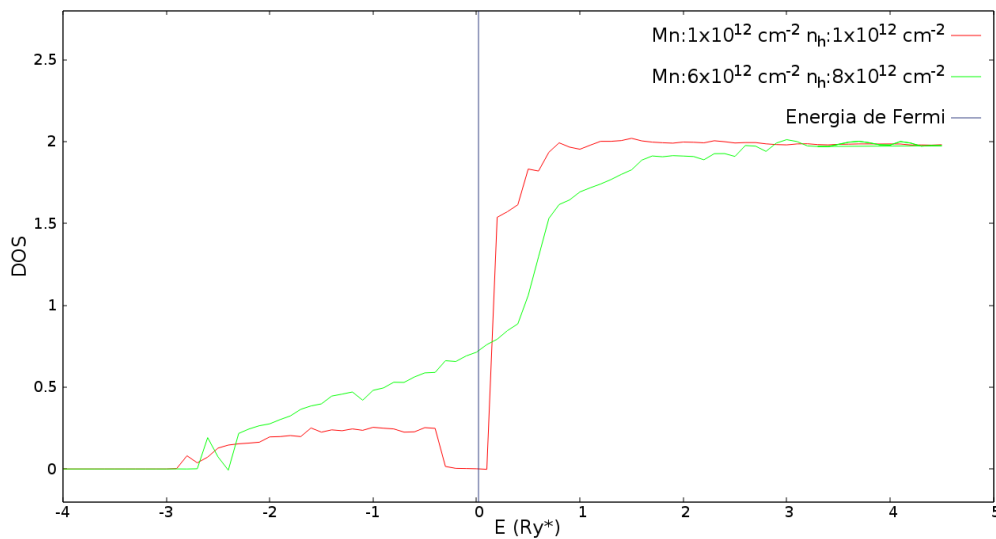


Figura 4.30: Densidade de estados pela energia. Deslocamento da energia de Fermi para uma amostra contendo $Mn = 6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_h = 8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

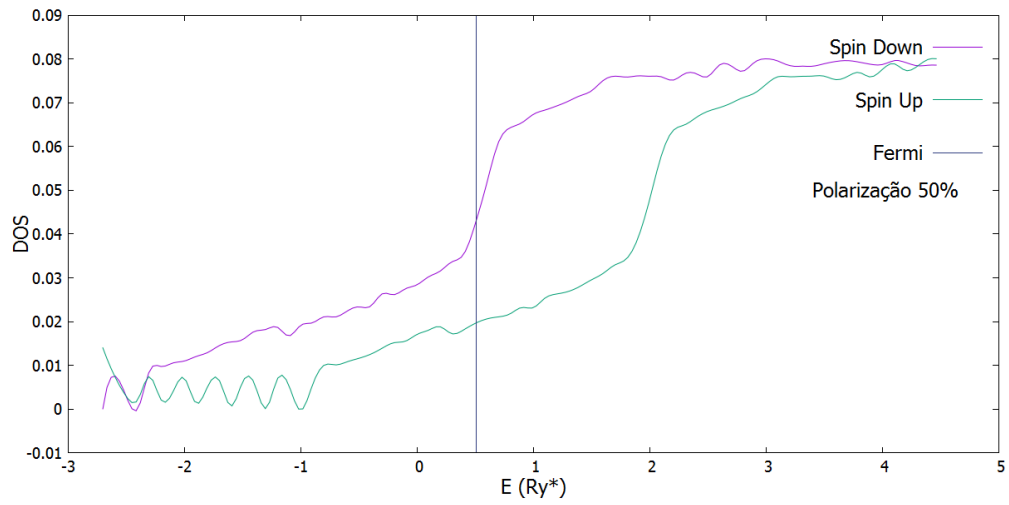


Figura 4.31: Densidade de estados pela energia, mostrando o nível de Fermi para a amostra contendo $n_i = 6 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e $n_h = 8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, a uma polarização de 50%.

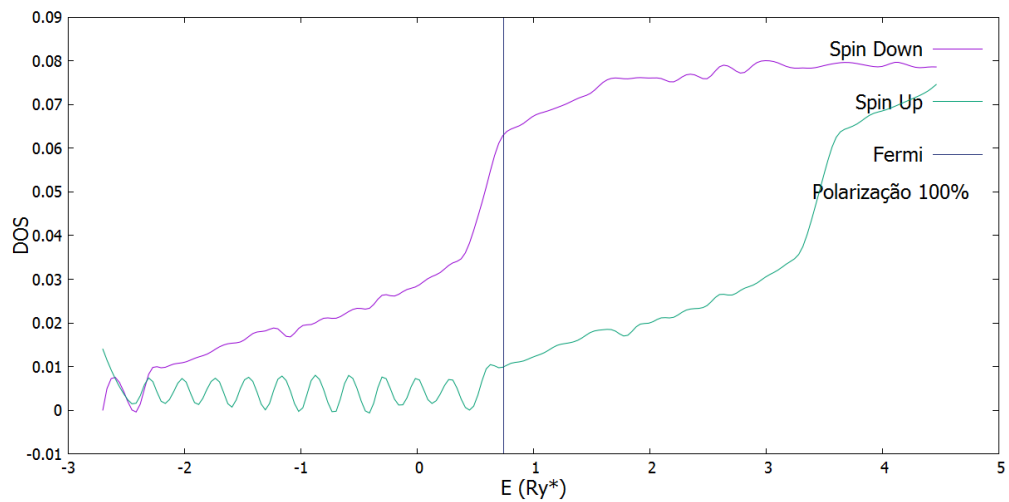


Figura 4.32: Densidade de estados pela energia, mostrando o nível de Fermi para a amostra contendo $n_i = 6 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$ e $n_h = 8 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$, a uma polarização de 100%.

Tabela 4.2: Comparação entre a intensidade de J_{ij} (Ry*) calculado para a distância de 2,5 monocamadas e a mobilidade μ (0.0 – 1.0) do mapa de cores, para a polarização de 0%.

$n_s(10^{12}cm^{-3})$	3		4		5		6		8	
$n_i(10^{12}cm^{-3})$	μ	J_{ij}	μ	J_{ij}	μ	J_{ij}	μ	J_{ij}	μ	J_{ij}
5	-	0.375	0.0375	-	-	-	-	-	-	-
6	0.125	0	0.375	0.1	-	-	0.625	0.4	0.875	0.9
10	0	0	-	-	0.625	0	0.875	5.7	0.75	0.45
12	0	0.1	-	-	-	-	0.75	1	0.5	0.3

Capítulo 5

Conclusão

Neste trabalho, nos propomos tratar de modo concomitante, propriedades magnéticas e elétricas de um DMS, em particular, o *GaMnAs*. Para ambas as interações, trabalhamos com o formalismo das funções de Green. Usamos a aproximação do espalhamento múltiplo para tratar o espalhamento coulombiano dos portadores pelos íons de Mn, e o formalismo desenvolvido por W. Nolting para descrever um hamiltoniano efetivo para a interação magnética.

Estas aproximações nos permitiram reproduzir a associação da intensidade das interações magnéticas com o caráter de mobilidade dos portadores.

Como resultado geral, pudemos estabelecer que para as regiões de maior mobilidade de portadores, as interações J_{ij} são mais intensas. O incremento da concentração de portadores nem sempre acarreta num aumento da interação magnética. Há um cruzamento intrincado dos efeitos dos parâmetros $n_i \times n_h$. Para regiões de alta mobilidade devido a concentração de íons, vimos que um seu incremento também não equivale ao favorecimento da mobilidade. Se fossemos traçar um mapa de cores da intensidade do termo de troca efetivo (J_{ij}) para um raio fixo, reproduziríamos com fidelidade, o mapa de cores da mobilidade apresentado na figura 4.1.

Como perspectivas futuras, temos o tratamento completamente auto-consistente dos espalhamentos magnéticos e coulombianos.

Referências Bibliográficas

- [1] H. Ohno. Making nonmagnetic semiconductors ferromagnetic. *Science*, 281(5379):951–956, 1998.
- [2] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College, Philadelphia, 1976.
- [3] A. Oiwa, S. Katsumoto, A. Endo, M. Hirasawa, Y. Iye, H. Ohno, F. Matsukura, A. Shen, and Y. Sugawara. Nonmetal-metal-nonmetal transition and large negative magnetoresistance in (Ga, Mn)As/GaAs. *Solid State Communications*, 103(4):209 – 213, 1997.
- [4] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, and Y. Iye. (Ga,Mn)As: A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs. *Applied Physics Letters*, 69(3):363–365, 1996.
- [5] F. Matsukura, H. Ohno, A. Shen, and Y. Sugawara. Transport properties and origin of ferromagnetism in (Ga,Mn)As. *Phys. Rev. B*, 57:R2037–R2040, Jan 1998.
- [6] Janusz Sadowski, and Piotr Dłużewski, and Sławomir Kret, and Elżbieta Janik, and Elżbieta Łusakowska, and Janusz Kanski, and Adam Presz, and Ferial Terki, and Salam Charar, and and Dong Tang GaAsMn nanowires grown by molecular beam epitaxy of (Ga,Mn)As at MnAs segregation conditions. *Nano Letters*, 7:2724–2728, Aug 2007.
- [7] M. Berciu, R. Chakarvorty, Y. Y. Zhou, M. T. Alam, K. Traudt, R. Jakiela, A. Barcz, T. Wojtowicz, X. Liu, J. K. Furdyna, and M. Dobrowolska. Origin

- of magnetic circular dichroism in GaMnAs: Giant zeeman splitting versus spin dependent density of states. *Phys. Rev. Lett.*, 102:247202, Jun 2009.
- [8] Shinobu Ohya, Iriya Muneta, and Masaaki Tanaka. Quantum-level control in a iii-v-based ferromagnetic-semiconductor heterostructure with a GaMnAs quantum well and double barriers. *Applied Physics Letters*, 96(5), 2010.
- [9] Shinobu Ohya, Iriya Muneta, Pham Nam Hai, and Masaaki Tanaka. Valence-band structure of the ferromagnetic semiconductor GaMnAs studied by spin-dependent resonant tunneling spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 104:167204, Apr 2010.
- [10] V. Novák, K. Olejník, J. Wunderlich, M. Cukr, K. Výborný, A. W. Rushforth, K. W. Edmonds, R. P. Campion, B. L. Gallagher, Jairo Sinova, and T. Jungwirth. Curie point singularity in the temperature derivative of resistivity in (Ga,Mn)As. *Phys. Rev. Lett.*, 101:077201, Aug 2008.
- [11] A. M. Nazmul, T. Amemiya, Y. Shuto, S. Sugahara, and M. Tanaka. High temperature ferromagnetism in GaAs-based heterostructures with mn δ doping. *Phys. Rev. Lett.*, 95:017201, Jun 2005.
- [12] F Matsukura, M Sawicki, T Dietl, D Chiba, and H Ohno. Magnetotransport properties of metallic (Ga,Mn)As films with compressive and tensile strain. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 21(2-4):1032 – 1036, 2004. Proceedings of the Eleventh International Conference on Modulated Semiconductor Structures.
- [13] T. Jungwirth, Jairo Sinova, J. Mašek, J. Kučera, and A. H. MacDonald. Theory of ferromagnetic (iii,mn)v semiconductors. *Rev. Mod. Phys.*, 78:809–864, Aug 2006.
- [14] B. L. Sheu, R. C. Myers, J.-M. Tang, N. Samarth, D. D. Awschalom, P. Schiffer, and M. E. Flatté. Onset of ferromagnetism in low-doped $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$. *Phys. Rev. Lett.*, 99:227205, Nov 2007.

- [15] J. F. Xu, S. W. Liu, Min Xiao, and P. M. Thibado. Growth of and optical emission from GaMnAs thin films grown by molecular beam epitaxy. *Journal of Vacuum Science and Technology B*, 25(4):1467–1469, 2007.
- [16] Toshiki Kanaki, Hirokatsu Asahara, Shinobu Ohya, and Masaaki Tanaka. Spin-dependent transport properties of a GaMnAs-based vertical spin metal-oxide-semiconductor field-effect transistor structure. *Applied Physics Letters*, 107(24), 2015.
- [17] B. Lv, J. Wang, J. Yu, H. Mao, Y. Shen, Z. Zhu, and H. Xing. Enhancement of Curie temperature under low electric fields in Mn selectively δ -doped GaAs /AlGaAs wide quantum wells. *Applied Physics Letters*, 90(14):142513, April 2007.
- [18] T. Jungwirth, Jairo Sinova, A. H. MacDonald, B. L. Gallagher, V. Novák, K. W. Edmonds, A. W. Rushforth, R. P. Campion, C. T. Foxon, L. Eaves, E. Olejník, J. Mašek, S.-R. Eric Yang, J. Wunderlich, C. Gould, L. W. Molenkamp, T. Dietl, and H. Ohno. Character of states near the fermi level in (Ga,Mn)As: Impurity to valence band crossover. *Phys. Rev. B*, 76:125206, Sep 2007.
- [19] K. Olejník, M. H. S. Owen, V. Novák, J. Mašek, A. C. Irvine, J. Wunderlich, and T. Jungwirth. Enhanced annealing, high curie temperature, and low-voltage gating in (Ga,Mn)As: A surface oxide control study. *Phys. Rev. B*, 78:054403, Aug 2008.
- [20] E. Dias Cabral, M. A. Boselli, R. Oszwaldowski, I. Žutić, and I. C. da Cunha Lima. Electrical control of magnetic quantum wells: Monte carlo simulations. *Phys. Rev. B*, 84:085315, Aug 2011.
- [21] Matthias Mayr, Gonzalo Alvarez, and Elbio Dagotto. Global versus local ferromagnetism in a model for diluted magnetic semiconductors studied with monte carlo techniques. *Phys. Rev. B*, 65:241202, Jun 2002.

- [22] Adam C. Durst, R. N. Bhatt, and P. A. Wolff. Bound magnetic polaron interactions in insulating doped diluted magnetic semiconductors. *Phys. Rev. B*, 65:235205, Jun 2002.
- [23] D. Neumaier, M. Turek, U. Wurstbauer, A. Vogl, M. Utz, W. Wegscheider, and D. Weiss. All-electrical measurement of the density of states in (Ga,Mn)As. *Phys. Rev. Lett.*, 103:087203, Aug 2009.
- [24] D. Neumaier, M. Schlapps, U. Wurstbauer, J. Sadowski, M. Reinwald, W. Wegscheider, and D. Weiss. Electron-electron interaction in one- and two-dimensional ferromagnetic (Ga, Mn)As. *Phys. Rev. B*, 77:041306, Jan 2008.
- [25] W Nolting, S Rex, and S Mathi Jaya. Magnetism and electronic structure of a local moment ferromagnet. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 9(6):1301, 1997.
- [26] C. Santos and W. Nolting. Ferromagnetism in the kondo-lattice model. *Phys. Rev. B*, 65:144419, Mar 2002.
- [27] Wolfgang Nolting and Anupuru Ramakanth. *Quantum Theory of Magnetism*. Springer Heidelberg Dordrecht London New York, London, New York, 2009.
- [28] M. Born. Quantenmechanik der Stoßvorgänge. *Zeitschrift für Physik*, 38:803–827, November 1926.
- [29] E. Dias Cabral, I. C. Cunha Lima, M. A. Boselli, A. T. Cunha Lima, and A. Ghazali. The non-metal-to-metal and vice-versa transitions in a GaMnAs layer. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 20(6):421–427, 2007.
- [30] Gerald D. Mahan. *Many-Particle Physics*. Plenum, New York, N.Y., 2nd edition, 1993.
- [31] E. Dias Cabral, M. A. Boselli, A. T. da Cunha Lima, A. Ghazali, and I. C. da Cunha Lima. On the nature of the spin-polarized hole states in a quasi-two-dimensional GaMnAs ferromagnetic layer. *Applied Physics Letters*, 90(14), 2007.

- [32] J. Serre and A. Ghazali. From band tailing to impurity-band formation and discussion of localization in doped semiconductors: A multiple-scattering approach. *Phys. Rev. B*, 28:4704–4715, Oct 1983.
- [33] E. Dias Cabral, I. C. da Cunha Lima, M. A. Boselli, and A. T. da Cunha Lima. Impurity bands and the character of the electronic states in ferromagnetic GaMnAs layers. *Applied Physics Letters*, 93(11), 2008.
- [34] A. Ghazali and J. Serre. Multiple-scattering approach to the formation of the impurity band in semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 48:886–889, Mar 1982.