

Tayroni Francisco de Alencar Alves

***Propriedades Físicas de um Gás de Elétrons 2D na
Presença de um Campo Magnético Inclinado***

Fortaleza

11 de Dezembro de 2008

Tayroni Francisco de Alencar Alves

***Propriedades Físicas de um Gás de Elétrons 2D na
Presença de um Campo Magnético Inclinado***

Tese apresentada ao Curso de Pós-graduação
em Física da Universidade Federal do Ceará
como parte dos requisitos para a obtenção do
Título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho

Co-orientador:

Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida

UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Fortaleza

11 de Dezembro de 2008

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

A482p Alves, Tayroni Francisco de Alencar.

Propriedades físicas de um gás de elétrons 2D na presença de um campo magnético inclinado / Tayroni Francisco de Alencar Alves. – 2008.
126 f. : il.

Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2008.

Orientação: Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho.

Coorientação: Prof. Dr. Nilson Sena de Almeida.

1. Propriedades físicas. 2. Gás de elétrons 2D. 3. Campo magnético inclinado. I. Título.

CDD 530

*à Etevaldo Muniz Alves (in memoriam)
e à Maria Lêda de Alencar Alves*

Agradecimentos

Ao meu orientador, Prof. Raimundo Nogueira da Costa Filho, pela ajuda, orientação, paciência e compreensão durante o decorrer deste trabalho.

Ao Prof. Nilson Sena Almeida, por toda a ajuda, imprescindível na conclusão desta Tese.

À minha esposa, Sandra Alves, por todo o carinho e apoio.

Aos meus pais, Etevaldo Muniz Alves e Maria Lêda de Alencar Alves. Agradeço a eles tudo que sou.

Aos meus amigos da pós-graduação, Teldo Anderson, George Frederick, Daniela Maionchi, Demétrius, Saulo David, Erneson, Roberval, Bruno Abagaro, Acrísio Lins, Eduardo Girão, Ana Tereza, J.J., Danila Tavares, Daniel Valim, Luis Araripe, Valmir, Neudson, Emerson e Roberto Sena, por todos os bons momentos juntos.

À Sofia, Yeda, Paulo Roberto, Francinanda, Mário e Pe. Samuel Brandão, por todas as boas lembranças que carregarei de agora em diante.

A Deus, começo e fim de toda a minha vida.

“...Gloria in excelsis Deo et in terra pax hominibus bonæ voluntatis...”

– Lc II, 14 –

Resumo

Investigamos os efeitos da interação spin-órbita do tipo Rashba e do tipo Dresselhaus e de um potencial com modulação periódica unidimensional sobre as propriedades físicas de um gás de elétrons bidimensional, na presença de um campo magnético externo constante e inclinado com respeito a direção de confinamento. O sistema é caracterizado pelos parâmetros que determinam a intensidade e direção do campo magnético, as intensidades das interações Rashba e Dresselhaus, a intensidade e periodicidade do potencial e o número de partículas por m^2 . Soluções da equação de Schrödinger foram obtidas para diferentes conjuntos de parâmetros, o que nos permitiu a obtenção da densidade de estados e energia de Fermi do sistema para cada conjunto. A obtenção destes resultados possibilitou a análise das condutividades Hall, colisional e difusiva, a energia livre e a magnetização na direção do campo em função da inclinação e do módulo do campo externo e a análise da importância relativa da interação Zeeman, da interação spin-órbita e da modulação periódica unidimensional sobre estas propriedades. Observamos modulações na densidade de estados devidas à interação spin-órbita. Este comportamento também é observado no comportamento dos observáveis que dependem das variáveis dinâmicas do sistema. Além disso, também observamos que a condutividade Hall é quantizada no caso da ausência da modulação periódica, interação spin-órbita e campo paralelo à direção de crescimento, podendo assumir somente valores múltiplos de e^2/h . Na presença de uma componente do campo paralela a região em que o gás se encontra confinado ou da interação spin-órbita, surgem *plateaus* intermediários $(2n + 1)e^2/(2h)$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n + 1$. Ao se incluir a modulação periódica, a condutividade Hall passa a ter valores contínuos entre dois *plateaus* quaisquer. Também obtivemos que a modulação periódica torna não-nula a contribuição da difusão para a condutividade.

Abstract

We investigate the effects of the spin-orbit interactions (both Rashba and Dresselhaus type), and a potential with one-dimensional periodic modulation on the physical properties of a non interacting bidimensional electron gas, in the presence of a tilted external d.c. magnetic field. The system is characterized by a set of parameters that determine the intensity and direction of the magnetic field, the intensities of the interactions Rashba and Dresselhaus, the intensity and periodicity of the potential and the number of particles for m^2 . Solutions of the equation of Schrödinger had been obtained for different sets of parameters, and this allowed us to calculate the density of states and the Fermi energy of the system, for each set of parameters. These results made possible the analysis of the conductivity, free energy, and magnetization in the direction of the field as a function of the inclination and the intensity of the external field and to analyze the relative importance of the Zeeman, spin-orbit interactions, and the one-dimensional periodic potential on these properties. We observe modulation in the density of states due to the spin-orbit interactions. This behavior also is observed in the behavior of observables that depend on the dynamic variables of the system. Moreover, we also observe that the Hall conductivity is quantized in the absence of the periodic modulation, interaction spin-orbit and parallel field to the growth direction, and only assume multiple values of e^2/h . In the presence of component the magnetic field parallel to the region where the gas is confined and/or spin-orbit interaction, there are intermediate plateaus $(2n+1) e^2/(2h)$ between any plateaus of order n and $n+1$. The presence of a periodic potential, makes possible the Hall conductivity have continuous values between two consecutive plateaus. Also we got that the periodic modulation makes the contribution the diffusivity to the conductivity have a finite value.

Sumário

1	Introdução	p. 10
2	GE2D na presença de um campo magnético inclinado: Efeitos da ISOR	p. 15
2.1	O Hamiltoniano	p. 16
2.1.1	Caso 1: ISOR e Campo Magnético na direção de Crescimento	p. 20
2.1.2	Caso Particular 2: Ausência de ISOR e Campo Inclinado	p. 21
2.2	Níveis de Energia, Densidade de Estados e Energia de Fermi	p. 22
2.3	Condutividade Hall	p. 31
2.4	Condutividade σ_{yy}	p. 36
2.5	Energia Livre de Helmholtz e Magnetização na direção do Campo	p. 43
2.6	Conclusões Parciais	p. 44
3	GE2D na presença de um campo magnético inclinado: Efeitos da ISOD	p. 49
3.1	O Hamiltoniano	p. 49
3.1.1	Caso 1: Ausência de ISOR	p. 51
3.1.2	Caso 1: Ausência de ISOR e Campo Magnético na direção de Crescimento	p. 52
3.2	Níveis de Energia, Densidade de Estados e Energia de Fermi	p. 53
3.3	Condutividade Hall	p. 58
3.4	Condutividade σ_{yy}	p. 65
3.5	Energia Livre de Helmholtz e Magnetização na direção do Campo	p. 66
3.6	Conclusões Parciais	p. 69

4	GE2D na presença de um campo magnético inclinado: Efeitos da MP1D	p. 74
4.1	O Hamiltoniano	p. 75
4.2	Níveis de Energia, Densidade de Estados e Energia de Fermi	p. 76
4.3	Condutividade Hall	p. 83
4.4	Condutividade σ_{yy}	p. 84
4.5	Condutividade difusiva σ_{xx}^{dif}	p. 87
4.6	Energia Livre de Helmholtz e Magnetização na direção do Campo	p. 88
4.7	Conclusões Parciais	p. 91
5	Conclusões	p. 97
	Apêndice A – Método das Frações Continuadas	p. 100
A.1	Método das Frações Continuadas	p. 100
A.2	Sumário dos Resultados deste Apêndice	p. 102
	Apêndice B – Propriedades de Transporte e Teoria Cinética de Boltzmann	p. 104
B.1	Preliminares	p. 104
B.2	Equações cinéticas para a parte diagonal e não-diagonal do operador Densidade	p. 107
B.3	Comportamento Assintótico do Operador Densidade	p. 109
B.3.1	Equação Cinética para a Parte Diagonal do Operador Densidade	p. 110
B.3.2	Equação Cinética para a Parte Não-Diagonal do Operador Densidade	p. 113
B.3.3	Equação Cinética Total do Operador Densidade	p. 114
B.4	Equação Cinética de Boltzmann para a Interação Elétron-Fônon	p. 115
B.4.1	Equação cinética de Boltzmann: Contribuição Diagonal	p. 118
B.4.2	Equação cinética de Boltzmann: Contribuição Não-Diagonal	p. 120
B.5	Sumário dos Resultados deste Apêndice	p. 121
	Glossário	p. 123

1 Introdução

Em sistemas como o MOSFET (Metal-Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) de Silício ou heteroestruturas do tipo GaAs/AlGaAs, mostrados na Fig. (1.1), encontramos elétrons que se comportam como um gás de elétrons em duas dimensões (GE2D). O avanço das técnicas de crescimento de materiais, como por exemplo, a MBE (Molecular Beam Epitaxy) ou a MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition) permitiu o desenvolvimento destes sistemas e atraiu o interesse para o GE2D através da descrição de suas propriedades de transporte com vista a aplicação em dispositivos. Merece destaque no estudo do GE2D a medição da condutividade Hall em um MOSFET de silício, realizadas por von Klitzing e colaboradores em 1980 e que resultaram no premio Nobel de 1985[1] devido a descoberta do efeito Hall quântico. Este efeito é caracterizado por *plateaus* bem definidos nas curvas da condutividade Hall. O experimento mostrou que esta grandeza pode assumir apenas valores múltiplos de e^2/h (com um erro de uma parte em 10^6) onde h e e são, respectivamente, a constante de Planck e a carga do elétron. Apesar da ênfase em descrever o resultado obtido como uma maneira precisa de se determinar a constante e^2/h , este trabalho despertou o interesse pela aplicação deste efeito em dispositivos, iniciando uma nova linha de pesquisa.

A possibilidade de aplicação do efeito Hall quântico exige uma compreensão mais completa do GE2D no que diz respeito as interações presentes. Dentre estas, merecem destaque a interação Zeeman, spin-órbita (ISO) e o potencial periódico a que os elétrons estão submetidos devido a própria estrutura cristalina. Dependendo da densidade eletrônica, a interação elétron-elétron pode ser importante para o entendimento das propriedades físicas do GE2D, mas neste trabalho consideramos sistemas com densidades tais que nos permite desprezar esta interação e descreve-los como um conjunto de partículas não interagentes.

A interação Zeeman é o acoplamento entre o momento magnético do elétron e um campo magnético externo, cuja expressão é dada por

$$-\frac{g\mu_B\hbar}{2}\vec{B}\cdot\vec{\sigma}. \quad (1.1)$$

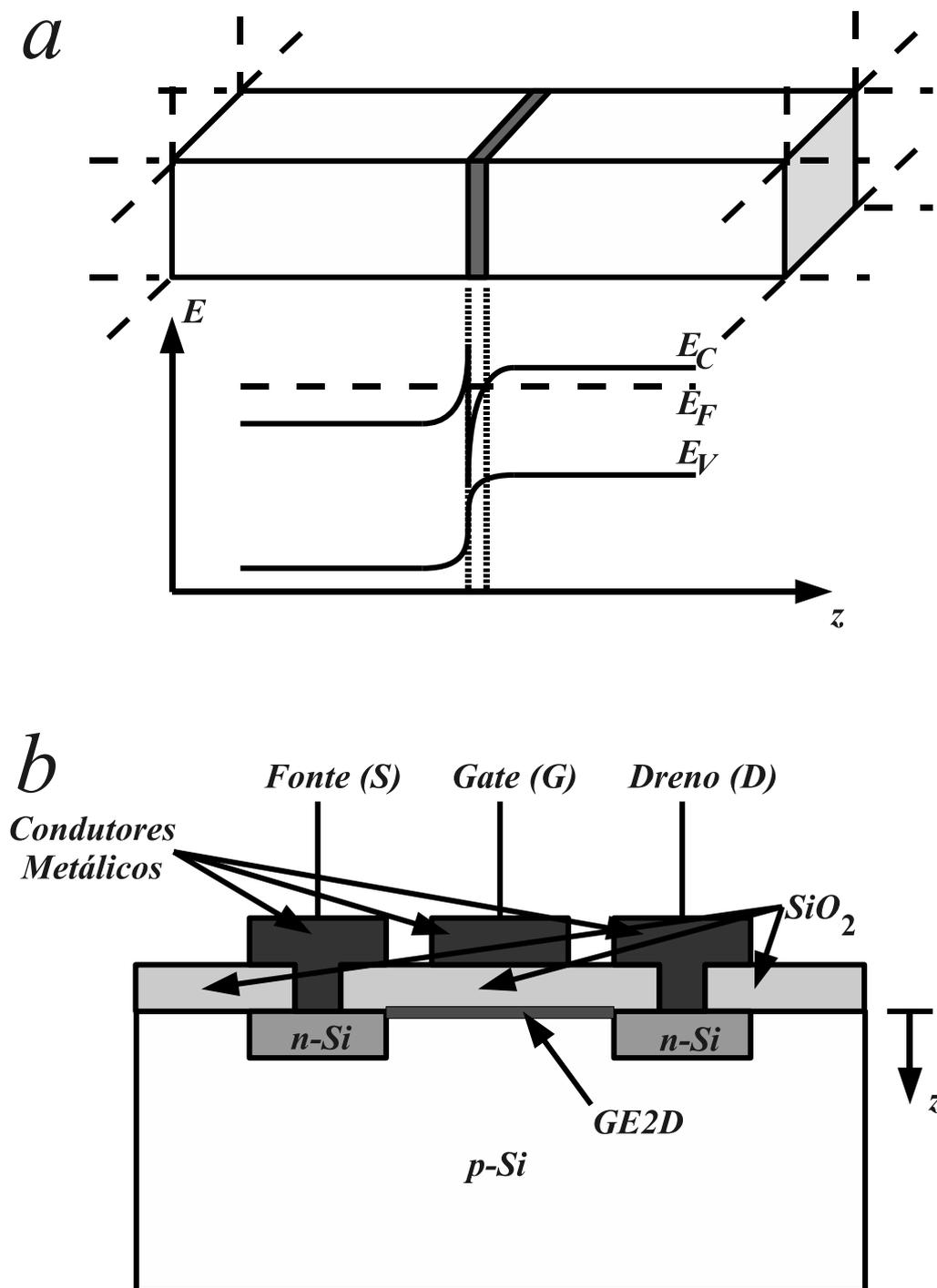


Figura 1.1: (a) GE2D em uma heteroestrutura onde E_C , E_V e E_F são, respectivamente, a energia da banda de condução, energia da banda de valência e a energia de Fermi do semiconductor. O GE2D se encontra confinado na heterojunção $p-n$ por um potencial igual a diferença entre a energia da banda de condução e a energia de Fermi do semiconductor. Em geral, o potencial confinante não é simétrico com respeito a interface da heteroestrutura. (b) Esquema de um MOSFET de silício. O GE2D é formado na interface entre o semiconductor e o óxido isolante, assinalado na figura.

Devido a interação Zeeman, a polarização dos auto-estados depende da direção do campo magnético externo. Para um campo magnético orientado na direção de crescimento do cristal, os auto-estados correspondentes aos níveis de Landau possuem polarização S^z definida. Isto deixa de acontecer para campos magnéticos em direções intermediárias entre a direção de crescimento e a região quasi-bidimensional onde os elétrons se encontram confinados. Portanto, a interação Zeeman oferece a possibilidade de se manipular sistemas de forma reversível através do momento angular intrínseco (spin) das partículas constituintes. A manipulação das propriedades de um sistema através do spin é um dos aspectos centrais da spintrônica[2–7] e vários efeitos e dispositivos baseados no controle das propriedades de GE2D através do momento angular intrínseco foram propostos nos últimos anos. Um exemplo é o transistor de spin[6], e sua recente versão não balística[7].

A ISO, por sua vez, é o acoplamento entre o momento angular intrínseco das partículas com o seu movimento orbital. A expressão para a ISO é dada por

$$\frac{\hbar}{4m^2c^2} (\vec{\nabla}V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma}, \quad (1.2)$$

onde V representa um potencial elétrico. Apesar da correção introduzida por esta interação nas auto-energias representar uma pequena fração de seus valores, ela possui um papel de destaque por ser responsável pela quebra da degenerescência associada ao spin na ausência de campo magnético externo. Evidências desta quebra da degenerescência do GE2D foram observadas em heteroestruturas do tipo GaAs/AlGaAs[8, 9] e poços quânticos do tipo GaSb-InAs-GaSb[10, 11]. Consideramos, neste trabalho, dois tipos de ISO, presentes no GE2D[12]:

- A interação spin-órbita do tipo Rashba (ISOR)[13], expressa por

$$H_R = \frac{\hbar E_z}{4m^2c^2} (\vec{\sigma} \times \vec{v})_z = \frac{\alpha_R}{\hbar} (\vec{\sigma} \times \vec{v})_z, \quad (1.3)$$

onde \vec{v} é o operador velocidade do elétron e α_R é o parâmetro de controle. A ISOR surge devido a assimetria do potencial confinante ao longo da direção de crescimento. Nas condições mostradas na Fig.(1.1-a), vemos que a energia de Fermi na região em que o GE2D se encontra confinado corresponde a um potencial confinante assimétrico, dando origem a interação mencionada.

- A interação spin-órbita do tipo Dresselhauss (ISOD), que surge devido a assimetria da estrutura do material. É conhecido que, devido a ausência de centro de inversão, o potencial também é assimétrico e as auto-energias sofrem correções proporcionais a k e a k^3 [14] onde k é proporcional ao momento linear. Desprezando o acoplamento proporcional a k^3 ,

a ISOD é escrita como[14]

$$H_D = \frac{\alpha_D}{\hbar} (\vec{\sigma} \cdot \vec{v}). \quad (1.4)$$

Ressaltamos que a intensidade da ISO no material pode ser controlada através de técnicas utilizadas para crescimento de materiais nanoestruturados[15–21], que permitem ajustar o potencial confinante, tornando-a um instrumento eficiente de manipulação dos auto-estados do sistema. As interações ISOR e ISOD têm sido extensivamente estudadas em face da possível aplicação em dispositivos[22–36] e suas respectivas intensidades α_R e α_D podem ser medidas através das oscilações na condutividade σ_{xx} , chamadas oscilações de Shubnikov-de Hass[10, 11, 17, 22, 37, 38], do estudo da de-localização em magneto-transporte[39] e, mais recentemente, através da análise ótica da precessão dos spins dos elétrons[40].

O potencial periódico se deve a periodicidade da estrutura que confina os elétrons, mas também pode ser induzido externamente através da fotocondutividade em heteroestruturas de $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$ [41] ou através da inserção de uma grade composta por fitas metálicas paralelas na superfície de inversão ou na superfície da heteroestrutura onde o GE2D se encontra confinado[42] combinada a um campo elétrico externo. Os efeitos induzidos externamente podem produzir uma modulação periódica 1D (MP1D) estudada neste trabalho.

Em sistemas onde há uma MP1D presente, o tensor condutividade $\sigma_{\mu\nu}$ tem um comportamento oscilatório com um padrão distinto das oscilações de Shubnikov-de Hass, tanto no período de oscilação, como na dependência com a temperatura[43–46]. Estas oscilações magneto-resistivas, denominadas oscilações de Weiss[41], são o resultado da comensurabilidade entre o raio ciclotrônico e o período da modulação no potencial. A importância da MP1D no desenvolvimento de dispositivos[47, 48] deve-se a possibilidade de novos efeitos que podem ser induzidos externamente, como, por exemplo, magnetorresistência gigante em um GE2D com modulações magnéticas externas[49].

Apesar do grande número de trabalhos dedicados ao estudo do GE2D[47, 48, 50–53], ainda se está longe do completo entendimento do papel do momento angular intrínseco, da ISO e da MP1D sobre as propriedades de transporte e termodinâmicas destes sistemas. Até o presente, não existe uma análise sistemática destas interações sobre as propriedades físicas do GE2D.

O efeito e a importância relativa destas interações poderá permitir o desenvolvimento de sistemas reversivelmente ajustáveis. Para isto, se faz necessário a realização do estudo comparativo dos efeitos da interação Zeeman, ISO e da MP1D sobre um GE2D e este é o principal objetivo deste trabalho. Nele, consideramos um GE2D composto de partículas não-interagentes e investigamos a importância relativa destas interações, assim como os efeitos da presença de

uma componente do campo magnético externo paralelo à região que contém os elétrons. Para isto, investigamos a influência destas interações sobre os níveis de energia, a energia de Fermi e as propriedades de transporte e termodinâmicas do sistema.

No Capítulo 2, mostramos os resultados dos efeitos da ISOR em um GE2D na presença de um campo magnético inclinado. No Capítulo 3 inserimos o termo correspondente a ISOD e analisamos a influência relativa da ISOD e da ISOR em um GE2D na presença de um campo magnético inclinado. No Capítulo 4, analisamos a importância relativa da ISO, da MP1D e do campo inclinado sobre o GE2D e apresentamos nossas conclusões finais no Capítulo 5. Em todas as etapas, escrevemos a equação de Schrödinger na forma secular, calculamos numericamente o espectro de energia, a densidade de estados (DOS) e a energia de Fermi. A partir destes resultados, obtemos a condutividade Hall σ_{xy} , a condutividade colisional, que descreve o efeito de espalhamento por impurezas, a condutividade difusiva, resultado dos efeitos de difusão dos portadores de carga, a energia livre de Helmholtz e a magnetização na direção do campo magnético externo. O procedimento matemático utilizado para resolver a equação secular é mostrado no Apêndice A, onde apresentamos o método das frações continuadas, que nos permite obter os autovalores de uma matriz tridiagonal infinita[54]. No Apêndice B, usando a teoria cinética de Boltzmann, obtemos as expressões utilizadas para obtermos valores numéricos para as condutividades σ_{xx} , σ_{yy} e σ_{xy} utilizadas ao longo desta Tese.

2 *GE2D na presença de um campo magnético inclinado: Efeitos da ISOR*

Neste Capítulo, consideramos um gás de elétrons confinado em uma região aproximadamente bidimensional, de espessura δ , paralela ao plano xy . O sistema é mostrado, esquematicamente, na Fig.(2.1) onde consideramos que o sistema se encontra na presença de um campo magnético externo, dado pela expressão

$$\vec{B} = B\sin\theta\vec{i} + B\cos\theta\vec{k}, \quad (2.1)$$

onde θ é o ângulo entre o campo magnético externo e a direção de crescimento.

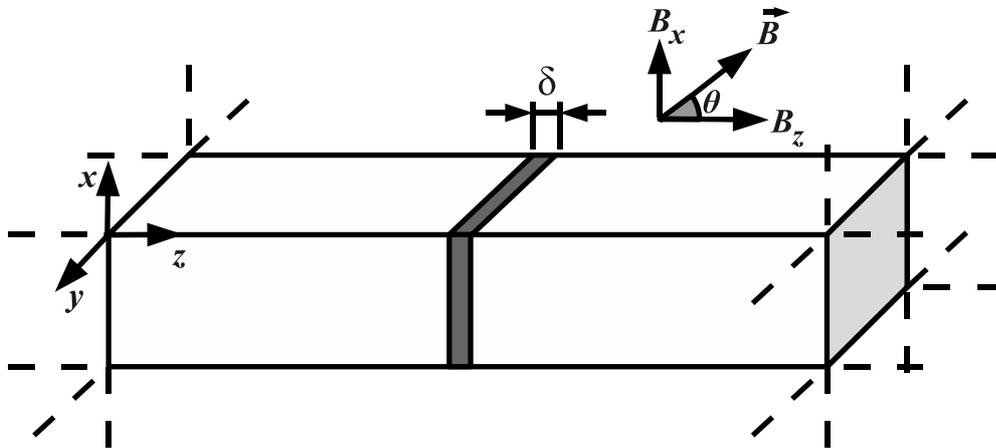


Figura 2.1: GE2D na presença de um campo magnético inclinado.

Para analisar os efeitos da ISOR sobre as propriedades termodinâmicas e de transporte do sistema, utilizaremos o seguinte procedimento: a partir do Hamiltoniano, obtemos a equação de Schrödinger na forma secular, calculamos numericamente o espectro de energia e conhecidas as soluções da equação secular, obtemos a densidade de estados e a energia de Fermi, a condutividade Hall, a condutividade σ_{yy} , a energia livre de Helmholtz e a magnetização.

2.1 O Hamiltoniano

O GE2D, para densidades eletrônicas pequenas, pode ser visto como um conjunto de partículas não-interagentes, sendo o comportamento de cada uma determinada pelo Hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 + \frac{\alpha_R}{\hbar} [\vec{\sigma} \times (\vec{p} + e\vec{A})]_z - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \quad (2.2)$$

onde o primeiro termo representa a energia cinética, o segundo a interação spin-órbita do tipo Rashba (ISOR), escrito na eq.(1.3), o terceiro a interação Zeeman, m expressa a massa efetiva dos elétrons na heteroestrutura e o potencial vetor \vec{A} é dado por

$$\vec{A} = -yB \cos \theta \vec{i} - zB \sin \theta \vec{j}. \quad (2.3)$$

Em todos os resultados deste Capítulo, consideramos a espessura do sistema igual a 50\AA e m igual a $0,05$ da massa m_e do elétron (massa efetiva do InAs).

Reescrevemos o Hamiltoniano, expandindo-o em termos das componentes x, y, z do potencial vetor \vec{A} , do campo magnético \vec{B} , do vetor posição \vec{r} e do momentum linear \vec{p} . Agrupando os termos semelhantes, temos

$$\begin{aligned} H = & \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 - 2eBp_x y \cos \theta + e^2 B^2 y^2 \cos^2 \theta) + \frac{1}{2m} (p_z^2 + e^2 B^2 z^2 \sin^2 \theta - 2eBp_y z \sin \theta) \\ & + \frac{\alpha_r}{\hbar} [\sigma_x (p_y - eBz \sin \theta) - \sigma_y (p_x - eBy \cos \theta)] - \frac{e\hbar}{2m} (B\sigma_x \sin \theta + B\sigma_z \cos \theta). \end{aligned} \quad (2.4)$$

A dependência de H em z e p_z **sugere** que podemos escrever a dependência em z das funções de onda como uma Gaussiana centrada em $z = 0$ e largura δ . Esta aproximação é tanto melhor quanto menor a largura do GE2D com relação as outras dimensões, devido ao confinamento unidimensional na direção z permitir uma largura suficientemente grande entre o estado fundamental em z e o primeiro estado excitado para pequenas espessuras. Portanto, consideramos apenas o estado fundamental em z correspondendo a uma subbanda formada pelos autoestados dos operadores de observáveis no plano. Esta aproximação é válida para energias de Fermi usuais menores do que a autoenergia do primeiro estado excitado em z , de tal forma que podemos definir o Hamiltoniano efetivo do sistema através da seguinte expressão

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2\pi\delta^2} \int_{-\infty}^{\infty} dz e^{z^2/\delta^2} H, \quad (2.5)$$

que consiste em escrever o Hamiltoniano efetivo como uma média dos operadores em z , considerando-se que a dependência das autofunções do Hamiltoniano com respeito a variável z é uma gaussiana centrada em $z = 0$.

de onde obtemos

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_c \cos \theta (y - y_c)^2 - \frac{\hbar\omega_c}{2} (\sin \theta \sigma_x + \cos \theta \sigma_z) \\ &+ \frac{\alpha_R}{\hbar} [\sigma_x p_y + m\omega_c \cos \theta \sigma_y (y - y_c)] + \frac{1}{2}m\omega_c^2 \delta^2 \sin^2 \theta, \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde ω_c , l_c e y_c são dados, respectivamente, por

$$\begin{aligned} \omega_c &= \frac{e}{m} \sqrt{B_x^2 + B_z^2}, \\ l_c &= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_c \cos \theta}}, \\ y_c &= l_c^2 k_x. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Usamos, na Eq.(2.6), o fato que H comuta com p_x , de tal forma que $p_x = \hbar k_x$. O último termo da Eq.(2.7) representa a correção devido a espessura finita e a sua forma depende do potencial confinante. Para um poço retangular infinito, este termo é dado por

$$\frac{(\pi^2 + 6) \delta^2 m\omega_c^2 \sin^2 \theta}{12 \pi^2 2}, \quad (2.8)$$

Para espessuras $\delta = 50 \text{ \AA}$, este termo de correção é da ordem de 10^{-6} meV em ambos os casos (harmônico e poço retangular infinito), enquanto todos os outros termos do Hamiltoniano são da ordem de 1 meV . Portanto, a forma do potencial não deve modificar substancialmente o comportamento quantitativo dos níveis de energia, desde que sua largura seja bem menor que as dimensões do sistema.

Usando o operador translação

$$H_{\text{eff}} = e^{-iy_c p_y} H_{\text{eff}} e^{iy_c p_y}, \quad (2.9)$$

podemos reescrever o Hamiltoniano usando os operadores escada

$$\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y, \quad (2.10)$$

e os operadores criação e aniquilação

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}l_c} \left(y + \frac{ip_y}{m\omega_c \cos \theta} \right), \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}l_c} \left(y - \frac{ip_y}{m\omega_c \cos \theta} \right), \end{aligned} \quad (2.11)$$

na seguinte forma

$$H_{\text{eff}} = \hbar\omega_c \cos \theta \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) - i \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\alpha_R}{l_c} \left(\sigma_+ a - \sigma_- a^\dagger \right) - \frac{1}{2} \hbar\omega_c \left[\frac{1}{2} \text{sen} \theta (\sigma_+ + \sigma_-) + \cos \theta \sigma_z \right] + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \delta^2 \text{sen}^2 \theta. \quad (2.12)$$

Para $\alpha_R = 0$ e $\theta = 0$, temos

$$H_0 = \hbar\omega_c \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar\omega_c}{2} \sigma_z, \quad (2.13)$$

e os auto-estados são dados por $|k_x, n, \sigma\rangle = |k_x\rangle |n\rangle |\sigma\rangle$ onde $|k_x\rangle = \frac{e^{ik_x}}{\sqrt{L_x}}$ com L_x correspondendo ao comprimento do sistema na direção x , $|n\rangle$ são os auto-estados de Landau, definidos por $a_l^\dagger a_l |n\rangle = n \delta_{n,l} |n\rangle$ e $|\sigma\rangle$ são os auto-estados do operador σ_z , definidos como $\sigma_z |\sigma\rangle = \sigma |\sigma\rangle$ onde $\sigma = \pm 1$. No caso geral, calcularemos os auto-estados de H_{eff} utilizando como base os auto-estados de H_0

$$|\psi(k_x)\rangle = \frac{e^{ik_x}}{\sqrt{L_x}} |\psi\rangle \quad \text{com} \quad |\psi\rangle = \sum_{n,\sigma} C_{n,\sigma} |n\rangle |\sigma\rangle \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.14)$$

Substituindo os auto-estados acima na equação de Schrödinger para o Hamiltoniano efetivo

$$H_{\text{eff}} |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (2.15)$$

obtemos o seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{cases} \left[s\hbar\omega_c \cos \theta + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \delta^2 \text{sen}^2 \theta - E \right] C_{s,+} - \frac{\hbar\omega_c}{2} \text{sen} \theta C_{s,-} - i \frac{\alpha_R}{l_c} \sqrt{2(s+1)} C_{s+1,-} = 0 \\ \left[(s+1)\hbar\omega_c \cos \theta + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \delta^2 \text{sen}^2 \theta - E \right] C_{s,-} - \frac{\hbar\omega_c}{2} \text{sen} \theta C_{s,+} + i \frac{\alpha_R}{l_c} \sqrt{2s} C_{s-1,+} = 0 \end{cases} \quad (2.16)$$

que possui a seguinte representação matricial tridiagonal homogênea infinita

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} - E & h_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ h_{2,1} & h_{2,2} - E & h_{2,3} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} - E & h_{3,4} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & h_{4,3} & h_{4,4} - E & h_{4,5} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & h_{5,4} & h_{5,5} - E & h_{5,6} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{6,5} & h_{6,6} - E & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0. \quad (2.17)$$

onde os elementos de matriz $h_{n,n}$ são dados por

$$h_{n,n} = \begin{cases} \hbar\omega_c \cos \theta \left(\frac{n+1}{2} \right) + \frac{1}{2}m\omega_c^2 \delta^2 \sin^2 \theta & \text{para } n \text{ ímpar,} \\ \hbar\omega_c \cos \theta \left(\frac{n}{2} - 1 \right) + \frac{1}{2}m\omega_c^2 \delta^2 \sin^2 \theta & \text{para } n \text{ par,} \end{cases} \quad (2.18)$$

e os elementos de matriz $h_{n,n+1}$ e $h_{n+1,n}$ são escritos como

$$h_{n,n+1} = (h_{n+1,n})^* = \begin{cases} -\frac{1}{2}\hbar\omega_c \sin \theta & \text{para } n \text{ ímpar,} \\ -i\frac{\alpha_R}{l_c} \sqrt{n} & \text{para } n \text{ par.} \end{cases} \quad (2.19)$$

As componentes $v_k^{(n)}$ do autovetor correspondente ao autovalor E_n estão relacionadas com os coeficientes da combinação linear (2.14) através de

$$v_k^{(n)} = \begin{cases} C_{\frac{k-1}{2},+} & \text{para } k \text{ ímpar,} \\ C_{\frac{k}{2}-1,-} & \text{para } k \text{ par.} \end{cases} \quad (2.20)$$

Desta maneira, as auto-energias e os correspondentes coeficientes $C_{i,\sigma}$ são determinados ao se calcular os autovalores e autovetores da matriz tridiagonal infinita escrita na Eq.(2.17). Observa-se, a partir da Eq.(2.14), que os auto-estados são degenerados em p_x . Esta degenerescência pode ser determinada se os comprimentos L_x e L_y forem muito maiores que a espessura δ do sistema, permitindo-se utilizar condições de contorno periódicas

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x}, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y}. \quad (2.21)$$

Definindo o fator de degenerescência g do auto-estado em relação ao operador p_x como a razão entre o volume do espaço de fase entre dois níveis de energia e o volume total do espaço de fase

$$g = \frac{S_0}{4\pi^2 \hbar^2} \int_{\vec{k}_1}^{\vec{k}_2} k d^2 k = \frac{S_0}{4\pi^2 \hbar^2} \int_{P_1}^{P_2} 2\pi P dP = \frac{S_0}{2\pi \hbar^2} \left(\frac{P_2^2}{2} - \frac{P_1^2}{2} \right), \quad (2.22)$$

onde $S_0 = L_x L_y$. Porém, entre dois níveis de Landau adjacentes, temos $P_1 = 2m(n+1/2)\hbar\omega_c$ e $P_2 = 2m(n+3/2)\hbar\omega_c$, de tal forma que obtemos o fator de degenerescência g escrito como

$$g = \frac{S_0}{2\pi l_c^2} = \left(\frac{eB \cos \theta}{h} \right) S_0. \quad (2.23)$$

Antes de considerar o caso geral, descrito na Eq.(2.17), podemos analisar os casos particulares: $\theta = 0$ [51] (campo magnético na direção perpendicular ao plano que contém o GE2D) e

$\alpha_R = 0$ [52] (campo inclinado e ausência de ISOR). Ambos possuem solução exata.

2.1.1 Caso 1: ISOR e Campo Magnético na direção de Crescimento

No primeiro caso, fazendo $\theta = 0$ na Eq.(2.17), o que corresponde a $h_{n,n+1} = 0$ para n ímpar, obtemos o seguinte sistema tridiagonal homogêneo

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} - E & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & h_{2,2} - E & h_{2,3} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} - E & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & h_{4,4} - E & h_{4,5} & \dots \\ 0 & 0 & 0 & h_{5,4} & h_{5,5} - E & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0, \quad (2.24)$$

onde os elementos de matriz $h_{n,n}$ são dados por

$$h_{n,n} = \begin{cases} \hbar\omega_c \left(\frac{n+1}{2} \right) & \text{para } n \text{ ímpar,} \\ \hbar\omega_c \left(\frac{n}{2} - 1 \right) & \text{para } n \text{ par,} \end{cases} \quad (2.25)$$

enquanto os elementos de matriz $h_{n,n+1}$ e $h_{n+1,n}$, para n par, são escritos como

$$h_{n,n+1} = (h_{n+1,n})^* = -i \frac{\alpha_R}{l_c} \sqrt{n/2} \quad (2.26)$$

e as componentes $v_k^{(n)}$ do autovetor correspondente ao autovalor E_n estão relacionadas com os coeficientes da combinação linear (2.14) através da Eq.(2.20). Desta forma, os níveis de energia e os auto-estados de H_{eff} para $\theta = 0$, neste caso particular, podem ser obtidos de forma exata combinando as Eqs. (2.20) e (2.24) e fazendo a substituição $l = \frac{n}{2} - 1$ com $n = 2, 4, 6, \dots$, de onde segue

$$(\hbar\omega_c - E_0^+) C_0^+ = 0,$$

$$\begin{pmatrix} \hbar\omega_c l - E & -i \frac{\alpha_R}{l_c} \sqrt{2l} \\ i \frac{\alpha_R}{l_c} \sqrt{2l} & \hbar\omega_c (l+1) - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_l^- \\ C_{l+1}^+ \end{pmatrix} = 0, \quad l = 1, 2, \dots \quad (2.27)$$

A partir da Eq.(2.27) obtemos o estado fundamental

$$E_0^+ = \hbar\omega_c, \quad |\psi_0^+(k_x)\rangle = |0, +\rangle, \quad (2.28)$$

e as seguintes autoenergias

$$E_l^\pm = l\hbar\omega_c \pm \sqrt{(\hbar\omega_c)^2 + 2l\frac{\alpha_R^2}{l_c^2}}, \quad l = 1, 2, \dots, \quad (2.29)$$

correspondentes aos seguintes auto-estados excitados

$$\begin{aligned} |\psi_l^-(k_x)\rangle &= \frac{e^{ik_x}}{\sqrt{L_x A_l}} [|l-1, +\rangle + iD_l |l, -\rangle], \quad l = 1, 2, \dots, \\ |\psi_l^+(k_x)\rangle &= \frac{e^{ik_x}}{\sqrt{L_x A_l}} [-iD_l |l-1, +\rangle + |l, -\rangle], \quad l = 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (2.30)$$

onde

$$A_l = \sqrt{1 + \left(\frac{\frac{\alpha_R}{l_c} \sqrt{2l}}{-\frac{\hbar\omega_c}{2} + \sqrt{\hbar^2 \omega_c^2 + 2l\frac{\alpha_R^2}{l_c^2}}} \right)^2}. \quad (2.31)$$

Observamos, neste caso particular, a presença de subbandas + e – devido ao termo Zeeman no Hamiltoniano. Observamos também que os auto-estados obtidos neste caso particular onde se considerou a ISOR, é uma combinação linear entre dois níveis de Landau $|l-1\rangle$ e $|l\rangle$, portanto, o termo ISOR possibilita a mistura entre os estados orbitais adjacentes $l-1$ e l .

2.1.2 Caso Particular 2: Ausência de ISOR e Campo Inclinado

No segundo caso, ao fazer $\alpha_R = 0$ [52] na Eq.(2.17), o que corresponde a $h_{n,n+1} = 0$ para n par, obtemos o seguinte sistema

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} - E & h_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ h_{2,1} & h_{2,2} - E & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & h_{3,3} - E & h_{3,4} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & h_{4,3} & h_{4,4} - E & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{5,5} - E & h_{5,6} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & h_{6,5} & h_{6,6} - E & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0, \quad (2.32)$$

onde os elementos de matriz $h_{n,n}$ são dados pela Eq.(2.18) e os elementos de matriz $h_{n,n+1}$ e $h_{n+1,n}$, para n ímpar, são escritos como

$$h_{n,n+1} = h_{n+1,n} = -\frac{1}{2}\hbar\omega_c \text{sen}\theta. \quad (2.33)$$

Os níveis de energia e os auto-estados de H_{eff} , neste caso particular, também podem ser determinados de forma exata através da solução do seguinte sistema de equações, obtido ao se combinar as Eqs. (2.20) e (2.32). O resultado é

$$\begin{pmatrix} \hbar\omega_c \cos \theta \left(l + \frac{3}{2} \right) + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \delta^2 \sin^2 \theta - E & \frac{1}{2} \hbar\omega_c \sin \theta \\ \frac{1}{2} \hbar\omega_c \sin \theta & \hbar\omega_c \cos \theta \left(l - \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \delta^2 \sin^2 \theta - E \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} C_l^+ \\ C_l^- \end{pmatrix} = 0, \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.34)$$

Portanto, na ausência de ISO, os auto-estados são dados por

$$E_l^\pm = \hbar\omega_c \cos \theta \left(l + \frac{1}{2} \right) \pm \frac{1}{2} \hbar\omega_c + \frac{m\omega_c^2 \delta^2 \sin^2 \theta}{2}, \quad (2.35)$$

enquanto que os auto-estados correspondentes são escritos como

$$|\psi_l^\pm(k_x)\rangle = \frac{e^{ik_x}}{\sqrt{L_x}} |l\rangle \times \left[\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) |\pm\rangle \pm \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) |\mp\rangle \right]. \quad (2.36)$$

Observamos mais uma vez, neste caso particular, a presença de duas subbandas $+$ e $-$ devido a presença do termo Zeeman, porém, diferentemente do caso $\theta = 0$ abordado na seção 2.1.1, os auto-estados são níveis de Landau puros $|l\rangle$. Portanto, a presença de ISOR possibilita a mistura entre níveis de Landau adjacentes. A consequência disto, sobre a densidade de estados, é permitir que as autoenergias possuam espaçamento desigual entre si, de tal forma que é esperado que ocorram modulações na densidade de estados provocadas pela presença do termo ISOR no Hamiltoniano. Na seção 2.2, mostraremos a solução do sistema de autovalores para $\theta \neq 0$ e $\alpha_R \neq 0$.

2.2 Níveis de Energia, Densidade de Estados e Energia de Fermi

No caso geral $\theta \neq 0$ e $\alpha_R \neq 0$, expresso na Eq.(2.17), utilizamos dois métodos numéricos com o objetivo de determinar as auto-energias e os auto-estados do sistema:

- O tratamento numérico direto do sistema tridiagonal homogêneo truncado, utilizando-se subrotinas padrão de diagonalização[55] onde consideramos o número de elementos da base suficientes para obtermos convergência nas propriedades de transporte e termodinâmicas. O tamanho da base necessário para convergência no cálculo dos níveis de

energia e das propriedades de transporte e termodinâmicas depende da temperatura, da intensidade e direção do campo magnético externo.

- O método das frações continuadas, descrito no Apêndice A, que permite encontrar numericamente, através de um processo iterativo, os autovalores e autovetores de uma matriz tridiagonal.

O método das frações continuadas consiste em escrever os auto-valores da matriz tridiagonal na forma

$$E_i = h_{i,i} - \frac{h_{i,i-1}h_{i-1,i}}{h_{i-1,i-1} - E_i - \frac{h_{i-1,i-2}h_{i-2,i-1}}{h_{i-2,i-2} - E_i - \dots}} - \frac{h_{i,i+1}h_{i+1,i}}{h_{i+1,i+1} - E_i - \frac{h_{i+1,i+2}h_{i+2,i+1}}{h_{i+2,i+2} - E_i - \dots}}, \quad (2.37)$$

onde $h_{i,i}$ são os elementos das diagonais, $h_{i,i+1}$, $h_{i+1,i}$ são os elementos das diagonais superior e inferior, respectivamente, e E_i é o i -ésimo autovalor desejado. A Eq.(2.37) é resolvida através do seguinte processo iterativo: a primeira aproximação para o autovalor é o elemento da diagonal $h_{i,i}$. Os termos à direita na Eq.(2.37) fornecem, então, uma aproximação de ordem superior. O procedimento é repetido até que a mudança no valor de E_i seja menor que a precisão desejada. Nos resultados numéricos apresentados neste trabalho, utilizamos a precisão de uma parte em 10^4 .

Uma vez determinado o i -ésimo autovalor E_i , podemos calcular as $\mathbf{v}_{k-N}^{(i)}$, $\mathbf{v}_{k-N+1}^{(i)}$, ..., $\mathbf{v}_k^{(i)}$, $\mathbf{v}_{k+1}^{(i)}$, ..., $\mathbf{v}_{k+N}^{(i)}$ componentes do i -ésimo autovetor não normalizado. Usando a Eq.(A.8) do Apêndice A, temos

$$\frac{\mathbf{v}_{k\pm 1}^{(i)}}{\mathbf{v}_k^{(i)}} = - \frac{h_{k\pm 1,k}}{h_{k\pm 1,k\pm 1} - E_i - \frac{a_{k\pm 1,k\pm 2}h_{k\pm 2,k\pm 1}}{h_{k\pm 2,k\pm 2} - E_i - \dots}}, \quad (2.38)$$

onde $\mathbf{v}_i^{(i)} = 1$. Nos nossos cálculos, consideramos que $\mathbf{v}_{i\pm|N+l|}^{(i)} = 0$ para todo l onde N é determinado por

$$\left| \mathbf{v}_{i\pm N\mp 1}^{(i)} \right| / \left| \mathbf{v}_{i\pm N}^{(i)} \right| < 10^{-6}. \quad (2.39)$$

Nas Figs. (2.2-a) e (2.2-b), mostramos a dependência dos níveis de energia mais baixos de um GE2D em função do ângulo θ para $B = 0, 1\text{T}$ e $B = 1\text{T}$, respectivamente. Em cada gráfico, tomamos $\alpha_R = 0$ (linha cheia) e $\alpha_R = 10^{-11}\text{eV/m}$ (linha tracejada). Percebemos, nas curvas para $\alpha_R = 0$ que, para $\theta = 0$, os níveis de energia possuem uma degenerescência extra além da degenerescência com relação ao operador p_x . A quebra desta degenerescência é importante na condutividade Hall, pois ela é responsável pelo aparecimento de *plateaus* extras.

Nas Figs. (2.3-a) e (2.3-b), observamos a dependência dos níveis de energia mais baixos em função do módulo do campo magnético $B = |\vec{B}|$ para $\theta = 0$ e $\theta = 30^\circ$, respectivamente. Em ambos os gráficos (a) e (b), temos $\alpha_R = 0$ (linha cheia) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha tracejada). Na ausência de ISOR, o comportamento dos níveis de energia, em unidades de $\hbar\omega_c$, é linear. Além disso, observamos que os níveis de energia com respeito a B independem da ISOR para campos magnéticos que satisfaçam a seguinte desigualdade

$$B \cos \theta \gg \frac{\alpha_R^2 m^2}{\hbar^3 e}, \quad (2.40)$$

obtida ao se considerar $|h_{n,n+1}|$ para n par muito menor que $h_{n,n+1}$ para n ímpar. Isto é visto ao se observar, no caso da dependência dos níveis de energia com respeito a θ , mostrada na Fig.(2.2), que para o campo de 1T as curvas correspondentes aos níveis são mais próximas entre si. Da mesma forma, podemos observar que a ISOR não é determinante no comportamento dos níveis para campos magnéticos dados na Eq.(2.40) observando a pequena mudança qualitativa entre as curvas para campos magnéticos maiores na Fig.(2.3).

A densidade de estados total é dada pela soma das densidades de estado de cada nível multiplicada pelo fator de degenerescência g dos auto-estados com respeito ao operador p_x , escrito na Eq.(2.23)

$$D(E) = \frac{S_0}{2\pi l_c^2} \sum_n \delta(E - E_n). \quad (2.41)$$

Considerando que os níveis tem uma largura Γ , de modo a tratar fenomenologicamente as impurezas presentes no material como uma aproximação em primeira ordem[56, 57], correspondendo a estados não-localizados, podemos reescrever a densidade de estados como

$$D(E) = \frac{S_0}{(2\pi)^{3/2} l_c^2 \Gamma} \sum_n e^{-(E-E_n)^2/2\Gamma^2}, \quad (2.42)$$

onde trocamos as deltas por gaussianas.

Mostramos resultados para a densidade de estados $D(E)$ nas Figs.(2.4) e (2.5). Nas Figs. (2.4-b) e (2.5-b), observamos o comportamento da densidade de estados para Γ pequeno com relação à separação entre os níveis. A densidade de estados neste caso, é formada por picos espaçados onde quase não há superposição entre os níveis.

Nas Figs. (2.4-c) e (2.5-c), observamos a presença de modulação na densidade de estados na presença de ISOR, considerando Γ suficientemente alto de modo a permitir superposição entre os níveis. Este padrão modular é caracterizado pela presença de oscilações secundárias na densidade de estados. Esta modulação é resultado do espaçamento desigual entre níveis adjacentes e é devida apenas a ISOR. Este espaçamento desigual entre os níveis é consequência

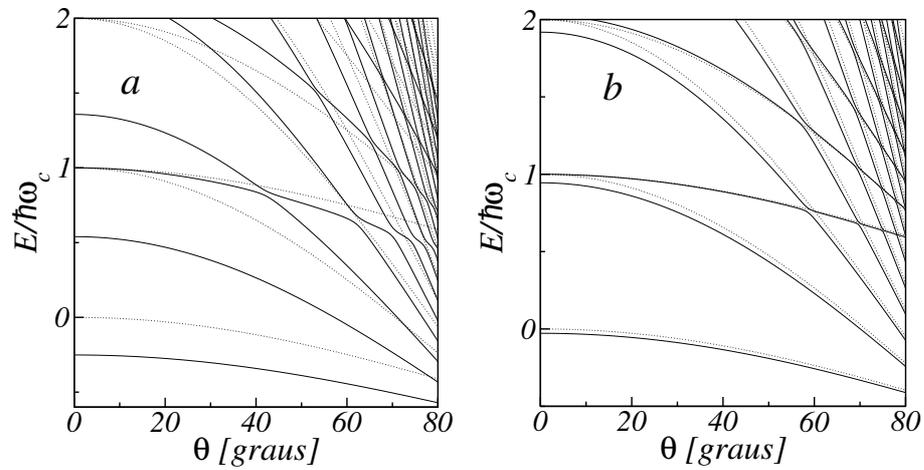


Figura 2.2: Níveis de energia E em função de θ para $B = 0, 1T$ (a) e $B = 1T$ (b). Para cada curva, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia).

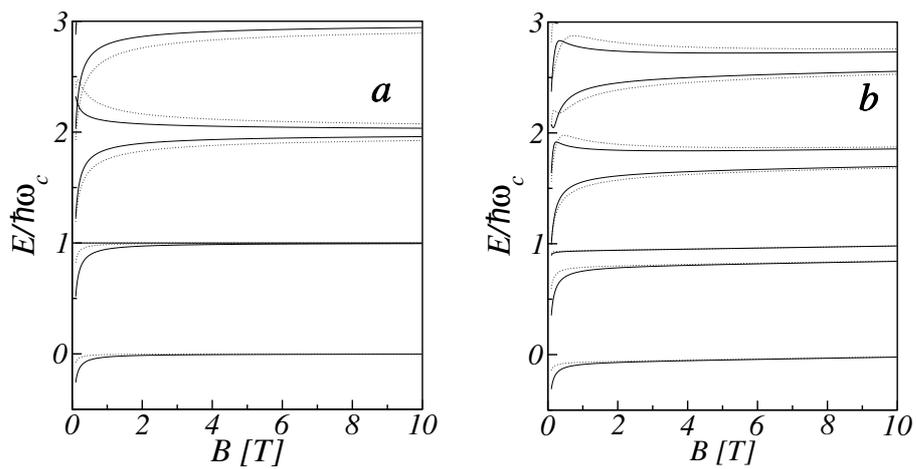


Figura 2.3: Níveis de energia E em função do módulo do campo magnético B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Para cada curva, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia).

do fato de que a ISOR acopla os níveis de Landau e os auto-estados finais não são auto-estados de Landau puros, conforme visto na seção 2.1.1. Este comportamento modular na densidade de estados devido a ISOR deve repercutir na Energia de Fermi, e conseqüentemente em todas as propriedades físicas do sistema produzindo modulações nas propriedades que dependem explicitamente da densidade de estados.

A energia de Fermi do sistema pode ser determinada usando-se a relação entre a densidade de elétrons n_s do GE2D e a densidade de estados

$$n_s = \int_{-\infty}^{\infty} F(E)D(E)dE, \quad (2.43)$$

onde $F(E)$ é a função de Fermi-Dirac

$$F(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} + 1}, \quad (2.44)$$

com $\beta = 1/k_B T$, μ o potencial químico, T a temperatura e k_B a constante de Boltzmann. A Eq.(2.42), combinada com a relação (2.43) no limite $T \rightarrow 0$, fornece

$$\frac{2hn_s}{eB\cos\theta} = \sum_n \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{E_F - E_n}{\sqrt{2}\Gamma} \right) \right]. \quad (2.45)$$

A energia de Fermi E_F é obtida resolvendo-se numericamente a Eq.(2.45). A expressão (2.45), no limite $\Gamma \rightarrow 0$, é dada por

$$\frac{hn_s}{eB\cos\theta} = \sum_n u(E_F - E_n), \quad (2.46)$$

onde $u(E)$ é a função de Heaviside. Resultados para a energia de Fermi são mostrados nas Figs. (2.6) a (2.8).

Na Fig.(2.6-(a)), onde tomamos $n_s = 10^{11}$ elétrons/m², $\theta = 30^\circ$ e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, observamos a presença de saltos na energia de Fermi E_F quando tomamos $\Gamma = 0,005$ meV (linha cheia). Para campos externos B maiores, há a necessidade de mais elétrons para preencher cada nível de energia, devido a degenerescência g ser diretamente proporcional a B . Portanto, os elétrons gradualmente esvaziam os níveis de energia mais altos, passando a ocupar os níveis mais baixos com o aumento de B . O salto acontece quando um nível é totalmente esvaziado pelas transições dos elétrons para níveis de energia mais abaixo.

De forma análoga podemos entender os saltos presentes na energia de Fermi E_F em função do ângulo θ na Fig.(2.6-(b)) no limite $\Gamma \rightarrow 0$: elas acontecem devido a degenerescência dos níveis ser diretamente proporcional a $\cos\theta$, o que implica que com o aumento de θ , há necessidade de menos elétrons para se preencher totalmente cada nível de energia. Os elétrons provenientes de níveis mais baixos passam a ocupar gradualmente os níveis mais altos com

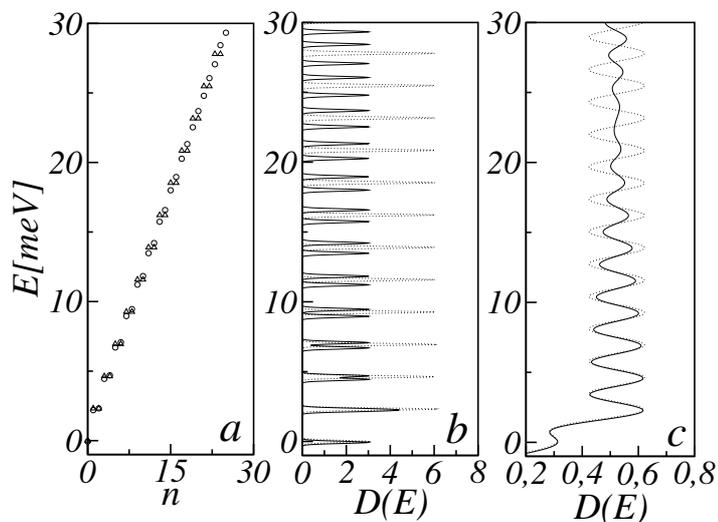


Figura 2.4: Níveis de energia E em ordem crescente para $\alpha_R = 0$ (triângulos) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (círculos) (a) e densidade de estados $D(E)$ para $\Gamma = 0,05$ meV (b) e $\Gamma = 0,5$ meV (c) onde $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $\theta = 0$ e $B = 1$ T.

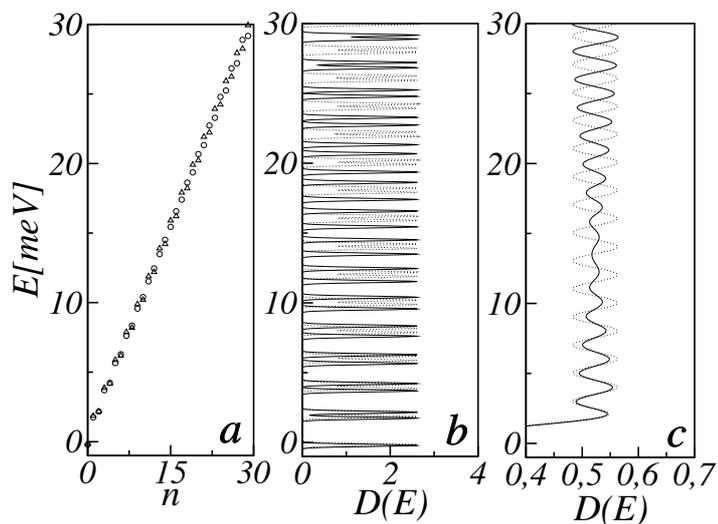


Figura 2.5: Níveis de energia E em ordem crescente versus $n = 0, 1, 2, \dots, 50$, para $\alpha_R = 0$ (triângulos) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (círculos) (a) e densidade de estados $D(E)$ para $\Gamma = 0,05$ meV (b) e $\Gamma = 0,5$ meV (c) onde $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $\theta = 30^\circ$ e $B = 1$ T.

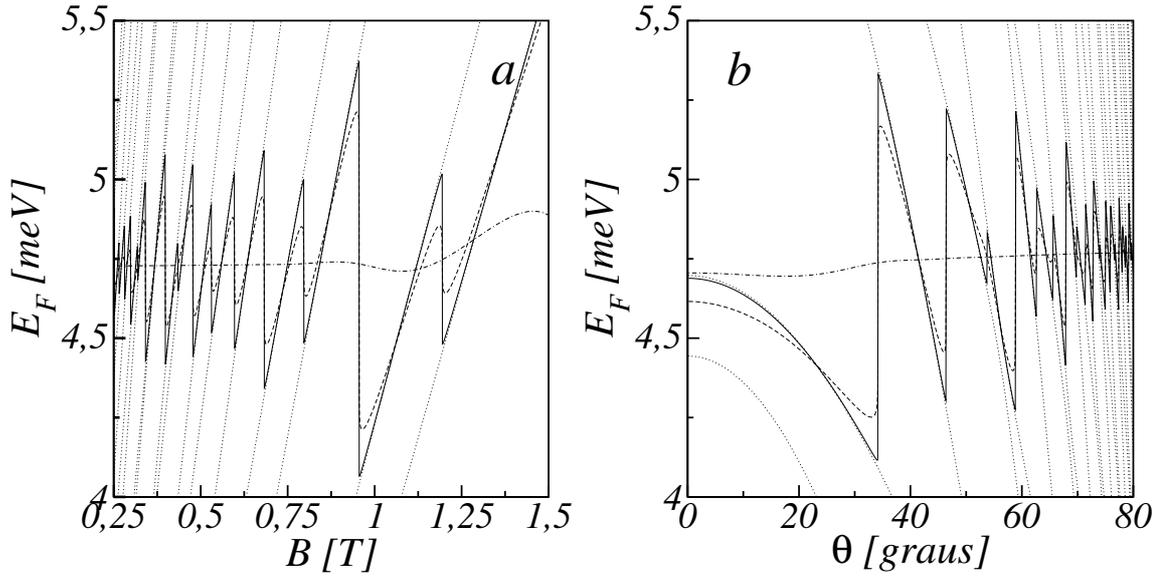


Figura 2.6: (a) Energia de Fermi E_F em função de B com $n_s = 10^{11}$ elétrons/ m^2 para três valores de Γ : $\Gamma = 0,005$ meV (linha cheia), $\Gamma = 0,05$ meV (linha tracejada) e $\Gamma = 0,5$ meV (linha pontilhada-tracejada) e alguns níveis de energia em função de B (linhas pontilhadas). Tomamos em todas as curvas: $\theta = 30^\circ$ e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m. (b) Energia de Fermi em função de θ com $n_s = 10^{11}$ elétrons/ m^2 para três valores de Γ : $\Gamma = 0,005$ meV (linha cheia), $\Gamma = 0,05$ meV (linha tracejada) e $\Gamma = 0,5$ meV (linha pontilhada-tracejada) e alguns níveis de energia em função de θ (linhas pontilhadas).

o aumento de θ . Observa-se que salto acontece quando um nível é totalmente populado por elétrons provenientes de níveis mais abaixo.

Ao aumentar o valor de Γ , percebemos que as descontinuidades nas Figs. (2.6-(a)) e (2.6-(b)) são gradualmente removidas. Isto ocorre devido ao fato de que ao aumentar a largura de cada nível de energia, o salto devido a degenerescência dos elétrons por cada nível deixa de existir, permitindo que as partículas ocupem estados com energia qualquer entre dois níveis de energia quaisquer. O aumento de Γ produz, então, um comportamento oscilatório sobre a energia de Fermi.

Mostramos, nas Figs. (2.7) e (2.8), resultados para a energia de Fermi em função de θ e nas Figs. (2.9), (2.10) a energia de Fermi em função de B . Observa-se ao se comparar as Figs. (2.7) e (2.8) e as Figs. (2.9) e (2.10), que o comportamento oscilatório da energia de Fermi se intensifica com o aumento da densidade eletrônica n_s , além da presença da modulação na energia de Fermi devida somente a ISOR, que é mais facilmente visível em densidades eletrônicas mais altas. Observando-se a dependência explícita da Energia de Fermi com respeito a densidade de estados na Eq.(2.43), concluímos que as modulações em E_F estão relacionadas às modulações vistas na densidade de estados e ao espaçamento desigual entre os níveis de energia ao se inserir o termo

ISOR no Hamiltoniano.

Como as propriedades de transporte devem depender essencialmente dos auto-estados dos elétrons que se encontram no nível de Fermi, estas modulações deverão ser encontradas nas propriedades de transporte como, por exemplo, a condutividade colisional σ_{yy} . Estas modulações devido ao termo ISOR devem também aparecer nas propriedades termodinâmicas do GE2D, por conta da dependência explícita da densidade de estados e da Energia de Fermi.

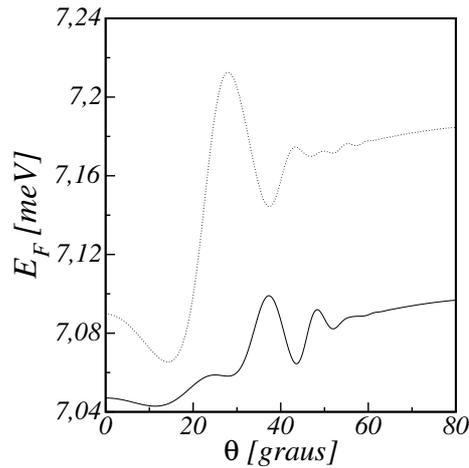


Figura 2.7: Energia de Fermi E_F em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/m², $B = 1$ T e $\Gamma = 0,5$ meV.

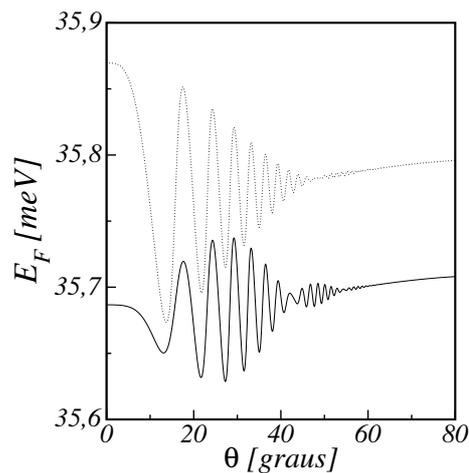


Figura 2.8: Energia de Fermi E_F em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T e $\Gamma = 0,5$ meV.

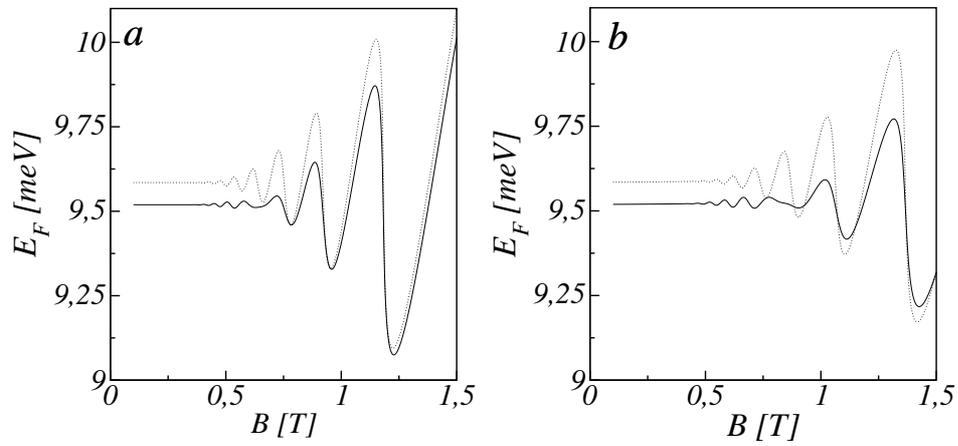


Figura 2.9: Energia de Fermi E_F em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/m² e $\Gamma = 0,5$ meV.

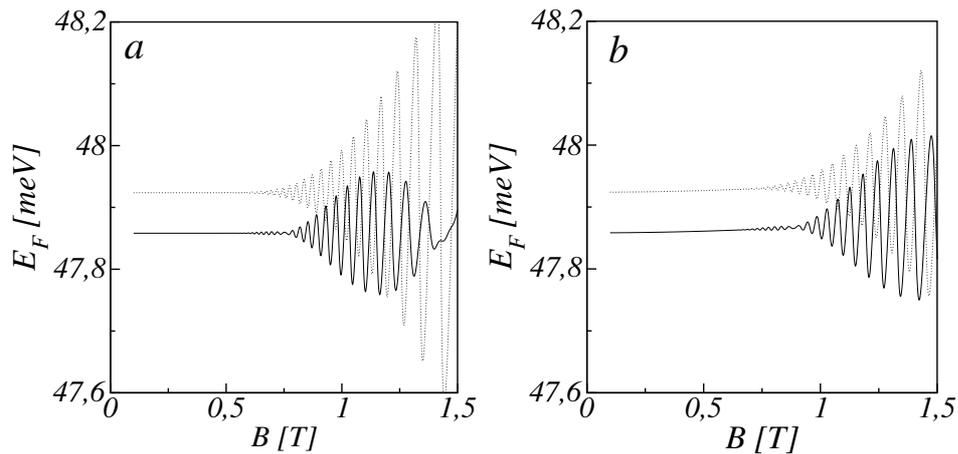


Figura 2.10: Energia de Fermi E_F em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m² e $\Gamma = 0,5$ meV.

2.3 Condutividade Hall

A condutividade Hall é obtida a partir da seguinte expressão, que corresponde a Eq.(B.128) do Apêndice B

$$\sigma_{AB}^{\text{nd}} = \frac{e^2}{V_o} \sum_{\eta, \zeta} \left(1 - \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \langle c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \frac{1 - e^{-\beta(E_{\eta} - E_{\zeta})}}{(E_{\eta} - E_{\zeta})^2} \langle \zeta | \dot{A} | \eta \rangle \langle \zeta | \dot{B} | \eta \rangle. \quad (2.47)$$

Fazendo-se

$$A = x, \quad B = y, \quad V_o = L_x L_y,$$

$$|\eta\rangle = |\psi^{(n)}(k_x)\rangle, \quad |\zeta\rangle = |\psi^{(n')}(k_x)\rangle,$$

$$\langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} = F(E_n), \quad \langle c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} = F(E_{n'}), \quad (2.48)$$

obtemos a seguinte expressão para a condutividade Hall

$$\sigma_{xy}^{\text{nd}} = \frac{ie^2 \hbar}{2\pi l_c^2} \sum_{n, n'} [1 - F(E_n)] F(E_{n'}) \frac{1 - e^{-\beta(E_n - E_{n'})}}{(E_n - E_{n'})^2} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle, \quad (2.49)$$

onde $\sum_{k_x} = g$ com g dado na Eq.(2.23), $F(E)$ é dado pela Eq.(2.44) e $v_{\eta} = \frac{\partial H}{\partial p_{\eta}}$ é a componente η do operador velocidade, com $\eta = x, y$

$$\begin{aligned} v_x &= -\frac{\sqrt{2}}{2} l_c \omega_c \cos \theta (a^{\dagger} + a) - i \frac{\alpha_R}{2\hbar} (\sigma^+ - \sigma^-), \\ v_y &= -i \frac{\sqrt{2}}{2} l_c \omega_c \cos \theta (a^{\dagger} - a) + \frac{\alpha_R}{2\hbar} (\sigma^+ + \sigma^-). \end{aligned} \quad (2.50)$$

A Eq.(2.49) pode ser simplificada ao se utilizar a seguinte identidade

$$[1 - F(E_n)] F(E_{n'}) e^{-\beta(E_n - E_{n'})} = [1 - F(E_{n'})] F(E_n), \quad (2.51)$$

resultando em

$$\sigma_{xy}^{\text{nd}} = \frac{ie^2 \hbar}{2\pi l_c^2} \sum_{n, n'} \frac{F(E_n) - F(E_{n'})}{(E_n - E_{n'})^2} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle, \quad (2.52)$$

que, no limite $T \rightarrow 0$, é escrita como

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2 \hbar}{2\pi l_c^2} \sum_{n, n'} \frac{u(E_F - E_n) - u(E_F - E_{n'})}{(E_n - E_{n'})^2} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle, \quad (2.53)$$

onde u é a função de Heaviside e os elementos de matriz $\langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle$ e $\langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle$ são dados em termos dos coeficientes da combinação linear (2.14) por

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle &= -\frac{l_c \omega_c \cos \theta}{\sqrt{2}} \sum_{l, \sigma = \pm} \sqrt{l} (C_{l-1, \sigma}^{(n')})^* C_{l, \sigma}^{(n)} + \sqrt{l+1} (C_{l+1, \sigma}^{(n')})^* C_{l, \sigma}^{(n)} \\ &\quad - \frac{i \alpha_R}{\hbar} \sum_{l=0} \left[(C_{l, -}^{(n)})^* C_{l, +}^{(n')} - (C_{l, +}^{(n)})^* C_{l, -}^{(n')} \right], \\ \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle &= -\frac{i l_c \omega_c \cos \theta}{\sqrt{2}} \sum_{l, \sigma = \pm} \sqrt{l} (C_{l, \sigma}^{(n)})^* C_{l-1, \sigma}^{(n')} - \sqrt{l+1} (C_{l, \sigma}^{(n)})^* C_{l+1, \sigma}^{(n')} \\ &\quad + \frac{\alpha_R}{\hbar} \sum_{l=0} \left[(C_{l, -}^{(n')})^* C_{l, +}^{(n)} + (C_{l, +}^{(n')})^* C_{l, -}^{(n)} \right]. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Mostramos resultados para a condutividade Hall em função de θ para dois valores de densidades de elétrons n_s nas Figs. (2.11) e (2.12). Observamos que a condutividade Hall é quantizada em todos os casos, apresentando *plateaus* nos valores h/ne^2 com $n = 1, 2, 3, \dots$ e $2h/(2n+1)e^2$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n+1$.

A quantização na condutividade Hall σ_{xy} também é vista nas Figs. (2.13) e (2.14), onde mostramos a condutividade Hall em função de B para dois valores de n_s . Observamos que, para $\theta = 0$ e $\alpha_R = 0$ há somente os *plateaus* de ordem h/ne^2 . Na presença de ISOR, ou $\theta \neq 0$, aparecem *plateaus* intermediários semi-inteiros $2h/(2n+1)e^2$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n+1$. Os *plateaus* intermediários estão associados à quebra da degenerescência extra vista no espectro para $\theta = 0$ e $\alpha_R = 0$. Neste caso limite a condutividade Hall tem a seguinte expressão

$$\sigma_{xy}^{\text{nd}} = \frac{e^2}{h} \sum_{s=0}^{\infty} (s+1) u(E_s - E_n), \quad (2.55)$$

onde observamos que o salto entre os *plateaus* ocorre quando a energia de Fermi cruza um nível de energia. Quando a degenerescência é quebrada, há a presença de, em vez de níveis duplamente degenerados no caso $\theta = 0$ e $\alpha_R = 0$, o dobro de níveis, de tal forma que os *plateaus* intermediários aparecem por conta da introdução destes novos níveis.

Observamos, ao comparar as Figs. (2.11) e (2.12) e as Figs. (2.13) e (2.14) que, para densidades eletrônicas maiores, em geral, o comprimento dos *plateaus* é menor, o que é associado ao comportamento oscilatório mais intenso na energia de Fermi, mostrada nas Figs. (2.9) e (2.10). Podemos observar esta dependência dos *plateaus* com a energia de Fermi ao analisar o caso limite $\theta = 0$ e $\alpha_R = 0$, escrito na Eq.(2.55), onde observamos que o salto entre os *plateaus* se

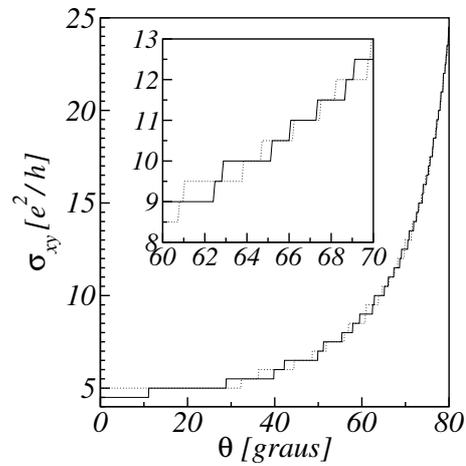


Figura 2.11: Condutividade Hall σ_{xy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/ m^2 , $B = 1\text{T}$, $\Gamma = 0,5\text{meV}$ e $T = 0$. No inset fica mais clara a quantização na condutividade.

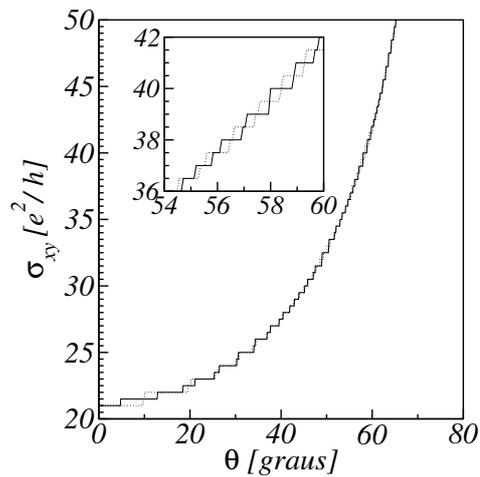


Figura 2.12: Condutividade Hall σ_{xy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/ m^2 , $B = 1\text{T}$, $\Gamma = 0,5\text{meV}$ e $T = 0$. No inset fica mais clara a quantização na condutividade.

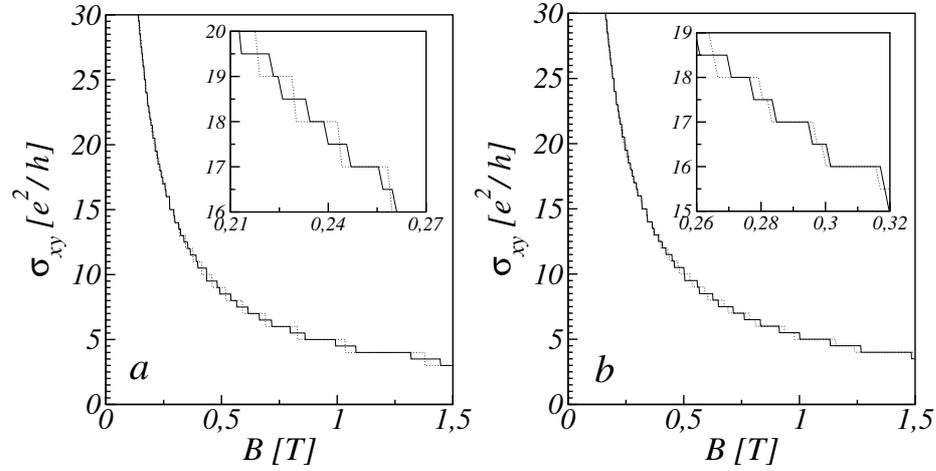


Figura 2.13: Condutividade Hall σ_{xy} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos $n_s = 2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ e $T = 0$. No inset fica mais clara a quantização na condutividade.

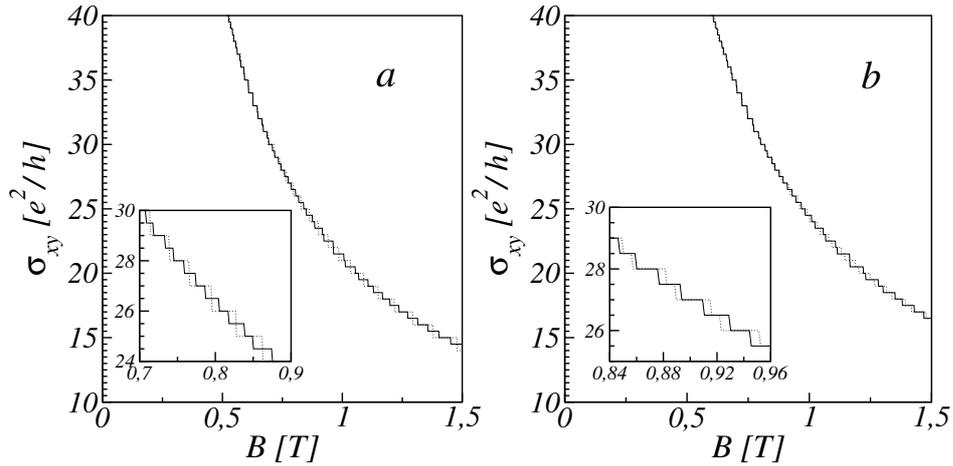


Figura 2.14: Condutividade Hall σ_{xy} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ e $T = 0$. No inset fica mais clara a quantização na condutividade.

dá quando a curva da energia de Fermi cruza uma curva correspondente a um nível de energia do sistema, tal como mostrado na Fig. (2.15).

Estes saltos na condutividade são explicados devido ao fato de que, na Eq.(2.53), os termos diferentes de zero no somatório são aqueles que envolvem transições entre os elétrons que estão abaixo do nível de Fermi para níveis acima do nível de Fermi ou vice-versa. Com o aumento do campo externo a condutividade reduz porque, como há menos níveis preenchidos, há menos transições entre os níveis abaixo do nível de Fermi para níveis acima do nível de Fermi, portanto a condutividade diminui com o aumento do campo. No caso da condutividade Hall em função de θ ocorre o inverso: como há mais níveis preenchidos porque a degenerescência dos níveis diminui com θ , há mais transições possíveis entre os níveis que estão abaixo do nível de Fermi e os níveis acima da energia de Fermi, logo, a condutividade aumenta com θ .

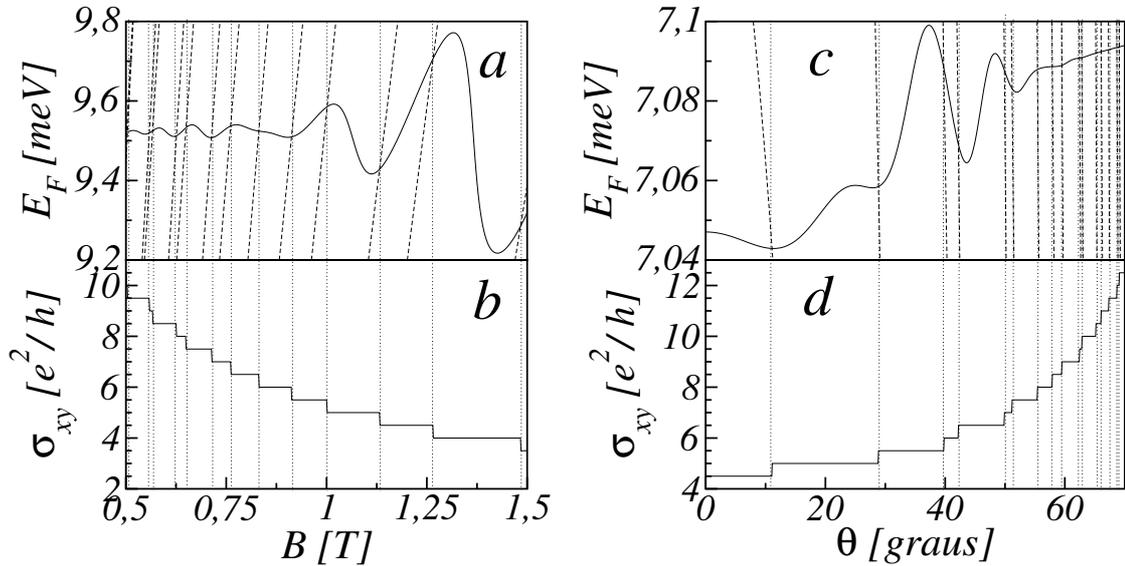


Figura 2.15: (a) Energia de Fermi E_F (linha cheia) e alguns níveis de energia em função de B (linhas tracejadas). (b) Condutividade Hall σ_{xy} em função de B . Em todas as curvas em (a) e (b), temos: $\theta = 30^\circ$, $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ cm $^{-2}$, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$. (c) Energia de Fermi E_F (linha cheia) e alguns níveis de energia em função de θ (linhas tracejadas). (d) Condutividade Hall σ_{xy} em função de θ . Em todas as curvas em (c) e (d), temos: $B = 1$ T, $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ cm $^{-2}$, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

Segundo esta mesma ótica, podemos concluir que a condutividade Hall possui um valor de saturação. Para campos magnéticos muito altos, o fator de degenerescência g pode ser maior que a densidade eletrônica n_s . Nesta situação, todos os elétrons ocupam o estado fundamental e só existe um termo diferente de zero no somatório da Eq.(2.53), de tal forma que o valor de saturação da condutividade para campos magnéticos altos é e^2/h .

2.4 Condutividade σ_{yy}

No apêndice B é mostrado que a contribuição diagonal da condutividade diagonal σ_{yy}^d é dada pela soma entre as condutividades colisional σ_{yy}^{col} e difusiva σ_{yy}^{dif} . A condutividade difusiva σ_{yy}^{dif} é obtida no Apêndice B, e a sua expressão é dada por

$$\sigma_{AB}^{\text{dif}} = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \left(1 - \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \tau_{\eta} \langle \eta | \hat{A} | \eta \rangle \langle \eta | \hat{B} | \eta \rangle, \quad (2.56)$$

e é reexpressa, ao se utilizar a Eq.(2.48), na seguinte forma

$$\sigma_{yy}^{\text{dif}} = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_n F(E_n) (1 - F(E_n)) \tau_n \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n)} \rangle^2, \quad (2.57)$$

onde $F(E)$ é dado pela Eq.(2.44), τ_n é o tempo de relaxação e o elemento de matriz $\langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n)} \rangle$ está escrito na Eq.(2.54).

No cálculo da condutividade difusiva, consideramos que o tempo de relaxação τ_n é o mesmo para todos os níveis e igual a $\frac{me}{\gamma}$ onde γ é a mobilidade eletrônica. Observamos que a contribuição difusiva da condutividade σ_{yy}^{dif} é zero

$$\langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle = \langle \psi^{(n)} | \frac{\partial H}{\partial p_y} | \psi^{(n')} \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_n}{\partial k_y} = 0, \quad (2.58)$$

e o mesmo acontece para σ_{xx}^{dif} . Portanto, a condutividade σ_{yy}^d é devida apenas a contribuição colisional σ_{yy}^{col} , que é resultado do espalhamento de elétrons por impurezas, escrita como

$$\sigma_{AA}^{\text{col}} = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta \zeta} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \left(1 - \langle c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \right) w_{\eta, \zeta} (\langle \zeta | A | \zeta \rangle - \langle \eta | A | \eta \rangle)^2. \quad (2.59)$$

onde $w_{\eta, \zeta}$ é a taxa de transição, expressa como

$$\begin{aligned} w_{\eta, \kappa} = & \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |U(\mathbf{q})|^2 \left[|\langle \eta | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \kappa \rangle|^2 \langle N_{\mathbf{q}} \rangle_{\text{eq}} \delta(E_{\eta} - E_{\kappa} + \omega_{\mathbf{q}}) \right. \\ & \left. + |\langle \eta | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \kappa \rangle|^2 (1 + \langle N_{\mathbf{q}} \rangle_{\text{eq}}) \delta(E_{\eta} - E_{\kappa} - \omega_{\mathbf{q}}) \right], \end{aligned} \quad (2.60)$$

com

$$U(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{2\epsilon_o \epsilon} \frac{1}{(q^2 + k_s^2)^{1/2}}, \quad (2.61)$$

dado pela transformada de Fourier de $U(\mathbf{r})$

$$U(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_o \epsilon} \frac{e^{-k_s r}}{r}. \quad (2.62)$$

A Eq.(2.63) corresponde a Eq.(B.123) do Apêndice B. Reexpressando a Eq.(2.59) ao se utilizar a Eq.(2.48), obtemos a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{col}} &= \frac{\beta e^2}{S_o} \sum_{n,n'} \int_{-\infty}^{\infty} d\varpi \delta(\varpi - E_n) \delta(\varpi - E_{n'}) F(\varpi) [1 - F(\varpi)] w_{n,n'} \\ &\times \left(\langle \psi^{(n')} | y | \psi^{(n')} \rangle - \langle \psi^{(n)} | y | \psi^{(n)} \rangle \right)^2, \end{aligned} \quad (2.63)$$

onde a taxa de transição entre dois estados acessíveis ao sistema $w_{n,n'}$ é expressa, no caso de espalhamento elástico dos elétrons por impurezas de densidade N_i , como

$$w_{n,n'} = \frac{2\pi\lambda^2 N_i}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |U(\mathbf{q})|^2 \left| \langle \psi^{(n)} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \psi^{(n')} \rangle \right|^2 \delta(E_n - E_{n'}) \delta_{k_x, k'_x - q_x}, \quad (2.64)$$

com $U(\mathbf{q})$ e $U(\mathbf{r})$ dados nas Eqs. (2.61) e (2.62), respectivamente. O elemento de matriz $\langle k_x, s | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | k'_x, s' \rangle$ é dado por

$$\begin{aligned} \langle k_x, s, \sigma | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | k'_x, s', \sigma' \rangle &= \delta_{k_x, k'_x - q_x} e^{-i\Theta - |\zeta|/2} 2^{-|s-s'|/2} \times \\ &\times \begin{cases} \left(\frac{s!}{s'!} \right)^{1/2} \zeta^{s'-s} L_s^{s'-s}(|\zeta|) & \text{para } s \leq s', \\ \left(\frac{s'!}{s!} \right)^{1/2} (-\zeta^*)^{s-s'} L_{s'}^{s-s'}(|\zeta|) & \text{para } s \geq s', \end{cases} \end{aligned} \quad (2.65)$$

onde $\Theta = l_c^2 q_y (-k_x + q_x^2)$, $\zeta = l_c^2 (q_x + iq_y)/2$ e $L_n^k(x)$ é um polinômio associado de Laguerre.

A partir da Eq.(2.65), ao desconsiderar o acoplamento entre os níveis de Landau devido aos fatoriais, podemos expressar o elemento de matriz $\left| \langle \psi^{(n)} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \psi^{(n')} \rangle \right|^2$ como

$$\left| \langle \psi^{(n)} | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \psi^{(n')} \rangle \right|^2 = \delta_{k_x, k'_x - q_x} e^{-|\zeta|} \sum_{s, s', \sigma, \sigma'} \left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s', \sigma'}^{(n')} \right) L_s(|\zeta|) L_{s'}(|\zeta|). \quad (2.66)$$

O elemento de matriz $\langle \psi^{(n')} | y | \psi^{(n')} \rangle - \langle \psi^{(n)} | y | \psi^{(n)} \rangle$ é dado por

$$\langle \psi^{(n')} | y | \psi^{(n')} \rangle - \langle \psi^{(n)} | y | \psi^{(n)} \rangle = l_c^2 (k_x - k'_x). \quad (2.67)$$

Substituindo as expressões para os elementos de matriz relevantes, escritos nas Eqs. (2.66) e (2.67) na Eq.(2.63) e combinando com

$$\sum_{k_x} = g \quad \sum_{\mathbf{q}} = \frac{S_o}{2\pi} \int_0^\infty q dq = \frac{S_o}{2\pi l_c^2} \int_0^\infty d|\zeta|, \quad (2.68)$$

onde g é escrito na Eq.(2.23), obtemos

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{col}} &= \frac{\beta e^2 N_i \lambda}{2\pi \hbar l_c^2 S_o} \left(\frac{e^2}{2\epsilon \epsilon_0} \right)^2 \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta^2(\omega - E_n) F(\omega) [1 - F(\omega)] \\ &\times \int_0^{\infty} d|\zeta| \frac{|\zeta| e^{-|\zeta|}}{2|\zeta|/l_c^2 + k_s^2} \sum_{s,s',\sigma,\sigma'} \left(C_{s,\sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s',\sigma'}^{(n)} \right) L_s(|\zeta|) L_{s'}(|\zeta|). \end{aligned} \quad (2.69)$$

A presença de $e^{-\zeta}$ na integral privilegia termos ζ pequenos, de tal forma que podemos desconsiderar o termo $2|\zeta|/l_c^2$ no denominador da Eq.(2.69). Combinando com as integrais

$$\int_0^{\infty} |\zeta| e^{-|\zeta|} L_s(|\zeta|) L_{s'}(|\zeta|) d|\zeta| = \begin{cases} s & \text{para } s' = s - 1, \\ 2s + 1 & \text{para } s' = s, \\ s + 1 & \text{para } s' = s + 1, \\ 0 & \text{para } s' \neq s - 1, s, s + 1, \end{cases} \quad (2.70)$$

obtemos a seguinte expressão para a condutividade colisional σ_{yy}^{col}

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{col}} &= \frac{2\beta e^2 N_i \lambda}{4\pi \hbar k_s^2 l_c^2 S_o} \left(\frac{e^2}{2\epsilon \epsilon_0} \right)^2 \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \delta^2(\omega - E_n) F(\omega) [1 - F(\omega)] \\ &\times \sum_{s,\sigma,\sigma'} \left[\left(C_{s,\sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s,\sigma'}^{(n)} \right) (2s + 1) + \left(C_{s,\sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s+1,\sigma'}^{(n)} \right) (2s) \right]. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Semelhantemente ao visto para a densidade de estados, podemos considerar, devido a impurezas, que as funções de Dirac presentes na Eq.(2.71) podem ser representadas por Gaussianas de largura Γ [56, 57], de tal forma que reescrevemos a Eq.(2.71) como

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{col}} &= \frac{\beta e^2 N_i \lambda}{2\pi^2 \Gamma \hbar k_s^2 l_c^2 S_o} \left(\frac{e^2}{2\epsilon \epsilon_0} \right)^2 \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-(\omega - E_n)^2 / \Gamma^2} F(\omega) [1 - F(\omega)] \\ &\times \sum_{s,\sigma,\sigma'} \left[\left(C_{s,\sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s,\sigma'}^{(n)} \right) (2s + 1) + \left(C_{s,\sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s+1,\sigma'}^{(n)} \right) (2s) \right]. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Através da relação $\Gamma = w_{n,n'} \hbar$, que expressa a dependência da largura dos níveis Γ em termos da taxa de transição, escrita na Eq.(2.64), podemos relacionar a densidade de impurezas N_i e o parâmetro k_s do potencial espalhador, escrito na Eq.(2.62)

$$\frac{N_i}{S_o} = \left(\frac{2\epsilon \epsilon_0}{e^2} \right)^2 \frac{k_s^2}{\lambda \sqrt{\pi}} \Gamma. \quad (2.73)$$

Ao combinar as Eqs. (2.72) e (2.73), obtemos, para a condutividade colisional σ_{yy}^{col}

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{col}} &= \frac{\beta e^2}{h} \frac{1}{\sqrt{\pi} l_c^2} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-(\omega - E_n)^2 / \Gamma^2} F(\omega) [1 - F(\omega)] \\ &\times \sum_{s, \sigma, \sigma'} \left[\left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s, \sigma'}^{(n)} \right) (2s + 1) + \left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s+1, \sigma'}^{(n)} \right) (2s) \right]. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Através da seguinte identidade

$$\beta \lim_{T \rightarrow 0} F(\omega) [1 - F(\omega)] = \delta(\omega - E_F), \quad (2.75)$$

e da Eq.(2.74), obtemos σ_{yy} no limite $T \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \sigma_{yy} &= \frac{e^2}{h} \frac{1}{\sqrt{\pi} l_c^2} \sum_n e^{-(E_F - E_n)^2 / \Gamma^2} \\ &\times \sum_{s, \sigma, \sigma'} \left[\left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s, \sigma'}^{(n)} \right) (2s + 1) + \left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s+1, \sigma'}^{(n)} \right) (2s) \right]. \end{aligned} \quad (2.76)$$

Mostramos resultados para a condutividade colisional σ_{yy} em função de θ nas Figs. (2.16) a (2.17) onde observamos a presença de oscilações em todas as curvas. Nas curvas para $\alpha_R \neq 0$, observamos um padrão modular, devido somente a ISOR.

O comportamento oscilatório na condutividade colisional também é visto nas Figs. (2.18) a (2.19), onde mostramos σ_{yy} em função de B , além do padrão modular devido somente a presença da ISOR. Observamos, a partir da comparação entre as Figs. (2.16) e (2.17) e entre as Figs. (2.18) a (2.19), que o comportamento oscilatório na condutividade colisional se intensifica com o aumento da densidade eletrônica n_s .

A condutividade colisional apresenta a mesma modulação vista para a energia de Fermi E_F devida somente a ISOR. Esta dependência é explicada pelo espalhamento por impurezas envolverem apenas os elétrons com energias próximas de E_F . As modulações, com o aumento do campo, são gradualmente substituídas por picos na condutividade. Como mostrado pela Eq.(2.40), com o aumento do campo os efeitos da ISOR são mais fracos, portanto, as modulações acontecem para campos magnéticos cuja largura Γ dos níveis seja da ordem da separação usual entre os níveis. Para campos maiores e conseqüentemente, separação entre os níveis maior, o comportamento modular gradualmente desaparece. Portanto, a condutividade colisional apresenta um comportamento de saturação, caracterizado pela presença de picos na condutividade.

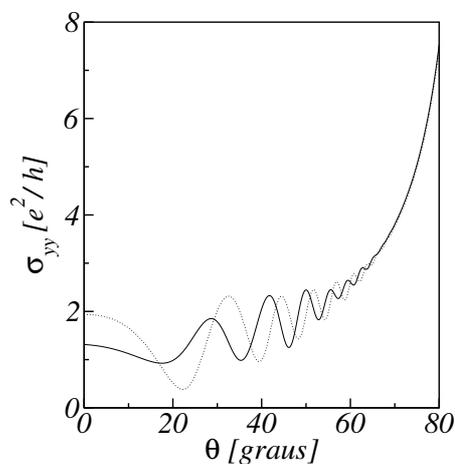


Figura 2.16: Condutividade colisional σ_{yy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

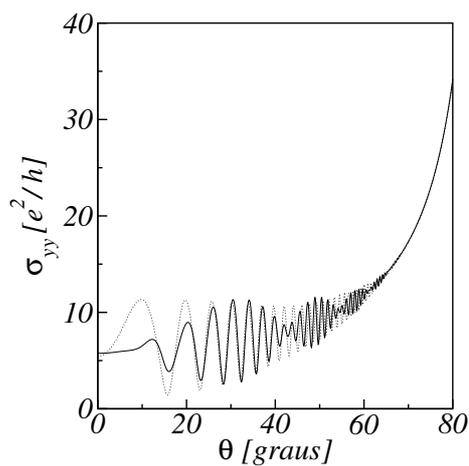


Figura 2.17: Condutividade colisional σ_{yy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

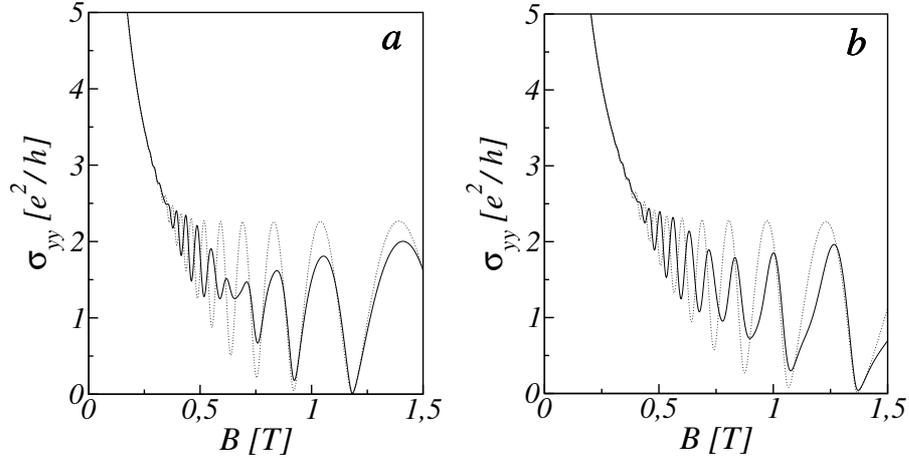


Figura 2.18: Condutividade colisional σ_{yy} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

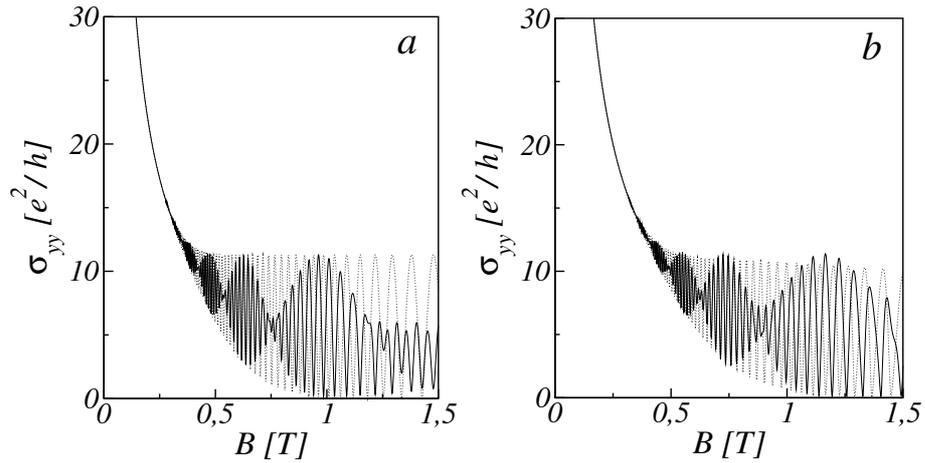


Figura 2.19: Condutividade colisional σ_{yy} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

Este padrão modular é idêntico às oscilações de Shubnikov-de Hass, verificadas experimentalmente para a condutividade colisional. Experimentalmente, as oscilações de Shubnikov-de Hass no tensor condutividade são usualmente entendidas como o resultado da presença de duas sub-bandas + e -, onde a separação entre elas, provocada pelo termo de ISOR no nível de Fermi é o termo que é responsável pelas oscilações secundárias na condutividade colisional. Como visto na seção 2.1.1, a ISOR separa os auto-estados assumidos pelos elétrons em duas subbandas + e -, inclusive para campos magnéticos nulos. Porém, no caso $B = 0$, cada subbanda é infinitamente degenerada.

A intensidade da condutividade colisional deve aumentar com Γ devido a se aumentar o número de superposições entre estados correspondentes aos demais níveis de energia e aos estados ocupados pelos elétrons com energia igual a E_F , conforme mostrado na Fig.(2.20). Esta dependência da condutividade colisional em termos de Γ pode ser explicada alternativamente pelo fato de que Γ é diretamente proporcional a taxa de transição entre os níveis $w_{n,n'}$, expressa na Eq.(2.64), de tal forma que, ao se aumentar Γ , se intensificam as transições entre os níveis de energia.

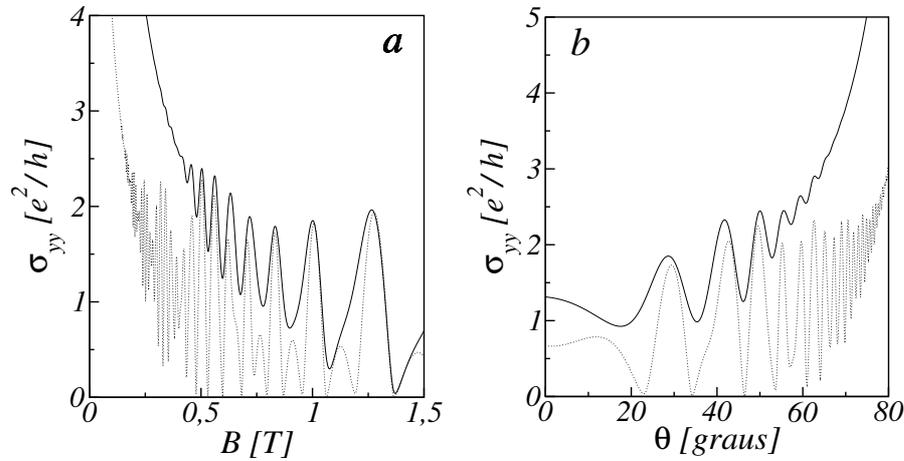


Figura 2.20: (a) Condutividade colisional σ_{yy} em função de B . Em cada uma das curvas, temos: $\Gamma = 0,2 \text{ meV}$ (linha pontilhada) e $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/ m^2 , $\alpha_R = 10^{-11} \text{ eV/m}$, $\theta = 30^\circ$ e $T = 0$. (b) Condutividade colisional σ_{yy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\Gamma = 0,2 \text{ meV}$ (linha pontilhada) e $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/ m^2 , $\alpha_R = 10^{-11} \text{ eV/m}$, $B = 1 \text{ T}$ e $T = 0$.

2.5 Energia Livre de Helmholtz e Magnetização na direção do Campo

A função de partição \mathbb{G} , para um gás de férmions não interagente[58] é escrita como

$$\ln \mathbb{G} = \sum_n \ln \left[1 + e^{-\beta(E_n - \mu)} \right], \quad (2.77)$$

de onde podemos obter a energia interna U

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln \mathbb{G} = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln \mathbb{G}. \quad (2.78)$$

O calor específico a volume constante

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 2k_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln \mathbb{G} + k_B T^2 \frac{\partial^2}{\partial T^2} \ln \mathbb{G}, \quad (2.79)$$

e a entropia S

$$S = \int_0^T dT \frac{C_V}{T} = k_B \ln \mathbb{G} + k_B T \frac{\partial}{\partial T} \ln \mathbb{G}. \quad (2.80)$$

Combinando os resultados da energia interna, entropia e função de partição, obtemos a energia livre de Helmholtz

$$A = U - TS + N\mu = N\mu - \frac{1}{\beta} \sum_n \ln \left[1 + e^{-\beta(E_n - \mu)} \right], \quad (2.81)$$

onde N é o número total de partículas.

No caso particular do GE2D, considerando uma densidade de estados, associada a cada energia E , escrita na Eq.(2.42), podemos trocar o somatório acima por uma integral, de tal forma que obtemos[47]

$$A_s = n_s \mu - \frac{1}{\beta} \int_{-\infty}^{\infty} dE D(E) \ln \left[1 + e^{-\beta(E - \mu)} \right], \quad (2.82)$$

onde A_s é a energia livre de Helmholtz por unidade de área para férmions não interagentes. A Eq.(2.82) no limite $T \rightarrow 0$, é escrita como

$$A_s = \frac{1}{4\pi l_c^2} \sum_n E_n \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{E_F - E_n}{\sqrt{2}\Gamma} \right) \right] - \frac{\Gamma}{(2\pi)^{3/2} l_c^2} \sum_n e^{(E_F - E_n)^2 / 2\Gamma^2}. \quad (2.83)$$

A partir da energia livre de Helmholtz por unidade de área, podemos obter a magnetização média através da relação termodinâmica

$$M = - \left(\frac{\partial A_s}{\partial B} \right)_T. \quad (2.84)$$

Mostramos resultados para a energia livre de Helmholtz por unidade de área A_s em função de B nas Figs. (2.21) e (2.22) para $T = 0$ onde tomamos duas densidades de elétrons n_s . Observa-se, ao se comparar as Figs. (2.21) e (2.22) que, com o aumento da densidade eletrônica n_s , o comportamento oscilatório da energia livre se torna mais intenso. Observamos também a presença do padrão modular em A_s , devido somente a ISOR.

Nas Figs. (2.23) e (2.24), mostramos resultados para a magnetização na direção do campo em unidades de $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$ a $T = 0$ tomando-se duas densidades de elétrons n_s . A magnetização na direção do campo também apresenta comportamento oscilatório dependente da densidade eletrônica n_s e, com a presença da ISOR, a magnetização apresenta modulações. Esta modulação vista na energia livre e na magnetização deve-se a dependência destas grandezas com respeito a energia de Fermi a $T = 0$. As oscilações na magnetização são semelhantes às oscilações de Hass-Van Alphen, observadas experimentalmente na magnetização em função do campo magnético externo em poços quânticos[59].

2.6 Conclusões Parciais

Consideramos o GE2D na presença da ISOR e de um campo magnético inclinado. Determinamos os níveis de energia acessíveis aos elétrons e os auto-estados associados através do método das frações continuadas e também através do tratamento direto do sistema tridiagonal homogêneo (2.17) utilizando-se subrotinas de diagonalização[55]. Quanto aos níveis de energia, seu comportamento com respeito ao campo não depende da ISOR para campos magnéticos dados pela relação 2.40.

Analisando o comportamento dos níveis de energia em função de θ , observamos que há a presença de degenerescência nos níveis de energia, na ausência de ISOR ($\alpha_R = 0$) e campo magnético na direção perpendicular ao plano que contém os elétrons ($\theta = 0$) além da degenerescência em p_x . Esta quebra de degenerescência tem papel fundamental no comportamento da condutividade Hall σ_{xy} .

Devido a presença da ISOR, observamos modulações na densidade de estados. Estas modulações resultam nas modulações vistas na energia de Fermi. Estas modulações surgem em função do espaçamento desigual entre os níveis, provocadas somente pelo termo de ISOR presente na Hamiltoniano.

No limite $\Gamma \rightarrow 0$ a energia de Fermi apresenta saltos. No caso da ausência de MP1D, as descontinuidades para a energia de Fermi *versus* campo, para campos externos B maiores, acontece devido a necessidade de mais elétrons para preencher cada nível de energia, tal como explici-

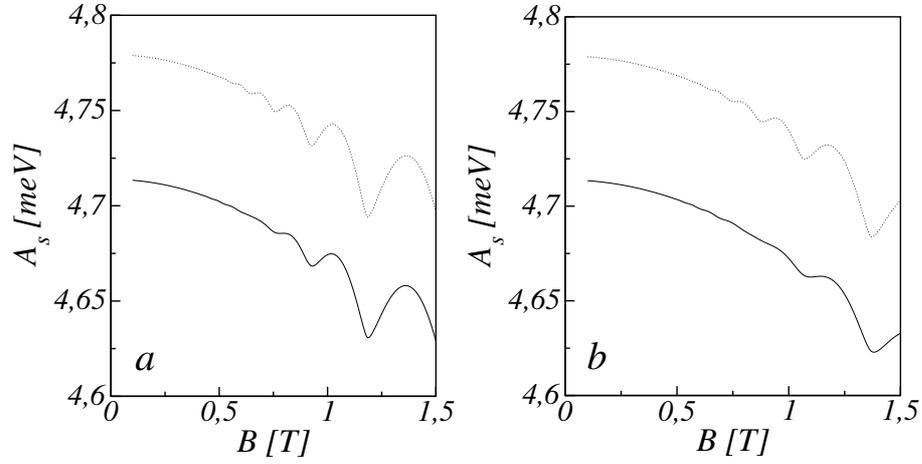


Figura 2.21: Energia livre de Helmholtz por unidade de área A_s em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ cm $^{-2}$, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

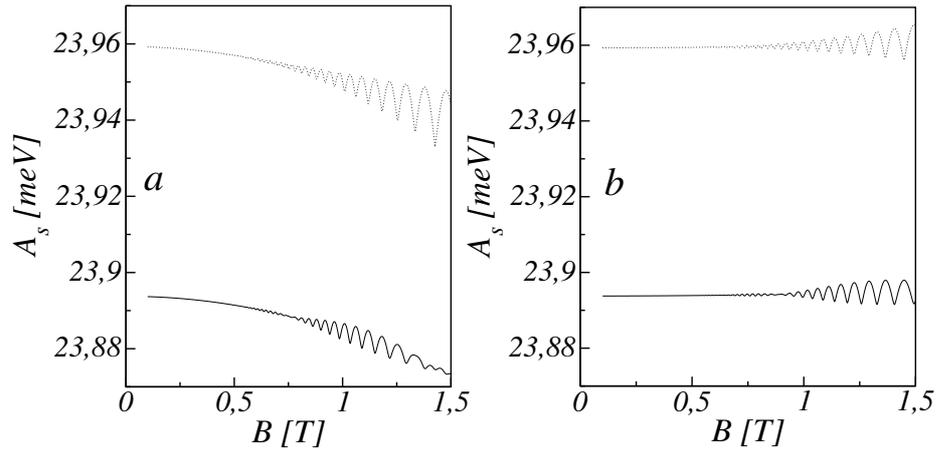


Figura 2.22: Energia livre de Helmholtz por unidade de área A_s em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ cm $^{-2}$, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

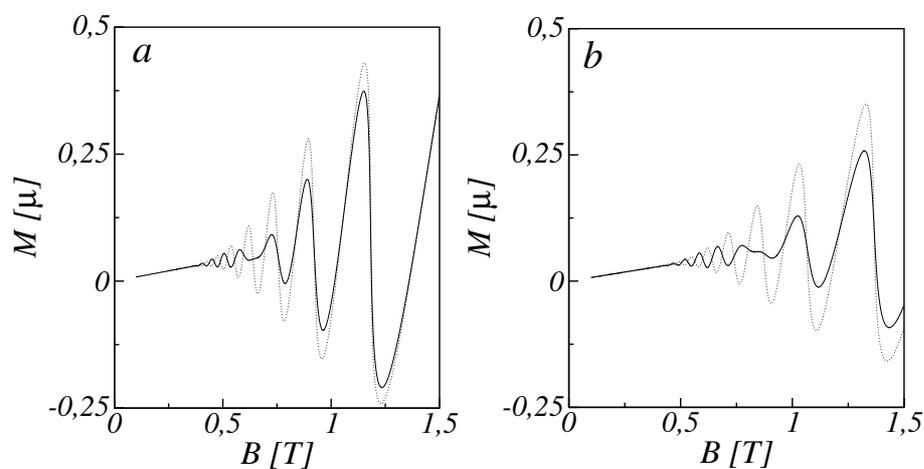


Figura 2.23: Magnetização M em função do campo B em unidades de $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$ para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada curva, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ e $T = 0$.

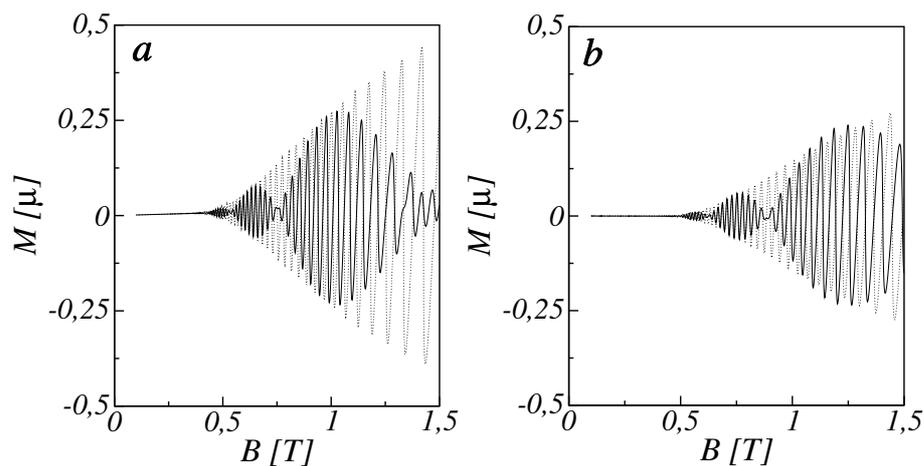


Figura 2.24: Magnetização M em função do campo B em unidades de $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$ para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada curva, temos: $\alpha_R = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ e $T = 0$.

tado na Eq.(2.23). Os elétrons gradualmente esvaziam os níveis energeticamente superiores, passando a ocupar os níveis energeticamente inferiores. O salto acontece quando um nível é totalmente esvaziado por transições para níveis mais baixos.

De forma semelhante, as discontinuidades observadas na energia de Fermi em função de θ na ausência de MPID podem ser entendidas devido a degenerescência dos níveis ser diretamente proporcional a $\cos \theta$, o que implica na necessidade de menos elétrons para se preencher cada nível de energia com o aumento de θ . Os elétrons provenientes de níveis energeticamente inferiores passam a ocupar gradualmente os níveis energeticamente superiores com o aumento de θ . O salto acontece quando um nível é totalmente populado por elétrons provenientes de níveis mais baixos.

As discontinuidades na energia de Fermi desaparecem gradualmente com o aumento de Γ devido a superposição entre os níveis, o que permite acomodar os elétrons em estados intermediários entre os níveis ou bandas de energia. O comportamento oscilatório da energia de Fermi depende da densidade eletrônica n_s : ao aumentar a densidade eletrônica, a energia de Fermi passa a apresentar um comportamento oscilatório mais intenso.

A condutividade Hall é quantizada no caso da ausência de MPID. No caso $\theta = 0$ e $\alpha_R = 0$, a condutividade Hall só pode assumir os valores ne^2/h com $n = 1, 2, 3, \dots$. Na presença de ISOR ou de uma componente do campo externo ao longo da região onde os elétrons se encontram confinados, aparecem *plateaus* intermediários $(2n + 1)e^2/(2h)$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n + 1$, associados à quebra de degenerescência observada nos níveis de energia. A condutividade Hall σ_{xy} em função de θ também é quantizada. O comportamento dos *plateaus* de σ_{xy} está associado às oscilações vistas na energia de Fermi em função de θ .

Os saltos associados aos *plateaus* da condutividade Hall acontecem quando a energia de Fermi do sistema se torna igual a um nível de energia. Isto acontece devido a condutividade Hall depender do numero de transições possíveis entre os elétrons abaixo do nível de Fermi e os elétrons que se encontram acima do nível de Fermi.

Em todos os casos, observamos a presença de oscilações na condutividade colisional, semelhantes às oscilações de Shubnikov-de Hass, verificadas experimentalmente σ_{yy} [10, 11, 17, 22, 37, 38]. As oscilações na condutividade colisional σ_{yy} possuem modulações devido a ISOR, modulações estas que se originam na densidade de estados e na energia de Fermi. A intensidade da condutividade colisional aumenta com Γ devido a se aumentar o número de superposições entre os níveis de energia e E_F , conforme mostrado na Fig.(3.21). Esta dependência acontece devido a taxa de transição entre os níveis $w_{n,n'}$ ser diretamente proporcional a Γ , de acordo com a Eq.(2.64).

Em todos os casos, com o aumento da densidade eletrônica n_s , aumenta-se o número de oscilações na energia livre. Na magnetização na direção do campo, observamos um comportamento oscilatório qualitativamente semelhante as oscilações de Hass-Van Alphen observado experimentalmente[59] e caracterizado por oscilações na magnetização em função do campo.

No próximo Capítulo, consideramos a inclusão do termo Dresselhaus e estudamos os seus efeitos sobre as propriedades físicas do GE2D. Em geral, pela semelhança dos termos, observamos que eles possuem efeitos qualitativamente semelhantes.

3 *GE2D na presença de um campo magnético inclinado: Efeitos da ISOD*

Neste Capítulo, estudamos o sistema definido no Capítulo 2, com a inclusão do termo da ISOD, expresso na Eq.(1.4). De uma maneira semelhante a utilizada no Capítulo anterior, consideramos que o sistema é adequadamente descrito por um conjunto de partículas independentes e que se encontra na presença de um campo magnético externo inclinado com respeito a direção de crescimento, expresso na Eq.(2.1).

Em geral, nestes sistemas, a interação Rashba é mais importante que a Dresselhauss, por conta que a interação Rashba além de ser um efeito do crescimento dos materiais capazes de confinar GE2D's, pode ser intensificada com a aplicação de um campo elétrico externo. No entanto, por estes mesmos materiais confinantes, como por exemplo o GaAs e o InAs apresentarem estruturas cristalinas do tipo Zinblende que não apresentam simetria de inversão, situação esta que dá origem ao termo Dresselhauss[14], é necessário, para a descrição mais completa, considerar-se a correção devido a presença deste termo no Hamiltoniano.

Seguindo a mesma seqüência do Capítulo 2, escrevemos o Hamiltoniano para uma partícula e obtemos a equação de Schrödinger na forma secular com o objetivo de se calcular numericamente o espectro de energia, a densidade de estados e a energia de Fermi do sistema. De posse destes resultados, determinamos a condutividade Hall, a condutividade σ_{yy} , a energia livre de Helmholtz e a magnetização e analisamos a influência relativa dos termos de ISOR, ISOD e da interação Zeeman sobre estas propriedades.

3.1 O Hamiltoniano

O Hamiltoniano para um elétron, na presença de campo magnético inclinado, ISOR e ISOD, é escrito como

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 + \frac{\alpha_R}{\hbar} [\vec{\sigma} \times (\vec{p} + e\vec{A})]_z + \frac{\alpha_D}{\hbar} [\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e\vec{A})] - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \quad (3.1)$$

onde o primeiro termo representa a energia cinética, o segundo a ISOR, o terceiro a ISOD, escrita na Eq.(1.4), o quarto expressa a interação Zeeman, m é a massa efetiva do InAs, igual a 0,05 da massa do elétron e o potencial vetor \vec{A} é dado pela Eq.(2.3).

Utilizando o mesmo procedimento do Capítulo 2, reescrevemos o Hamiltoniano, expandindo-o em termos das componentes x, y, z do potencial vetor \vec{A} , do campo magnético \vec{B} , do vetor posição \vec{r} e do vetor momentum linear \vec{p} . Após o uso do operador translação, dos operadores escada e os operadores criação e aniquilação, dados pelas Eqs. (2.9), (2.10) e (2.11), obtemos o Hamiltoniano efetivo

$$H_{\text{eff}} = \hbar\omega_c \cos\theta \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) - i \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\alpha_R}{l_c} \left(\sigma_+ a - \sigma_- a^\dagger \right) - \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{\alpha_D}{l_c} \left(\sigma_+ a^\dagger + \sigma_- a \right) - \frac{1}{2} \hbar\omega_c \left[\frac{1}{2} \sin\theta (\sigma_+ + \sigma_-) + \cos\theta \sigma_z \right] + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \delta^2 \sin^2\theta, \quad (3.2)$$

com ω_c , l_c e y_c escritos na Eq.(2.7) e o fator de degenerescência em p_x é dado na Eq.(2.23). Na obtenção dos resultados numéricos neste Capítulo, consideramos a espessura do sistema igual a 50Å.

Para $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 0$ e $\theta = 0$, temos $H_{\text{eff}} = H_o$, escrito na Eq.(2.13). Portanto, podemos expressar os auto-estados de H_{eff} utilizando como base os auto-estados de H_o , expressos na Eq.(2.14), de tal forma que obtemos a equação de Schrödinger efetiva reescrita no seguinte sistema de equações lineares

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} - E & h_{1,2} & 0 & h_{1,4} & 0 & 0 & \cdots \\ h_{2,1} & h_{2,2} - E & h_{2,3} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} - E & h_{3,4} & 0 & h_{3,6} & \cdots \\ h_{4,1} & 0 & h_{4,3} & h_{4,4} - E & h_{4,5} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & h_{5,4} & h_{5,5} - E & h_{5,6} & \cdots \\ 0 & 0 & h_{6,3} & 0 & h_{6,5} & h_{6,6} - E & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0. \quad (3.3)$$

Na Eq.(3.3), os elementos de matriz $h_{n,n}$ são dados na Eq.(2.18), $h_{n,n+1}$ e $h_{n+1,n}$ na Eq.(2.19) e $h_{n,n+3}$, $h_{n+3,n}$, para n ímpar, são expressos por

$$h_{n,n+3} = h_{n+3,n} = -\frac{\alpha_D}{l_c} \sqrt{n+1} \quad (3.4)$$

As componentes v_n do autovetor correspondente ao autovalor E_n estão relacionadas com os coeficientes $C_{n,\sigma}$ escritos na Eq.(2.14) através da Eq.(2.20). Desta maneira, as auto-energias e os

coeficientes correspondentes $C_{i,\sigma}$ são determinados ao se calcular os autovalores e autovetores da matriz infinita escrita na Eq.(3.3), porém, antes de apresentarmos as soluções do sistema de equações lineares mais geral escrito na Eq.(3.3), podemos considerar alguns casos particulares nas seções (3.1.1) e (3.1.2).

3.1.1 Caso 1: Ausência de ISOR

No primeiro caso, para $\alpha_R = 0$, $h_{n,n+1}$ e $h_{n+1,n}$ na Eq.(3.3) para n ímpar são nulos. Mudando apropriadamente a ordem das equações lineares, obtemos o seguinte sistema tridiagonal

$$\begin{pmatrix} h'_{1,1} - E & h'_{1,2} & 0 & 0 & \cdots \\ h'_{2,1} & h'_{2,2} - E & h'_{2,3} & 0 & \cdots \\ 0 & h'_{3,2} & h'_{3,3} - E & h'_{3,4} & \cdots \\ 0 & 0 & h'_{4,3} & h'_{4,4} - E & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v'_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \\ v'_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0, \quad (3.5)$$

onde os elementos de matriz $h'_{n,n}$ são dados por

$$h'_{n,n} = \begin{cases} \hbar\omega_c \cos \theta \left(\frac{n-1}{2} \right) + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \delta^2 \sin^2 \theta & \text{para } n \text{ ímpar,} \\ \hbar\omega_c \cos \theta \left(\frac{n}{2} - 1 \right) + \frac{1}{2} m\omega_c^2 \delta^2 \sin^2 \theta & \text{para } n \text{ par,} \end{cases} \quad (3.6)$$

enquanto os elementos de matriz $h'_{n,n+1}$ e $h'_{n+1,n}$ são expressos por

$$h'_{n,n+1} = h'_{n+1,n} = \begin{cases} -\frac{1}{2} \hbar\omega_c \sin \theta & \text{para } n \text{ ímpar,} \\ -\frac{\alpha_D}{l_c} \sqrt{n} & \text{para } n \text{ par,} \end{cases} \quad (3.7)$$

e as componentes v'_n do autovetor correspondente ao autovalor E são dadas em termos dos coeficientes da combinação linear (2.14), por

$$v'_n = \begin{cases} C_{\frac{n-1}{2}, -} & \text{para } n \text{ ímpar,} \\ C_{\frac{n}{2}-1, +} & \text{para } n \text{ par.} \end{cases} \quad (3.8)$$

Os autovalores e autovetores da matriz tridiagonal da Eq.(3.5) podem ser calculados pelo método das frações continuadas, seguindo o processo descrito no Capítulo 2, seção 2.2.

3.1.2 Caso 1: Ausência de ISOR e Campo Magnético na direção de Crescimento

Neste caso particular, $\alpha_R = 0$ e $\theta = 0$, o que corresponde a fazer $h'_{n,n+1} = 0$ para n ímpar na Eq.(3.5)

$$\begin{pmatrix} h'_{1,1} - E & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & h'_{2,2} - E & h'_{2,3} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & h'_{3,2} & h'_{3,3} - E & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & h'_{4,4} - E & h'_{4,5} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & h'_{5,4} & h'_{5,5} - E & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v'_1 \\ v'_2 \\ v'_3 \\ v'_4 \\ v'_5 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0, \quad (3.9)$$

onde os elementos da diagonal são dados por

$$h'_{n,n} = \begin{cases} \hbar\omega_c \left(\frac{n-1}{2} \right) & \text{para } n \text{ ímpar,} \\ \hbar\omega_c \left(\frac{n}{2} - 1 \right) & \text{para } n \text{ par,} \end{cases} \quad (3.10)$$

e os elementos de matriz $h'_{n,n+1}$ e $h'_{n+1,n}$, para n par, são dados por

$$h'_{n,n+1} = h'_{n+1,n} = -\frac{\alpha_D}{l_c} \sqrt{n/2}. \quad (3.11)$$

Os níveis de energia e os auto-estados, neste caso particular, são obtidos por processo análogo ao visto no Capítulo 2, da Eq.(2.27) a Eq.(2.31). O estado fundamental é dado por

$$E_0^- = 0, \quad |\psi_0^-(k_x)\rangle = |0, -\rangle, \quad (3.12)$$

e os outros auto-estados acessíveis do sistema são escritos como

$$E_l^\pm = l\hbar\omega_c \pm \sqrt{2l} \frac{\alpha_D}{l_c}, \quad l = 1, 2, \dots \quad (3.13)$$

$$|\psi_l^\pm(k_x)\rangle = \frac{e^{ik_x}}{\sqrt{2L_x}} [|l, +\rangle \mp |l-1, -\rangle], \quad l = 1, 2, \dots$$

Observamos a presença de subbandas + e - devido ao termo Zeeman além de que os auto-estados obtidos neste caso particular onde se considerou a ISOD, é uma combinação linear entre dois níveis de Landau $|l-1\rangle$ e $|l\rangle$, portanto, o termo ISOD também possibilita a mistura entre os estados orbitais adjacentes $l-1$ e l , da mesma forma que o visto para o termo ISOR na seção 2.1.1. Como o comportamento qualitativo das curvas depende do padrão assumido pelos níveis,

percebemos que a ISOD também deverá ser capaz de imprimir modulações nas propriedades do GE2D.

Porém, ao se comparar as Eqs. (2.31) e (3.14), observamos que, além de considerar $\theta = 0$, temos ao considerar apenas o termo ISOR, os autoestados são combinações lineares de $|l-1, +\rangle$ e $|l, -\rangle$ enquanto que ao considerar apenas a ISOR, temos que os autoestados são combinações lineares de $|l-1, -\rangle$ e $|l, +\rangle$. Portanto, a polarização da base dos auto-estados é trocada ao se considerar apenas um termo ou outro no Hamiltoniano, o que deve levar a diferenças quantitativas nas curvas.

Na próxima seção, mostramos as soluções numéricas do sistema mais geral, escrito na Eq.(3.3).

3.2 Níveis de Energia, Densidade de Estados e Energia de Fermi

Com o objetivo de se calcular numericamente os autovalores e autovetores no caso geral, escrito na Eq.(3.3), usamos o tratamento numérico direto do sistema homogêneo truncado utilizando-se subrotinas padrão de diagonalização[55]. Consideramos o número de elementos suficiente para convergência das propriedades físicas calculadas.

Mostramos nas Figs. (3.1) e (3.2), a dependência dos níveis energeticamente mais baixos de um GE2D em função do ângulo θ para $B = 1\text{T}$ onde consideramos, em cada curva, a presença de apenas ISOR e ISOD, respectivamente. Observamos, a partir da Fig.(3.1), que a ISOD quebra a degenerescência extra dos níveis de energia vista na Fig.(2.2) para $\theta = 0$ e $\alpha_R = 0$. Na Fig.(3.2), mostramos os resultados para um sistema na presença de ambas as ISO. Portanto a ISOD, assim como a ISOR, é capaz de incluir *plateaus* extras na condutividade Hall.

Nas Figs. (3.3) e (3.4), mostramos a dependência dos níveis de energia energeticamente mais baixos em função do módulo do campo magnético B para $\theta = 0$ e $\theta = 30^\circ$, respectivamente. Observamos, em todos os casos, que os níveis de energia com respeito a B independem da ISOR e da ISOD para campos magnéticos que satisfaçam as seguintes desigualdades

$$\begin{aligned} B \cos \theta &\gg \frac{\alpha_R^2 m^2}{\hbar^3 e} \\ B \cos \theta &\gg \frac{\alpha_D^2 m^2}{\hbar^3 e}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

obtida ao se considerar que os elementos de matriz na Eq.(3.3) dependentes de α_R ou α_D são pequenos em relação aos outros elementos de matriz relevantes. Podemos observar que a ISOR

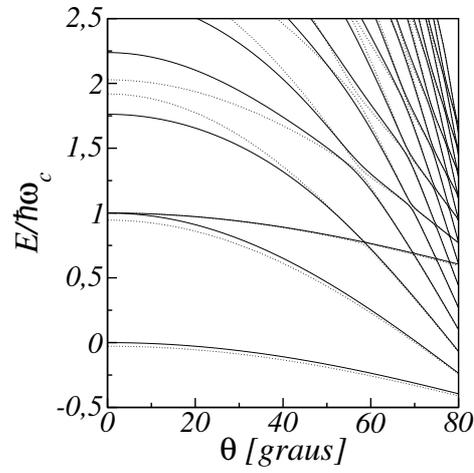


Figura 3.1: Níveis de energia E em função de θ para $B = 1\text{T}$. Em cada curva, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}\text{eV/m}$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}\text{eV/m}$, $\alpha_D = 0$ (linha cheia).

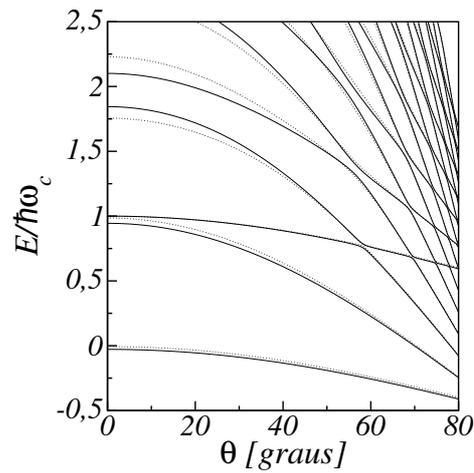


Figura 3.2: Níveis de energia E em função de θ para $B = 1\text{T}$. Em cada curva, temos: $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12}\text{eV/m}$, $\alpha_D = 10^{-11}\text{eV/m}$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}\text{eV/m}$, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}\text{eV/m}$ (linha cheia).

e a ISOD não são determinante no comportamento dos níveis para campos magnéticos dados na Eq.(3.14) observando a pequena mudança qualitativa entre as curvas para campos magnéticos maiores nas Figs.(3.3) e (3.4).

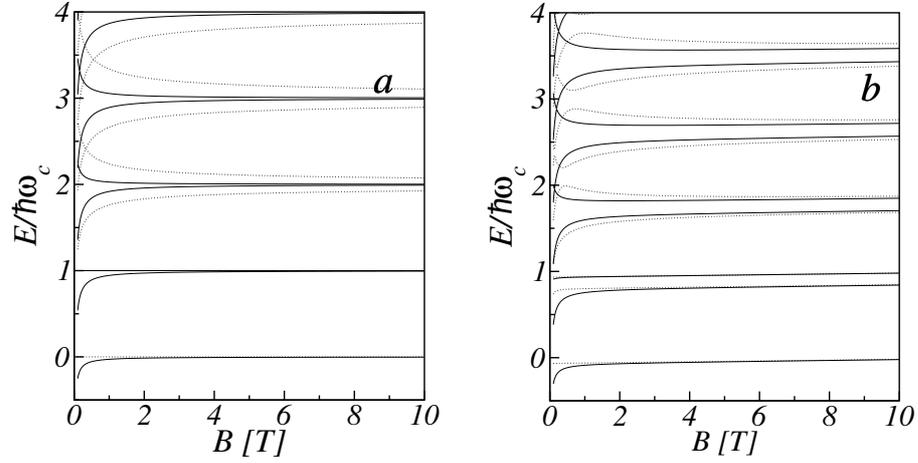


Figura 3.3: Níveis de energia E em função de B . Em cada curva, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia).

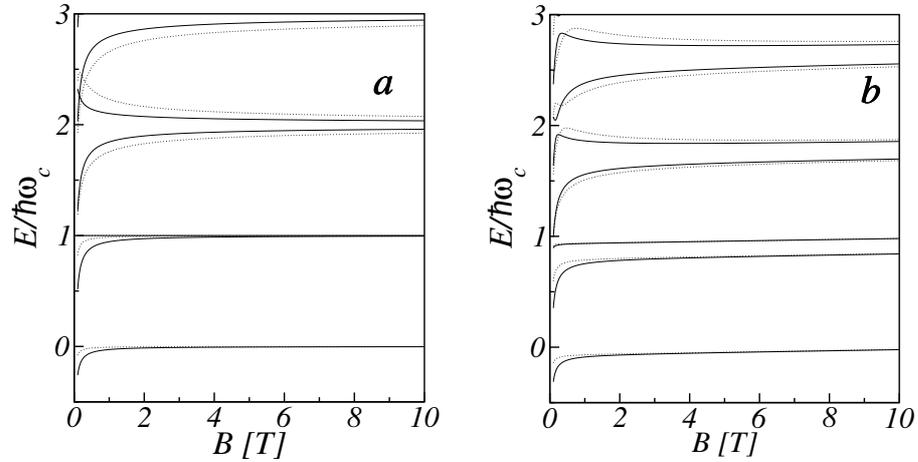


Figura 3.4: Níveis de energia E em função de B . Em cada curva, temos: $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m (linha cheia).

A densidade de estados total é obtida usando-se a Eq.(2.42)

$$D(E) = \frac{S_0}{(2\pi)^{3/2} l_c^2 \Gamma} \sum_n e^{-(E-E_n)^2/2\Gamma^2}. \quad (3.15)$$

Nas Figs.(3.5-b) e (3.6-b) mostramos o comportamento da densidade de estados para Γ pequeno com relação à separação dos níveis. A densidade de estados, tal como mostrada nas Figs. (2.4-b) e (2.5-b), é formada por picos espaçados, isto é, sem superposição dos níveis. Nas

Figs.(3.5-c) e (3.6-c), para Γ maior, observamos superposição entre os níveis e a presença da modulação, devido somente a ISOD, de uma maneira semelhante a obtida devido a presença da ISOR. Este comportamento modular na densidade de estados devido a ISOD também deve repercutir na Energia de Fermi, da mesma forma que o mostrado no Capítulo 2, e consequentemente em todas as propriedades físicas do sistema produzindo modulações nas propriedades que dependem explicitamente da densidade de estados.

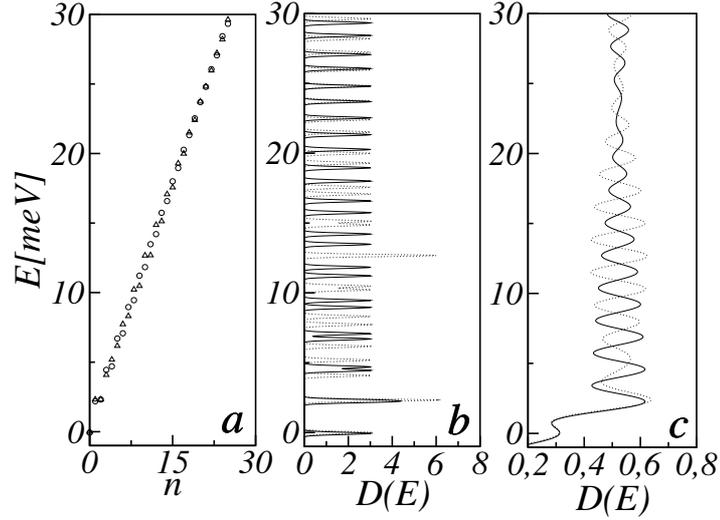


Figura 3.5: Níveis de energia E em ordem crescente para $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (triângulos) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (círculos) (a) e densidade de estados $D(E)$ para $\Gamma = 0,05$ meV (b) e $\Gamma = 0,5$ meV (c) onde $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $\theta = 0$ e $B = 1T$.

A energia de Fermi E_F é obtida numericamente da expressão

$$\frac{2hn_s}{eB \cos \theta} = \sum_n \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{E_F - E_n}{\sqrt{2}\Gamma} \right) \right], \quad (3.16)$$

calculada através do modo descrito na seção 2.2.

Na Fig.(3.7-(a)), onde tomamos $n_s = 10^{11}$ elétrons/m², $\theta = 30^\circ$ e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m, observamos que, ao se inserir o termo de ISOD, o comportamento da energia de Fermi para $\Gamma = 0,005$ meV é similar ao visto na Fig.(2.6-(a)): para campos externos B maiores, há a necessidade de mais elétrons para preencher cada nível de energia, pois a degenerescência com respeito a p_x aumenta com B e o saltos acontecem quando um nível é totalmente esvaziado pelas transições dos elétrons para níveis de energia mais abaixo.

O comportamento descontínuo da energia de Fermi E_F também é na Fig.(3.7-(b)) no limite $\Gamma \rightarrow 0$, sendo similar ao visto na Fig.(2.6-(b)). Com o aumento de θ , há necessidade de menos elétrons para preencher totalmente cada nível de energia. Os saltos ocorrem quando um nível é

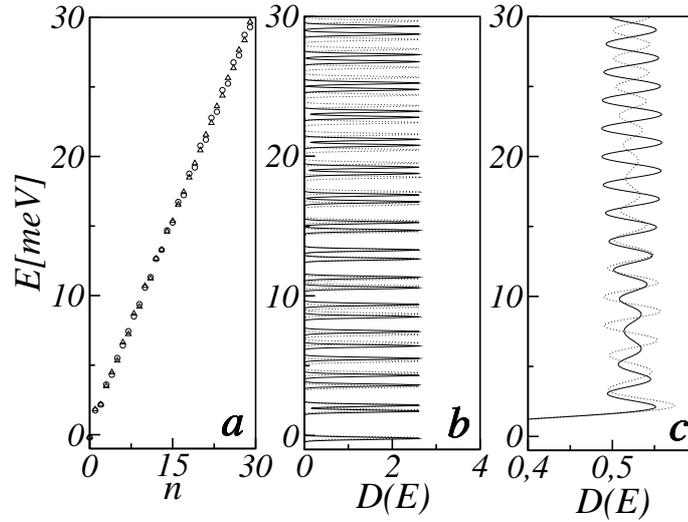


Figura 3.6: Níveis de energia E em ordem crescente para $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12} \text{eV/m}$, $\alpha_D = 10^{-11} \text{eV/m}$ (triângulos) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{eV/m}$, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12} \text{eV/m}$ (círculos) (a) e densidade de estados $D(E)$ para $\Gamma = 0,05 \text{meV}$ (b) e $\Gamma = 0,5 \text{meV}$ (c) onde $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12} \text{eV/m}$, $\alpha_D = 10^{-11} \text{eV/m}$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{eV/m}$, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12} \text{eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $\theta = 30^\circ$ e $B = 1T$.

totalmente populado por elétrons provenientes de níveis mais abaixo.

Identicamente ao mostrado no Capítulo 2, ao aumentar o valor de Γ , as discontinuidades nas Figs. (3.7-(a)) e (3.7-(b)) são gradualmente removidas. Este comportamento é entendido considerando-se que ao aumentar Γ , permite-se que as partículas ocupem estados com energia qualquer entre dois níveis adjacentes.

Mostramos, nas Figs. (3.8) e (3.9), resultados para a energia de Fermi em função de θ e, nas Figs. (3.10) e (3.11), resultados para a energia de Fermi em função de B . Em todos os casos, há a presença da modulação devido a presença da ISOR ou da ISOD, como consequência da modulação encontrada na densidade de estados, por causa da dependência explícita de E_F com respeito a $D(E)$. Ao comparar as Figs. (3.8) a (3.11) com a Fig.(3.7), percebemos que o comportamento oscilatório da energia de Fermi se intensifica com o aumento da densidade eletrônica n_s . As modulações em E_F , conforme visto, estão relacionadas ao espaçamento desigual entre os níveis de energia ao se inserir o termo ISOR no Hamiltoniano.

Como as propriedades de transporte não mudam substancialmente com a inclusão do termo de ISOD, continuam dependendo essencialmente dos auto-estados dos elétrons que se encontram no nível de Fermi, portanto, estas modulações deverão ser encontradas nas propriedades de transporte, mesmo com a inclusão da ISOD, ou mesmo considerando-se apenas ela. Estas modulações, que também aparecem devido ao termo ISOD, devem também aparecer nas propri-

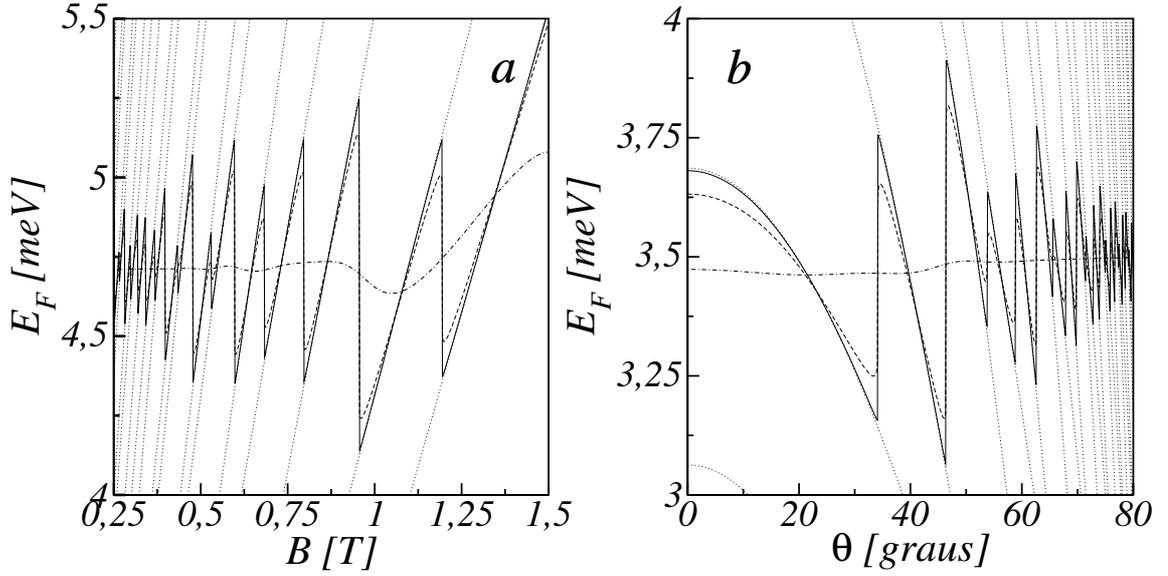


Figura 3.7: (a) Energia de Fermi E_F em função de B com $n_s = 10^{11}$ elétrons/ m^2 para três valores de Γ : $\Gamma = 0,005\text{meV}$ (linha cheia), $\Gamma = 0,05\text{meV}$ (linha tracejada) e $\Gamma = 0,5\text{meV}$ (linha pontilhada-tracejada) e alguns níveis de energia em função de B (linhas pontilhadas). Tomamos em todas as curvas: $\theta = 30^\circ$, $\alpha_R = 10^{-11}\text{eV/m}$ e $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}\text{eV/m}$. (b) Energia de Fermi em função de θ com $n_s = 10^{11}$ elétrons/ m^2 para três valores de Γ : $\Gamma = 0,005\text{meV}$ (linha cheia), $\Gamma = 0,05\text{meV}$ (linha tracejada) e $\Gamma = 0,5\text{meV}$ (linha pontilhada-tracejada) e alguns níveis de energia em função de θ (linhas pontilhadas).

idades termodinâmicas do GE2D, por conta da dependência explícita da densidade de estados e da Energia de Fermi.

3.3 Condutividade Hall

De forma idêntica ao visto na seção (2.3), a condutividade Hall σ_{xy}^{nd} é obtida numericamente a partir da seguinte expressão

$$\sigma_{xy}^{\text{nd}} = \frac{ie^2\hbar}{2\pi l_c^2} \sum_{n,n'} \frac{F(E_n) - F(E_{n'})}{(E_n - E_{n'})^2} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle, \quad (3.17)$$

onde $F(E)$ é dado na Eq.(2.44), $\sum_{k_x} = g$ com g expresso na Eq.(2.23) e $v_\eta = \frac{\partial H}{\partial p_\eta}$ é a componente η do operador velocidade, com $\eta = x, y$. As formas explícitas das componentes do operador velocidade são dadas por

$$\begin{aligned} v_x &= -\frac{\sqrt{2}}{2} l_c \omega_c \cos \theta (a^\dagger + a) - i \frac{\alpha_R}{2\hbar} (\sigma^+ - \sigma^-) + \frac{\alpha_D}{2\hbar} (\sigma^+ + \sigma^-), \\ v_y &= -i \frac{\sqrt{2}}{2} l_c \omega_c \cos \theta (a^\dagger - a) + \frac{\alpha_R}{2\hbar} (\sigma^+ + \sigma^-) + i \frac{\alpha_D}{2\hbar} (\sigma^+ - \sigma^-), \end{aligned} \quad (3.18)$$

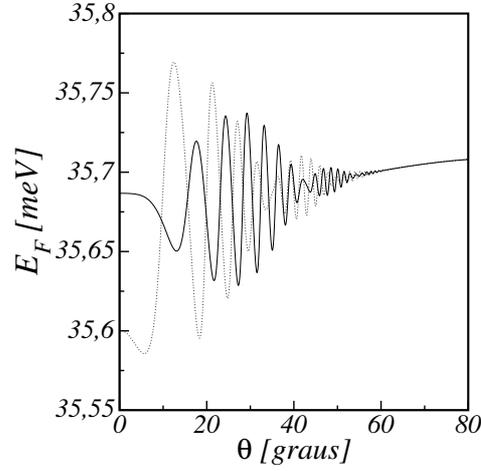


Figura 3.8: Energia de Fermi E_F em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T e $\Gamma = 0,5$ meV.

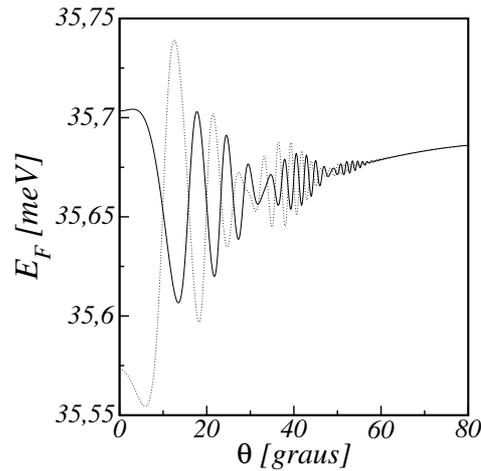


Figura 3.9: Energia de Fermi E_F em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T e $\Gamma = 0,5$ meV.

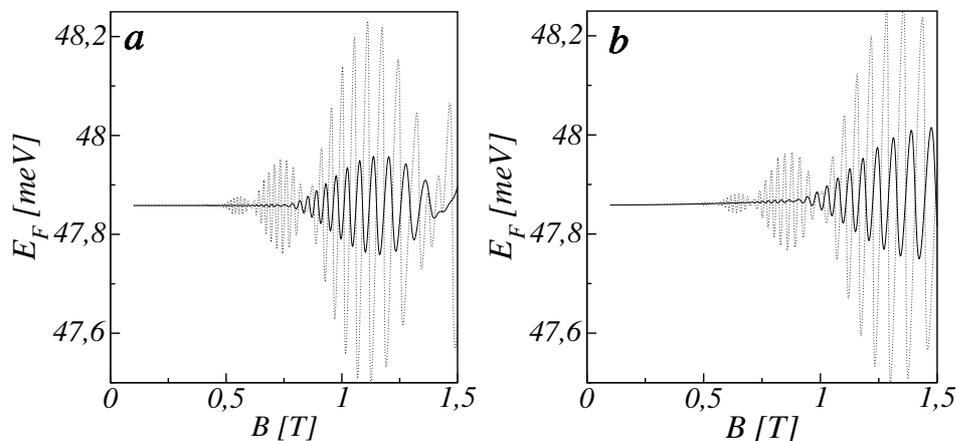


Figura 3.10: Energia de Fermi E_F em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m² e $\Gamma = 0,5$ meV.

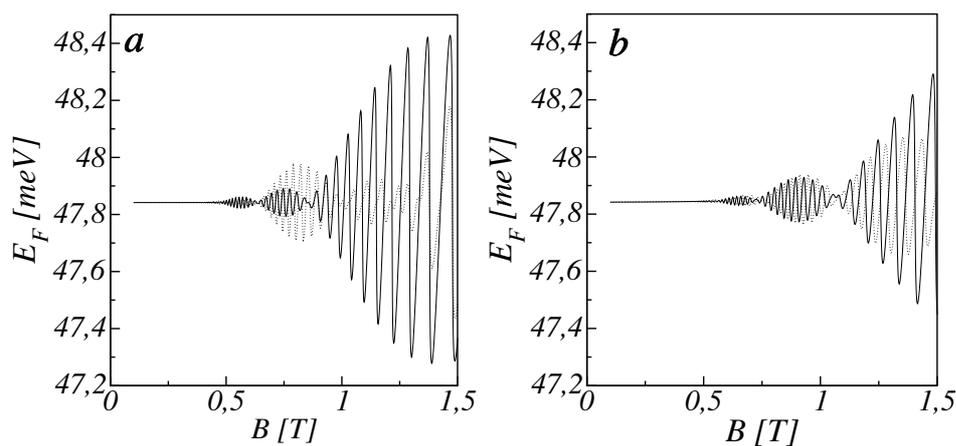


Figura 3.11: Energia de Fermi E_F em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m² e $\Gamma = 0,5$ meV.

no caso da presença da ISOR e da ISOD.

O limite $T \rightarrow 0$ da Eq.(3.17) é dado por

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2\hbar}{2\pi l_c^2} \sum_{n,n'} \frac{u(E_F - E_n) - u(E_F - E_{n'})}{(E_n - E_{n'})^2} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle. \quad (3.19)$$

Os elementos de matriz $\langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle$ e $\langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle$ em termos dos coeficientes da combinação linear (2.14), são calculados através da Eq.(3.18)

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle &= -\frac{l_c \omega_c \cos \theta}{\sqrt{2}} \sum_{l,\sigma=\pm} \sqrt{l} (C_{l-1,\sigma}^{(n')})^* C_{l,\sigma}^{(n)} + \sqrt{l+1} (C_{l+1,\sigma}^{(n')})^* C_{l,\sigma}^{(n)} \\ &\quad - \frac{i\alpha_R}{\hbar} \sum_{l=0} \left[(C_{l,-}^{(n)})^* C_{l,+}^{(n)} - (C_{l,+}^{(n)})^* C_{l,-}^{(n)} \right] \\ &\quad + \frac{\alpha_D}{\hbar} \sum_{l=0} \left[(C_{l,-}^{(n')})^* C_{l,+}^{(n)} + (C_{l,+}^{(n')})^* C_{l,-}^{(n)} \right], \\ \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle &= -\frac{il_c \omega_c \cos \theta}{\sqrt{2}} \sum_{l,\sigma=\pm} \sqrt{l} (C_{l,\sigma}^{(n)})^* C_{l-1,\sigma}^{(n')} - \sqrt{l+1} (C_{l,\sigma}^{(n)})^* C_{l+1,\sigma}^{(n')} \\ &\quad + \frac{\alpha_R}{\hbar} \sum_{l=0} \left[(C_{l,-}^{(n')})^* C_{l,+}^{(n)} + (C_{l,+}^{(n')})^* C_{l,-}^{(n)} \right] \\ &\quad + \frac{i\alpha_D}{\hbar} \sum_{l=0} \left[(C_{l,-}^{(n)})^* C_{l,+}^{(n')} - (C_{l,+}^{(n)})^* C_{l,-}^{(n')} \right]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Mostramos resultados para a condutividade Hall em função de θ nas Figs. (3.12) e (3.13). Observamos que a condutividade Hall, semelhantemente ao resultado obtido no Capítulo 2, é quantizada, apresentando *plateaus* nos valores ne^2/h com $n = 1, 2, 3, \dots$ e $(2n+1)e^2/(2h)$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n+1$. A quantização na condutividade Hall σ_{xy} também é vista nas Figs. (3.14) e (3.15), onde mostramos a condutividade Hall em função de B . Em todos os casos há a presença dos *plateaus* intermediários $(2n+1)e^2/(2h)$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n+1$. Conforme mostrado na seção 2.3, estes novos *plateaus* aparecem quando a degenerescência extra para $\theta = 0$, $\alpha_R = 0$ e $\alpha_D = 0$ é quebrada, ou seja, em vez de níveis duplamente degenerados, há o dobro de níveis, de tal forma que os *plateaus* intermediários aparecem por conta da introdução destes novos níveis.

O comportamento dos *plateaus* da condutividade Hall está associado às oscilações na energia de Fermi. De forma similar ao visto na Fig.(2.15), as transições ocorrem quando a curva da energia de Fermi cruza uma curva correspondente a um nível de energia do sistema, tal

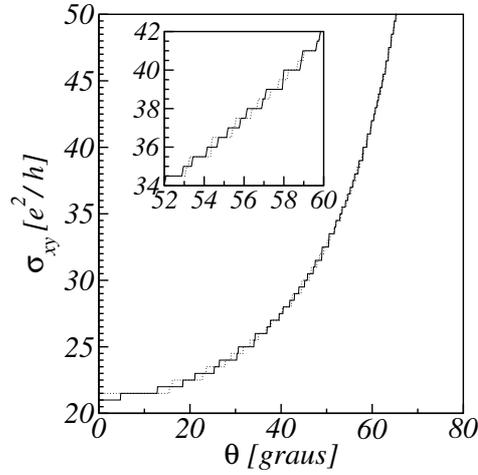


Figura 3.12: Condutividade Hall σ_{xy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$. No inset fica mais clara a quantização na condutividade.

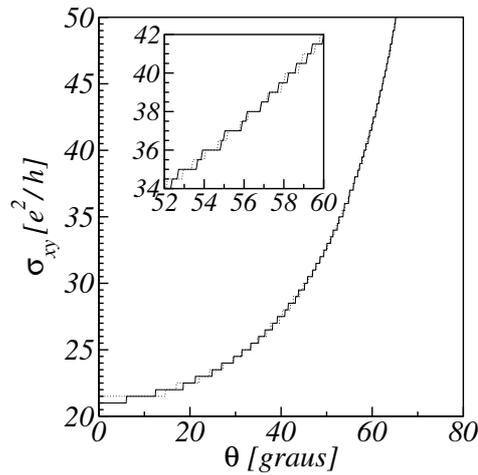


Figura 3.13: Condutividade Hall σ_{xy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$. No inset fica mais clara a quantização na condutividade.

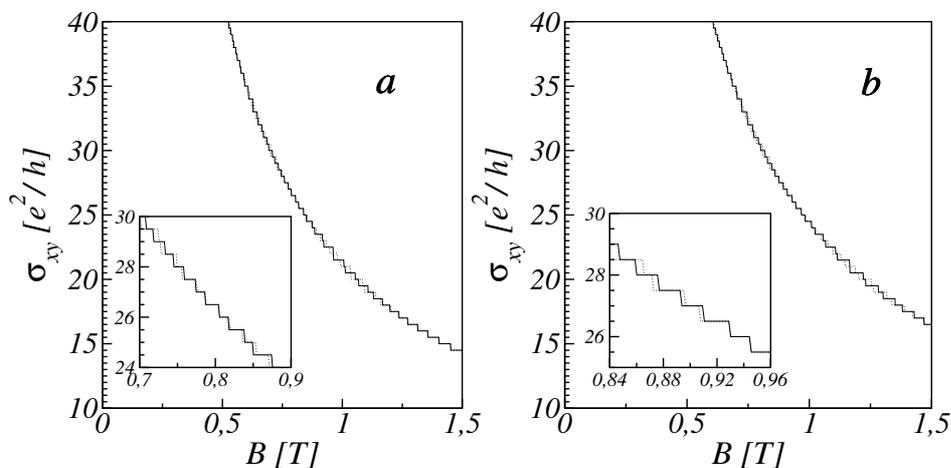


Figura 3.14: Condutividade Hall σ_{xy} em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$. No inset fica mais clara a quantização na condutividade.

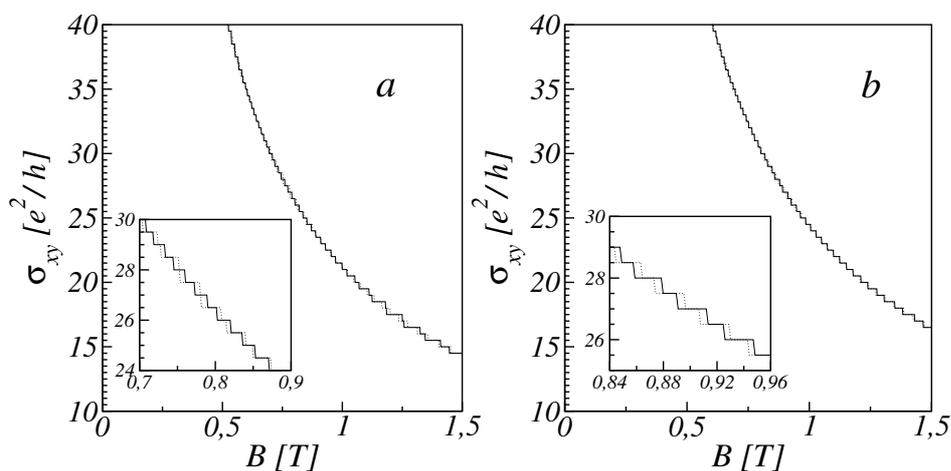


Figura 3.15: Condutividade Hall σ_{xy} em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$. No inset fica mais clara a quantização na condutividade.

como mostrado na Fig.(3.16). Também observamos, a partir da Fig.(3.16), que para densidades eletrônicas menores, em geral, o comprimento dos *plateaus* é maior, o que é associado ao comportamento oscilatório menos intenso na energia de Fermi.

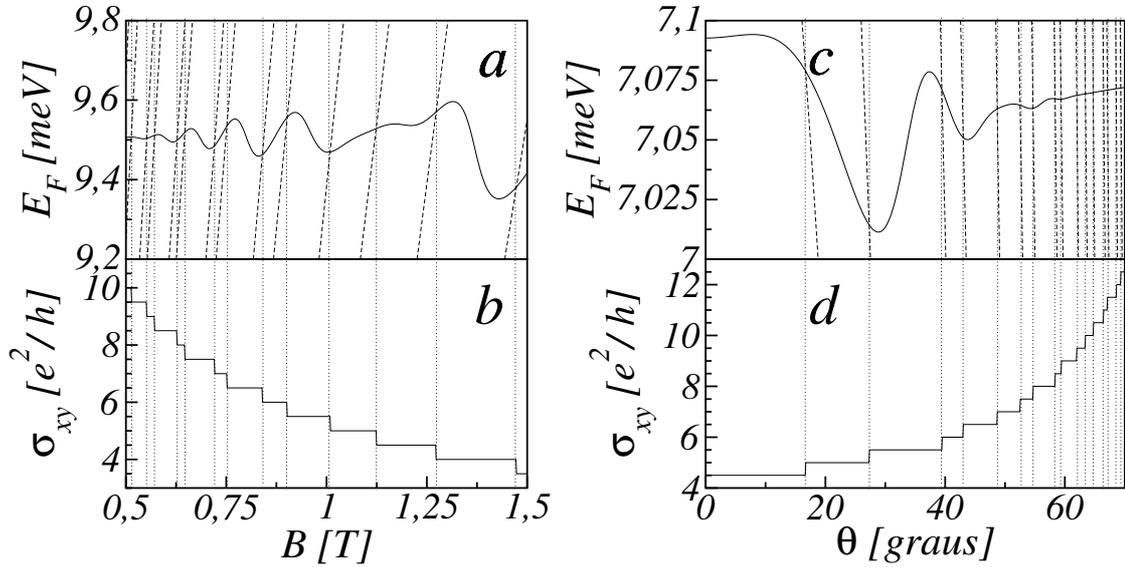


Figura 3.16: (a) Energia de Fermi E_F (linha cheia) e alguns níveis de energia em função de B (linhas tracejadas). (b) Condutividade Hall σ_{xy} em função de B . Em todas as curvas em (a) e (b), temos: $\theta = 30^\circ$, $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ cm $^{-2}$, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$. (c) Energia de Fermi E_F (linha cheia) e alguns níveis de energia em função de θ (linhas tracejadas). (d) Condutividade Hall σ_{xy} em função de θ . Em todas as curvas em (c) e (d), temos: $B = 1$ T, $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ cm $^{-2}$, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

Estes saltos na condutividade são explicados da mesma forma que o visto na Capítulo 2 porque as expressões para a condutividade Hall não apresentam diferenças significativas. Na Eq.(3.19), os termos diferentes de zero no somatório são aqueles que envolvem transições entre os elétrons que estão abaixo do nível de Fermi para níveis acima do nível de Fermi ou vice-versa. Com o aumento do campo externo a condutividade reduz porque, como há menos níveis preenchidos, há menos transições entre os níveis abaixo do nível de Fermi para níveis acima do nível de Fermi, portanto a condutividade diminui com o aumento do campo. No caso da condutividade Hall em função de θ ocorre o inverso: como há mais níveis preenchidos porque a degenerescência dos níveis diminui com θ , há mais transições possíveis entre os níveis que estão abaixo do nível de Fermi e os níveis acima da energia de Fermi, logo, a condutividade aumenta com θ .

3.4 Condutividade σ_{yy}

Utilizando-se o mesmo método visto na seção 2.4, obtemos que as contribuições difusivas σ_{xx}^{dif} e σ_{yy}^{dif} , são nulas. Portanto, a condutividade σ_{yy}^{d} , na presença da ISOD, é dada apenas pela contribuição colisional σ_{yy}^{col} , que por sua vez, é obtida da seguinte expressão

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{col}} &= \frac{\beta e^2}{h} \frac{1}{\sqrt{\pi} l_c^2} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\varpi e^{-(\varpi - E_n)^2 / \Gamma^2} F(\varpi) [1 - F(\varpi)] \\ &\times \sum_{s, \sigma, \sigma'} \left[\left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s, \sigma'}^{(n)} \right) (2s + 1) + \left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s+1, \sigma'}^{(n)} \right) (2s) \right]. \end{aligned} \quad (3.21)$$

No limite $T \rightarrow 0$ obtemos que

$$\begin{aligned} \sigma_{yy} &= \frac{e^2}{h} \frac{1}{\sqrt{\pi} l_c^2} \sum_n e^{-(E_F - E_n)^2 / \Gamma^2} \\ &\times \sum_{s, \sigma, \sigma'} \left[\left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s, \sigma'}^{(n)} \right) (2s + 1) + \left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s+1, \sigma'}^{(n)} \right) (2s) \right]. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Mostramos resultados para a condutividade colisional σ_{yy} em função de θ nas Figs. (3.17) a (3.18). Em todos os casos, as oscilações na condutividade colisional σ_{yy} possuem modulações devido a ISOR ou ISOD. O comportamento oscilatório na condutividade colisional σ_{yy} também é visto nas Figs. (3.19) a (3.20), onde mostramos condutividades colisionais σ_{yy} em função de B , que também apresentam modulações devido a ISOR ou ISOD.

A condutividade colisional apresenta a mesma modulação vista para a energia de Fermi E_F devida somente a ISOD, da mesma forma que o verificado para a ISOR. Esta dependência possui a mesma explicação dada no Capítulo 2: o espalhamento por impurezas envolve apenas os elétrons com energias próximas de E_F , portanto as modulações, com o aumento do campo, são gradualmente substituídas por picos na condutividade devido ao fato de que com o aumento do campo os efeitos da ISOR e da ISOD são mais fracos, conforme mostrado pela Eq.(3.14). Para campos maiores e conseqüentemente, separação entre os níveis maior, o comportamento modular gradualmente desaparece de tal forma que a condutividade colisional apresenta um comportamento de saturação, caracterizado pela presença de picos na condutividade.

Este padrão modular mostrado nas Figs. (2.16) a (2.17), com a inclusão do termo da ISOD, é idêntico às oscilações de Shubnikov-de Hass, verificadas experimentalmente para a condutividade colisional σ_{yy} [10, 11, 17, 22, 37, 38]. Experimentalmente, as oscilações de Shubnikov-de Hass no tensor condutividade são usualmente entendidas como o resultado da presença de duas

sub-bandas + e -, onde a separação entre elas, provocada pelo termo de ISOR e também da ISOD no nível de Fermi, é o termo que é responsável pelas oscilações secundárias na condutividade colisional. Como visto na seção 3.1.2, a ISOD separa os auto-estados assumidos pelos elétrons em duas subbandas + e -, inclusive para campos magnéticos nulos.

A intensidade da condutividade colisional aumenta com Γ devido a se aumentar o número de superposições entre os níveis de energia e E_F , conforme mostrado na Fig.(3.21). Este resultado é idêntico ao mostrado na Fig.(2.20). Esta dependência da condutividade colisional em termos de Γ pode ser entendida pelo fato de que a taxa de transição entre os níveis $w_{n,n'}$ é diretamente proporcional a Γ , de tal forma que, ao se aumentar Γ , se intensificam as transições entre os níveis de energia.

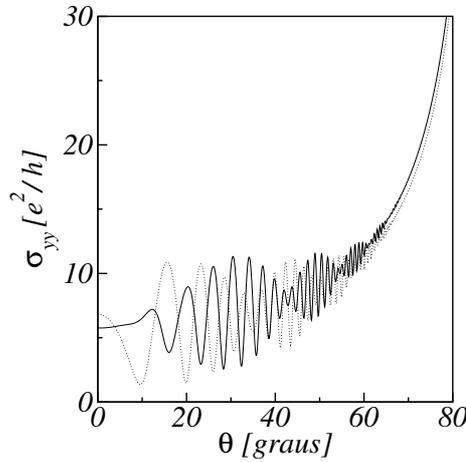


Figura 3.17: Condutividade colisional σ_{yy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

3.5 Energia Livre de Helmholtz e Magnetização na direção do Campo

De forma semelhante ao estudado na seção 2.5, considerando uma densidade de estados associada a cada energia E escrita na Eq.(3.15), podemos calcular numericamente a energia livre de Helmholtz por unidade de área para um gás de férmions não-interagente através da seguinte expressão[47]

$$A_s = \frac{1}{4\pi l_c^2} \sum_n E_n \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{E_F - E_n}{\sqrt{2}\Gamma} \right) \right] - \frac{\Gamma}{(2\pi)^{3/2} l_c^2} \sum_n e^{(E_F - E_n)^2 / 2\Gamma^2}, \quad (3.23)$$

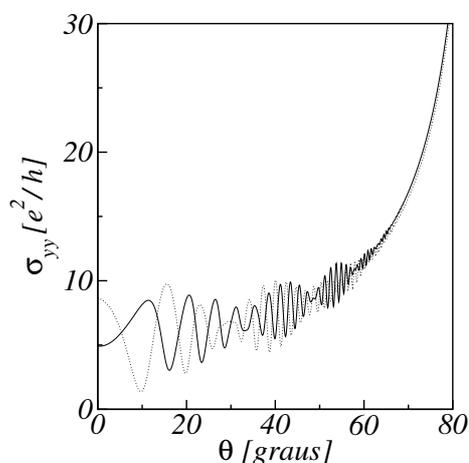


Figura 3.18: Condutividade colisional σ_{yy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12} \text{eV/m}$, $\alpha_D = 10^{-11} \text{eV/m}$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{eV/m}$, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12} \text{eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12} \text{elétrons/m}^2$, $B = 1 \text{T}$, $\Gamma = 0,5 \text{meV}$ e $T = 0$.

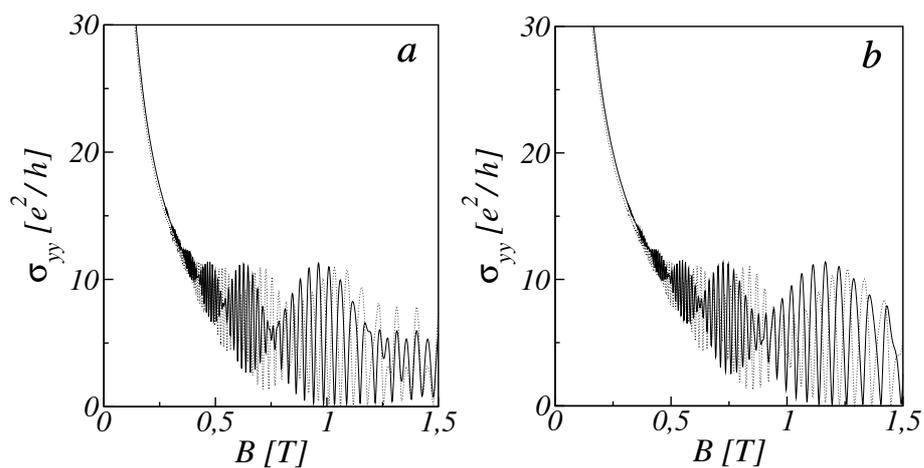


Figura 3.19: Condutividade colisional σ_{yy} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11} \text{eV/m}$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11} \text{eV/m}$, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12} \text{elétrons/m}^2$, $B = 1 \text{T}$, $\Gamma = 0,5 \text{meV}$ e $T = 0$.

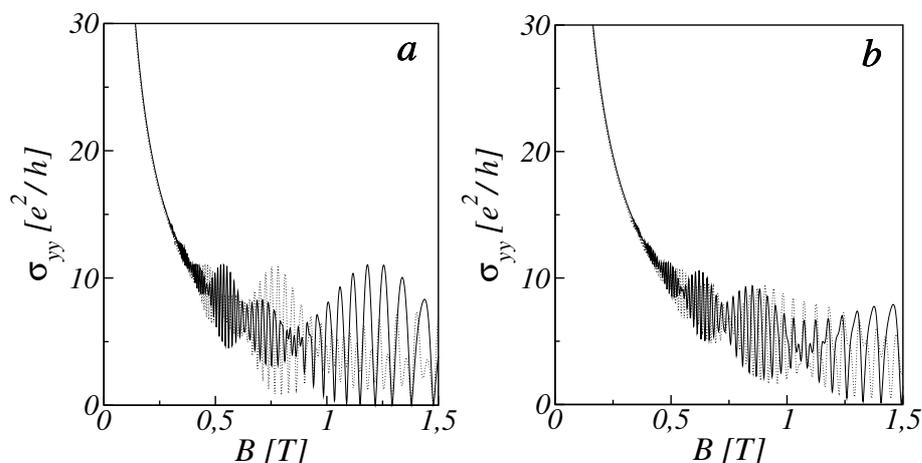


Figura 3.20: Condutividade colisional σ_{yy} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

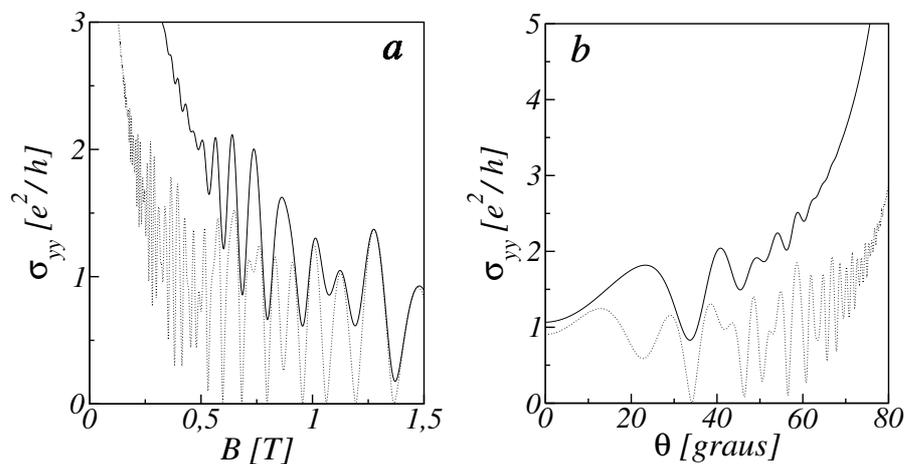


Figura 3.21: (a) Condutividade colisional σ_{yy} em função de B . Em cada uma das curvas, temos: $\Gamma = 0,2$ meV (linha pontilhada) e $\Gamma = 0,5$ meV (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $\theta = 30^\circ$ e $T = 0$. (b) Condutividade colisional σ_{yy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\Gamma = 0,2$ meV (linha pontilhada) e $\Gamma = 0,5$ meV (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $B = 1$ T e $T = 0$.

e a partir da Eq.(3.23), podemos calcular numericamente a magnetização por unidade de área através da relação termodinâmica

$$M = - \left(\frac{\partial A_s}{\partial B} \right)_T. \quad (3.24)$$

Mostramos resultados para a energia livre de Helmholtz por unidade de área A_s em função de B nas Figs. (3.22) e (3.23). Observa-se, em todos os casos, que, com o aumento da densidade eletrônica n_s , o comportamento oscilatório da energia livre se torna mais intenso. Observamos também a presença de modulações em A_s devidas a ISOR e a ISOD.

Nas Figs. (3.24) e (3.25), mostramos resultados para a magnetização na direção do campo a $T = 0$ em unidades de $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$. A magnetização na direção do campo apresenta um comportamento oscilatório dependente da densidade eletrônica n_s e, devido a presença da ISOR e ISOD, a magnetização também apresenta modulações. As oscilações na magnetização, em todos os casos, são semelhantes às oscilações de Hass-Van Alphen, observadas experimentalmente na magnetização em função do campo magnético externo em poços quânticos[59].

3.6 Conclusões Parciais

Consideramos o GE2D na presença da ISOR, ISOD e de um campo magnético inclinado. Determinamos os níveis de energia acessíveis aos elétrons e os auto-estados associados através do tratamento direto do sistema tridiagonal homogêneo (3.5) utilizando-se subrotinas de diagonalização[55]. Quanto aos níveis de energia, seu comportamento com respeito ao campo não depende da ISOD para campos magnéticos dados pela relação 3.14.

Há a presença de degenerescência nos níveis de energia, na ausência de ISOR, ISOD ($\alpha_R = \alpha_D = 0$) e campo magnético na direção perpendicular ao plano que contém os elétrons ($\theta = 0$) além da degenerescência em p_x . A inclusão de qualquer um dos termos quebra esta degenerescência e isto tem papel fundamental no comportamento da condutividade Hall σ_{xy} , com a inclusão de novos *plateaus*.

Devido a presença de ISOD ou ISOR, observamos modulações na densidade de estados. Estas modulações resultam nas modulações vistas na energia de Fermi. Estas modulações surgem em função do espaçamento desigual entre os níveis, provocadas somente pelo termo de ISOR presente na Hamiltoniano.

No limite $\Gamma \rightarrow 0$ a energia de Fermi apresenta saltos. As descontinuidades para a energia de Fermi *versus* campo, da mesma forma que o visto no Capítulo 2), para campos externos B mai-

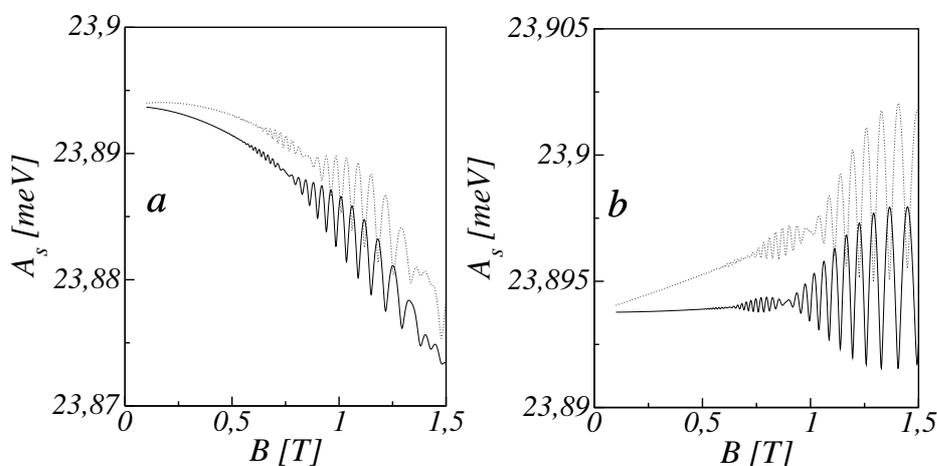


Figura 3.22: Energia livre de Helmholtz por unidade de área A_s em função de B . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

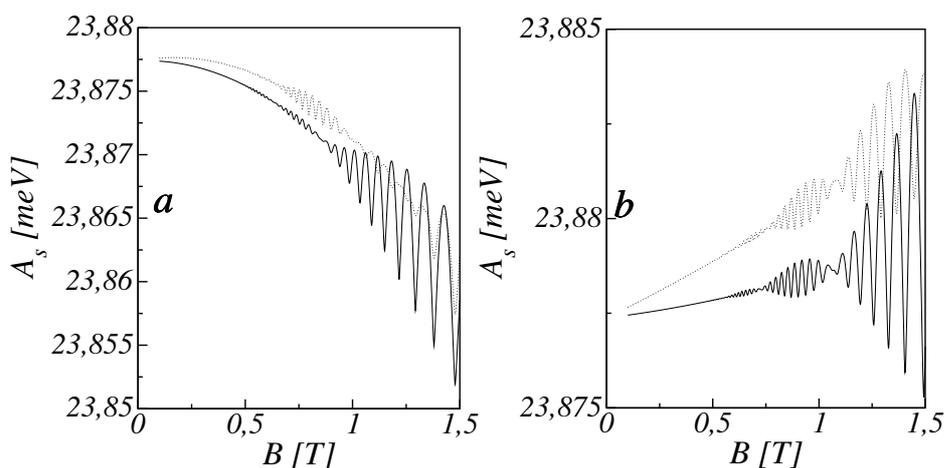


Figura 3.23: Energia livre de Helmholtz por unidade de área A_s em função de B . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

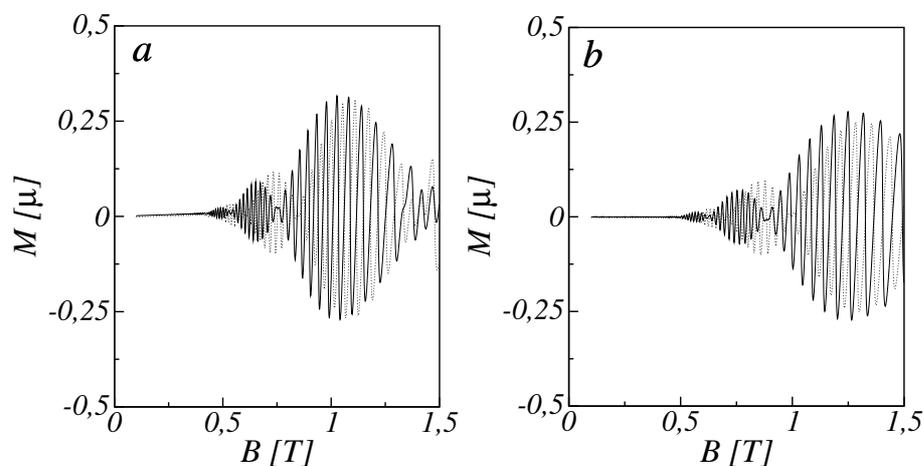


Figura 3.24: Magnetização M em função do campo B em unidades de $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$. Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 0$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

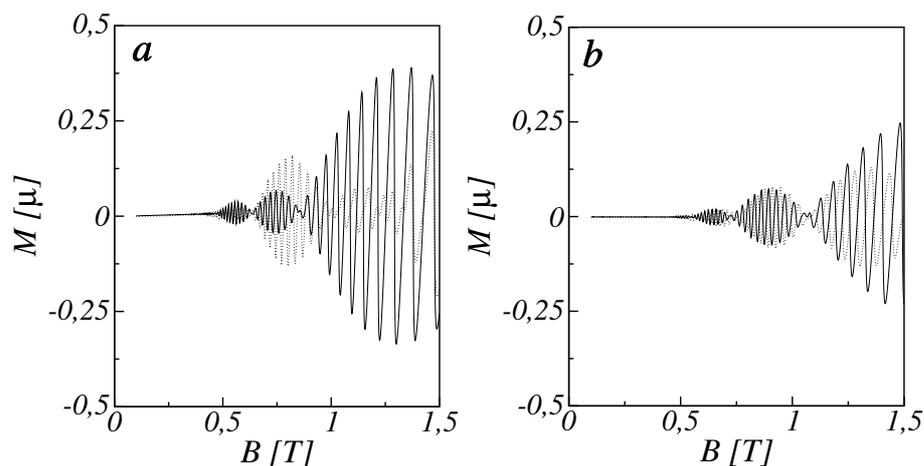


Figura 3.25: Magnetização M em função do campo B em unidades de $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$. Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m, $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha pontilhada) e $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m, $\alpha_D = 5 \cdot 10^{-12}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

ores, acontece devido a necessidade de mais elétrons para preencher cada nível de energia, tal como explicitado na Eq.(2.23). Os elétrons gradualmente esvaziam os níveis energeticamente superiores, passando a ocupar os níveis energeticamente inferiores. O salto acontece quando um nível é totalmente esvaziado por transições para níveis mais baixos.

De forma semelhante, as discontinuidades observadas na energia de Fermi em função de θ na ausência de MPID podem ser entendidas devido a degenerescência dos níveis ser diretamente proporcional a $\cos \theta$, o que implica na necessidade de menos elétrons para se preencher cada nível de energia com o aumento de θ . Os elétrons provenientes de níveis energeticamente inferiores passam a ocupar gradualmente os níveis energeticamente superiores com o aumento de θ . O salto acontece quando um nível é totalmente populado por elétrons provenientes de níveis mais baixos.

As discontinuidades na energia de Fermi desaparecem gradualmente com o aumento de Γ devido a superposição entre os níveis, o que permite acomodar os elétrons em estados intermediários entre os níveis ou bandas de energia. O comportamento oscilatório da energia de Fermi depende da densidade eletrônica n_s : ao aumentar a densidade eletrônica, a energia de Fermi passa a apresentar um comportamento oscilatório mais intenso.

A condutividade Hall é quantizada no caso da ausência de MPID. No caso $\theta = 0$, $\alpha_R = 0$ e $\alpha_D = 0$, a condutividade Hall só pode assumir os valores ne^2/h com $n = 1, 2, 3, \dots$. Na presença de ISOR ou ISOD ou de uma componente do campo externo ao longo da região onde os elétrons se encontram confinados, aparecem *plateaus* intermediários $(2n + 1)e^2/(2h)$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n + 1$, associados à quebra de degenerescência observada nos níveis de energia. A condutividade Hall σ_{xy} em função de θ também é quantizada. O comportamento dos *plateaus* de σ_{xy} está associado às oscilações vistas na energia de Fermi em função de θ .

Os saltos associados aos *plateaus* da condutividade Hall acontecem quando a energia de Fermi do sistema se torna igual a um nível de energia. Isto acontece devido a condutividade Hall depender do numero de transições possíveis entre os elétrons abaixo do nível de Fermi e os elétrons que se encontram acima do nível de Fermi.

Em todos os casos, observamos a presença de oscilações na condutividade colisional, semelhantes às oscilações de Shubnikov-de Hass, verificadas experimentalmente nas condutividades σ_{yy} [10, 11, 17, 22, 37, 38]. As oscilações na condutividade colisional σ_{yy} possuem modulações devido a ISOR, modulações estas que se originam na densidade de estados e na energia de Fermi. A intensidade da condutividade colisional aumenta com Γ devido a se aumentar o número de superposições entre os níveis de energia e E_F , conforme mostrado na Fig.(3.21). Esta dependência acontece devido a taxa de transição entre os níveis $w_{n,n'}$ ser diretamente pro-

proporcional a Γ , de acordo com a Eq.(2.64).

Em todos os casos, com o aumento da densidade eletrônica n_s , aumenta-se o número de oscilações na energia livre. Na magnetização na direção do campo, observamos um comportamento oscilatório qualitativamente semelhante as oscilações de Hass-Van Alphen observado experimentalmente[59] e caracterizado por oscilações na magnetização em função do campo.

No Capítulo 4, consideramos a inclusão do termo de modulação periódica e estudamos os seus efeitos sobre as propriedades físicas do GE2D.

4 *GE2D na presença de um campo magnético inclinado: Efeitos da MP1D*

Neste Capítulo, analisamos os efeitos da inserção de uma modulação periódica unidimensional (MP1D) sobre as propriedades termodinâmicas e de transporte do GE2D na presença de um campo inclinado. A MP1D é introduzida através da inserção de uma grade composta por fitas paralelas de um metal na superfície da heteroestrutura onde o GE2D se encontra confinado, combinada a um campo elétrico externo[42]. O sistema é mostrado esquematicamente na Fig.(4.1). A modulação periódica pode ser aproximada pelo termo de primeira ordem em sua expansão em Fourier, escrito na forma

$$H_p = V_p \cos(K_p y), \quad (4.1)$$

onde V_p é a amplitude da MP1D, em geral pequena em relação a separação usual entre as bandas de energia. K_p é dado por $K_p = 2\pi/A_p$ onde A_p é a periodicidade da MP1D. O termo de MP1D é responsável pela inclusão de oscilações magneto-resistivas distintas das oscilações de Shubnikov-de Hass, denominadas oscilações de Weiss[41], que são o resultado da comensurabilidade entre o raio ciclotrônico e o período da modulação no potencial

Consideramos, também, a presença de uma componente do campo magnético na direção perpendicular à periodicidade do potencial, escrito na Eq.(2.1), onde θ , mostrado na Fig.(4.1), é o ângulo entre o campo magnético e a direção de crescimento.

Com o objetivo de analisar os efeitos da inclusão da MP1D, usamos os resultados dos Capítulos anteriores onde obtemos a equação de Schrödinger na forma secular. Para amplitudes V_p pequenas em relação a separação usual entre as bandas de energia, podemos utilizar a teoria de perturbação linear para se calcular numericamente o espectro de energia na presença de MP1D, a densidade de estados e a energia de Fermi do sistema. De posse da energia de Fermi, obtemos a condutividade Hall, a condutividade colisional σ_{yy} , a contribuição difusiva σ_{xx} , a energia livre de Helmholtz e a magnetização.

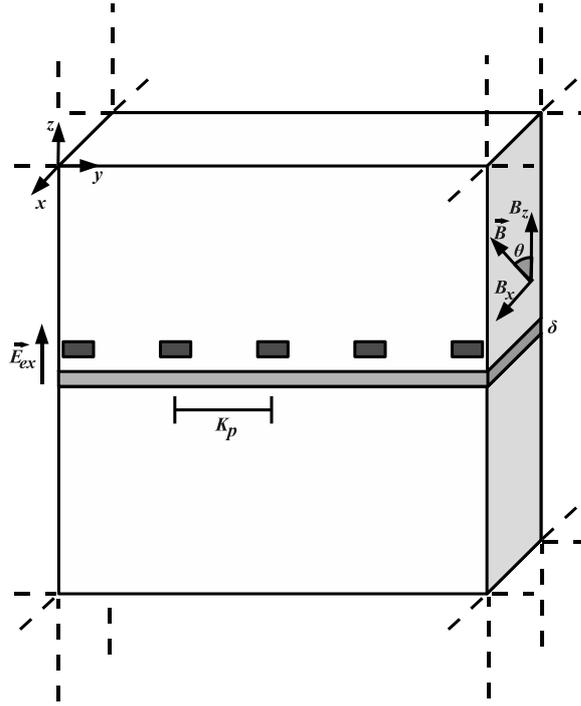


Figura 4.1: GE2D na presença de um campo magnético inclinado e de uma MP1D originada pelo efeito combinado da inserção de fitas paralelas de um metal (cinza escuro) próximo a superfície onde os elétrons estão confinados (cinza claro) e de um campo elétrico externo \vec{E}_{ex} . Consideramos que a componente do campo magnético ao longo da região onde os elétrons estão confinados é perpendicular à periodicidade do potencial.

4.1 O Hamiltoniano

O Hamiltoniano para um elétron, na presença de campo magnético inclinado, ISOR, ISOD e MP1D, é escrito como

$$\mathcal{H} = H + H_p, \quad (4.2)$$

onde H é dado na Eq.(3.1)

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} + e\vec{A})^2 + \frac{\alpha_R}{\hbar} [\vec{\sigma} \times (\vec{p} + e\vec{A})]_z + \frac{\alpha_D}{\hbar} [\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} + e\vec{A})] - \frac{e\hbar}{2m} \vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \quad (4.3)$$

e H_p é escrito na Eq.(4.1). O primeiro termo da Eq.(4.3) representa a energia cinética, o segundo a ISOR, escrita na Eq.(1.3), o terceiro a ISOD, escrita na Eq.(1.4), o quarto a interação Zeeman, m é a massa efetiva do InAs, igual a 0.05 da massa do elétron e o potencial vetor \vec{A} é dado na Eq.(2.3).

Para $\alpha_R = 0$, $\alpha_D = 0$, $V_p = 0$ e $\theta = 0$, temos $\mathcal{H} = H_o$, escrito na Eq.(2.13). Portanto, ao seguir o mesmo processo descrito nas seções 2.1 e 3.1, obtemos a equação de Schrödinger

para o Hamiltoniano efetivo H_{eff} na base dos auto-estados de H_0 , expressos na Eq.(2.14). Nesta base, a equação de Schrödinger efetiva é expressa através do seguinte sistema de equações lineares homogêneas

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} - E & h_{1,2} & 0 & h_{1,4} & 0 & 0 & \cdots \\ h_{2,1} & h_{2,2} - E & h_{2,3} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} - E & h_{3,4} & 0 & h_{3,6} & \cdots \\ h_{4,1} & 0 & h_{4,3} & h_{4,4} - E & h_{4,5} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & h_{5,4} & h_{5,5} - E & h_{5,6} & \cdots \\ 0 & 0 & h_{6,3} & 0 & h_{6,5} & h_{6,6} - E & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0, \quad (4.4)$$

onde os elementos de matriz $h_{n,n}$ são dados na Eq.(2.18), $h_{n,n+1}$ e $h_{n+1,n}$ na Eq.(2.19), $h_{n,n+3}$, $h_{n+3,n}$, para n ímpar são dados pela Eq.(3.4), ω_c , l_c e y_c escritos na Eq.(2.7) e as componentes v_n do autovetor correspondente ao autovalor E_n estão relacionadas com os coeficientes C_n^σ escritos na Eq.(2.14) através da Eq.(2.20).

As auto-energias e os coeficientes correspondentes C_i^σ na ausência da MP1D são determinados ao se calcular os autovalores e autovetores da matriz infinita escrita na Eq.(4.4). Após isso, podemos utilizar os resultados da teoria de perturbação em primeira ordem para determinar os auto-estados e as auto-energias considerando-se a MP1D. Em todos os resultados deste Capítulo, consideramos a espessura do sistema igual a 50Å , $V_p = 0,03\text{meV}$ e $A_p = 3500\text{Å}$.

4.2 Níveis de Energia, Densidade de Estados e Energia de Fermi

Com o objetivo de se calcular numericamente as auto-energias e auto-estados de \mathcal{H} , primeiramente determinamos as auto-energias e os auto-estados a partir do tratamento numérico direto do sistema de equações lineares homogêneas escrito na Eq.(4.4)[55]. Após determinar-se os auto-energias E_n e os auto-estados $|\psi^{(n)}(k_x)\rangle$ do sistema na ausência de MP1D, as auto-energias do Hamiltoniano total podem ser determinadas através das seguintes equações

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_n &= E_n + \langle \psi^{(n)}(k_x) | H_p | \psi^{(n)}(k_x) \rangle, \\ |\Psi^{(n)}(k_x)\rangle &= |\psi^{(n)}(k_x)\rangle + \sum_{n' \neq n} \frac{\langle \psi^{(n')}(k'_x) | H_p | \psi^{(n)}(k_x) \rangle}{E_n - E_{n'}} |\psi^{(n')}(k'_x)\rangle, \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde \mathcal{E}_n e $|\Psi^{(n)}(k_x)\rangle$ são, respectivamente, as auto-energias e auto-estados do sistema na presença da MP1D.

O elemento de matriz $\langle k'_x, n', \sigma | H_p | k_x, n, \sigma \rangle$, necessário no cálculo numérico das auto-energias \mathcal{E}_n e dos auto-estados $|\Psi^{(n)}(k_x)\rangle$ do Hamiltoniano \mathcal{H} , é dado por

$$\begin{aligned} \langle k'_x, n', \sigma | H_p | k_x, n, \sigma \rangle &= \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{k_x, k'_x - K_p} e^{-l_c^2 K_p^2 / 2} (l_c^2 K_p^2)^{|n-n'|/2} \Re \left(i^{|n-n'|} e^{i K_p y_c} \right) \times \\ &\times \begin{cases} \left(\frac{n!}{n'} \right)^{1/2} L_n^{n'-n}(l_c^2 K_p^2 / 2) & \text{para } n \leq n', \\ \left(\frac{n'!}{n!} \right)^{1/2} L_{n'}^{n-n}(l_c^2 K_p^2 / 2) & \text{para } n \geq n', \end{cases} \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde $L_n^k(x)$ é um polinômio associado de Laguerre. Devido a presença de fatoriais na Eq.(4.6), podemos desprezar as transições entre as auto-energias, de tal forma que obtemos para o elemento de matriz $\langle k'_x, n', \sigma | H_p | k_x, n, \sigma \rangle$

$$\langle k'_x, n', \sigma | H_p | k_x, n, \sigma \rangle \approx \delta_{n, n'} \delta_{\sigma, \sigma'} \delta_{k_x, k'_x - K_p} e^{-l_c^2 K_p^2 / 2} \cos(\hbar K_p y_c) L_n(l_c^2 K_p^2 / 2). \quad (4.7)$$

Utilizando a Eq.(4.7), obtemos as auto-energias após a correção devido a presença da MP1D

$$\mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y) = E_n + V_p e^{-l_c^2 K_p^2 / 2} \sum_{s, \sigma} |C_{s, \sigma}^{(n)}|^2 \cos(\mathcal{K}_y) L_n(l_c^2 K_p^2 / 2), \quad (4.8)$$

onde $\mathcal{K}_y = \hbar l_c^2 K_p k_x$, e ao desconsiderar as transições entre auto-estados, devido aos fatoriais, obtemos que a correção nos auto-estados pode ser desprezada, de tal forma que

$$|\Psi^{(n)}(k_x)\rangle \approx |\psi^{(n)}\rangle |k_x\rangle, \quad (4.9)$$

onde $|k_x\rangle = \frac{e^{i x k_x}}{\sqrt{L_x}}$. Observamos, da Eq.(4.8), que o potencial periódico quebra a degenerescência relativa ao operador p_x , de tal forma que, em vez de níveis de energia, obtemos bandas de energia acessíveis ao sistema onde cada banda é função de $\hbar k_x$. Além disso, temos que a condutividade difusiva σ_{xx}^{dif} não é nula, diferentemente do mostrado nos Capítulos anteriores, pois o elemento de matriz $\langle \psi^{(n)} | v_x | \psi^{(n)} \rangle$ é dado por

$$\langle \psi^{(n)} | v_x | \psi^{(n)} \rangle = \frac{1}{\hbar} \frac{\mathcal{E}_n}{k_x} = -\frac{V_p K_p l_c^2}{\hbar} \text{sen}(\mathcal{K}_y) e^{K_p^2 l_c^2} \sum_{s, \sigma} |C_{s, \sigma}^{(n)}|^2 L_n(l_c^2 K_p^2 / 2) \quad (4.10)$$

Na Fig.(4.2), mostramos a dependência das bandas de energia mais baixas de um GE2D

em função do ângulo θ para $B = 1\text{T}$. Tomamos $\alpha_R = 10^{-11}\text{eV/m}$ e $\alpha_D = 10^{-11}\text{eV/m}$ (linha tracejada). Mais uma vez observamos a quebra de degenerescência com respeito a p_x devido a MP1D.

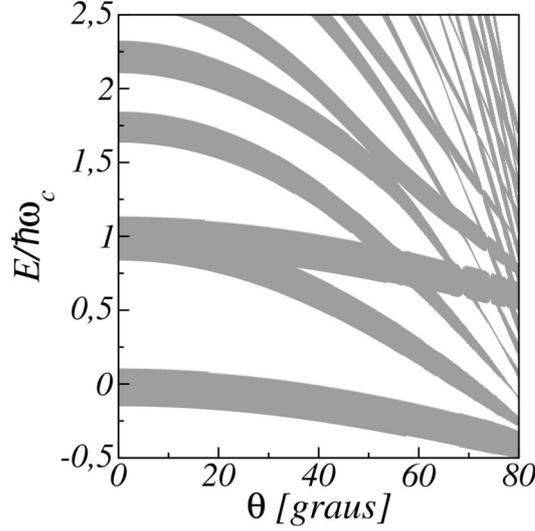


Figura 4.2: Bandas de energia E em função de θ para $B = 1\text{T}$, $\alpha_R = 10^{-11}\text{eV/m}$ e $\alpha_D = 10^{-11}\text{eV/m}$.

Na Fig.(4.3), observamos a dependência das bandas de energia mais baixas em função do módulo do campo magnético $B = |\vec{B}|$ para $\theta = 0$ e $\theta = 30^\circ$, respectivamente. Em ambos os gráficos (a) e (b), temos $\alpha_R = 10^{-11}\text{eV/m}$ e $\alpha_D = 10^{-11}\text{eV/m}$. Observamos, mais uma vez, a quebra da degenerescência em p_x devido a presença da MP1D.

A densidade de estados total é obtida de forma análoga ao visto nos Capítulos anteriores onde consideramos $\sum_{k_x} = \frac{S_0}{4\pi l_c^2} \int_0^{2\pi} d\mathcal{K}_y$, de tal forma que obtemos

$$D(E) = \frac{S_0}{4\pi l_c^2} \int_0^{2\pi} \sum_n e^{(E - \epsilon_n(\mathcal{K}_y))^2 / 2\Gamma^2} d\mathcal{K}_y, \quad (4.11)$$

onde consideramos que as auto-energias possuem uma largura Γ , de modo a tratar as impurezas presentes no material como uma aproximação em primeira ordem[56, 57].

Mostramos resultados para a densidade de estados $D(E)$ na Fig.(4.4). A densidade de estados, para Γ pequeno com relação a separação usual entre as bandas, é formada por picos espaçados. Para Γ maior, ocorrem as superposições entre as bandas de energia. Observamos também a presença da modulação, devido a ambas as ISO. Vemos, também, a mudança no comportamento qualitativo da densidade de estados devido a inclusão da MP1D ao se comparar as Figs.(2.5) e (4.4) para $\alpha_R = \alpha_D = 0$.

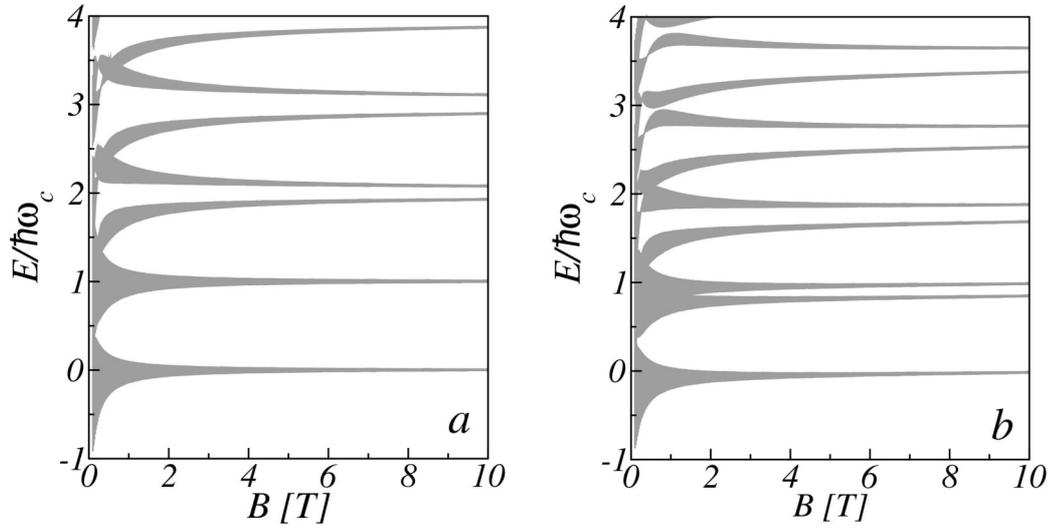


Figura 4.3: Bandas de energia E em função do módulo do campo magnético B para $\theta = 0$ (a), $\theta = 30^\circ$ (b), $\alpha_R = 10^{-11}$ eV/m e $\alpha_D = 10^{-11}$ eV/m.

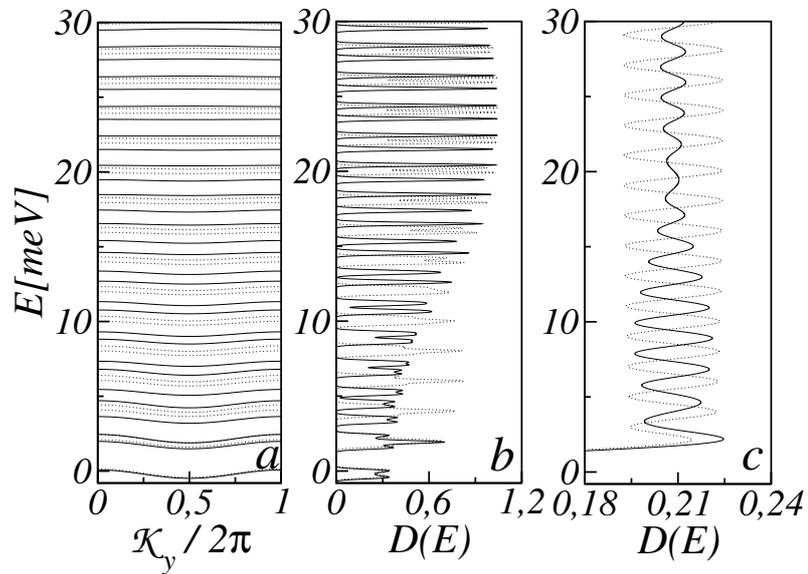


Figura 4.4: Bandas de energia \mathcal{E}_n em função de $\mathcal{K}_y = \hbar K_{pyc}$ para $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia) (a) e densidade de estados $D(E)$ para $\Gamma = 0,05$ meV (b) e $\Gamma = 0,5$ meV (c) onde $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $\theta = 30^\circ$ e $B = 1$ T.

A energia de Fermi E_F é obtida de forma análoga a Eq.(2.45)

$$\frac{4hn_s}{eB \cos \theta} = \int_0^{2\pi} \sum_n \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{E_F - \mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y)}{\sqrt{2}\Gamma} \right) \right] d\mathcal{K}_y. \quad (4.12)$$

Na Fig.(4.5-(a)), onde tomamos $n_s = 10^{11}$ elétrons/m², $\theta = 30^\circ$ e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m, observamos que o termo de potencial periódico altera o comportamento qualitativo da energia de Fermi devido a quebra de degenerescência em p_x . Os saltos vistos na energia de Fermi correspondem a regiões de energia inacessível ao sistema. Nas regiões de energias acessíveis, a energia de Fermi é monotonicamente crescente.

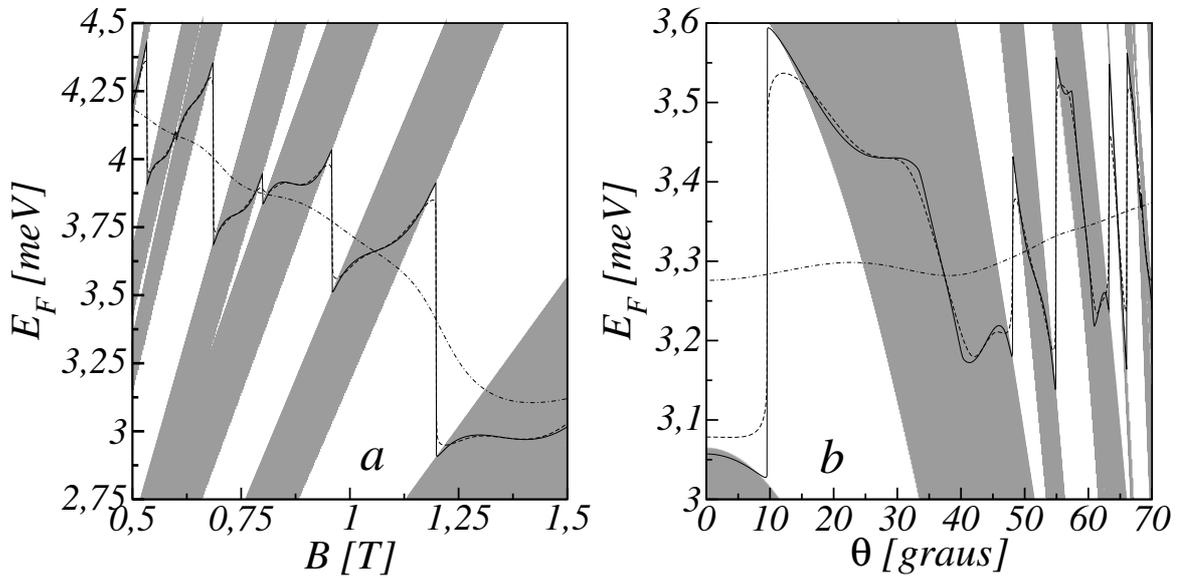


Figura 4.5: (a) Energia de Fermi E_F em função de B com $n_s = 10^{11}$ elétrons/m² para três valores de Γ : $\Gamma = 0,005$ meV (linha cheia), $\Gamma = 0,05$ meV (linha tracejada) e $\Gamma = 0,5$ meV (linha pontilhada-tracejada) e bandas de energia em função de B (regiões em cinza). Tomamos em todas as curvas: $\theta = 30^\circ$ e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m. (b) Energia de Fermi em função de θ com $n_s = 10^{11}$ elétrons/m² para três valores de Γ : $\Gamma = 0,005$ meV (linha cheia), $\Gamma = 0,05$ meV (linha tracejada) e $\Gamma = 0,5$ meV (linha pontilhada-tracejada) e bandas de energia em função de θ (regiões em cinza). Tomamos em todas as curvas: $\theta = 30^\circ$ e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m.

Os saltos presentes na energia de Fermi E_F em função do ângulo θ na Fig.(4.5-(b)) no limite $\Gamma \rightarrow 0$, da mesma forma que o visto para a energia de Fermi em função do campo, também correspondem a regiões de energia inacessíveis ao sistema. Nas regiões de energias acessíveis, a energia de Fermi é monotonicamente decrescente.

Identicamente ao visto nos Capítulos anteriores, ao aumentar o valor de Γ , percebemos que as discontinuidades nas Figs. (4.5-(a)) e (4.5-(b)) são gradualmente removidas. Ao aumentar a largura de cada nível de energia, permite-se que as partículas ocupem energias anteriormente inacessíveis no limite $\Gamma \rightarrow 0$.

Mostramos, nas Figs. (4.6) e (4.7), resultados para a energia de Fermi em função de θ e, nas Figs. (4.8) e (4.9), resultados para a energia de Fermi em função de B . Em todos os casos, há a presença da modulação devido a presença da ISOR ou da ISOD, como consequência da modulação encontrada na densidade de estados. Além disso, em todas as figuras, percebemos que o comportamento oscilatório da energia de Fermi se intensifica com o aumento da densidade eletrônica n_s .

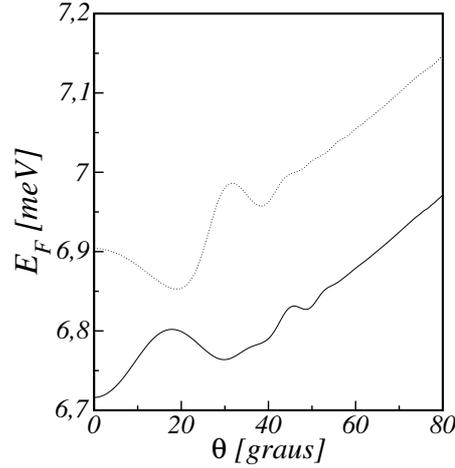


Figura 4.6: Energia de Fermi E_F em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{11}$ elétrons/m², $B = 1$ T e $\Gamma = 0,5$ meV.

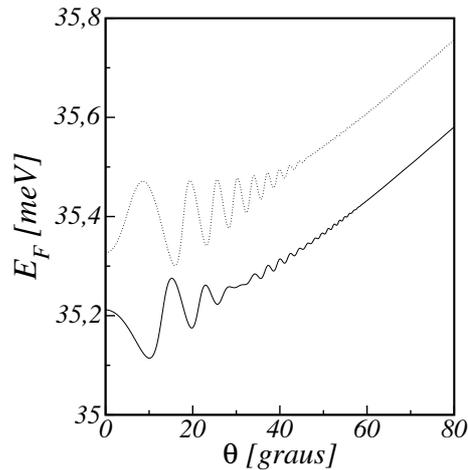


Figura 4.7: Energia de Fermi E_F em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T e $\Gamma = 0,5$ meV.

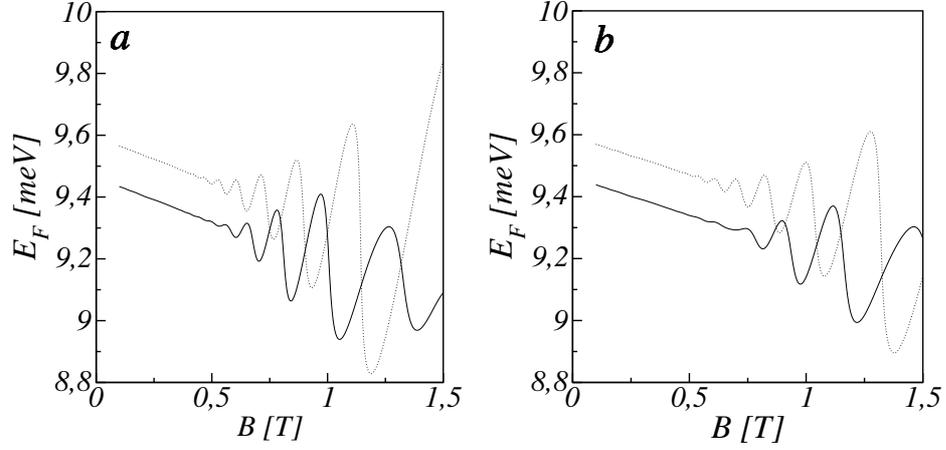


Figura 4.8: Energia de Fermi E_F em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{11} \text{ elétrons/m}^2$ e $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$.

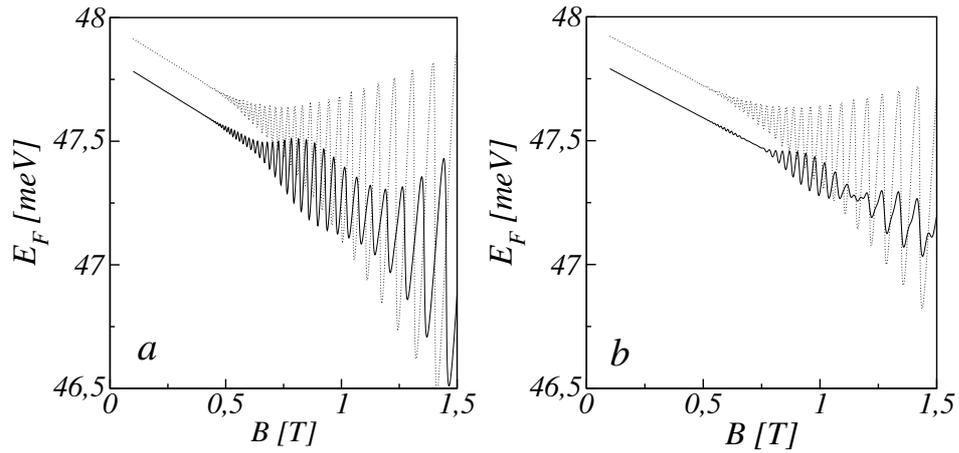


Figura 4.9: Energia de Fermi E_F em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12} \text{ elétrons/m}^2$ e $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$.

4.3 Condutividade Hall

De forma semelhante ao estudado na seção (2.3), a condutividade Hall σ_{xy}^{nd} é obtida numericamente a partir da seguinte expressão

$$\sigma_{xy}^{\text{nd}} = \frac{ie^2\hbar}{4\pi l_c^2} \int_0^{2\pi} \sum_{n,n'} \frac{F[\mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y)] - F[\mathcal{E}_{n'}(\mathcal{K}_y)]}{[\mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y) - \mathcal{E}_{n'}(\mathcal{K}_y)]^2} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle d\mathcal{K}_y, \quad (4.13)$$

onde $F(E)$ é dado na Eq.(2.44) e $v_\eta = \frac{\partial H}{\partial p_\eta}$ é a componente η do operador velocidade.

O limite $T \rightarrow 0$ da Eq.(3.17) é dado por

$$\sigma_{xy} = \frac{ie^2\hbar}{4\pi l_c^2} \int_0^{2\pi} \sum_{n,n'} \frac{u[\mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y)] - u[\mathcal{E}_{n'}(\mathcal{K}_y)]}{[\mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y) - \mathcal{E}_{n'}(\mathcal{K}_y)]^2} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle d\mathcal{K}_y, \quad (4.14)$$

e os elementos de matriz $\langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle$ e $\langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle$ estão escritos na Eq.(3.18)

$$\begin{aligned} \langle \psi^{(n')} | v_x | \psi^{(n)} \rangle &= -\frac{l_c \omega_c \cos \theta}{\sqrt{2}} \sum_{l,\sigma=\pm} \sqrt{l} \left(C_{l-1,\sigma}^{(n')} \right)^* C_{l,\sigma}^{(n)} + \sqrt{l+1} \left(C_{l+1,\sigma}^{(n')} \right)^* C_{l,\sigma}^{(n)} \\ &\quad - \frac{i\alpha_R}{\hbar} \sum_{l=0} \left[\left(C_{l,-}^{(n)} \right)^* C_{l,+}^{(n')} - \left(C_{l,+}^{(n)} \right)^* C_{l,-}^{(n')} \right] \\ &\quad + \frac{\alpha_D}{\hbar} \sum_{l=0} \left[\left(C_{l,-}^{(n')} \right)^* C_{l,+}^{(n)} + \left(C_{l,+}^{(n')} \right)^* C_{l,-}^{(n)} \right], \\ \langle \psi^{(n)} | v_y | \psi^{(n')} \rangle &= -\frac{il_c \omega_c \cos \theta}{\sqrt{2}} \sum_{l,\sigma=\pm} \sqrt{l} \left(C_{l,\sigma}^{(n)} \right)^* C_{l-1,\sigma}^{(n')} - \sqrt{l+1} \left(C_{l,\sigma}^{(n)} \right)^* C_{l+1,\sigma}^{(n')} \\ &\quad + \frac{\alpha_R}{\hbar} \sum_{l=0} \left[\left(C_{l,-}^{(n')} \right)^* C_{l,+}^{(n)} + \left(C_{l,+}^{(n')} \right)^* C_{l,-}^{(n)} \right] \\ &\quad + \frac{i\alpha_D}{\hbar} \sum_{l=0} \left[\left(C_{l,-}^{(n)} \right)^* C_{l,+}^{(n')} - \left(C_{l,+}^{(n)} \right)^* C_{l,-}^{(n')} \right]. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Mostramos resultados para a condutividade Hall em função de θ nas Figs. (4.10) e (4.11). Observamos que a condutividade Hall, semelhantemente ao resultado obtido no Capítulo 2, é quantizada, apresentando *plateaus* nos valores ne^2/h com $n = 1, 2, 3, \dots$ e $(2n+1)e^2/(2h)$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n+1$. Porém, devido ao potencial periódico, a condutividade passa a ter valores contínuos entre dois *plateaus* quaisquer.

A quantização na condutividade Hall σ_{xy} também é vista nas Figs. (4.12) e (4.13), onde mostramos a condutividade Hall em função de B . Em todos os casos há a presença dos *plateaus*

intermediários $(2n + 1)e^2/(2h)$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n + 1$. Mais uma vez, devido ao potencial periódico, a condutividade passa a ter valores contínuos entre dois *plateaus* quaisquer.

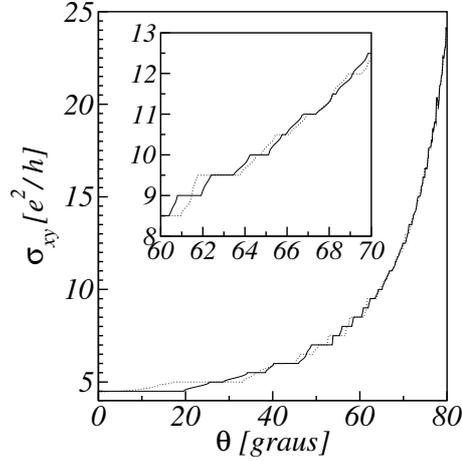


Figura 4.10: Condutividade Hall σ_{xy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11} \text{elétrons/m}^2$, $B = 1 \text{T}$, $\Gamma = 0,5 \text{meV}$ e $T = 0$. No inset mostramos com mais detalhes as regiões onde a condutividade não é constante.

Os *plateaus* da condutividade Hall correspondem a regiões em que a energia de Fermi se encontra em intervalos de energias inacessíveis ao sistema. As regiões em que a condutividade pode assumir quaisquer valores entre dois *plateaus* são correspondentes às regiões onde a energia de Fermi cruza uma banda de energia do sistema, tal como mostrado na Fig.(4.14).

4.4 Condutividade σ_{yy}

Por método idêntico ao visto nos Capítulos anteriores, a contribuição difusiva σ_{yy}^{dif} , escrita na Eq.(2.57) é nula de tal forma que a condutividade σ_{yy}^{d} é dada apenas pela contribuição colisional σ_{yy}^{col} , expressa como

$$\begin{aligned} \sigma_{yy}^{\text{col}} = & \frac{\beta e^2}{h} \frac{1}{2\sqrt{\pi}l_c^2} \int_0^{2\pi} d\mathcal{K}_y \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} d\varpi e^{-[\varpi - \mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y)]^2/\Gamma^2} F(\varpi) [1 - F(\varpi)] \\ & \times \sum_{s, \sigma, \sigma'} \left[\left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s, \sigma'}^{(n)} \right) (2s + 1) + \left(C_{s, \sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s+1, \sigma'}^{(n)} \right) (2s) \right], \end{aligned} \quad (4.16)$$

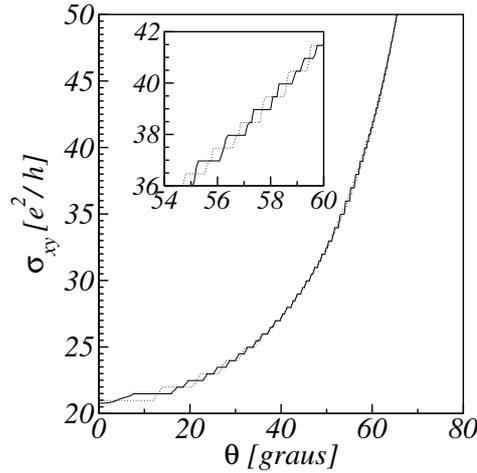


Figura 4.11: Condutividade Hall σ_{xy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$. No inset mostramos com mais detalhes as regiões onde a condutividade não é constante.

cujo limite $T \rightarrow 0$ é dado por

$$\begin{aligned} \sigma_{yy} &= \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\sqrt{\pi}l_c^2} \int_0^{2\pi} d\mathcal{K}_y \sum_n e^{-[E_F - \varepsilon_n(\mathcal{K}_y)]^2/\Gamma^2} \\ &\times \sum_{s,\sigma,\sigma'} \left[\left(C_{s,\sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s,\sigma'}^{(n)} \right) (2s+1) + \left(C_{s,\sigma}^{(n)} \right)^* \left(C_{s+1,\sigma'}^{(n)} \right) (2s) \right]. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Mostramos resultados para a condutividade colisional σ_{yy} em função de θ nas Figs. (4.15) a (4.16). Observamos a presença de oscilações, semelhantes às oscilações de Shubnikov-de Hass, verificadas experimentalmente nas condutividades σ_{yy} [10, 11, 17, 22, 37, 38], da mesma forma que o visto no Capítulo 2 e 3. Em todos os casos, as oscilações na condutividade colisional σ_{yy} possuem modulações devido a ISOR e ISOD. O comportamento oscilatório na condutividade colisional σ_{yy} também é visto nas Figs. (3.19) a (3.20), onde mostramos condutividades colisionais σ_{yy} em função de B , que também apresentam modulações devido a ambas as ISO.

A intensidade da condutividade colisional, da mesma forma que o visto nos Capítulos anteriores, aumenta com Γ devido a se aumentar o número de superposições entre as bandas de energia e E_F , conforme mostrado na Fig.(3.21). Esta dependência acontece devido a taxa de transição entre as bandas $w_{n,n'}$ é diretamente proporcional a Γ , de acordo com a Eq.(2.64). Esta dependência em Γ também permite entender a pequena mudança no comportamento qualitativo de σ_{yy} para $\alpha_R = \alpha_D = 0$ ao se comparar as Figs.(4.15) e (4.18) com as Figs.(2.16) e (2.19).

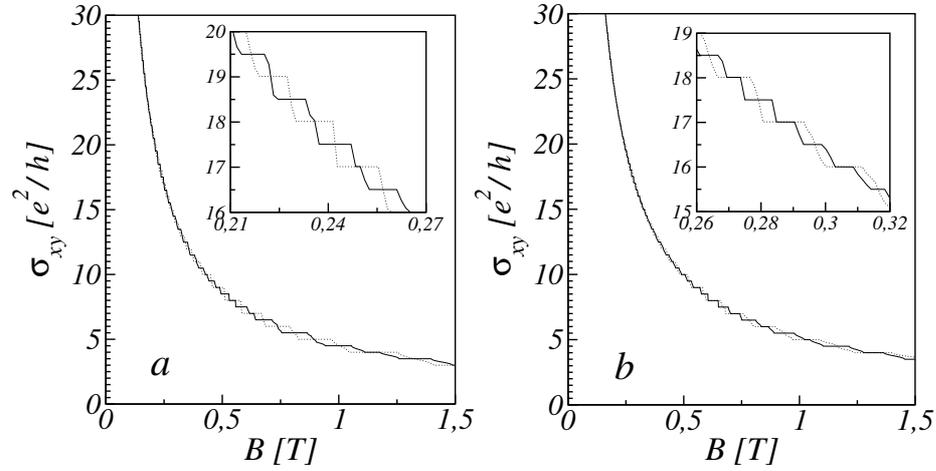


Figura 4.12: Condutividade Hall σ_{xy} em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/ m^2 , $B = 1 \text{ T}$, $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ e $T = 0$. No inset mostramos com mais detalhes as regiões onde a condutividade não é constante.

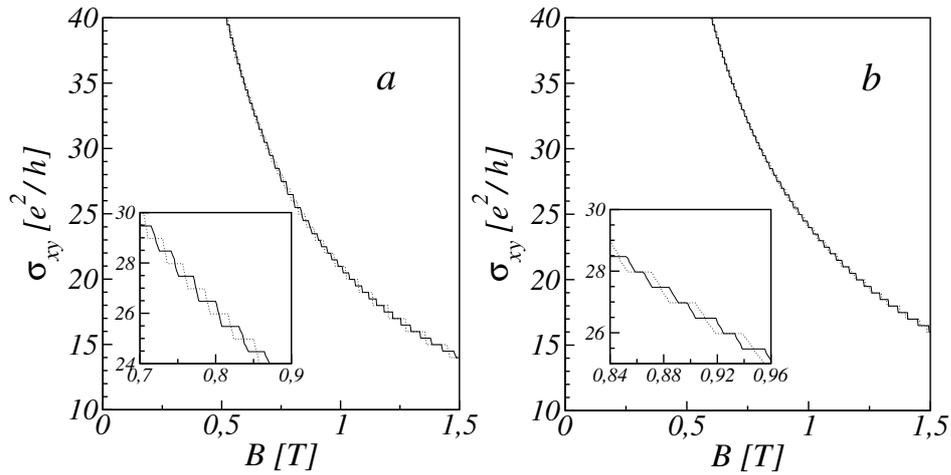


Figura 4.13: Condutividade Hall σ_{xy} em função de B para $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/ m^2 , $B = 1 \text{ T}$, $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ e $T = 0$. No inset mostramos com mais detalhes as regiões onde a condutividade não é constante.

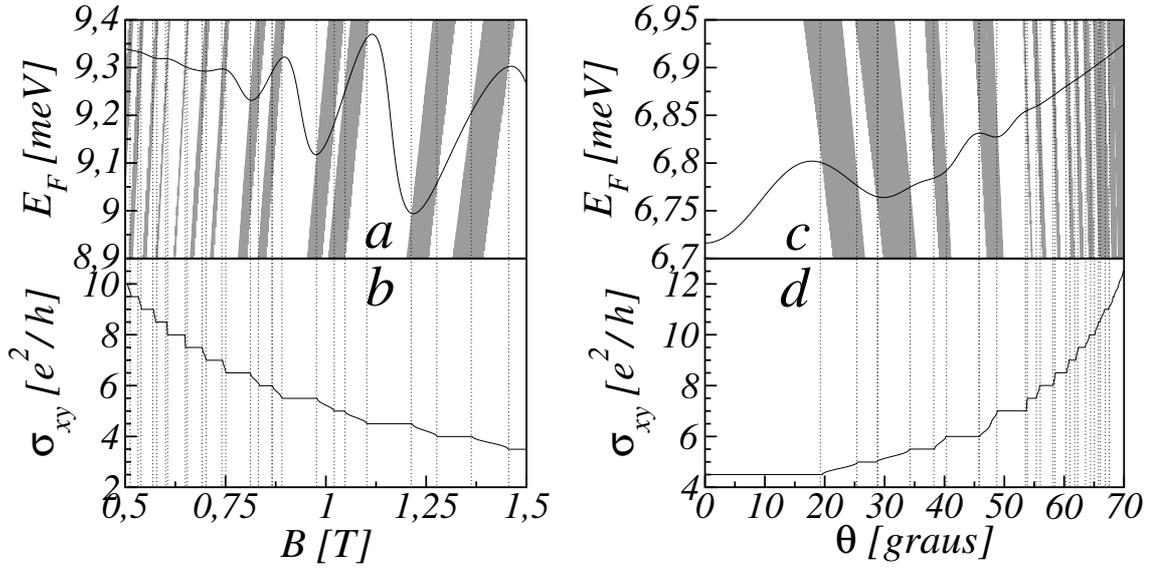


Figura 4.14: (a) Energia de Fermi E_F (linha cheia) e bandas de energia em função de B (regiões em cinza). (b) Condutividade Hall σ_{xy} em função de B . Em todas as curvas em (a) e (b), temos: $\theta = 30^\circ$, $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{ eV/m}$, $n_s = 2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ e $T = 0$. (c) Energia de Fermi E_F (linha cheia) e bandas de energia em função de θ (regiões em cinza). (d) Condutividade Hall σ_{xy} em função de θ . Em todas as curvas em (c) e (d), temos: $B = 1 \text{ T}$, $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{ eV/m}$, $n_s = 2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ e $T = 0$.

4.5 Condutividade difusiva σ_{xx}^{dif}

Diferentemente do mostrado nos Capítulos anteriores, o elemento de matriz $\langle \psi^{(n)} | v_x | \psi^{(n)} \rangle$ é diferente de zero, sendo dado pela Eq.(4.10). Portanto, a contribuição difusiva σ_{xx}^{dif} , dada pela seguinte expressão

$$\sigma_{xx}^{\text{dif}} = \frac{\beta e^2}{4\pi^2 l_c^2} \sum_n \int_0^{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\mathcal{K}_y d\omega F(\omega) [1 - F(\omega)] \delta(\omega - \mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y)) \tau_n \langle \psi^{(n)} | v_x | \psi^{(n)} \rangle^2, \quad (4.18)$$

também é diferente de zero, onde $F(E)$ é dado pela Eq.(2.44) e τ_n é o tempo de relaxação. No cálculo numérico da condutividade difusiva, consideramos que o tempo de relaxação τ_n é o mesmo para todas as auto-energias e igual a $\frac{m\gamma}{e}$ onde γ é a mobilidade eletrônica.

No limite $T \rightarrow 0$, após substituir $\langle \psi^{(n)} | v_x | \psi^{(n)} \rangle$ e $\tau_n = \frac{m\gamma}{e}$, a contribuição difusiva da condutividade é expressa por

$$\sigma_{xx}^{\text{dif}} = \frac{e^2 m \gamma V_p l_c^2 K_p^2}{2\sqrt{2}\pi^{3/2} \hbar \Gamma} \sum_n \sum_{s,\sigma} |C_{s,\sigma}^{(n)}|^2 L_n(l_c^2 K_p^2 / 2) \int_0^{2\pi} d\mathcal{K}_y e^{-(E_F - \mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y))^2 / 2\Gamma^2} \text{sen}(\mathcal{K}_y). \quad (4.19)$$

Na Eq.(4.19), consideramos que, devido a presença de impurezas, as funções de Dirac presentes na Eq.(2.71) podem ser representadas por Gaussianas de largura Γ [56, 57].

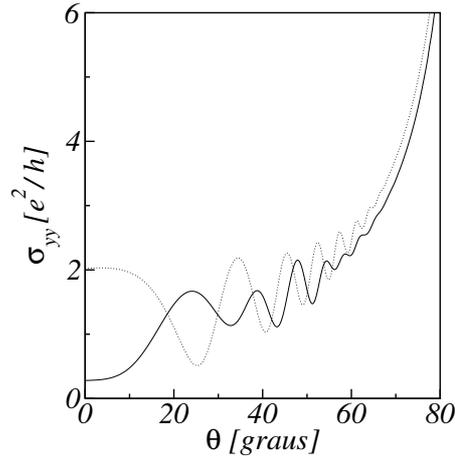


Figura 4.15: Condutividade colisional σ_{yy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

Mostramos resultados para a contribuição difusiva da condutividade em função de θ nas Figs.(4.20) e (4.21). Observamos a presença de oscilações cujo período não se altera, mesmo com a inclusão da ISOD e da ISOR. Estas oscilações são qualitativamente semelhantes as oscilações de Weiss[41]. Estas oscilações magneto-resistivas são o resultado da comensurabilidade entre o raio ciclotrônico e o período da modulação no potencial. As mesmas oscilações são vistas nas Figs.(4.22) e (4.23) onde mostramos resultados para a contribuição difusiva da condutividade em função de B .

4.6 Energia Livre de Helmholtz e Magnetização na direção do Campo

Utilizando-se o mesmo método visto na seção 2.5, considerando uma densidade de estados associada a cada energia E escrita na Eq.(4.11), podemos calcular numericamente a energia livre de Helmholtz por unidade de área para um gás de férmions não-interagente através da seguinte expressão[47]

$$\begin{aligned}
 A_s &= \frac{1}{8\pi l_c^2} \sum_n \int_0^{2\pi} d\mathcal{K}_y \mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y) \left[1 + \operatorname{erf} \left(\frac{E_F - \mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y)}{\sqrt{2}\Gamma} \right) \right] \\
 &\quad - \frac{\Gamma}{2(2\pi)^{3/2} l_c^2} \sum_n \int_0^{2\pi} d\mathcal{K}_y e^{(E_F - \mathcal{E}_n(\mathcal{K}_y))^2 / 2\Gamma^2},
 \end{aligned} \tag{4.20}$$

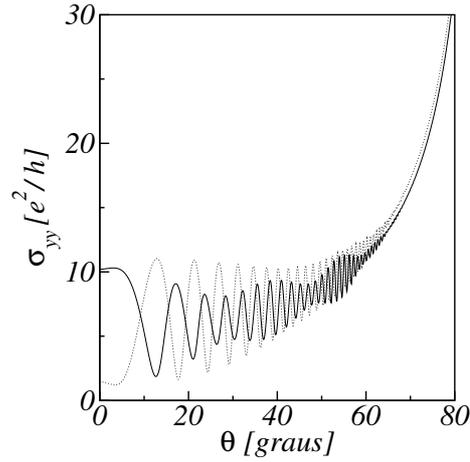


Figura 4.16: Condutividade colisional σ_{yy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

e a partir da Eq.(4.20), podemos calcular numericamente a magnetização por unidade de área através da relação termodinâmica

$$M = - \left(\frac{\partial A_s}{\partial B} \right)_T. \quad (4.21)$$

Mostramos resultados para a energia livre de Helmholtz por unidade de área A_s em função de B nas Figs. (4.24) e (4.25) para $T = 0$ onde tomamos duas densidades de elétrons n_s . Observa-se, ao se comparar as Figs. (4.24) e (4.25) que, com o aumento da densidade eletrônica n_s , o comportamento oscilatório da energia livre se torna mais intenso. Observamos também a presença do padrão modular em A_s , devido a ISOR e a ISOD.

Nas Figs. (4.26) e (4.27), mostramos resultados para a magnetização na direção do campo em unidades de $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$ a $T = 0$ tomando-se duas densidades de elétrons n_s . A magnetização na direção do campo também apresenta comportamento oscilatório dependente da densidade eletrônica n_s e, com a presença da ISOR e da ISOD, a magnetização apresenta modulações. Como visto nos Capítulos anteriores, esta modulação vista na energia livre e na magnetização deve-se a dependência destas grandezas da energia de Fermi a $T = 0$.

As oscilações na magnetização são semelhantes às oscilações de Hass-Van Alphen, observadas experimentalmente em poços quânticos[59]. É observado, das Figs. (4.26) e (4.27), uma mudança significativa no comportamento qualitativo da magnetização com a inclusão da MP1D. Esta mudança é explicada pela dependência da energia livre e da magnetização da densidade de estados.

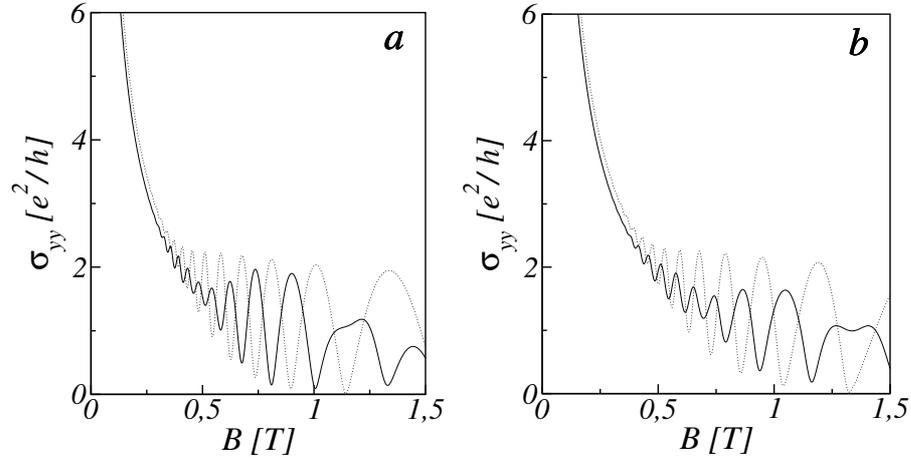


Figura 4.17: Condutividade colisional σ_{yy} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

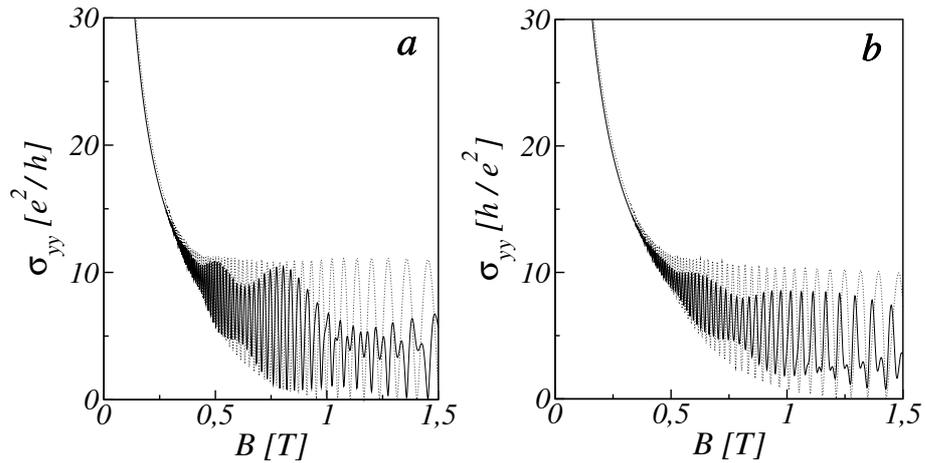


Figura 4.18: Condutividade colisional σ_{yy} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

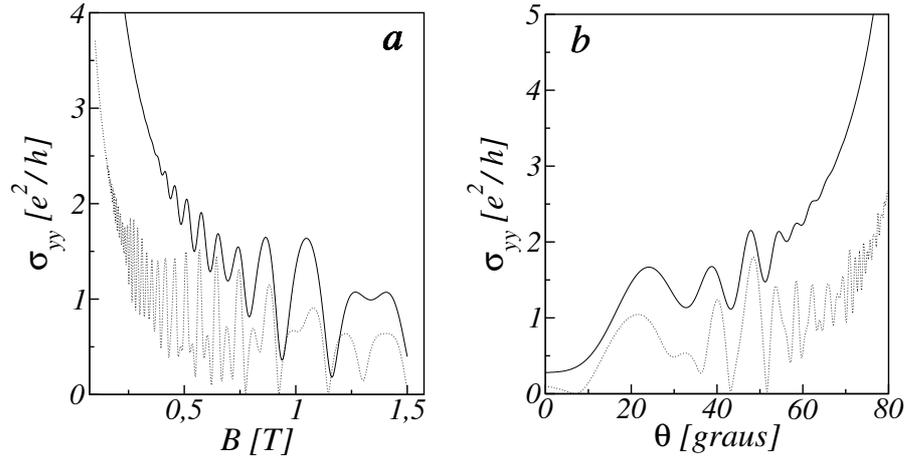


Figura 4.19: (a) Condutividade colisional σ_{yy} em função de B . Em cada uma das curvas, temos: $\Gamma = 0,2 \text{ meV}$ (linha pontilhada) e $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/ m^2 , $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{ eV/m}$, $\theta = 30^\circ$ e $T = 0$. (b) Condutividade colisional σ_{yy} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\Gamma = 0,2 \text{ meV}$ (linha pontilhada) e $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/ m^2 , $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{ eV/m}$, $B = 1 \text{ T}$ e $T = 0$.

4.7 Conclusões Parciais

Consideramos os efeitos da ISOR, da ISOD e da MP1D em um GE2D na presença de um campo magnético inclinado cuja componente na direção do plano é perpendicular a periodicidade da MP1D. Determinamos os níveis de energia acessíveis aos elétrons e os auto-estados associados através do método das frações continuadas e também através do tratamento direto do sistema tridiagonal homogêneo (2.17) utilizando-se subrotinas de diagonalização[55] e logo após calculamos as bandas de energia e os auto-estados correspondentes através da teoria de perturbação em primeira ordem. A introdução da modulação periódica transforma os níveis de energia em bandas de energia, devido a quebra da degenerescência em p_x .

Devido a presença de ISOD ou ISOR, observamos modulações na densidade de estados, mesmo na presença de MP1D. Estas modulações resultam nas modulações vistas na energia de Fermi. No limite $\Gamma \rightarrow 0$ a energia de Fermi apresenta saltos. Os saltos acontecem quando a energia de Fermi se encontra em regiões com energias inacessíveis aos elétrons do sistema. Nas regiões de energias acessíveis, a energia de Fermi é monotonicamente crescente em função da magnitude da componente do campo magnético externo ao longo da direção de crescimento.

As descontinuidades na energia de Fermi desaparecem gradualmente com o aumento de Γ devido a superposição entre as bandas de energia, o que permite acomodar os elétrons em estados intermediários entre as bandas de energia. O comportamento oscilatório da energia de

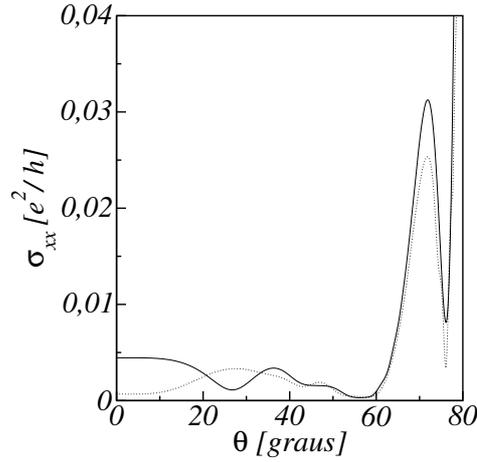


Figura 4.20: Contribuição difusiva σ_{xx} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{ eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11} \text{ elétrons/m}^2$, $B = 1 \text{ T}$, $\Gamma = 0,5 \text{ meV}$ e $T = 0$.

Fermi depende da densidade eletrônica n_s : ao aumentar a densidade eletrônica, a energia de Fermi passa a apresentar um comportamento oscilatório mais intenso.

Na presença de MP1D, a condutividade Hall passa a ter valores contínuos entre dois *plateaus* quaisquer e o intervalo onde a condutividade Hall não é constante é o mesmo intervalo onde a energia de Fermi é um estado permitido ao sistema, ou seja, quando a energia de Fermi cruza uma banda de energia.

Em todos os casos onde consideramos a presença de ISO, observamos a presença de oscilações na condutividade colisional, semelhantes às oscilações de Shubnikov-de Hass, verificadas experimentalmente para as condutividades colisionais σ_{yy} [10, 11, 17, 22, 37, 38]. As oscilações na condutividade colisional σ_{yy} possuem modulações devido a ISOR e ISOD. A intensidade da condutividade colisional aumenta com Γ devido a se aumentar o número de superposições entre os níveis de energia e E_F , conforme mostrado na Fig.(3.21). Esta dependência acontece devido a taxa de transição entre os níveis $w_{n,n'}$ é diretamente proporcional a Γ , de acordo com a Eq.(2.64).

Na ausência da MP1D a contribuição difusiva da condutividade é nula. Na presença da MP1D, observamos a presença de oscilações cujo período não se altera, mesmo com a inclusão da ISOD e da ISOR. Estas oscilações são qualitativamente semelhantes as oscilações de Weiss[41], resultado da comensurabilidade entre o raio ciclotrônico e o período da modulação no potencial.

Em todos os casos, com o aumento da densidade eletrônica n_s , aumenta-se o número de oscilações na energia livre. Na magnetização na direção do campo, observamos um compor-

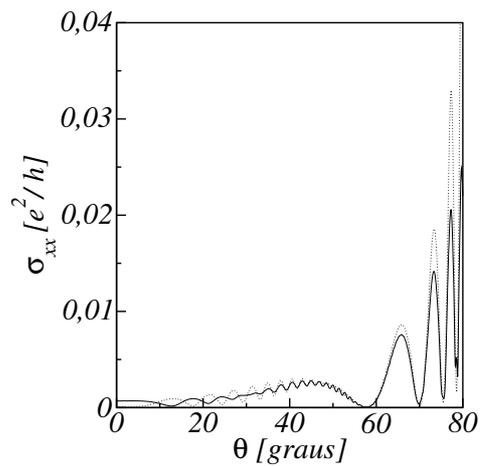


Figura 4.21: Contribuição difusiva σ_{xx} em função de θ . Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11} \text{eV/m}$ (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12} \text{elétrons/m}^2$, $B = 1 \text{T}$, $\Gamma = 0,5 \text{meV}$ e $T = 0$.

tamento oscilatório qualitativamente semelhante as oscilações de Hass-Van Alphen observado experimentalmente[59] e caracterizado por oscilações na magnetização em função do campo.

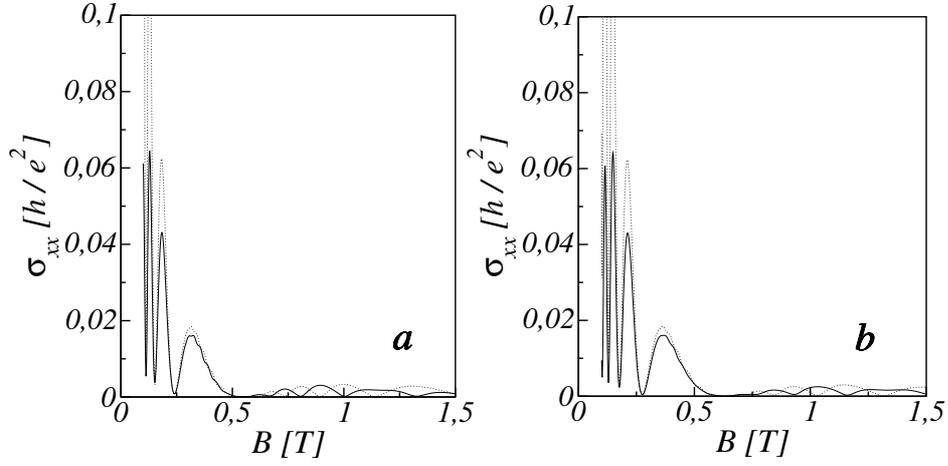


Figura 4.22: Contribuição difusiva σ_{xx} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

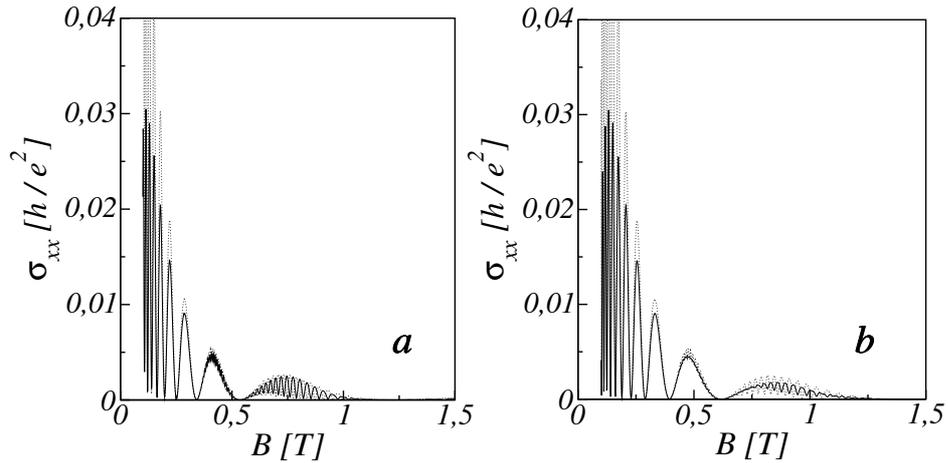


Figura 4.23: Contribuição difusiva σ_{xx} em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

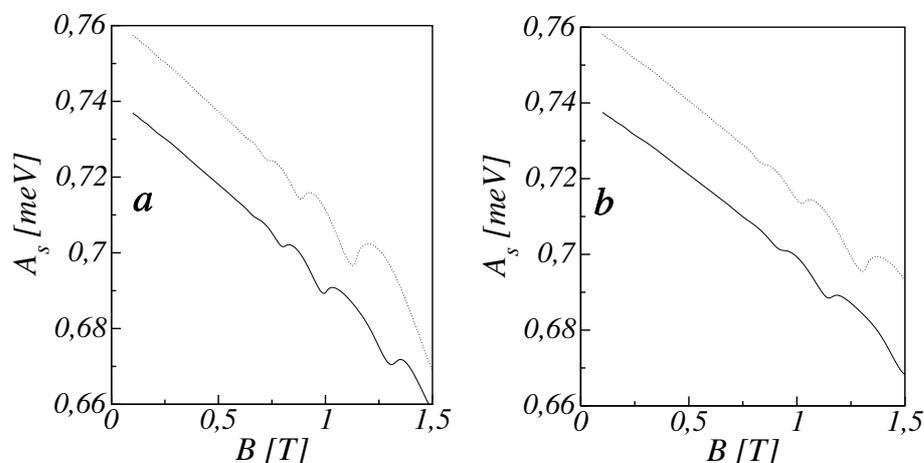


Figura 4.24: Energia livre de Helmholtz por unidade de área A_s em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

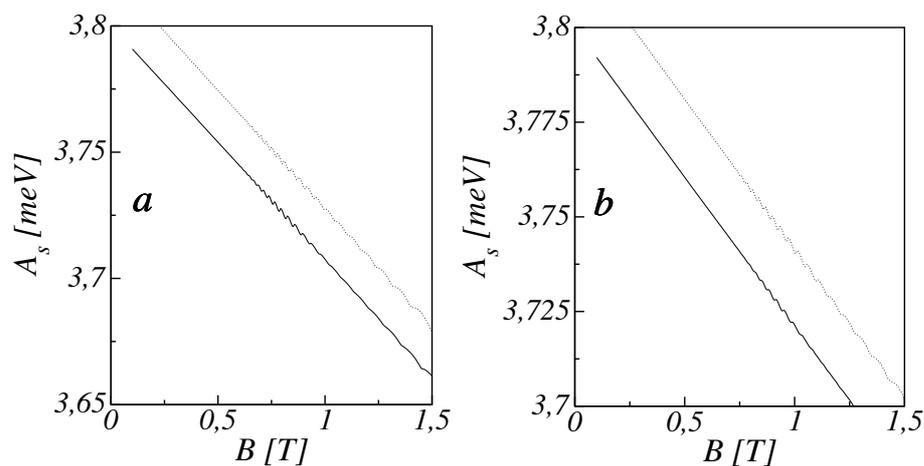


Figura 4.25: Energia livre de Helmholtz por unidade de área A_s em função de B para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

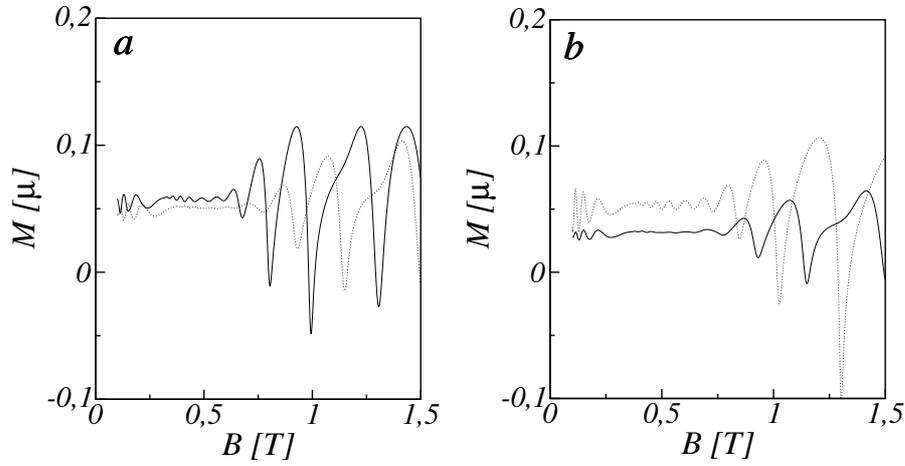


Figura 4.26: Magnetização M em função do campo B em unidades de $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$ para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 2 \cdot 10^{11}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

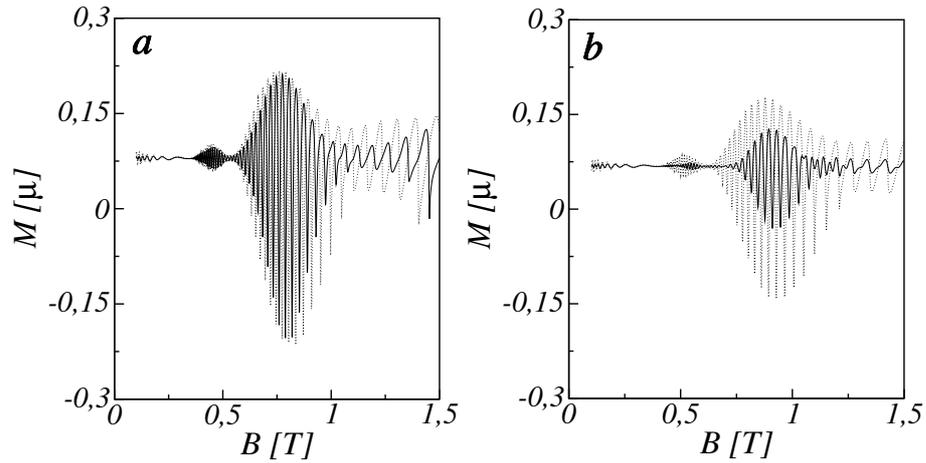


Figura 4.27: Magnetização M em função do campo B em unidades de $\mu = \frac{e\hbar}{2m}$ para dois valores de θ : $\theta = 0$ (a) e $\theta = 30^\circ$ (b). Em cada uma das curvas, temos: $\alpha_R = \alpha_D = 0$ (linha pontilhada) e $\alpha_R = \alpha_D = 10^{-11}$ eV/m (linha cheia). Em todas as curvas, temos: $n_s = 10^{12}$ elétrons/m², $B = 1$ T, $\Gamma = 0,5$ meV e $T = 0$.

5 Conclusões

Consideramos os efeitos da ISOR, da ISOD em um GE2D na presença de um campo magnético inclinado e determinamos os níveis de energia acessíveis aos elétrons e os auto-estados associados através do método das frações continuadas e também através do tratamento direto do sistema tridiagonal homogêneo (2.17) utilizando-se subrotinas de diagonalização[55]. Consideramos também a presença de uma modulação periódica unidimensional, perpendicular a componente do campo externo ao longo da região onde os elétrons estão confinados e calculamos as bandas de energia e os auto-estados correspondentes através da teoria de perturbação em primeira ordem.

Quanto aos níveis de energia, seu comportamento com respeito ao campo não depende da ISOR e da ISOD para campos magnéticos dados pela relação 3.14. Analisando o comportamento dos níveis de energia em função de θ , observamos que há a presença de degenerescência nos níveis de energia, na ausência de ISOR ($\alpha_R = 0$) e campo magnético na direção perpendicular ao plano que contém os elétrons ($\theta = 0$) além da degenerescência em p_x . Esta quebra de degenerescência tem papel fundamental no comportamento da condutividade Hall σ_{xy} . A introdução da modulação periódica transforma os níveis de energia em bandas de energia, devido a quebra da degenerescência em p_x .

Devido a presença de ISOD ou ISOR, observamos modulações na densidade de estados, mesmo na presença de MP1D. Estas modulações resultam nas modulações vistas na energia de Fermi.

No limite $\Gamma \rightarrow 0$ a energia de Fermi apresenta saltos. No caso da ausência de MP1D, as descontinuidades para a energia de Fermi *versus* campo, para campos externos B maiores, acontece devido a necessidade de mais elétrons para preencher cada nível de energia, tal como explicitado na Eq.(2.23). Os elétrons gradualmente esvaziam os níveis energeticamente superiores, passando a ocupar os níveis energeticamente inferiores. O salto acontece quando um nível é totalmente esvaziado por transições para níveis mais baixos.

De forma semelhante, as descontinuidades observadas na energia de Fermi em função de

θ na ausência de MP1D podem ser entendidas devido a degenerescência dos níveis ser diretamente proporcional a $\cos \theta$, o que implica na necessidade de menos elétrons para se preencher cada nível de energia com o aumento de θ . Os elétrons provenientes de níveis energeticamente inferiores passam a ocupar gradualmente os níveis energeticamente superiores com o aumento de θ . O salto acontece quando um nível é totalmente populado por elétrons provenientes de níveis mais baixos.

Na presença de MP1D, os saltos acontecem quando a energia de Fermi se encontra em regiões com energias inacessíveis aos elétrons do sistema. Nas regiões de energias acessíveis, a energia de Fermi é monotonicamente crescente em função da magnitude da componente do campo magnético externo ao longo da direção de crescimento.

As discontinuidades na energia de Fermi desaparecem gradualmente com o aumento de Γ devido a superposição entre os níveis, o que permite acomodar os elétrons em estados intermediários entre os níveis ou bandas de energia. O comportamento oscilatório da energia de Fermi depende da densidade eletrônica n_s : ao aumentar a densidade eletrônica, a energia de Fermi passa a apresentar um comportamento oscilatório mais intenso.

A condutividade Hall é quantizada no caso da ausência de MP1D. No caso $\theta = 0$ e $\alpha_R = 0$, a condutividade Hall só pode assumir os valores ne^2/h com $n = 1, 2, 3, \dots$. Na presença de ISOR ou ISOD ou de uma componente do campo externo ao longo da região onde os elétrons se encontram confinados, aparecem *plateaus* intermediários $(2n + 1)e^2/(2h)$ entre quaisquer *plateaus* de ordem n e $n + 1$, associados à quebra de degenerescência observada nos níveis de energia. A condutividade Hall σ_{xy} em função de θ também é quantizada. O comportamento dos *plateaus* de σ_{xy} está associado às oscilações vistas na energia de Fermi em função de θ .

Os saltos associados aos *plateaus* da condutividade Hall acontecem quando a energia de Fermi do sistema se torna igual a um nível de energia, na ausência de MP1D. Isto acontece devido a condutividade Hall envolver os elétrons que estão no nível de Fermi. Na presença de MP1D, a condutividade Hall pode assumir qualquer valor entre dois *plateaus* quaisquer e o intervalo onde a condutividade Hall não é constante é o mesmo intervalo onde a energia de Fermi é um estado permitido ao sistema, ou seja, quando a energia de Fermi cruza uma banda de energia.

Em todos os casos, observamos a presença de oscilações na condutividade colisional, semelhantes às oscilações de Shubnikov-de Hass, verificadas experimentalmente σ_{yy} [10, 11, 17, 22, 37, 38]. As oscilações na condutividade colisional σ_{yy} possuem modulações devido a ISOR e ISOD. A intensidade da condutividade colisional aumenta com Γ devido a se aumentar o número de superposições entre os níveis de energia e E_F , conforme mostrado na Fig.(3.21).

Esta dependência acontece devido a taxa de transição entre os níveis $w_{n,n'}$ é diretamente proporcional a Γ , de acordo com a Eq.(2.64).

Na ausência da MP1D a contribuição difusiva da condutividade é nula. Na presença da MP1D, observamos a presença de oscilações cujo período não se altera, mesmo com a inclusão da ISOD e da ISOR. Estas oscilações são qualitativamente semelhantes as oscilações de Weiss[41], resultado da comensurabilidade entre o raio ciclotrônico e o período da modulação no potencial.

Em todos os casos, com o aumento da densidade eletrônica n_s , aumenta-se o número de oscilações na energia livre. Na magnetização na direção do campo, observamos um comportamento oscilatório qualitativamente semelhante as oscilações de Hass-Van Alphen observado experimentalmente[59] e caracterizado por oscilações na magnetização em função do campo.

APÊNDICE A – Método das Frações Continuadas

Apresentamos, neste apêndice, o Método das Frações Continuadas (MFC), que nos permite obter os autovalores de uma matriz tridiagonal [54, 60, 61]. Muitos sistemas são descritos por matrizes tridiagonais infinitas e, geralmente, para estes sistemas a solução é obtida truncando-se a matriz. Porém, em determinados casos, é importante se conhecer todo o espectro, como, por exemplo, na solução de problemas estatísticos de um sistema no limite termodinâmico, ou na solução de gases quânticos não interagentes.

No caso específico de gases quânticos não-interagentes formado por férmions, necessitamos apenas os níveis mais baixos no caso $T = 0$, pois as partículas, neste caso específico, ocupam os níveis de energia até o nível de Fermi. Neste caso específico, o MFC nos permite o controle dos níveis de energia necessários no cálculo da energia de Fermi e conseqüentemente, do tamanho de matriz necessário na convergência das propriedades deste mesmo Gás de Férmions não interagente.

A.1 Método das Frações Continuadas

Considerando o sistema de equações lineares homogêneo

$$\begin{pmatrix} h_{1,1} - E & h_{1,2} & 0 & 0 & \dots \\ h_{2,1} & h_{2,2} - E & h_{2,3} & 0 & \dots \\ 0 & h_{3,2} & h_{3,3} - E & h_{3,4} & \dots \\ 0 & 0 & h_{4,3} & h_{4,4} - E & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0, \quad (\text{A.1})$$

obtemos da $(n \pm 1)$ -ésima equação do sistema (A.1),

$$h_{n\pm 1, n\pm 2} v_{n\pm 2} + (h_{n\pm 1, n\pm 1} - E) v_{n\pm 1} + h_{n\pm 1, n} v_n = 0 \quad (\text{A.2})$$

a seguinte relação entre as componentes $v_{n\pm 1}$ e v_n

$$\frac{v_{n\pm 1}}{v_n} = \frac{-h_{n\pm 1,n}}{h_{n\pm 1,n\pm 1} - E - \frac{v_{n\pm 2}}{v_{n\pm 1}}}. \quad (\text{A.3})$$

Iterando-se sucessivamente a Eq.(A.3), obtemos a seguinte relação entre $v_{n\pm 1}$ e v_n

$$\frac{v_{n\pm 1}}{v_n} = - \frac{h_{n\pm 1,n}}{h_{n\pm 1,n\pm 1} - E - \frac{h_{n\pm 1,n\pm 2}h_{n\pm 2,n\pm 1}}{h_{n\pm 2,n\pm 2} - E - \frac{h_{n\pm 2,n\pm 3}h_{n\pm 3,n\pm 2}}{h_{n\pm 3,n\pm 3} - E - \frac{h_{n\pm 3,n\pm 4}h_{n\pm 4,n\pm 3}}{h_{n\pm 4,n\pm 4} - E - \dots}}}. \quad (\text{A.4})$$

Observamos, da Eq.(A.8), que ao se conhecer o autovalor E , podemos encontrar as componentes do vetor não-normalizado v_i correspondente, fazendo-se $n = i$ na Eq.(A.8).

Podemos obter uma relação para E , na forma de uma equação secular a partir da n -ésima equação do sistema (A.1)

$$h_{n,n+1}v_{n+1} + (h_{n,n} - E)v_n + h_{n-1,n}v_{n-1} = 0. \quad (\text{A.5})$$

Ao dividir-se a Eq.(A.5) por v_n e combinando com a Eq.(A.8), obtemos

$$E = h_{n,n} - \frac{h_{n,n-1}h_{n-1,n}}{h_{n-1,n-1} - E - \frac{h_{n-1,n-2}h_{n-2,n-1}}{h_{n-2,n-2} - E - \frac{h_{n-2,n-3}h_{n-3,n-2}}{\dots}}}. \quad (\text{A.6})$$

$$- \frac{h_{n,n+1}h_{n+1,n}}{h_{n+1,n+1} - E - \frac{h_{n+1,n+2}h_{n+2,n+1}}{h_{n+2,n+2} - E - \frac{h_{n+2,n+3}h_{n+3,n+2}}{h_{n+3,n+3} - E - \frac{h_{n+3,n+4}h_{n+4,n+3}}{h_{n+4,n+4} - E - \dots}}}$$

A equação secular (A.6) pode ser resolvida de forma iterativa onde o autovalor E é um *ponto fixo* e a Eq.(A.6) pode ser utilizada na determinação das componentes do autovetor não normalizado correspondente. Para se determinar o i -ésimo autovalor E_i , podemos escrever $n = i$ na Eq.(A.6) de tal forma que obtemos

$$E_i = h_{i,i} - \frac{h_{i,i-1}h_{i-1,i}}{h_{i-1,i-1} - E_i - \frac{h_{i-1,i-2}h_{i-2,i-1}}{\dots}} - \frac{h_{i,i+1}h_{i+1,i}}{h_{i+1,i+1} - E_i - \frac{h_{i+1,i+2}h_{i+2,i+1}}{h_{i+2,i+2} - E_i - \dots}}. \quad (\text{A.7})$$

$$\dots \frac{h_{2,2}h_{1,2}}{h_{1,1} - E_i}$$

Na Eq.(A.7), consideramos, como primeira aproximação para o autovalor, o elemento da diagonal $h_{i,i}$. Os termos à direita na Eq.(2.37) fornecem, então, uma aproximação de ordem superior e repetimos o procedimento até que a mudança no valor de E_i seja menor que a precisão desejada. Opcionalmente, pode-se introduzir mais denominadores no terceiro termo da Eq.(A.7) e repetir-se o processo iterativo. O processo é então repetido até a convergência com a precisão desejada. Observa-se que com a repetição do processo iterativo e a inserção de denominadores leva sempre a convergência no valor final de E_i .

Uma vez determinado o i -ésimo autovalor E_i , podemos calcular as $v_{k-N}^{(i)}$, $v_{k-N+1}^{(i)}$, ..., $v_k^{(i)}$, $v_{k+1}^{(i)}$, ..., $v_{k+N}^{(i)}$ componentes do i -ésimo autovetor não normalizado a partir da Eq.(A.4). Com este objetivo, reexpressamos a Eq.(A.4) ao incluir os superíndices i do autovetor não-normalizado correspondente ao i -ésimo autovalor E_i e ao fazer $n = k$ na Eq.(A.4)

$$\frac{v_{k\pm 1}^{(i)}}{v_k^{(i)}} = - \frac{h_{k\pm 1,k}}{h_{k\pm 1,k\pm 1} - E_i - \frac{a_{k\pm 1,k\pm 2} h_{k\pm 2,k\pm 1}}{h_{k\pm 2,k\pm 2} - E_i - \dots}}. \quad (\text{A.8})$$

onde podemos considerar $v_i^{(i)} = 1$ e a partir dele, obtemos as outras componentes $v_k^{(i)}$ ($k \neq 1$) usando a Eq.(A.8). Além disso, podemos considerar que $v_{i\pm|N+l|}^{(i)} = 0$ para todo l onde N é determinado por

$$\left| v_{i\pm N\mp 1}^{(i)} \right| / \left| v_{i\pm N}^{(i)} \right| < 10^{-6}. \quad (\text{A.9})$$

Observamos que, ao se truncar os denominadores do terceiro termo do segundo membro da Eq.(A.7), ela se torna formalmente equivalente a equação secular de uma matriz finita. Isto significa que o MFC é formalmente equivalente aos métodos padrão de diagonalização. Porém, a vantagem do MFC é permitir o controle sobre os tamanhos de matriz considerados na diagonalização numérica, ou seja, o MFC permite que se encontre as linhas de matriz mais importantes no cálculo de um autovalor particular da matriz tridiagonal infinita considerada.

A.2 Sumário dos Resultados deste Apêndice

Obtivemos a equação secular para o cálculo numérico dos autovalores de uma matriz tridiagonal infinita através do Método das Frações Continuadas. Obtivemos, também, as expressões das componentes do i -ésimo autovetor não-normalizado em termos do i -ésimo autovalor E_i . Estas expressões, ao se truncarem apropriadamente as frações continuadas, são formalmente equivalentes às expressões obtidas para matrizes finitas. Porém, a vantagem do método das frações continuadas é permitir o controle sobre os tamanhos de matrizes finitas truncadas ao se

considerar na diagonalização numérica.

APÊNDICE B – Propriedades de Transporte e Teoria Cinética de Boltzmann

Neste apêndice, mostramos os resultados para as propriedades de transporte derivados através da teoria cinética de Boltzmann. Primeiramente, estabelecemos alguns teoremas e logo após, seguindo os passos descritos por van Vliet *et al*[62], determinamos duas equações mestras para as partes diagonal e não-diagonal do operador densidade. Logo após, seguindo Charbonneau *et al*[63], das equações mestras, derivamos as partes diagonal e não-diagonal da equação de Boltzmann. De posse das equações cinéticas de Boltzmann, usamos os resultados da teoria da resposta linear[64] com o objetivo de obter as expressões para as propriedades de transporte[65].

Consideramos um Hamiltoniano escrito da seguinte forma

$$H = H_o + \lambda V - AF(t), \quad (\text{B.1})$$

onde H_o é a parte diagonal de H , λV é a interação, que assumimos não diagonal, o que é equivalente a incorporar a parte diagonal de V a H_o . $-AF(t)$ é a parte devida a interação com um campo externo onde $F(t)$ é uma força generalizada. Em geral, o operador λV provoca transições aleatórias entre os auto-estados de H_o , representando um termo dissipativo. Além disso, consideramos que o campo $F(t)$ é ativado no tempo $t = 0$.

B.1 Preliminares

Usando o fato de que os auto-estados $|\gamma\rangle$ de H_o formam uma base linearmente independente, podemos escrever um operador K qualquer na forma

$$K = \sum_{\gamma, \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| K |\gamma'\rangle \langle \gamma'| = \sum_{\gamma} |\gamma\rangle \langle \gamma| K |\gamma\rangle \langle \gamma| + \sum_{\gamma \neq \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| K |\gamma'\rangle \langle \gamma'|. \quad (\text{B.2})$$

A expressão B.2 pode ser reescrita na forma

$$K = \mathcal{P}K + (1 - \mathcal{P})K, \quad (\text{B.3})$$

onde

$$\mathcal{P}K \equiv \sum_{\gamma} |\gamma\rangle \langle \gamma| K |\gamma\rangle \langle \gamma|, \quad (1 - \mathcal{P})K \equiv \sum_{\gamma \neq \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| K |\gamma'\rangle \langle \gamma'|. \quad (\text{B.4})$$

Da expressão anterior, podemos concluir que $\mathcal{P}K$ é a parte diagonal do operador K . A ação do super-operador \mathcal{P} consiste em extrair a parte diagonal K_d de um operador qualquer K . De forma análoga, observamos que a ação do super-operador $(1 - \mathcal{P})$ consiste em extrair a parte não-diagonal K_{nd} de um operador qualquer K . A nomenclatura super-operador é dada em razão do fato que o super-operador age em um operador fornecendo outro operador.

Em geral, podemos escrever um super-operador \mathcal{F} como

$$\mathcal{F} = \sum_i P_i \rightarrow \leftarrow Q_i, \quad (\text{B.5})$$

onde P_i age pela esquerda e Q_i age pela direita. \mathcal{P} , na notação para os super-operadores, é expresso como

$$\mathcal{P} \equiv \sum_{\gamma} |\gamma\rangle \langle \gamma| \rightarrow \leftarrow |\gamma\rangle \langle \gamma|. \quad (\text{B.6})$$

Como descrito por Fano[66], a descrição dos super-operadores pode ser formalizada ao se definir um espaço de Hilbert incluindo todos os operadores K . Este novo espaço cujos elementos são operadores é um espaço de Liouville.

É possível mostrar de forma direta as seguintes propriedades dos operadores \mathcal{P} e $(1 - \mathcal{P})$ usando a notação expressa na Eq.(B.6)

$$\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}, \quad (1 - \mathcal{P})^2 = 1 - \mathcal{P}, \quad \mathcal{P}(1 - \mathcal{P}) = 0. \quad (\text{B.7})$$

Podemos definir outros super-operadores, como por exemplo o super-operador Identidade, cuja ação em um operador K resulta no mesmo operador K

$$\mathcal{I} = \sum_{\gamma, \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| \rightarrow \leftarrow |\gamma'\rangle \langle \gamma'| = 1 \rightarrow \leftarrow 1, \quad (\text{B.8})$$

e o super-operador de Liouville

$$\mathcal{L} = \frac{1}{\hbar} (H \rightarrow \leftarrow 1 + 1 \rightarrow \leftarrow H), \quad (\text{B.9})$$

que nos permite reexpressar a evolução temporal de um operador na notação dos super-operadores

$$\mathcal{L}K = \frac{1}{\hbar}[H, K] = \frac{dK}{dt}, \quad (\text{B.10})$$

e o operador \mathcal{R} , expresso por

$$\mathcal{R} = -\sum_{\gamma} (W_{\gamma, \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma'| \rightarrow \leftarrow |\gamma'\rangle \langle \gamma| - W_{\gamma, \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| \rightarrow \leftarrow |\gamma'\rangle \langle \gamma'|), \quad (\text{B.11})$$

onde

$$W_{\gamma, \gamma'} = W_{\gamma', \gamma} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} |\langle \gamma | V | \gamma' \rangle|^2 \delta(E_{\gamma} - E_{\gamma'}), \quad (\text{B.12})$$

que expressa a taxa de transição entre os estados acessíveis do sistema devido aos efeitos de λV .

Para o que se segue, precisaremos dos seguintes teoremas envolvendo super-operadores

• **Teorema 1:**

$$e^{i\mathcal{L}t} K = e^{iHt/\hbar} K e^{-iHt/\hbar}, \quad (\text{B.13})$$

$$e^{i\mathcal{L}_0 t} K = e^{iH_0 t/\hbar} K e^{-iH_0 t/\hbar}, \quad (\text{B.14})$$

onde

$$\mathcal{L} = \frac{1}{\hbar} (H_0 \rightarrow \leftarrow I + I \rightarrow \leftarrow H_0). \quad (\text{B.15})$$

• **Teorema 2:**

$$e^{\sum_{\gamma} |\gamma\rangle \langle \gamma| f(\gamma)} = \sum_{\gamma} |\gamma\rangle \langle \gamma| f(\gamma). \quad (\text{B.16})$$

• **Teorema 3:**

$$e^{\mathcal{R}t} K = \sum_{\gamma} |\gamma\rangle \langle \gamma| e^{\mathcal{M}t} \langle \gamma| K |\gamma\rangle, \quad (\text{B.17})$$

onde

$$\mathcal{M} f(\gamma) = -\sum_{\gamma'} W_{\gamma', \gamma} f(\gamma') - W_{\gamma, \gamma'} f(\gamma). \quad (\text{B.18})$$

• **Teorema 4:**

$$e^{-it(1-\mathcal{P})\mathcal{L}} (1-\mathcal{P})K = (1-\mathcal{P})e^{-it\mathcal{L}(1-\mathcal{P})}L. \quad (\text{B.19})$$

• **Teorema 5:** Se a relação

$$\mathcal{P}[K, H_0] = 0, \quad (\text{B.20})$$

for satisfeita, o que é equivalente a K não diagonal

$$\mathcal{P} \mathcal{L}_0 K = 0, \quad (\text{B.21})$$

temos a seguinte relação

$$e^{-it(1-\mathcal{P})\mathcal{L}} K = [e^{it\mathcal{L}_0} + O(\lambda)] K, \quad (\text{B.22})$$

onde \mathcal{L}_0 é definido por

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{\hbar} (H_0 \rightarrow\leftarrow 1 + 1 \rightarrow\leftarrow H_0). \quad (\text{B.23})$$

Os lemas a seguir envolvendo o operador \mathcal{R} e \mathcal{L}_0 , são válidos para quaisquer operadores C e D

• **Lema 1:**

$$\text{Tr}(C\mathcal{R}D) = \text{Tr}(D\mathcal{R}C). \quad (\text{B.24})$$

• **Lema 2:**

$$\text{Tr}(C e^{-\mathcal{R}t} D) = \text{Tr}(D e^{-\mathcal{R}t} C). \quad (\text{B.25})$$

• **Lema 3:**

$$\text{Tr}(C \mathcal{L}_0 D) = -\text{Tr}(D \mathcal{L}_0 C). \quad (\text{B.26})$$

• **Lema 4:**

$$\text{Tr}(C e^{i\mathcal{L}_0 t} D) = \text{Tr}(D e^{i\mathcal{L}_0 t} C). \quad (\text{B.27})$$

• **Lema 5:**

$$\text{Tr}[C e^{(\mathcal{R}+i\mathcal{L}_0)t} D] = \text{Tr}[D e^{(\mathcal{R}-i\mathcal{L}_0)t} C]. \quad (\text{B.28})$$

B.2 Equações cinéticas para a parte diagonal e não-diagonal do operador Densidade

Definindo o operador densidade como

$$\rho(t) \equiv \sum_{\gamma} p_{\gamma} |\gamma\rangle \langle \gamma|, \quad (\text{B.29})$$

onde p_{γ} é a probabilidade clássica de o sistema se encontrar no estado $|\gamma\rangle$. Considerando a equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\gamma\rangle = H |\gamma\rangle, \quad (\text{B.30})$$

podemos obter a evolução temporal do operador densidade $\rho(t)$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + i\mathcal{L}\rho = \frac{i}{\hbar}u(t)F(t)[A, \rho], \quad (\text{B.31})$$

onde $u(t)$ é a função de Heaviside, H é dado na equação B.1 e \mathcal{L} é expresso na Eq.(B.9).

Aplicando os operadores \mathcal{P} e $1 - \mathcal{P}$, definidos na Eq.(B.4), obtemos

$$\frac{\partial \rho_d(t)}{\partial t} + i\mathcal{P}\mathcal{L}\rho_d(t) + i\mathcal{P}\mathcal{L}\rho_{nd}(t) = \frac{i}{\hbar}u(t)F(t)\mathcal{P}[A, \rho], \quad (\text{B.32})$$

$$\frac{\partial \rho_{nd}(t)}{\partial t} + i(1 - \mathcal{P})\mathcal{L}\rho_d(t) + i(1 - \mathcal{P})\mathcal{L}\rho_{nd}(t) = \frac{i}{\hbar}u(t)F(t)(1 - \mathcal{P})[A, \rho], \quad (\text{B.33})$$

onde $\rho_d(t)$ e $\rho_{nd}(t)$ são, respectivamente, a parte diagonal e não-diagonal do operador densidade $\rho(t)$.

Combinando a Eq.(B.32) com a seguinte expressão

$$\mathcal{P}\mathcal{L}\rho_d(t) = 0, \quad (\text{B.34})$$

derivada da Eq.(B.21) que, por sua vez, é consequência de que V é não-diagonal, obtemos

$$\frac{\partial \rho_d(t)}{\partial t} + i\mathcal{P}\mathcal{L}\rho_{nd}(t) = \frac{i}{\hbar}u(t)F(t)\mathcal{P}[A, \rho], \quad (\text{B.35})$$

$$\frac{\partial \rho_{nd}(t)}{\partial t} + i\mathcal{L}\rho_d(t) + i(1 - \mathcal{P})\mathcal{L}\rho_{nd}(t) = \frac{i}{\hbar}u(t)F(t)(1 - \mathcal{P})[A, \rho]. \quad (\text{B.36})$$

A função de Green para a Eq.(B.36) é dada por

$$\mathcal{G}(t, t') = \mathcal{G}(t - t') = u(t - t')e^{-i(t-t')(1-\mathcal{P})\mathcal{L}}. \quad (\text{B.37})$$

A partir da Eq.(B.37), calculamos a solução da Eq.(B.36),

$$\rho_{nd}(t) = \mathcal{G}(t, 0)\rho_{nd}(0) + \int_0^t dt' \mathcal{G}(t - t') \left\{ -i\mathcal{L}\rho_d(t') + \frac{i}{\hbar}F(t')(1 - \mathcal{P})[A, \rho(t')] \right\}. \quad (\text{B.38})$$

Substituindo o resultado (B.38) na Eq.(B.35), obtemos uma equação integro-diferencial para a parte diagonal do operador densidade $\rho_d(t)$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_d(t)}{\partial t} &= -\mathcal{P}\mathcal{L} \int_0^t dt' \mathcal{G}(t - t') \mathcal{L}\rho_d(t') + \frac{i}{\hbar}F(t)\mathcal{P}[A, \rho(t)] \\ &+ \frac{1}{\hbar}\mathcal{P}\mathcal{L} \int_0^t dt' F(t') \mathcal{G}(t - t')(1 - \mathcal{P})[A, \rho(t')] - i\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{G}(t, 0)\rho_{nd}(0). \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

As Eqs. (B.38) e (B.39) fornecem, respectivamente, a evolução temporal completa das par-

tes diagonal e não-diagonal do operador densidade. Como não incluímos nenhuma aproximação, elas são totalmente equivalentes às Eqs. (B.32) e (B.33). As Eqs. (B.32) e (B.33) não representam um processo Markoviano devido a presença das integrais de convolução, que expressam os efeitos de memória do sistema.

Incluimos, agora, as simplificações de praxe da teoria da resposta linear[64]: substituir $\rho(t)$ por ρ_{eq} , onde ρ_{eq} representa o ensemble gran-canônico do sistema no equilíbrio

$$\rho_{\text{eq}} = e^{-\beta H} / Z, \quad Z = \text{Tre}^{-\beta H}, \quad (\text{B.40})$$

com $\beta = \frac{1}{k_B T}$ e k_B é a constante de Boltzmann, nas Eqs. (B.38) e (B.39) de tal forma que obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_d(t)}{\partial t} &= -\mathcal{P}\mathcal{L} \int_0^t dt' \mathcal{G}(t-t') \mathcal{L} \rho_d(t') + \frac{i}{\hbar} F(t) \mathcal{P}[A, \rho_{\text{eq}}] \\ &+ \frac{1}{\hbar} \mathcal{P}\mathcal{L} \int_0^t dt' F(t') \mathcal{G}(t-t') (1 - \mathcal{P})[A, \rho_{\text{eq}}] - i \mathcal{P}\mathcal{L} \mathcal{G}(t, 0) \rho_{nd}(0), \end{aligned} \quad (\text{B.41})$$

$$\begin{aligned} \rho_{nd}(t) &= \int_0^t dt' \mathcal{G}(t-t') \left\{ -i \mathcal{L} \rho_d(t') + \frac{i}{\hbar} F(t') (1 - \mathcal{P})[A, \rho_{\text{eq}}] \right\} \\ &+ \mathcal{G}(t, 0) \rho_{nd}(0). \end{aligned} \quad (\text{B.42})$$

Na próxima seção, obtemos o comportamento das partes diagonal e não-diagonal do operador densidade no equilíbrio tomando-se os limites $t \rightarrow \infty$ das evoluções temporais escritas na Eq.(B.42).

B.3 Comportamento Assintótico do Operador Densidade

Nesta seção, calculamos o limite, termo a termo, das Eqs. (B.41) e (B.42) no limite de van Hove $t \rightarrow \infty$, de modo a determinar o comportamento do operador densidade no equilíbrio. Obtemos a contribuição diagonal e não-diagonal onde coletamos os termos de ordem até λ^2 e λ^0 , respectivamente, e ao final, obtemos o comportamento do operador densidade total.

B.3.1 Equação Cinética para a Parte Diagonal do Operador Densidade

Podemos reexpressar o primeiro termo do lado direito da Eq.(B.41)

$$T_{1d}(t) = -\mathcal{P}\mathcal{L} \int_0^t dt' \mathcal{G}(t-t') \mathcal{L} \rho_d(t'), \quad (\text{B.43})$$

utilizando-se as formas explícitas de \mathcal{L}_o , \mathcal{P} , \mathcal{L} e \mathcal{L}_o dadas, respectivamente, pelas Eqs. (B.23), (B.6), (B.9) e (B.23) e o Teorema 1, expresso na Eq.(B.14) e a seguinte aproximação

$$\mathcal{G}(t-t') \approx u(t-t') e^{-i(t-t')\mathcal{L}_o}, \quad (\text{B.44})$$

obtida da forma explícita de \mathcal{L} , expressa na Eq.(B.9) e do Teorema 5, escrito na Eq.(B.22), na seguinte forma

$$\begin{aligned} T_{1d}(t) &= -\frac{\lambda^2}{\hbar^2} \sum_{\gamma, \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| |\langle \gamma| V | \gamma\rangle|^2 \int_0^t dt' \cos(E_{\gamma'} - E_{\gamma}) \\ &\times (\langle \gamma| \rho_d(t') | \gamma\rangle - \langle \gamma'| \rho_d(t') | \gamma'\rangle). \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

A transformada de Laplace $\Psi_{1d}(s)$ da Eq.(B.45) é dada por

$$\begin{aligned} \Psi_{1d}(s) &= \frac{i\lambda^2}{2\hbar^2} \sum_{\gamma, \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| |\langle \gamma| V | \gamma\rangle|^2 [P_d(\gamma, s) - P_d(\gamma', s)] \\ &\times \left(\frac{1}{(E_{\gamma'} - E_{\gamma})/\hbar - is} - \frac{1}{(E_{\gamma'} - E_{\gamma})/\hbar + is} \right), \end{aligned} \quad (\text{B.46})$$

onde $P_d(\gamma, s)$ é a transformada de Laplace de $\langle \gamma| \rho_d(t) | \gamma\rangle$.

O limite de van Hove ($t \rightarrow \infty$, $s \rightarrow 0$) é calculado através da identidade de Dirac

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = \frac{\mathbf{P}}{x} \pm i\pi\delta x, \quad (\text{B.47})$$

onde \mathbf{P} é a parte principal de Cauchy, de tal forma que obtemos, para a Eq.(B.46)

$$\Psi_{1d}(0) = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \sum_{\gamma, \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| |\langle \gamma| V | \gamma\rangle|^2 \delta(E_{\gamma'} - E_{\gamma}) [P_d(\gamma, 0) - P_d(\gamma', 0)]. \quad (\text{B.48})$$

A transformada de Laplace inversa da Eq.(B.48), que corresponde ao termo $T_{1d}(t)$ no limite

$t \rightarrow \infty$, é dada por

$$T_{1d}(t \rightarrow \infty) = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \sum_{\gamma, \gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| |\langle \gamma| V |\gamma'\rangle|^2 \delta(E_{\gamma'} - E_{\gamma}) \\ \times (\langle \gamma | \rho_d(t') | \gamma \rangle - \langle \gamma' | \rho_d(t') | \gamma' \rangle), \quad (\text{B.49})$$

e, ao usar a definição (B.11), obtemos para o primeiro termo do lado direito da Eq.(B.41)

$$T_{1d}(t \rightarrow \infty) = -\mathcal{R}\rho_d(t). \quad (\text{B.50})$$

O segundo termo da Eq.(B.41)

$$T_{2d}(t) = \frac{i}{\hbar} F(t) \mathcal{P}[A, \rho_{\text{eq}}], \quad (\text{B.51})$$

pode ser reescrito, utilizando-se a seguinte aproximação

$$\rho_{\text{eq}} \approx e^{H_o} / z_o, \quad (\text{B.52})$$

onde $z_o = \text{Tr}e^{H_o}$, que é equivalente a considerar termos até segunda ordem em λ , combinada à identidade de Kubo

$$[A, e^{-\beta H_o}] = \int_0^\beta d\beta' e^{\beta H_o} [A^{H_o}(-i\hbar\beta'), H_o], \quad (\text{B.53})$$

onde $A_o^H(-i\hbar\beta') = e^{\beta H_o} A e^{-\beta H_o}$ e o Teorema 1 (Eq.(B.14)), de modo que obtemos a Eq.(B.51) na forma

$$T_{2d}(t) = \frac{i}{\hbar} F(t) \int_0^\beta d\beta' e^{\beta H_o} e^{\hbar\beta' \mathcal{L}_o} \mathcal{P}\dot{A}, \quad (\text{B.54})$$

com $\dot{A} = \frac{i}{\hbar}[A, H_o]$. O super-operador \mathcal{P} pode avançar dentro da integral, sendo posicionado em frente ao comutador devido a \mathcal{H}_o ser diagonal. Como $\mathcal{P}\dot{A}$ é diagonal, $e^{\hbar\beta' \mathcal{L}_o} \mathcal{P}\dot{A} = \dot{A}_d$, de tal forma que obtemos

$$T_{2d}(t \rightarrow \infty) = \beta F(t) \rho_{\text{eq}} \dot{A}_d, \quad (\text{B.55})$$

onde \dot{A}_d denota a parte diagonal de $[A, H]$.

Considerando agora o terceiro termo da Eq.(B.41)

$$T_{3d}(t) = \frac{1}{\hbar} \mathcal{P} \mathcal{L} \int_0^t dt' F(t') \mathcal{G}(t-t') (1 - \mathcal{P}) [A, \rho_{\text{eq}}], \quad (\text{B.56})$$

e usando mais uma vez a identidade de Kubo (Eq.(B.53)), combinada com as Eqs. (B.44) e (B.52), obtemos

$$T_{3d}(t) = \frac{1}{\hbar z_o} \mathcal{P} \mathcal{L} \int_0^t dt' F(t') e^{-i(t-t') \mathcal{L}_o} (1 - \mathcal{P}) \int_0^\beta d\beta' e^{\beta H_o} [A(-i\hbar\beta'), H]. \quad (\text{B.57})$$

O super-operador $(1 - \mathcal{P})$, na Eq.(B.56) pode ser deslocado em frente ao anti-comutador, visto que todos os operadores entre $(1 - \mathcal{P})$ e $[A, H]$ são diagonais. Podemos aproximar $(1 - \mathcal{P})[A(-i\hbar\beta), H]$ por $-[A_d, H]$ porque, em geral, A_{nd} comuta com o termo perturbativo λV para operadores A dependentes da posição e as variáveis macroscópicas devem exibir uma evolução temporal lenta, de tal forma que $A(-i\hbar\beta) \approx A$. Além disso, o termo $[A_{nd}, H_o]$, que aparece no cálculo do comutador $[A(-i\hbar\beta), H]$ pode ser desprezado porque ele é um termo não diagonal de ordem λ e na contribuição não-diagonal, coletamos apenas os termos de ordem λ^0 . Usando as aproximações e a forma explícita de \mathcal{P} e \mathcal{L} , obtemos, após algum algebrismo

$$T_{3d}(t) = -\frac{2\lambda^2\beta^2}{\hbar^2 z_o} \sum_{\gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| |\langle \gamma| V | \gamma'\rangle|^2 \int_0^t dt' F(t') \cos [(E_{\gamma'} - E_{\gamma})(t - t')/\hbar] \\ \times \left(\langle \gamma' | A_d | \gamma'\rangle e^{-\beta E_{\gamma'}} - \langle \gamma | A_d | \gamma\rangle e^{-\beta E_{\gamma}} \right). \quad (\text{B.58})$$

Resolvendo a integral em β e calculando a transformada de Laplace de (B.58), reescrevemos a Eq.(B.58) na forma

$$\Psi_{3d}(s) = -\frac{2\lambda^2\beta}{\hbar^2 z_o} \sum_{\gamma'} |\gamma\rangle \langle \gamma| |\langle \gamma| V | \gamma'\rangle|^2 F(s) \frac{s}{s^2 + (E_{\gamma'} - E_{\gamma})^2/\hbar^2} \\ \times e^{-\beta E_{\gamma}} \left(\langle \gamma' | A_d | \gamma'\rangle - \langle \gamma | A_d | \gamma\rangle \right). \quad (\text{B.59})$$

Usando a identidade de Dirac (B.47), calculando a transformada de Laplace inversa e combinando com a definição (B.11), obtemos o termo $T_{3d}(t)$ no limite de van Hove $s \rightarrow 0$, $t \rightarrow \infty$,

$$T_{3d}(t) = -\beta F(t) \rho_{\text{eq}} \mathcal{R} A_d. \quad (\text{B.60})$$

Substituindo-se os resultados expressos nas Eqs. (B.48), (B.55) e (B.60) na Eq.(B.41), reescrevemos a equação cinética para a parte diagonal de $\rho(t)$, considerando-se termos de ordem até λ^2 , como

$$\frac{\partial \rho_d(t)}{\partial t} + \mathcal{R} \rho_d(t) = \beta F(t) \rho_{\text{eq}} (\dot{A}_d - \mathcal{R} A_d). \quad (\text{B.61})$$

Observa-se que a equação cinética para $\rho_d(t)$ no limite de van Hove torna-se Markoviana e desacoplada com respeito a $\rho_{nd}(t)$.

B.3.2 Equação Cinética para a Parte Não-Diagonal do Operador Densidade

Considerando o primeiro termo da Eq.(B.42)

$$T_{1nd}(t) = -i \int_0^t dt' \mathcal{G}(t-t') \mathcal{L} \rho_d(t'), \quad (\text{B.62})$$

obtemos, para $\mathcal{L} \rho_d(t')$, ao usar a forma explicita de \mathcal{L} escrita na Eq.(B.9)

$$\mathcal{L} \rho_d(t) = \frac{1}{\hbar} [\rho_d(t), H_o] + \frac{\lambda}{\hbar} [\rho_d(t), V]. \quad (\text{B.63})$$

O comutador $[\rho_d(t), H_o]$ é zero pois ambos os operadores são diagonais, de tal forma que reexpressamos a equação anterior como

$$T_{1nd}(t) = -i \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^t dt' \mathcal{G}(t-t') [\rho_d(t'), V]. \quad (\text{B.64})$$

Podemos desconsiderar o primeiro termo da Eq.(B.42) por ser proporcional a λ .

O segundo termo da Eq.(B.42), escrito como

$$T_{2nd}(t) = \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \mathcal{G}(t-t') F(t') (1 - \mathcal{P}) [A, \rho_{\text{eq}}], \quad (\text{B.65})$$

pode ser simplificado, ao se usar mais uma vez a identidade de Kubo (B.53), combinada com as Eqs. (B.44) e (B.52), na seguinte forma

$$T_{2nd}(t) = \frac{-i}{\hbar} \int_0^t dt' F(t') e^{-i(t-t')\mathcal{L}_o} (1 - \mathcal{P}) \int_0^\beta d\beta' \rho_{\text{eq}} e^{-\hbar\beta' \mathcal{L}} [A, H]. \quad (\text{B.66})$$

Desconsiderando-se mais uma vez termos não-diagonais de ordem λ , obtemos

$$T_{2nd}(t) = \int_0^t dt' F(t') e^{-i(t-t')\mathcal{L}_o} \int_0^\beta d\beta' \rho_{\text{eq}} e^{-\hbar\beta' \mathcal{L}_o} \dot{A}_{nd}, \quad (\text{B.67})$$

onde \dot{A}_{nd} é a parte não diagonal de $[A, H]$.

O terceiro termo da Eq.(B.42) pode ser reescrito, usando-se a Eq.(B.44), na forma

$$T_{3nd}(t) = \mathcal{G}(t, 0) \rho_{nd}(0) = e^{-it\mathcal{L}_o} \rho_{nd}(0). \quad (\text{B.68})$$

Ao coletar-se os resultados expressos nas Eqs. (B.67) e (B.42), reescrevemos a equação cinética para a parte não diagonal de $\rho(t)$ como

$$\dot{\rho}_{nd}(t) = \int_0^t dt' F(t') e^{-i(t-t')\mathcal{L}_o} \int_0^\beta d\beta' \rho_{\text{eq}} e^{-\hbar\beta' \mathcal{L}_o} \dot{A}_{nd} + e^{-it\mathcal{L}_o} \rho_{nd}(0). \quad (\text{B.69})$$

Derivando-se com respeito a t , obtemos, finalmente

$$\frac{\partial \rho_{nd}(t)}{\partial t} + i\mathcal{L}_o \rho_{nd}(t) = F(t) \rho_{\text{eq}} \int_0^\beta d\beta' e^{\hbar\beta' \mathcal{L}_o} \dot{A}_{nd}. \quad (\text{B.70})$$

B.3.3 Equação Cinética Total do Operador Densidade

Como o super-operador \mathcal{R} destrói qualquer operador não-diagonal, o que pode ser obtido diretamente da forma explícita de \mathcal{R} escrita na Eq.(B.11), podemos reescrever a Eq.(B.61) na forma

$$\frac{\partial \rho_d(t)}{\partial t} + \mathcal{R}\rho(t) = \beta F(t) \rho_{\text{eq}} \dot{A}_d + \mathcal{S}A. \quad (\text{B.71})$$

A Eq.(B.71) pode ser reexpressa como

$$\frac{\partial \rho_d(t)}{\partial t} + \mathcal{R}\rho(t) = F(t) \rho_{\text{eq}} \int_0^\beta d\beta' e^{\hbar\beta' \mathcal{L}_o} \dot{A}_d^R, \quad (\text{B.72})$$

onde o operador \dot{A}_d^R é definido como

$$\dot{A}_d^R = \dot{A}_d + \mathcal{R}A_d. \quad (\text{B.73})$$

O super-operador \mathcal{L}_o destrói qualquer operador diagonal K_d , pois

$$\mathcal{L}_o K_d = \frac{1}{\hbar} [K_d, H_o] = 0, \quad (\text{B.74})$$

o que nos permite reexpressar a Eq.(B.70) como

$$\frac{\partial \rho_{nd}(t)}{\partial t} + i\mathcal{L}_o \rho(t) = F(t) \rho_{\text{eq}} \int_0^\beta d\beta' e^{\hbar\beta' \mathcal{L}_o} \dot{A}_{nd}. \quad (\text{B.75})$$

Somando as Eqs. (B.72) e (B.75), obtemos a equação cinética total para o operador densidade

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} + (\mathcal{R} + i\mathcal{L}_o) \rho(t) = F(t) \rho_{\text{eq}} \int_0^\beta d\beta' e^{\hbar\beta' \mathcal{L}_o} \dot{A}^R, \quad (\text{B.76})$$

onde o operador \dot{A}^R é definido como

$$\dot{A}^R = \dot{A} + \mathcal{R}A_d = \dot{A} + \mathcal{R}A, \quad (\text{B.77})$$

e a segunda igualdade é derivada usando-se mais uma vez o fato de que o super-operador \mathcal{R} destrói qualquer operador não diagonal.

B.4 Equação Cinética de Boltzmann para a Interação Elétron-Fônon

Nesta seção, aplicamos os resultados das seções anteriores ao caso particular da interação elétron-fônon (IEF), onde consideramos a seguinte forma para H_o

$$H_o = \sum_{\eta} E_{\eta} c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}}, \quad (\text{B.78})$$

onde a primeira parcela no segundo membro da Eq.(B.78) representa um gás de fônons não interagente cujos operadores a, a^{\dagger} possuem uma álgebra de comutação

$$[a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}, \quad [a_{\mathbf{q}}^{\dagger}, a_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = [a_{\mathbf{q}}, a_{\mathbf{q}'}] = 0, \quad (\text{B.79})$$

e a segunda parcela no segundo membro da Eq.(B.78) expressa um gás de elétrons não interagente cujos operadores c, c^{\dagger} possuem uma álgebra de anticomutação

$$\{c_{\eta}, c_{\zeta}^{\dagger}\} = \delta_{\eta, \zeta}, \quad \{c_{\eta}^{\dagger}, c_{\zeta}^{\dagger}\} = \{c_{\eta}, c_{\zeta}\} = 0. \quad (\text{B.80})$$

Os auto-estados $|\gamma\rangle$ de H_o são dados por

$$|\gamma\rangle = \prod_{\eta} |n_{\eta}\rangle \prod_{\mathbf{q}} |N_{\mathbf{q}}\rangle, \quad (\text{B.81})$$

onde n_{η} é o número de ocupação de elétrons e $N_{\mathbf{q}}$ é o número de ocupação de fônons, definidos como

$$c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} |\gamma\rangle = n_{\eta} |\gamma\rangle, \quad a_{\mathbf{q}}^{\dagger} a_{\mathbf{q}} |\gamma\rangle = N_{\mathbf{q}} |\gamma\rangle. \quad (\text{B.82})$$

O termo de acoplamento λV , no caso particular da IEF, é escrito como

$$\lambda V = i\lambda \sum_{\eta, \zeta, \mathbf{q}} U(\mathbf{q}) \left[c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} a_{\mathbf{q}} \langle \zeta | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \eta \rangle - c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} a_{\mathbf{q}}^{\dagger} \langle \zeta | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \eta \rangle \right], \quad (\text{B.83})$$

onde

$$U(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{2\epsilon_o \epsilon} \frac{1}{(q^2 + k_s^2)^{1/2}}, \quad (\text{B.84})$$

é a transformada de Fourier do potencial $U(\mathbf{r})$

$$U(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_o \epsilon} \frac{e^{-k_s r}}{r}, \quad (\text{B.85})$$

e o operador $AF(t)$, que expressa a interação com um campo externo, é expresso como

$$AF(t) = -\frac{e}{V_o} E_z(t) \sum_{\eta, \zeta} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \langle n_{\eta} | A | n_{\zeta} \rangle, \quad (\text{B.86})$$

onde $F(t) = eE_z(t)$, e é a carga do elétron, $E_z(t)$ é a componente z do campo elétrico, V_o é o volume do sistema e o operador A é um operador posição.

Podemos determinar a evolução temporal do operador número de elétrons $c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta}$ usando as definições anteriores e o resultado para a evolução do operador densidade total, escrita na Eq.(B.76)

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_t = \frac{\partial}{\partial t} \text{Tr} \left[\rho(t) c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \right], \quad (\text{B.87})$$

onde $\langle K \rangle_t$ indica $\text{Tr}[\rho(t)K]$. Combinando a Eq.(B.87) com a Eq.(B.76), obtemos a equação cinética de Boltzmann na forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle - \text{Tr} \left[\rho(t) \mathcal{R} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \right] + i \text{Tr} \left[\rho(t) \mathcal{L}_o c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \right] &= \beta F(t) \text{Tr} \left[\rho_{\text{eq}} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \dot{A}_d \right] \\ + \beta F(t) \text{Tr} \left[\rho_{\text{eq}} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \mathcal{R} A_d \right] + F(t) \int_0^{\beta} d\beta' \text{Tr} \left[\rho_{\text{eq}} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \left(e^{\hbar\beta' \mathcal{L}_o} \dot{A}_{nd} \right) c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.88})$$

Na segunda e terceira parcelas do lado esquerdo da Eq.(B.88) usamos, respectivamente, o Lema 2 e o Lema 4, escritos nas Eqs. (B.24) e (B.27). Nas duas parcelas do lado direito, usamos a propriedade cíclica do traço. Na equação de Boltzmann acima, levamos em consideração que os bósons devem estar no equilíbrio térmico de tal forma que determinamos apenas a evolução temporal da distribuição de férmions (hipótese adiabática), ou seja, em todos os termos as médias bosônicas estão sendo tomadas no equilíbrio.

Usando mais uma vez a propriedade de que \mathcal{R} destrói qualquer operador diagonal no segundo termo do lado esquerdo da Eq.(B.88), obtemos que o termo representa uma contribuição diagonal

$$\text{Tr} \left[\rho(t) \mathcal{R} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \right] = \text{Tr} \left[\rho(t) \mathcal{R} c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \right] \delta_{\eta, \zeta}, \quad (\text{B.89})$$

e combinando com a forma explícita de λ_d e dos auto-estados de H_o escritos, respectivamente, nas Eqs. (B.11) e (B.81), obtemos

$$\text{Tr} \left[\rho(t) \mathcal{R} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \right] = \langle \mathcal{B}_{\eta} c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_t, \quad (\text{B.90})$$

onde $\mathcal{B}_{\eta} c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta}$ é definido como

$$\mathcal{B}_{\eta} c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} = \sum_{\kappa} w_{\eta, \kappa} c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \left(1 - c_{\kappa}^{\dagger} c_{\kappa} \right) - w_{\kappa, \eta} c_{\kappa}^{\dagger} c_{\kappa} \left(1 - c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \right). \quad (\text{B.91})$$

As taxas de transição $w_{\eta,\kappa}$ são dadas por

$$w_{\eta,\kappa} = \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |U(\mathbf{q})|^2 \left[|\langle \eta | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \kappa \rangle|^2 \langle N_{\mathbf{q}} \rangle_{\text{eq}} \delta(E_{\eta} - E_{\kappa} + \omega_{\mathbf{q}}) \right. \\ \left. + |\langle \eta | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \kappa \rangle|^2 (1 + \langle N_{\mathbf{q}} \rangle_{\text{eq}}) \delta(E_{\eta} - E_{\kappa} - \omega_{\mathbf{q}}) \right]. \quad (\text{B.92})$$

O terceiro termo do lado esquerdo da Eq.(B.88) pode ser reescrito tomando-se a forma explícita de \mathcal{L}_o e calculando-se diretamente o traço, resultando em

$$i\text{Tr} \left[\rho(t) \mathcal{L}_o c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \right] = \frac{i}{\hbar} (E_{\zeta} - E_{\eta}) \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_t. \quad (\text{B.93})$$

O primeiro termo do lado direito da Eq.(B.88), combinado com a forma explícita do operador A , escrita na Eq.(B.86), fornece

$$\beta F(t) \text{Tr} \left[\rho_{\text{eq}} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \dot{A}_d \right] = -\frac{\beta e E_z(t)}{V_o} \sum_{\zeta} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | \dot{A} | \zeta \rangle. \quad (\text{B.94})$$

O segundo termo do lado direito da Eq.(B.88), combinado com a forma explícita do operador A , escrita na Eq.(B.86), resulta

$$\beta F(t) \text{Tr} \left[\rho_{\text{eq}} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \mathcal{B} A_d \right] = -\frac{\beta e E_z(t)}{V_o} \sum_{\zeta} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \mathcal{B}_{\zeta} c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | A | \zeta \rangle. \quad (\text{B.95})$$

O terceiro termo do membro direito da Eq.(B.88), pode ser reexpresso, usando-se as forma explícitas de A e \mathcal{L}_o , escritas, respectivamente, nas Eqs.(B.86) e (B.11), em

$$F(t) \int_0^{\beta} d\beta' \text{Tr} \left[\rho_{\text{eq}} \left(e^{\hbar\beta' \mathcal{L}_o} A \right) c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \right] = \\ = -\frac{e}{V_o} E_z(t) \frac{1 - e^{-\beta(E_{\eta} - E_{\zeta})}}{E_{\eta} - E_{\zeta}} \left(1 - \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \langle c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | \dot{A} | \eta \rangle. \quad (\text{B.96})$$

Coletando os termos (B.87), (B.90), (B.93), (B.94), (B.95) e (B.96), temos

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_t + \langle \mathcal{B}_{\eta} c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_t + \frac{i}{\hbar} (E_{\zeta} - E_{\eta}) \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_t = -\frac{\beta e E_z(t)}{V_o} \sum_{\zeta} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | \dot{A} | \zeta \rangle \\ - \frac{\beta e E_z(t)}{V_o} \sum_{\zeta} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \mathcal{B}_{\zeta} c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | A | \zeta \rangle \\ - \frac{e}{V_o} E_z(t) \frac{1 - e^{-\beta(E_{\eta} - E_{\zeta})}}{E_{\eta} - E_{\zeta}} \left(1 - \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \langle c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | \dot{A} | \eta \rangle, \quad (\text{B.97})$$

onde \mathcal{B}_η é definido na Eq.(B.91).

B.4.1 Equação cinética de Boltzmann: Contribuição Diagonal

Coletando os termos diagonais da Eq.(B.97), obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle c_\eta^\dagger c_\eta \rangle_t + \langle \mathcal{B}_\eta c_\eta^\dagger c_\eta \rangle_t &= -\frac{\beta e E_z(t)}{V_o} \sum_\zeta \langle c_\eta^\dagger c_\eta c_\zeta^\dagger c_\zeta \rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | \dot{A} | \zeta \rangle \\ &+ \langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \mathcal{B}_\zeta c_\zeta^\dagger c_\zeta \rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | A | \zeta \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.98})$$

cuja solução, através do método da função de Green, é dada por

$$\begin{aligned} \langle c_\eta^\dagger c_\eta \rangle_t &= -\frac{\beta e}{V_o} \int_0^t dt' E_z(t') \\ &\times \left\langle \left(e^{-(t-t')\mathcal{B}_\eta} c_\eta^\dagger c_\eta \right) \sum_\zeta \left(\mathcal{B}_\zeta c_\zeta^\dagger c_\zeta \langle \zeta | A | \zeta \rangle + c_\zeta^\dagger c_\zeta \langle \zeta | \dot{A} | \zeta \rangle \right) \right\rangle_{\text{eq}}. \end{aligned} \quad (\text{B.99})$$

Podemos definir o operador densidade de corrente

$$\mathbf{J}_B^{\text{col}} = -\frac{e}{V_o} E_z(t) \sum_\eta \mathcal{B}_\eta c_\eta^\dagger c_\eta \langle \eta | B | \eta \rangle + c_\eta^\dagger c_\eta \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle, \quad (\text{B.100})$$

e calcular a sua evolução temporal a partir da Eq.(B.99)

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}_B^{\text{col}} \rangle_t &= \frac{\beta e^2}{V_o} \int_0^t dt' E_z(t') \left\langle \sum_{\eta\zeta} \left(\mathcal{B}_\zeta c_\zeta^\dagger c_\zeta \langle \zeta | A | \zeta \rangle + c_\zeta^\dagger c_\zeta \langle \zeta | \dot{A} | \zeta \rangle \right) \right. \\ &\times \left. e^{-(t-t')\mathcal{B}_\eta} \left(\mathcal{B}_\eta c_\eta^\dagger c_\eta \langle \eta | B | \eta \rangle + c_\eta^\dagger c_\eta \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle \right) \right\rangle_{\text{eq}}. \end{aligned} \quad (\text{B.101})$$

O primeiro termo do operador, definido na Eq.(B.100) expressa o efeito das colisões no movimento das partículas provocado pelo campo externo sobre o sistema. O segundo termo expressa os efeitos devido ao movimento difusivo das partículas. Considerando apenas a contribuição colisional e comparando com a fórmula de Kubo para uma condutibilidade generalizada[64]

$$\langle \mathbf{J}_B \rangle_t = \int_0^t dt' E_z(t') \sigma(t-t'), \quad (\text{B.102})$$

obtemos

$$\sigma_{AB}^{\text{col}}(t) = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta\zeta} \left\langle \left(\mathcal{B}_\zeta c_\zeta^\dagger c_\zeta \langle \zeta | A | \zeta \rangle \right) e^{-(t-t')\mathcal{B}_\eta} \left(\mathcal{B}_\eta c_\eta^\dagger c_\eta \langle \eta | B | \eta \rangle \right) \right\rangle_{\text{eq}}. \quad (\text{B.103})$$

Tomando-se a transformada de Laplace, a identidade de Dirac (B.47) e calculando a transformada de Laplace inversa, obtemos a Eq.(B.103) no limite de van Hove ($s \rightarrow 0, t \rightarrow \infty$)

$$\sigma_{AB}^{\text{col}} = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta \zeta} \left\langle \left(\mathcal{B}_\zeta c_\zeta^\dagger c_\zeta \langle \zeta | A | \zeta \rangle \right) \left(c_\eta^\dagger c_\eta \langle \eta | B | \eta \rangle \right) \right\rangle_{\text{eq}}. \quad (\text{B.104})$$

Considerando-se a forma explícita de \mathcal{B}_η , escrita na Eq.(B.91) e usando-se a seguinte aproximação, que equivale a desprezar os efeitos de correlação entre os elétrons

$$\left\langle c_\eta^\dagger c_\eta c_\zeta^\dagger c_\zeta \right\rangle \approx \left\langle c_\eta^\dagger c_\eta \right\rangle \left\langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \right\rangle, \quad (\text{B.105})$$

em conjunto com a seguinte identidade

$$\left\langle c_\eta^\dagger c_\eta \right\rangle_{\text{eq}} \left(1 - \left\langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \right\rangle_{\text{eq}} \right) w_{\eta, \zeta} = \left\langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \right\rangle_{\text{eq}} \left(1 - \left\langle c_\eta^\dagger c_\eta \right\rangle_{\text{eq}} \right) w_{\zeta, \eta}, \quad (\text{B.106})$$

obtemos, para a condutividade colisional

$$\sigma_{AB}^{\text{col}} = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta \zeta} \left\langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \right\rangle_{\text{eq}} \left(1 - \left\langle c_\eta^\dagger c_\eta \right\rangle_{\text{eq}} \right) w_{\zeta, \eta} \left(\langle \zeta | A | \zeta \rangle - \langle \eta | A | \eta \rangle \right) \langle \zeta | B | \zeta \rangle. \quad (\text{B.107})$$

Fazendo $A = B$ na Eq.(B.107), obtemos

$$\sigma_{AA}^{\text{col}} = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta \zeta} \left\langle c_\eta^\dagger c_\eta \right\rangle_{\text{eq}} \left(1 - \left\langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \right\rangle_{\text{eq}} \right) w_{\eta, \zeta} \left(\langle \zeta | A | \zeta \rangle - \langle \eta | A | \eta \rangle \right)^2. \quad (\text{B.108})$$

Comparando-se a contribuição difusiva da Eq.(B.101) com a Eq.(B.102), obtemos

$$\sigma_{AB}^{\text{dif}}(t) = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta \zeta} \left\langle \left(c_\zeta^\dagger c_\zeta \langle \zeta | \dot{A} | \zeta \rangle \right) e^{-(t-t')\mathcal{B}} \left(c_\eta^\dagger c_\eta \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle \right) \right\rangle_{\text{eq}}. \quad (\text{B.109})$$

A expressão acima pode ser simplificada se tomarmos $\left\langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \right\rangle_{\text{eq}} \approx e^{-\beta(E_\zeta - \mu)}$, onde μ é o potencial químico do sistema, na seguinte forma

$$\sigma_{AB}^{\text{dif}}(t) = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta \zeta} \left\langle c_\eta^\dagger c_\eta c_\zeta^\dagger c_\zeta \right\rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | \dot{A} | \zeta \rangle e^{it\mathcal{B}_o} \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle, \quad (\text{B.110})$$

onde $\mathcal{B}_o \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle$ é definido como

$$\mathcal{B}_o \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle = \sum_{\kappa} w_{\eta, \kappa} \left(\langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle - \langle \zeta | \dot{B} | \zeta \rangle \right). \quad (\text{B.111})$$

A Eq.(B.110) pode ser reexpressa utilizando-se o seguinte resultado

$$\sum_{\zeta} \left\langle c_\eta^\dagger c_\eta c_\zeta^\dagger c_\zeta \right\rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | \dot{A} | \zeta \rangle = \left\langle c_\eta^\dagger c_\eta \right\rangle_{\text{eq}} \left(1 + \left\langle c_\eta^\dagger c_\eta \right\rangle_{\text{eq}} \right) \langle \eta | \dot{A} | \eta \rangle, \quad (\text{B.112})$$

obtido utilizando-se a Eq.(B.105), na seguinte forma

$$\sigma_{AB}^{\text{dif}}(t) = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \left(1 + \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \langle \eta | \dot{A} | \eta \rangle e^{it\mathcal{B}_o} \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle. \quad (\text{B.113})$$

Introduzindo um tempo de relaxação τ , dado por

$$\mathcal{B}_o \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle = \frac{1}{\tau_{\eta}} \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle, \quad (\text{B.114})$$

o que é válido se $1/\tau$ é um autovalor de \mathcal{B}_o , obtemos a expressão no limite de van Hove ($s \rightarrow 0$, $t \rightarrow \infty$)

$$\sigma_{AB}^{\text{dif}} = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \left(1 - \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \tau_{\eta} \langle \eta | \dot{A} | \eta \rangle \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle. \quad (\text{B.115})$$

A contribuição diagonal total da condutividade é dada pela soma entre as contribuições colisional σ_{AB}^{col} e difusiva σ_{AB}^{dif} da condutividade

$$\sigma_{AB}^{\text{d}} = \sigma_{AB}^{\text{col}} + \sigma_{AB}^{\text{dif}}, \quad (\text{B.116})$$

onde σ_{AB}^{col} é escrito na Eq.(B.107) e σ_{AB}^{dif} é dado pela Eq.(B.115).

B.4.2 Equação cinética de Boltzmann: Contribuição Não-Diagonal

Coletando os termos não diagonais da Eq.(B.97), obtemos a seguinte equação

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_t + \frac{i}{\hbar} (E_{\zeta} - E_{\eta}) \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_t = \\ - \frac{e}{V_o} E_z(t) \frac{1 - e^{-\beta(E_{\eta} - E_{\zeta})}}{E_{\eta} - E_{\zeta}} \left(1 - \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \langle c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \langle \zeta | \dot{A} | \eta \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.117})$$

cuja solução, através do método da função de Green, é dada por

$$\begin{aligned} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_t = - \frac{e}{V_o} \int_0^t dt' E_z(t') \frac{1 - e^{-\beta(E_{\eta} - E_{\zeta})}}{E_{\eta} - E_{\zeta}} \left(1 - \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \langle c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \\ \times e^{i(t-t')(E_{\zeta} - E_{\eta})/\hbar} \langle \zeta | \dot{A} | \eta \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.118})$$

Definindo o operador densidade de corrente J_B

$$J_B = - \frac{e}{V_o} E_z(t) \sum_{\eta, \zeta} c_{\eta}^{\dagger} c_{\zeta} \langle \eta | \dot{B} | \zeta \rangle, \quad (\text{B.119})$$

e, combinando a Eq.(B.118) com a Eq.(B.119), obtemos

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}_B \rangle_t &= -\frac{e}{V_o} \sum_{\eta, \zeta} \int_0^t dt' E_z(t') \frac{1 - e^{-\beta(E_\eta - E_\zeta)}}{E_\eta - E_\zeta} \left(1 - \langle c_\eta^\dagger c_\eta \rangle_{\text{eq}} \right) \langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \rangle_{\text{eq}} \\ &\times e^{i(t-t')(E_\zeta - E_\eta)/\hbar} \langle \zeta | \dot{A} | \eta \rangle \langle \eta | \dot{B} | \zeta \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.120})$$

Comparando a Eq.(B.120) acima com a fórmula de Kubo, escrita na Eq.(B.102), temos

$$\begin{aligned} \sigma_{AB}^{\text{nd}}(t) &= \frac{e^2}{V_o} \sum_{\eta, \zeta} \frac{1 - e^{-\beta(E_\eta - E_\zeta)}}{E_\eta - E_\zeta} \left(1 - \langle c_\eta^\dagger c_\eta \rangle_{\text{eq}} \right) \langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \rangle_{\text{eq}} \\ &\times e^{it(E_\zeta - E_\eta)/\hbar} \langle \zeta | \dot{A} | \eta \rangle \langle \zeta | \dot{B} | \eta \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.121})$$

Calculando a transformada de Laplace, usando a identidade de Dirac (B.47) e calculando a transformada de Laplace inversa, obtemos a Eq.(B.121) no limite de van Hove ($s \rightarrow 0$, $t \rightarrow \infty$)

$$\sigma_{AB}^{\text{nd}} = \frac{e^2}{V_o} \sum_{\eta, \zeta} \left(1 - \langle c_\eta^\dagger c_\eta \rangle_{\text{eq}} \right) \langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \rangle_{\text{eq}} \frac{1 - e^{-\beta(E_\eta - E_\zeta)}}{(E_\eta - E_\zeta)^2} \langle \zeta | \dot{A} | \eta \rangle \langle \zeta | \dot{B} | \eta \rangle. \quad (\text{B.122})$$

A expressão acima, para um operador posição, escrito na Eq.(B.119), expressa a contribuição não-diagonal na condutividade devido a uma perturbação no regime linear no equilíbrio.

B.5 Sumário dos Resultados deste Apêndice

A condutividade σ_{AB} é dada pela soma $\sigma_{AB}^{\text{d}} + \sigma_{AB}^{\text{nd}}$. A contribuição diagonal σ_{AB}^{d} é, por sua vez, obtida da soma entre as condutividades difusiva e colisional $\sigma_{AB}^{\text{col}} + \sigma_{AB}^{\text{dif}}$. A condutividade colisional σ_{AA}^{col} é dada pela seguinte expressão

$$\sigma_{AA}^{\text{col}} = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta, \zeta} \langle c_\eta^\dagger c_\eta \rangle_{\text{eq}} \left(1 - \langle c_\zeta^\dagger c_\zeta \rangle_{\text{eq}} \right) w_{\eta, \zeta} \left(\langle \zeta | A | \zeta \rangle - \langle \eta | A | \eta \rangle \right)^2, \quad (\text{B.123})$$

onde $w_{\eta, \zeta}$ é a taxa de transição, expressa como

$$\begin{aligned} w_{\eta, \kappa} &= \frac{2\pi\lambda^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |U(\mathbf{q})|^2 \left[\left| \langle \eta | e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \kappa \rangle \right|^2 \langle N_{\mathbf{q}} \rangle_{\text{eq}} \delta(E_\eta - E_\kappa + \omega_{\mathbf{q}}) \right. \\ &\quad \left. + \left| \langle \eta | e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} | \kappa \rangle \right|^2 (1 + \langle N_{\mathbf{q}} \rangle_{\text{eq}}) \delta(E_\eta - E_\kappa - \omega_{\mathbf{q}}) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.124})$$

com

$$U(\mathbf{q}) = \frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon} \frac{1}{(q^2 + k_s^2)^{1/2}}, \quad (\text{B.125})$$

dado pela transformada de Fourier de $U(\mathbf{r})$

$$U(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \frac{e^{-k_s r}}{r}. \quad (\text{B.126})$$

A condutividade difusiva σ_{AB}^{dif} , que expressa a contribuição devida ao movimento difusivo dos elétrons, é escrita como

$$\sigma_{AB}^{\text{dif}} = \frac{\beta e^2}{V_o} \sum_{\eta} \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \left(1 - \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \tau_{\eta} \langle \eta | \dot{A} | \eta \rangle \langle \eta | \dot{B} | \eta \rangle, \quad (\text{B.127})$$

onde τ_{η} é um tempo de relaxação. A contribuição não-diagonal da condutividade, σ_{AB}^{nd} , é expressa por

$$\sigma_{AB}^{\text{nd}} = \frac{e^2}{V_o} \sum_{\eta, \zeta} \left(1 - \langle c_{\eta}^{\dagger} c_{\eta} \rangle_{\text{eq}} \right) \langle c_{\zeta}^{\dagger} c_{\zeta} \rangle_{\text{eq}} \frac{1 - e^{-\beta(E_{\eta} - E_{\zeta})}}{(E_{\eta} - E_{\zeta})^2} \langle \zeta | \dot{A} | \eta \rangle \langle \zeta | \dot{B} | \eta \rangle. \quad (\text{B.128})$$

Estes resultados são usados ao longo desta Tese na determinação das propriedades de transporte do GE2D.

Glossário

GaAs/AlGaAs	Arseneto de Gálio/Arseneto de Gálio e Alumínio, 17
GE2D	Gás de Elétrons em Duas Dimensões, 17
IEF	Interação Elétron-Fônon, 125
ISO	Interação Spin-Órbita, 17
ISOD	Interação Spin-Órbita do Tipo Dresselhauss, 19
ISOR	Interação Spin-Órbita do Tipo Rashba, 19
MBE	Molecular Beam Epitaxy, 17
MFC	Método das Frações Continuadas, 111
MOCVD	Metal-Organic Chemical Vapor Deposition, 17
MOSFET	Metal-Oxide Semiconductor Field Effect Transistor, 17
MP1D	Modulação Periódica Unidimensional, 20

Referências Bibliográficas

- 1 KLITZING, K. von; DORDA, G.; PEPPER, M. *Phys. Rev. Lett.*, v. 45, p. 494, 1980.
- 2 ZUTI, I.; FABIAN, J.; SARMA, S. D. *Rev. Mod. Phys.*, v. 76, p. 323, 2004.
- 3 RASHBA, E. I. *Physica E*, v. 20, p. 189, 2004.
- 4 WOLF, S. A. et al. *Science*, v. 294, p. 1488, 2001.
- 5 MURAKAMI, S.; NAGAOSA, N.; ZHANG, S. C. *Science*, v. 301, p. 1348, 2003.
- 6 DATTA, S.; DAS, B. *Appl. Phys. Lett.*, v. 56, p. 665, 1990.
- 7 SCHLIEMANN, J.; EGUES, J. C.; LOSS, D. *Phys. Rev. Lett.*, v. 90, p. 146801, 2003.
- 8 STÖRMER, H. L. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 51, p. 126, 1983.
- 9 STEIN, D.; KLITZING, K. von; WEIMANN, G. *Phys. Rev. Lett.*, v. 51, p. 130, 1983.
- 10 LUO, J. et al. *Phys. Rev. B*, v. 38, p. 10142, 1988.
- 11 LUO, J. et al. *Phys. Rev. B*, v. 41, p. 7685, 1990.
- 12 WINKLER, R. *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Berlim: Springer, 1987.
- 13 BYCHKOV, Y. A.; RASHBA, E. I. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, v. 17, p. 6039, 1984.
- 14 DRESSELHAUSS, G. *Phys. Rev.*, v. 100, p. 580, 1955.
- 15 NITTA, J. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 78, p. 1335, 1997.
- 16 NITTA, J. et al. *Phys. Rev. B*, v. 60, p. 7736, 1999.
- 17 ENGELS, G. et al. *Phys. Rev. B*, v. 55, p. R1958, 1997.
- 18 GRUNDLER, D. *Phys. Rev. Lett.*, v. 84, p. 6074, 2000.
- 19 HEIDA, J. P. et al. *Phys. Rev. B*, v. 57, p. 11911, 1998.
- 20 MOLEMKAMP, L. W.; SCHMIDT, G.; BAUER, G. E. W. *Phys. Rev. B*, v. 64, p. R121202, 2001.
- 21 KOGA, T. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 89, p. 046801, 2002.
- 22 HU, C. et al. *Phys. Rev. B*, v. 60, p. 7736, 1999.
- 23 RICHARDS, D.; JUSSERAND, B. *Phys. Rev. B*, v. 59, p. R2506, 1999.

- 24 SILVA, E. de Andrada e. *Phys. Rev. B*, v. 60, p. 8859, 1999.
- 25 VOSKOBOYNIKOV, A. et al. *J. Appl. Phys.*, v. 87, p. 1, 2000.
- 26 MALSHUKOV, A. G.; CHAO, K. A. *Phys. Rev. B*, v. 61, p. R2413, 2000.
- 27 CALIFANO, M.; CHAKRABORTY, T.; PIETILAINEN, P. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, p. 246801, 2005.
- 28 RACEC, P. N. et al. *Phys. Rev. B*, v. 56, p. 3595, 1997.
- 29 VOSKOBOYNIKOV, A. et al. *Phys. Rev. B*, v. 63, p. 165306, 2001.
- 30 FOLK, J. A. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 86, p. 2102, 2001.
- 31 HALPERIN, B. I. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 86, p. 2106, 2001.
- 32 ALEINER, I. L.; FALKO, V. I. *Phys. Rev. Lett.*, v. 87, p. 256801, 2001.
- 33 VALIN-RODRIGUEZ, M. et al. *Phys. Rev. B*, v. 66, p. 165302, 2002.
- 34 VALIN-RODRIGUEZ, M. et al. *Phys. Rev. B*, v. 66, p. 045317, 2002.
- 35 VALIN-RODRIGUEZ, M. et al. *Phys. Rev. B*, v. 66, p. 235322, 2002.
- 36 SCHLIEMANN, J.; EGUES, J. C.; LOSS, D. *Phys. Rev. B*, v. 67, p. 085302, 2003.
- 37 SCHAPERS, T. et al. *J. Appl. Phys.*, v. 83, p. 4324, 1998.
- 38 DAS, B. et al. *Phys. Rev. B*, v. 39, p. 1411, 1989.
- 39 GANICHEV, S. D. et al. *Phys. Rev. Lett.*, v. 92, p. 256601, 2004.
- 40 MEIER, L. et al. *Nature Phys.*, v. 3, p. 650, 2007.
- 41 WEISS, D. et al. *Europhys. Lett.*, v. 8, p. 179, 1989.
- 42 WINKLER, R. M.; KOTTHAUS, J. P.; PLOOG, K. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 1177, 1989.
- 43 GERHARDTS, R. R.; WEISS, D.; KLITZING, K. V. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 1173, 1989.
- 44 BEENAKKER, C. W. J. *Phys. Rev. Lett.*, v. 62, p. 2020, 1989.
- 45 VASILOPOULOS, P.; PEETERS, F. M. *Phys. Rev. Lett.*, v. 63, p. 2120, 1989.
- 46 STREDA, P.; MACDONALD, A. H. *Phys. Rev. B*, v. 41, p. 11892, 1990.
- 47 PEETERS, F. M.; VASILOPOULOS, P. *Phys. Rev. B*, v. 46, p. 4667, 1992.
- 48 WANG, X. F.; VASILOPOULOS, P.; PEETERS, F. M. *Phys. Rev. B*, v. 71, p. 125301, 2005.
- 49 PAPP, G.; PEETERS, F. M. *J. Phys.: Condens. Matter*, v. 16, p. 8275, 2004.
- 50 FANG, F. F.; STILES, P. J. *Phys. Review*, v. 174, p. 823, 1968.
- 51 WANG, X. F.; VASILOPOULOS, P. *Phys. Rev. B*, v. 67, p. 085313, 2003.

- 52 RAMOS, A. C. A. et al. *cond-mat*, p. 0703763, 2007.
- 53 LIPPARINI, E. et al. *Phys. Rev. B*, v. 74, p. 115303, 2006.
- 54 SWALEN, J. D.; PIERCE, L. *J. of Math. Phys.*, v. 2, p. 736, 1961.
- 55 PRESS, W. H. et al. *Numerical Recipes in Fortran, The art of Scientific Computing*. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
- 56 PRANGE, P. E. *Phys. Rev. B*, v. 23, p. 4802, 1981.
- 57 AOKI, H.; ANDO, T. *Solid State Commun.*, v. 38, p. 1079, 1982.
- 58 HUANG, K. *Statistical Mechanics*. New York: John Wiley and Sons, 1987.
- 59 HAAS, W. J. de; ALPHEN, P. M. van. *Leiden Commun.*, v. 46, p. 212, 1931.
- 60 GIVENS, W. J. *Assoc. Comp. Mach.*, v. 4, p. 298, 1959.
- 61 SWAIN, S. *J. of Phys. A: Math. Gen.*, v. 9, p. 1811, 1976.
- 62 VLIET, K. M. van. *J. of Math. Phys.*, v. 20, p. 2573, 1979.
- 63 CHARBONNEAU, M.; VLIET, K. M. van; VASILOPOULOS, P. *J. of Math. Phys.*, v. 23, p. 318, 1982.
- 64 KUBO, R. *J. Phys. Soc. Jpn*, v. 12, p. 570, 1957.
- 65 VASILOPOULOS, P. *Phys. Rev. B*, v. 32, p. 771, 1985.
- 66 FANO, U. *Lectures on the Many-Body Problem*. New York: Academic NY, 1964.