

**MAGNETORESISTÊNCIA EM METAIS  
E LIGAS FERROMAGNETICAS**

**REJANE M. RIBEIRO TEIXEIRA**

Tese realizada sob a orientação do Prof. Guillermo G.Cabrera e apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" em preenchimento aos pré-requisitos para a obtenção do grau de Doutor em Ciências.

Janeiro, 1979.

Aos meus pais

## AGRADECIMENTOS

Sou grata ao Prof. Guillermo Cabrera pelos ensinamentos, constante incentivo e amizade que transformaram o trabalho numa tarefa agradável.

Ao Prof. Cylon Gonçalves da Silva, pela ajuda e orientação no período inicial de minha permanência na Unicamp.

Ao Durão, companheiro de todos os momentos, cujo apoio tornou realidade meus mais importantes empreendimentos.

A Gerardo Gonzalez de la Cruz e Artur Carriço pelas discussões cotidianas e demonstrações de coleguismo.

Aos amigos dos Institutos de Física da Unicamp e da UFRGS que direta ou indiretamente contribuíram para este trabalho.

Ao Departamento de Física da UFRGS e a CAPES através do Programa Institucional de Capacitação de Docentes (PICD) pelo apoio financeiro que tornou possível a realização desta tese.

## RESUMO

Estudamos as propriedades galvanomagnéticas de metais ferromagnéticos cristalinos e amorfos. Desenvolvemos um modelo para explicar os resultados experimentais da resistividade de Hall do ferro incluindo efeitos de espalhamento dependentes do spin e o fenômeno de ruptura magnética. Consideramos superfícies de Fermi esféricas e massas efetivas para portadores do tipo elétron e buraco. Os resultados apresentam uma concordância razoável com as observações experimentais.

Propomos um modelo que reproduz qualitativamente os comportamentos experimentais da resistividade e magnetoresistência de ligas ferromagnéticas amorfas de metal nobre com metal de transição. Sugerimos que os elétrons de condução sejam espalhados pelas flutuações dos momentos localizados dos átomos de metal de transição na liga, conduzindo a uma magnetoresistência negativa e um comportamento  $T^2$  da resistividade para temperaturas intermediárias.

## ABSTRACT

A study of the galvanomagnetic properties of crystalline and amorphous ferromagnetic metals is presented. A simple two-band model is used in order to explain experimental results of the Hall resistivity of iron at very high magnetic fields, taking into account spin dependent scattering effects and magnetic breakdown. Spherical Fermi surfaces are considered as well as different effective masses for electron and hole-like carriers.

It is also studied the magnetoresistance of amorphous ferromagnetic metals for alloy systems  $T_x Au_{1-x}$ , where T is a transition metal. It is suggested that conduction electrons of the alloy system are scattered by fluctuations of the localized magnetic moments associated to the transition metal atoms, thus yielding a negative magnetoresistance up to fields of the order of 50kG, and producing a  $T^2$  behavior of the resistivity for intermediate temperatures below the Curie point.

The calculations presented here are in good agreement with the experimental results.

# ÍNDICE

	pág.
INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO 1 - DINÂMICA DE ELÉTRONS DE BLOCH E TEORIA DA MAGNETORESISTÊNCIA.....	9
1.1 - <u>O conceito de Superfície de Fermi e           o efeito de campos externos no movi-           mento de elétrons de Bloch.....</u>	9
1.2 - <u>Propriedades semiclássicas de trans-           porte: Equação de Boltzmann.....</u>	17
1.3 - <u>Propriedades galvanomagnéticas de           metais para campos muito grandes.....</u>	21
1.4 - <u>Ruptura magnética.....</u>	24
1.5 - <u>Estrutura de Bandas e Superfície de           Fermi para os metais de transição Fe,           Co e Ni.....</u>	27
CAPÍTULO 2 - PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM METAIS FER- ROMAGNÉTICOS COM CAMPO MAGNÉTICO APLICADO....	43
2.1 - <u>Propriedades de transporte em pre-           sença de ruptura magnética.....</u>	43
2.2 - <u>Mecanismos de espalhamento dependen-           tes do spin.....</u>	56
2.2.a - Efeito Hall ordinário in- cluindo dois mecanismos de relaxação.....	68

2.2.b - Efeito Hall ordinário incluindo dois mecanismos de relaxação em presença de ruptura magnética..... 75

2.3 - Conclusões..... 84

CAPÍTULO 3 - MAGNETORESISTÊNCIA E RESISTIVIDADE DE LIGAS FERROMAGNÉTICAS AMORFAS DE METAL DE TRANSIÇÃO COM METAL NOBRE..... 87

3.1 - Hamiltoniano na aproximação de campo molecular..... 91

3.2 - Cálculo da magnetoresistência e resistividade..... 99

3.3 - Discussão dos resultados e conclusões.....107

REFERÊNCIAS.....119

## INTRODUÇÃO

A origem do ferromagnetismo dos metais de transição tem sido objeto de estudos intensivos por muitos anos<sup>1</sup>, porém este é um problema que ainda se encontra em aberto<sup>2</sup>.

Também nos últimos anos a atenção tem se voltado para o estudo de ligas do tipo "clustering", das quais são bons exemplos as do tipo  $T_x N_{1-x}$ , onde T é um metal de transição e N é um metal nobre. Em particular, estas ligas tem propriedades interessantes de ampla aplicação na indústria do petróleo, assim como em processos antipoluentes, devido as suas propriedades catalíticas<sup>3</sup>.

No estado cristalino este tipo de ligas prefere o estado segregado (com a formação de clusters), onde cada átomo possui uma grande tendência de ficar rodeado de átomos do mesmo tipo. Esta segregação pode ser evitada preparando ligas amorfas por "quenching".

Além da importância associada com aplicações tecnológicas, o estudo deste tipo de ligas amorfas tem um interesse fundamental ligado com a formulação de modelos que expliquem satisfatoriamente o ferromagnetismo nos metais de transição. O metal de transição pode ser diluído pelo metal nobre, nestas ligas, em todo o intervalo de concentrações passando pelos mais diversos regimes com propriedades magnéticas diferentes, permi

tindo a possibilidade de um melhor entendimento das interações que dão origem ao ferromagnetismo no metal de transição puro. Estes materiais são particularmente interessantes também para o estudo de propriedades de transporte, porque devido ao pequeno livre caminho médio dos elétrons os detalhes da superfície de Fermi ficam escondidos e os elétrons de condução comportam-se como elétrons livres, com superfície de Fermi (SF) esférica.

Apresentamos neste trabalho um estudo de fenômenos de caráter complementar, o que reflete com bastante fidelidade o estado atual da teoria. Por um lado, para o caso do ferro puro, cálculos de estrutura de bandas concordam muito bem com o modelo de Stoner para o ferromagnetismo<sup>30</sup>. Estudos experimentais paralelos (efeito de de Haas-van Alphen, magnetoresistência, efeito Hall, etc) da superfície de Fermi do ferro apresentam uma boa concordância com os cálculos de bandas, mostrando que os elétrons 3d dão uma contribuição líquida às diferentes folhas da superfície de Fermi. Adotamos este quadro geral no cálculo da resistividade de Hall apresentado no Cap. 2.

Quando se considera o acoplamento de spin-órbita as bandas de spin maioria e minoria se hibridizam removendo grande parte das degenerescências acidentais. A SF resultante<sup>4</sup> apresenta órbitas de spin hibridizado e gaps de energia, devido a interação de spin-órbita, que podem sofrer ruptura (transições interbandas) sob a aplicação de um campo magnético intenso, produzindo muitas possibilidades de órbitas suscetíveis de serem observadas experimentalmente.

Os estudos experimentais das propriedades galvano-magnéticas de metais ferromagnéticas a campos magnéticos muito intensos têm conduzido a resultados ainda não completamente entendidos para a magnetoresistência e efeito Hall no ferro<sup>5-7</sup>. Um destes efeitos (Figs. 11 e 12) é a dependência funcional, no campo magnético, da magnetoresistência transversal:  $\Delta\rho/\rho_0 = a B^n$ . A campos magnéticos baixos a magnetoresistência exibe um comportamento típico de um metal compensado ( $n = 2$  para todas as direções do campo magnético e da corrente). Entretanto, para campos acima de 100 kG o expoente  $n$  decresce a valores próximos de 1 para qualquer direção do campo. Foi sugerido que este fenômeno está associado à ruptura magnética entre dois regimes orbitais que conduzem a comportamentos quadráticos da magnetoresistência<sup>8</sup>.

Os resultados experimentais para a resistividade de Hall do Fe apresentam uma transição entre dois comportamentos lineares no campo magnético (Figs. 13 e 14). Sugerimos que o mesmo efeito que parece explicar a dependência anômala no campo magnético da magnetoresistência transversal, pode ser responsável pelo comportamento apresentado pela resistividade de Hall<sup>9</sup>.

Para campo magnético baixo, é observada uma troca de sinal na constante de Hall ordinária do ferro como função da temperatura<sup>7</sup>, associada com uma mudança no caráter da órbita com contribuição dominante para o efeito Hall. Queremos sugerir aqui que este resultado se deve a efeitos de temperatura sobre o tempo de relaxação efetivo quando consideramos mecanismos

mos de espalhamento dependentes e independentes do spin, como deveria ocorrer num metal ferromagnético<sup>10</sup>.

Por outro lado, observações na fase paramagnética, principalmente no ferro, parecem indicar a presença de momentos localizados contrariamente ao predito pelo modelo de Stoner (duas bandas degeneradas em spin)<sup>11</sup>.

Para o caso da liga ferromagnética amorfa parece ser mais conveniente adotar um modelo onde o momento magnético associado ao átomo do metal de transição seja essencialmente localizado. A interação com os outros momentos magnéticos distribuídos aleatoriamente na liga se dá via os elétrons de condução, de maneira análoga à interação RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida). Este tratamento leva-nos a escrever um hamiltoniano efetivo do tipo Heisenberg para os momentos localizados. É interessante notar que uma teoria deste tipo já foi proposta por M.B.Stearns, para explicar o ferromagnetismo dos metais de transição<sup>11</sup>.

O momento magnético preponderantemente localizado no sítio do átomo de metal de transição "vê" um campo eletrostático aleatório que provém da distribuição desordenada dos átomos vizinhos. Esta anisotropia aleatória local é descrita no nosso problema sob forma de um eixo de fácil magnetização cuja direção está distribuída aleatoriamente no espaço, seguindo o modelo proposto por Harris et al<sup>12</sup>.

O tratamento autoconsistente deste modelo, na aproximação de campo molecular, conduz a uma transição de fase ferromagnética. Devido ao caráter do problema, além das mē-

dias estatísticas, devem ser consideradas médias angulares sobre as distribuições aleatórias dos momentos magnéticos.

A desordem estrutural global é levada em conta através da introdução do fator de estrutura da liga. Experimentalmente, pode ser obtida informação sobre o fator de estrutura mediante difração de raios-X.

As ligas ferromagnéticas amorfas de metal de transição com metal nobre possuem três intervalos distintos de concentrações : regime Kondo - concentrações baixas; regime de spin-glass - concentrações intermediárias,  $0.05 \% \leq x \leq 15\%$ ; regime do ferromagneto diluído - concentrações altas,  $x \geq 15\%$ . Estamos interessados basicamente no último regime, para concentrações altas do metal de transição.

Os estudos experimentais de fenômenos de resistividade e magnetoresistência nestas ligas (no regime de concentrações altas) apresentam resultados muito interessantes<sup>14,15</sup>. Para temperaturas baixas é observado que a resistividade segue uma lei  $T^2$  e acima da temperatura de transição ferromagnética, é quase constante. Estas ligas apresentam magnetoresistência negativa e um gráfico das inclinações das curvas de magnetoresistência como função da temperatura exibe um máximo próximo à temperatura de Curie (Figs. 31 e 32)..

Propomos, como sendo o mecanismo responsável pelos comportamentos da resistividade e magnetoresistência nestas ligas, o espalhamento dos elétrons de condução pelas flutuações dos momentos localizados dos átomos de metal de transição na liga<sup>16</sup>.

A magnetoresistência é calculada neste sistema usan

do a fórmula de Kubo-Nakano<sup>17,18</sup>, desprezando os efeitos diamagnéticos, tendo em vista o pequeno livre caminho médio dos elétrons de condução num amorfo. Neste sentido, os fenômenos galvanomagnéticos aqui estudados são devidos a efeitos diametralmente opostos. No caso do ferro cristalino, a magnetoresistência aparece como um efeito coerente das órbitas de cíclotron dos elétrons, num sistema onde o tempo médio entre colisões é maior que o período de cíclotron. Neste caso é possível distinguir efeitos de superfície de Fermi, a qual pode ser completamente mapeada variando a direção do campo magnético externo.

No caso do amorfo, os efeitos de superfície de Fermi ficam encobertos pelo espalhamento difuso dos elétrons de condução que ocorre num material desordenado. Toda coerência é destruída nas "frequentes" colisões e os efeitos de magnetoresistência estudados tem origem na supressão das flutuações dos spins produzida pelo campo magnético externo.

No Capítulo 1 fazemos uma revisão das propriedades semiclássicas de transporte. Sob certas condições a equação de Boltzmann se reduz a uma integração para a obtenção do chamado caminho efetivo dos elétrons (integral de trajetória de Chambers). Analisamos os diversos comportamentos da magnetoresistência para campos magnéticos muito altos, associados aos vários tipos de órbitas na SF, que constituem a teoria clássica de Lifshitz<sup>19</sup>. Discutimos também o fenômeno de ruptura magnética. Esta pode alterar radicalmente a topologia da SF e assim o comportamento dos tensores galvanomagnéticos, produzindo transições entre os diferentes comportamentos da magnetoresis-

tência transversal e efeito Hall preditos pela teoria de Lifshitz. Apresentamos, resumidamente, os resultados de cálculos de estrutura de bandas, bem como a informação experimental da superfície de Fermi obtida tendo como base o efeito de de Haas-van Alphen e as propriedades galvanomagnéticas dos metais ferromagnéticos e em especial do Fe.

No Capítulo 2 apresentamos nossos cálculos da resistividade de Hall usando um modelo de duas bandas — uma esfera de Fermi para elétrons e outra para buracos. O Fe parece ser um metal compensado, assim se considerarmos massas efetivas iguais para elétrons e buracos obtemos uma resistividade de Hall nula. Para remover a simetria esférica, consideramos massas efetivas (isotrópicas) diferentes para diferentes tipos de portadores. O método para calcular o tensor resistividade consiste numa solução semiclássica da equação de Boltzmann para um conjunto de órbitas eletrônicas no espaço  $\vec{k}$  acopladas por meio da ruptura magnética em alguns pontos, chamados junções de ruptura<sup>20</sup>. A seguir (seção 2.2a) estudamos o efeito de novos mecanismos de espalhamento (dependentes do spin) sobre a constante de Hall ordinária no Fe. Terminamos este capítulo analisando o efeito combinado de mecanismos de relaxação dependentes e independentes do spin e do fenômeno de ruptura magnética sobre o efeito Hall ordinário de metais ferromagnéticos. Na seção 2.3 apresentamos as conclusões finais do estudo sobre a resistividade de Hall de metais ferromagnéticos desenvolvido neste capítulo.

No capítulo 3 apresentamos o cálculo da resistividade e magnetoresistência de ligas ferromagnéticas amorfas de

metal de transição com metal nobre.

Na seção 3.1 tratamos o hamiltoniano que descreve a liga na aproximação de campo molecular. A seguir, calculamos o tensor resistividade usando a fórmula de Kubo-Nakano. Finalmente, na seção 3.3, apresentamos nossos resultados e conclusões.

## CAPÍTULO 1

**DINÂMICA DE ELÉTRONS DE BLOCH E  
TEORIA DA MAGNETORESISTÊNCIA**

1.1 - O conceito de Superfície de Fermi e o efeito de campos externos no movimento de elétrons de Bloch

Nos limitaremos aqui a revisar de forma resumida alguns conceitos que usaremos no decorrer do texto. Entre os livros e monografias mais conhecidos neste assunto mencionamos Mercouroff<sup>21</sup>, Falicov<sup>22</sup>, Cracknell<sup>23</sup> e Harrison e Webb<sup>24</sup>.

O número de diferentes vetores de onda  $\vec{k}$  dentro da zona de Brillouin é igual ao número,  $N$ , de células unitárias no cristal. Como cada estado pode ser ocupado por dois elétrons (princípio de exclusão de Pauli), o número de estados permitidos por banda de energia dentro da zona de Brillouin é  $2N$ . Em equilíbrio térmico, a ocupação de qualquer banda,  $n$ , num metal é determinada pela função de distribuição de Fermi-Dirac

$$f_n(\vec{k}) = \{1 + \exp((E_n(\vec{k}) - \mu)/k_B T)\}^{-1} \quad (1.1)$$

onde  $\mu$  é o potencial químico, que é determinado pela condição de número de partículas fixo

$$\sum_{n, \vec{k}} f_n(\vec{k}) = \text{número total de elétrons no cristal} \quad (1.2)$$

O potencial químico a  $T = 0$  K,  $\mu_0$ , define o nível de Fermi e a diferença entre o fundo da banda de valência,  $\epsilon_V$ , e  $\mu_0$  é definida como a energia de Fermi. Se definimos  $\epsilon_V$  como o zero da escala de energia, energia de Fermi e nível de Fermi tornam-se termos equivalentes.

Para  $T \neq 0$  K, alguns elétrons passam de estados com energia menores que  $\epsilon_F$  para estados com energias maiores que  $\epsilon_F$  (largura  $k_B T$ ), porém mesmo que aproximadamente,  $\epsilon_F$  ainda divide estados ocupados de não ocupados, porque  $\epsilon_F \gg k_B T$  ( $T_F = \epsilon_F/k_B \sim 10^4$  K, e a desigualdade mantém-se praticamente sempre).

O conjunto de equações  $E_n(\vec{k}) = \epsilon_F$ , define uma superfície de energia constante que se chama Superfície de Fermi. Ela pode ser considerada como a superfície que marca o contorno entre as porções ocupadas e não ocupadas da banda (zona)  $n$  (embora isto só seja rigorosamente verdadeiro para  $T = 0$  K, ainda constitui uma boa aproximação para valores de  $T$  não nulos). A superfície de Fermi indica quais vetores de onda  $\vec{k}$  na zona de Brillouin correspondem a estados ocupados e quais a estados não ocupados. Em cristais com uma complicada estrutura de bandas podem haver diversas zonas que estão parcialmente ocupadas de maneira que teremos diferentes folhas de SF para cada uma das bandas parcialmente preenchidas.

Quando consideramos a interação de elétrons com perturbações externas — campos elétrico e magnético —, podemos negligenciar a maioria dos elétrons que estão em estados suficientemente distantes da energia de Fermi. Portanto, estamos

interessados em elétrons em estados eletrônicos tais que  $E_n(\vec{k}) = \epsilon_F$ .

A determinação da Superfície de Fermi depende de dois fatores, a propriedade geométrica que está associada a estrutura cristalina e o número de elétrons a serem distribuídos nas bandas de energia.

Vamos examinar agora o comportamento de elétrons de Bloch em campos externos. Quando negligenciamos os efeitos do acoplamento de spin-órbita e para campos externos não muito grandes, o pacote de ondas associado ao elétron evolui no tempo assim que os índices de banda  $n$  e de spin  $\sigma$  são constantes de movimento e o vetor de onda  $\vec{k}$  satisfaz a equação de movimento

$$\hbar \dot{\vec{k}}_{n\sigma} = -|e| (\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v}_{n\sigma}(\vec{k}) \times \vec{H}) \quad (1.3)$$

onde  $\vec{v}_{n\sigma}(\vec{k})$  é a velocidade de grupo do elétron na banda  $n$  com vetor de onda  $\vec{k}$  e é dada por

$$\vec{v}_{n\sigma}(\vec{k}) = \nabla_{\vec{k}} \epsilon_{n\sigma}(\vec{k}) / \hbar \quad (1.4)$$

Quando consideramos somente um campo elétrico verificamos que as trajetórias do elétron no espaço  $\vec{k}$  são linhas retas (esquema de zona repetida) e o vetor de onda  $\vec{k}$  evolui com velocidade uniforme.

A trajetória no espaço real para o pacote de ondas é dada por

$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 + \int_0^t \vec{v}_k(t') dt' \quad (1.5)$$

No modelo de elétrons quase livres e na ausência de colisões a trajetória real (1.5) (sô campo elétrico aplicado) é uma parábola até que o vetor de onda chega ao contorno da zona de Brillouin, onde o elétron sofre uma reflexão de Bragg e sua velocidade muda abruptamente por um vetor da rede recíproca, então a trajetória volta a ser uma parábola até o elétron sofrer uma nova reflexão de Bragg.

O efeito causado por um campo magnético pode ser visto na equação (1.3). A variação do vetor de onda  $\vec{k}$  do elétron é sempre (a) normal à velocidade do elétron e (b) normal ao campo magnético  $\vec{H}$ . De (a) segue que o elétron, num campo magnético, move-se numa superfície de energia constante e de (b), que a componente do vetor de onda  $\vec{k}$  paralela ao campo permanece constante.

Como os elétrons que nos interessam são aqueles na superfície de Fermi, então o vetor de onda  $\vec{k}$  se move numa órbita definida pela intersecção da superfície de Fermi com um plano perpendicular ao campo  $\vec{H}$  (Fig. 1).

Se aplicamos um campo magnético segundo a direção-z, integração da equação (1.3) nos dá

$$k_z = \text{cte.}, \quad k_x = -\alpha (y - y_0), \quad k_y = -\alpha (x - x_0) \quad (1.6)$$

$\alpha \equiv |e| H / c\hbar$ . Pode ser visto destas equações que a projeção da trajetória real num plano perpendicular a  $\vec{H}$  pode ser obtida a partir da trajetória no espaço  $\vec{k}$ , rodada de  $\pi/2$  em torno de  $\vec{H}$  e modificada por um fator de escala  $\alpha^{-1}$ . Este fato é ilustrado na Fig. 2. Vemos que se a secção da SF no espaço  $\vec{k}$

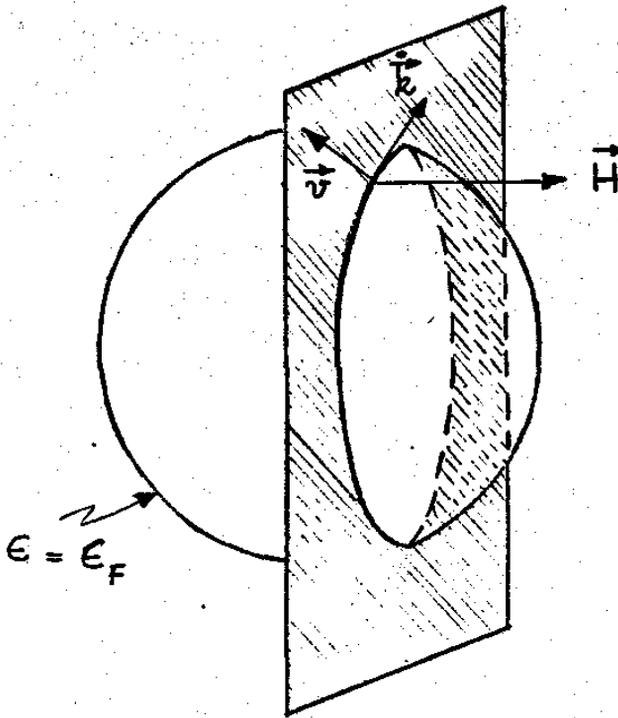


Fig. 1: órbita descrita por um elétron, sobre a SF, em presença de um campo magnético.

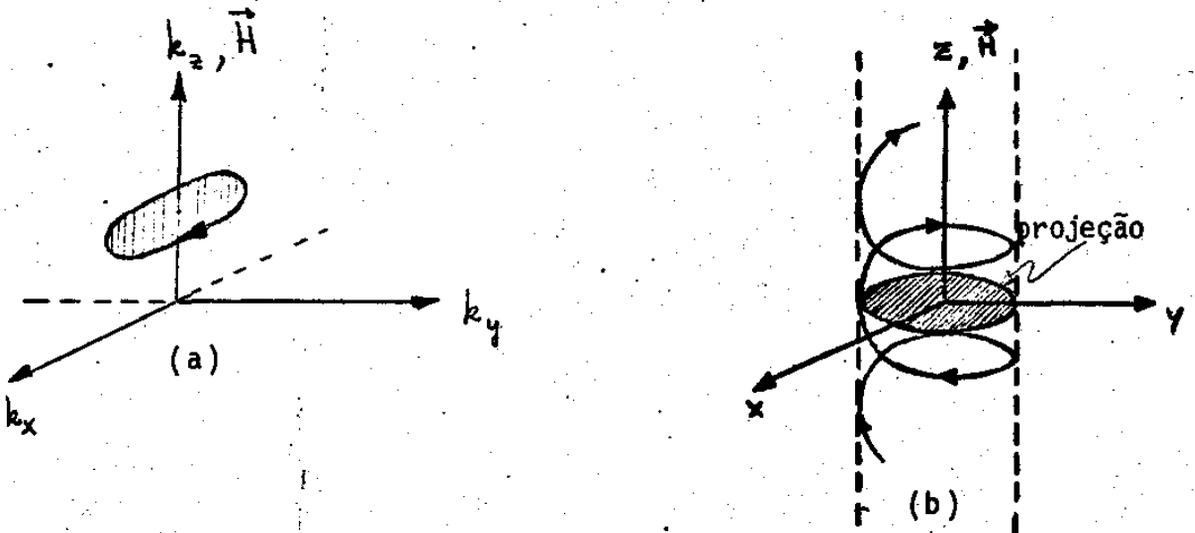


Fig. 2: relação entre as trajetórias de um elétron no espaço recíproco (a) e no espaço real (b) quando há um campo magnético aplicado.

é uma curva fechada, o elétron descreverá uma hélice no espaço real.

A energia dos elétrons de Bloch é periódica no espaço recíproco. Assim, as superfícies de energia constante para cada banda se estendem periodicamente em todo espaço  $\vec{k}$  e não estão confinadas dentro de uma única zona de Brillouin. Quando um elétron encontra o contorno da zona ele simplesmente passa para a zona seguinte (esquema de zona repetida).

Dependendo da forma da SF as órbitas podem ser fechadas ou abertas. Se a órbita for aberta no espaço  $\vec{k}$ , a trajetória no espaço real também será aberta, porém segundo uma direção perpendicular. Devemos considerar vários casos (Fig. 3)

(a) se a superfície de Fermi está inteiramente contida dentro dos limites da zona, a SF será fechada e todas as órbitas serão também fechadas;

(b) se a SF consiste de várias porções "encostadas" as faces da zona ou em torno dos vértices, estas porções formam superfícies fechadas no esquema de zona periódica. Neste caso também todas as órbitas serão fechadas;

(c) as órbitas fechadas podem ser do tipo elétron ou do tipo buraco. Uma órbita do tipo elétron encerra estados de energia mais baixa e o vetor velocidade (eq. (1.4)) aponta para fora de uma órbita de elétron. Uma órbita do tipo buraco se define como aquela que encerra estados de mais alta energia e portanto  $\vec{v}$  aponta para dentro de uma órbita de buraco. Um elétron, num campo magnético, descreve uma órbita de buraco no sentido oposto aquele de uma órbita de elétron, assim um elétron numa órbita de buraco se comporta como se tivesse uma car

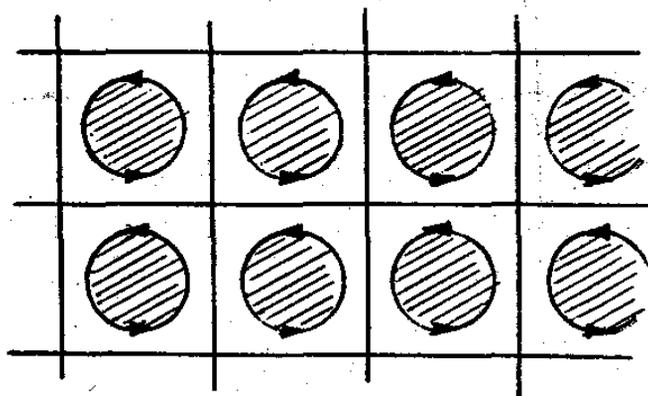
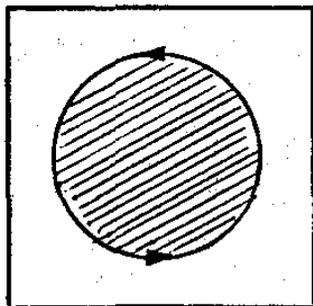


Fig. 3(a): SF totalmente contida na zona e as correspondentes  $\bar{o}$ rbitas fechadas do tipo el $\bar{e}$ tron, no esquema de zona peri $\bar{o}$ dica.

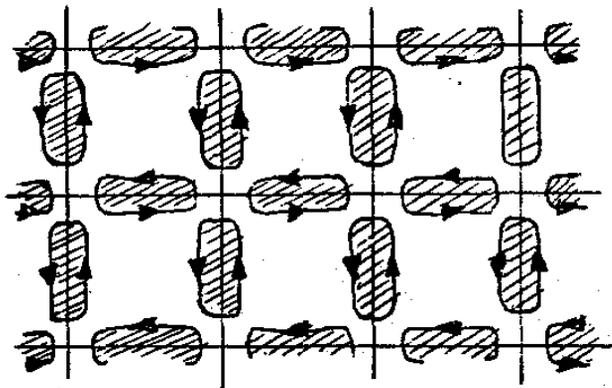
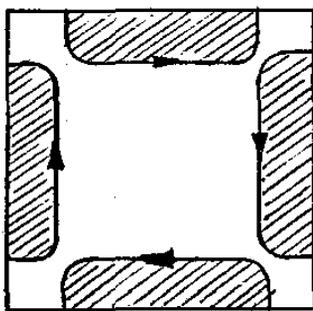


Fig. 3(b): folhas da SF encostadas as faces das zo $\bar{n}$ as e suas  $\bar{o}$ rbitas fechadas do tipo el $\bar{e}$ tron, no esquema de zona peri $\bar{o}$ dica.

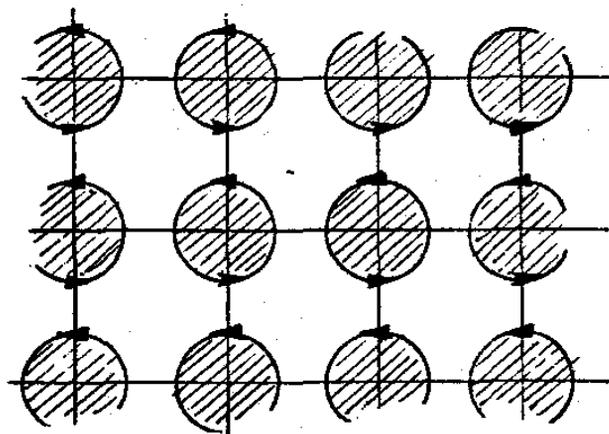
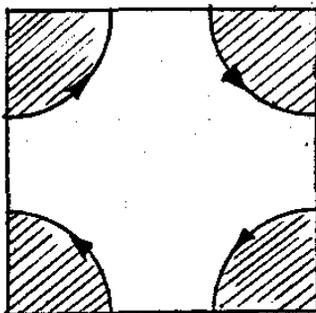


Fig. 3(c): folhas da SF em torno dos v $\bar{e}$ rtices. No esquema de zona peri $\bar{o}$ dica obtemos  $\bar{o}$ rbitas fechadas do tipo el $\bar{e}$ tron.

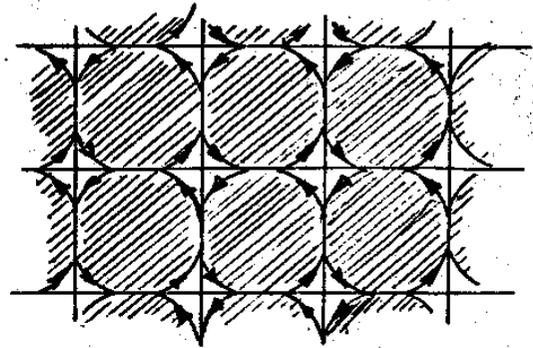
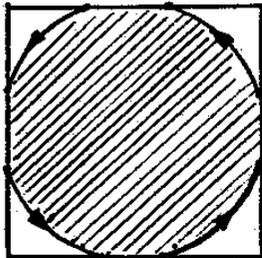


Fig. 3(d): órbitas fechadas do tipo buraco.

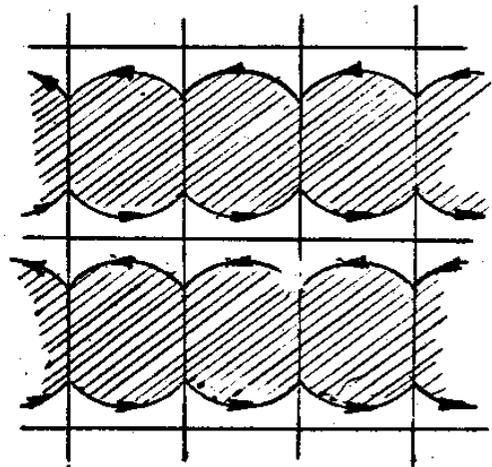
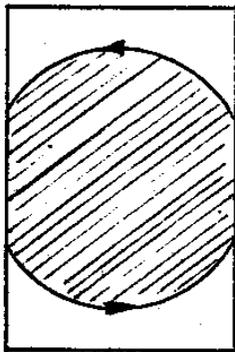


Fig. 3(e): SF que se estende desde uma face da zona até outra, existem órbitas abertas.

ga positiva;

(d) se a superfície de Fermi se estende numa zona de uma face até a outra ou de um vértice até o outro, então no esquema de zona periódica a SF será uma superfície multiplamente conexa que se estende por todo espaço recíproco. Esta superfície aberta pode conter órbitas abertas para algumas direções do campo magnético e fechadas em outras.

A classificação das órbitas é de importância fundamental no estudo dos fenômenos galvanomagnéticos, como poderemos verificar mais adiante.

## 1.2 - Propriedades semiclássicas de transporte: Equação de Boltzmann

Os elétrons num metal podem sofrer influências de campos externos e gradientes de temperatura, assim como podem ser espalhados por fonons, impurezas, etc. A formulação de uma equação de transporte deve conter todas estas contribuições, além disso deve haver um balanço entre estes efeitos para que a função de distribuição de elétrons permaneça constante no estado estacionário. A equação de Boltzmann é uma equação de continuidade para a função de distribuição de elétrons,  $f(\vec{k}, \vec{r})$ :

$$(\vec{k} \cdot \nabla_{\vec{k}} + \vec{v} \cdot \nabla_{\vec{r}}) f(\vec{k}, \vec{r}) + (\partial f(\vec{k}, \vec{r}) / \partial t)_{col} = 0. \quad (1.7)$$

Para campos elétrico e magnético aplicados, a variação do vetor de onda  $\vec{k}$  é dado pela equação (1.3), assim

$$\frac{|e|\hbar}{m} (\vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v}_{n\sigma} \times \vec{H}) \cdot \nabla_{\vec{k}} f_{n\sigma\vec{k}}(\vec{r}) - \vec{v}_{n\sigma}(\vec{k}) \cdot \nabla_{\vec{r}} f_{n\sigma\vec{k}}(\vec{r}) =$$

$$= (\partial f_{n\sigma\vec{k}}(\vec{r})/\partial t)_{col} \quad (1.8)$$

A função de distribuição de equilíbrio  $f_{n\sigma\vec{k}}^{(0)}$ , é a função de distribuição de Fermi-Dirac.

Para os efeitos que estamos interessados vamos supor que

(a) não exista variação espacial de qualquer quantidade física nem efeitos de superfície, assim a função de distribuição não depende da posição

$$\nabla_{\vec{r}} f(\vec{k}, \vec{r}) = 0, \quad (1.9)$$

(b) o termo de espalhamento possa ser tratado na aproximação do tempo de relaxação

$$(\partial f_{n\sigma\vec{k}}/\partial t)_{col} = - (f_{n\sigma\vec{k}} - f_{n\sigma\vec{k}}^{(0)})/\tau, \quad (1.10)$$

(c) estamos no regime da lei de Ohm — sejam considerados somente termos lineares no campo elétrico  $\vec{E}$ . Entretanto, os efeitos do campo magnético (curvatura) são considerados em todas as ordens.

Definimos

$$g \equiv f - f^{(0)}, \quad (1.11)$$

como o desvio da função de distribuição de seu valor no equilíbrio  $f_{n\sigma\vec{k}}^{(0)}$ .

Com as hipóteses acima, encontramos a equação de

Boltzmann linearizada

$$-|e| \vec{E} \cdot \vec{v}_{\vec{k}}(t) \left( \frac{\partial f_{\vec{k}}^{(0)}}{\partial \epsilon} \right) - \frac{|e|}{\hbar c} (\vec{v}_{\vec{k}}(t) \times \vec{H}) \cdot \nabla_{\vec{k}} g(\vec{k}) = g(\vec{k})/\tau, \quad (1.12)$$

tendo como solução

$$g(\vec{k}) = -(\partial f^{(0)}/\partial \epsilon) |e| \vec{E} \cdot \vec{\Delta}_{\vec{k}}, \quad (1.13)$$

onde  $\vec{\Delta}_{\vec{k}}$  é denominado o caminho efetivo do elétron no estado  $\vec{k}$  e é dado por

$$\vec{\Delta}_{\vec{k}} = \int_{-\infty}^{t_0(\vec{k})} \vec{v}_{\vec{k}}(t) \exp((t - t_0(\vec{k}))/\tau) dt, \quad (1.14)$$

onde  $\vec{v}_{\vec{k}}(t)$  é a velocidade do elétron que em  $t_0(\vec{k})$  se encontra no estado  $\vec{k}$  e é determinada pelas equações (1.3) e (1.4).

A integral (1.14) é a integral de linha de Chambers.

A densidade de corrente se escreve como

$$\vec{J} = -|e| \sum_{n, \sigma, \vec{k}} g_{n\sigma}(\vec{k}) \vec{v}_{n\sigma}(\vec{k}), \quad (1.15)$$

a qual, após usarmos a expressão para  $g_{n\sigma}(\vec{k})$  ((1.13)) se transforma em

$$\begin{aligned} \vec{J} &= e^2 \sum_{n\sigma} \int_{\text{todo } \vec{k}} \left( -\partial f^{(0)}/\partial \epsilon_{n\sigma}(\vec{k}) \right) \vec{v}_{n\sigma}(\vec{k}) (\vec{E} \cdot \vec{\Delta}_{n\sigma\vec{k}}) = \\ &= \frac{e^2}{8\pi^3} \sum_{n\sigma} \int_{\text{todo } \vec{k}} \left( -\frac{\partial f^{(0)}}{\partial \epsilon_{n\sigma}(\vec{k})} \right) \vec{v}_{n\sigma}(\vec{k}) (\vec{E} \cdot \vec{\Delta}_{n\sigma\vec{k}}) d^3k. \end{aligned} \quad (1.16)$$

A temperaturas baixas, próximas de  $T = 0$  K, o fator  $(-\partial f^{(0)}/\partial \epsilon)$  pode ser aproximado por uma função delta  $\delta(\epsilon_{n\sigma}(\vec{k}) - \epsilon_F)$ . Assim, a integral em (1.16) se reduz a uma integração sobre a superfície de Fermi.

Desde que

$$\vec{j} = \vec{\sigma} \cdot \vec{E} \quad , (1.17)$$

obtemos o tensor condutividade

$$\vec{\sigma} = \frac{e^2}{8\pi^3 \hbar} \int_{SF} \int_{SF} dS \frac{\vec{v}_{n\sigma}(\vec{k})}{|\vec{v}_{n\sigma}(\vec{k})|} \hat{\Delta}_{n\sigma\vec{k}} \quad . (1.18)$$

Como um exemplo ilustrativo vejamos o caso do elétron livre (SF esférica), com campo magnético aplicado na direção -z. Calculando as integrais (1.14) e (1.18) obtemos

$$\vec{\sigma} = \frac{e^2 n \tau}{m} (1 + \omega_c^2 \tau^2)^{-1} \begin{bmatrix} 1 & -\omega_c \tau & 0 \\ \omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad , (1.19)$$

e por inversão matricial, o tensor resistividade

$$\vec{\rho} = \frac{m}{ne^2 \tau} \begin{bmatrix} 1 & \omega_c \tau & 0 \\ -\omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad , (1.20)$$

onde  $n (= k_F^3/3\pi^2)$  é a densidade de elétrons no cristal, e  $\omega_c = |e|H/mc$ , é a frequência de ciclotron.

Podemos ver da relação (1.20) que o modelo de elétrons livres não produz magnetoresistência. A componente  $\rho_{xy}$ , a resistividade de Hall, é independente do tempo de relaxação e é linear no campo magnético

$$\rho_{xy} = m\omega_c/ne^2 \equiv R H \quad , (1.21)$$

onde a constante R, a constante de Hall, é

$$R = 1/n|e|c \quad . (1.22)$$

Uma corrente fluindo sob a influência de um campo elétrico  $\vec{E}$  consiste de portadores com velocidades médias paralelas a  $\vec{E}$ . Um campo magnético aplicado perpendicular a esta direção desvia as trajetórias dos elétrons, criando um excesso de carga em algumas regiões da amostra, surgindo assim um campo elétrico (campo de Hall,  $E_H$ ) que compensa a força do campo magnético. O resultado é a ausência de magnetoresistência.

Na próxima seção veremos como se comportam as componentes dos tensores condutividade e resistividade no limite de campos aplicados muito grandes.

### 1.3 - Propriedades galvanomagnéticas de metais para campos muito grandes

O limite de campos muito grandes,  $\omega_c \tau \gg 1$ , significa que o elétron executa na média muitos ciclos na órbita de cíclotron antes de ser espalhado, assim neste limite enquanto os detalhes dos processos de colisão perdem sua importância, a forma das órbitas torna-se fundamental.

Os resultados experimentais para a magnetoresistência transversal no limite de campos grandes (na ausência de ruptura magnética) apresentam diferentes comportamentos:

(i) a magnetoresistência transversal satura para todas as direções da corrente e do campo magnético. O valor de saturação pode depender da direção.

(ii) a magnetoresistência transversal cresce quadrática em relação ao campo, para todas as direções do campo e da corrente. O coeficiente do comportamento quadrático pode depender da direção.

(iii) a magnetoresistência transversal satura para algumas direções do campo e apresenta um comportamento quadrático para outras direções.

O modelo de elétrons livres (como vimos na seção anterior) é insuficiente para explicar estes resultados. A mais simples modificação a este modelo consiste na introdução de um segundo tipo de portadores, ou seja, considerar uma SF de duas folhas (esféricas), uma para portadores com carga  $e_1$ , massa  $m_1$  e densidade  $n_1$  e outra para portadores com carga  $e_2$ , massa  $m_2$  e densidade  $n_2$ . Se uma das folhas da SF for do tipo elétron e a outra do tipo buraco, temos  $e_1 = e_2 = -|e|$ . Além disso, vamos supor que os portadores têm o mesmo tempo de relaxação  $\tau$  e a mesma massa efetiva  $m$ . As componentes do tensor resistividade que obtemos são as seguintes

$$\rho_{zz}(H) = \rho_0, \quad \rho_{xz} = \rho_{yz} = \rho_{zx} = \rho_{zy} = 0,$$

$$\rho_{xx}(H) = \rho_{yy} = \rho_0(n_e + n_h)^2(1 + \chi^2)/\{(n_e + n_h)^2 + \chi^2(n_e - n_h)^2\}, \quad (1.23)$$

$$\rho_{xy} = -\rho_{yx} = \chi(n_e - n_h)(n_e + n_h)(1 + \chi^2)/\{(n_e + n_h)^2 + \chi^2(n_e - n_h)^2\},$$

onde  $\chi = \omega_c \tau$ , e a resistividade para campo nulo,  $\rho_0$ , é definida como

$$\rho_0 = \sigma_0^{-1} \equiv m/e^2\tau(n_e + n_h) \quad (1.24)$$

Analisando estes resultados podemos ver que (a) cumprem-se as relações de Onsager

$$\rho_{ij}(H) = \rho_{ji}(-H) \quad , \quad (1.25)$$

(b) se o metal não é compensado,  $n_e \neq n_h$ , a magnetoresistência transversal satura para  $H \rightarrow \infty$ , a um valor

$$\rho_{xx}(H \rightarrow \infty) = \rho_0 (n_e + n_h)^2 / (n_e - n_h)^2 \quad , \quad (1.26)$$

neste limite o valor do coeficiente de Hall ( $\rho_{xy} = RH$ ) é dado por

$$R(H \rightarrow \infty) = (|e|c (n_e - n_h))^{-1} \quad , \quad (1.27)$$

(c) se o metal é compensado,  $n_e = n_h$ , a magnetoresistência cresce quadraticamente com H

$$\rho_{xx}(H \rightarrow \infty) = \rho_0 x^2 \quad , \quad (1.28)$$

e não existe resistância de Hall,  $\rho_{xy}$ .

Vemos assim que este modelo com superfícies de Fermi fechadas explica os comportamentos (i) e (ii), mas não consegue explicar o comportamento da magnetoresistência transversal de saturar em algumas direções e crescer indefinidamente ( $H^2$ ) em outras. Este comportamento só pode ser explicado quando existem órbitas abertas em planos perpendiculares à direção do campo magnético.

Um tratamento teórico das propriedades galvanomagnéticas de metais na região de campos grandes foi dado por Lifshitz, Azbel e Kaganov<sup>19</sup>, conhecido como teoria de Lifshitz,

onde cada elemento do tensor condutividade é expandido em série de potências de  $1/H$ , da qual o termo dominante é retido. Eles mostraram que a lei de potências em  $1/H$  do termo dominante de cada elemento do tensor resistividade depende diretamente dos fatores geométricos da superfície de Fermi, se existem órbitas abertas ou se o metal é compensado ou não.

Os resultados obtidos neste tratamento são encontrados em forma resumida na Tabela 1.

#### 1.4 - Ruptura magnética

Como vimos em seções anteriores, sob o efeito de campos elétrico e magnético aplicados o pacote de onda que descreve o elétron se desloca no espaço  $k$  ao longo de trajetórias bem definidas. Estas trajetórias podem se aproximar de um plano de Bragg e ao sentir a influência da rede cristalina sofrerem difração de Bragg (modelo de elétrons quase-livres). Se a interação do elétron com a rede é fraca, as bandas de energia são quase degeneradas próximo a planos de Bragg, então sob a ação de campos externos existe uma probabilidade de ocorrer efeito túnel, quando o pacote de ondas do elétron sofre uma transição entre as bandas quase degeneradas.

O efeito túnel entre duas bandas sob a ação de um campo elétrico é conhecido como ruptura Zener<sup>25</sup> e tem importantes implicações na física de semicondutores.

De maneira similar à ruptura (Zener) elétrica, um

PROPRIEDADES GALVANOMAGNÉTICAS NO LIMITE  $\omega_c \tau \gg 1$

Tipo de órbita	Magnetoresistência transversal	Resistividade Hall
I. Todas as órbitas são fechadas $n_e \neq n_h$	$\sim H^0$ (satura)	$H/(ec(n_e - n_h))$
II. Todas as órbitas são fechadas $n_e = n_h$	$\sim H^2$ (quadrático)	$\sim H$
III. Órbita aberta segundo uma direção que forma um ângulo $\theta$ com o eixo $x$ no espaço real	$\rho_{xx} \sim A \cos^2 \theta + CH^2 \sin^2 \theta$ $\rho_{yy} \sim A \sin^2 \theta + CH^2 \cos^2 \theta$	$\sim H$

Tabela 1

campo magnético forte pode produzir efeito túnel interbandas. Este efeito é muito importante no entendimento de diversos resultados experimentais para muitos metais e é chamado de ruptura magnética. Este fenômeno foi discutido pela primeira vez por Cohen e Falicov<sup>26</sup>. Quando o pacote de ondas do elétron, movendo-se em sua órbita de ciclotron, aproxima-se do limite da zona de Brillouin, poderá não sofrer uma reflexão de Bragg e passar para outra folha da superfície de Fermi com uma certa probabilidade que depende de  $H$  e dos detalhes do potencial da rede.

Não derivaremos aqui a expressão para a probabilidade de ruptura, esta tem sido derivada de diversas maneiras por vários autores<sup>27-29</sup>, só daremos o resultado final

$$T = \exp(-H_0/H) \quad , \quad (1.29)$$

onde  $H_0$  é chamado de campo de ruptura, e é dado por

$$H_0 = \alpha \frac{|V_G|^2 m c}{\epsilon_F |e| \hbar} \quad , \quad (1.30)$$

$2|V_G|$  é o gap entre as bandas no contorno da zona,  $\epsilon_F$  é a energia de Fermi e  $\alpha$  é um fator numérico da ordem da unidade.

Se o gap é tal que  $H_0/H \leq 1$  os elétrons tem uma probabilidade finita de fazer uma transição entre as bandas separadas pelo gap.

Se a origem do gap for a interação de spin-órbita, ele pode ser relativamente pequeno, da ordem de  $10^{-2}$  eV, e o fenômeno de ruptura magnética torna-se possível para campos magnéticos da ordem de 10 kG.

Quando uma órbita aberta sofre ruptura magnética pode tornar-se uma órbita fechada e, inversamente, órbitas abertas podem surgir da ruptura entre órbitas fechadas. Assim o efeito de ruptura magnética pode alterar drasticamente a topologia da SF e portanto tem uma influência muito grande nos resultados da magnetoresistência e efeito Hall para campos magnéticos grandes.

### 1.5 - Estrutura de Bandas e Superfície de Fermi para os Metais de Transição Fe, Co e Ni

Com os resultados de cálculos de estruturas de bandas e observações experimentais da topologia da superfície de Fermi dos metais ferromagnéticos, Fe, Co, Ni, tem sido possível obter uma boa concordância que parece confirmar o modelo proposto por Stoner para explicar o ferromagnetismo destes metais<sup>30,31</sup>. Neste modelo, as bandas que são degeneradas em spin na fase paramagnética, separam-se por uma interação de troca ferromagnética tal que as bandas de spin maioria deslocam-se para baixo das bandas de spin minoria. A separação de energia  $\Delta\epsilon$  é grande ( $\sim 2$  eV), assim espera-se que as características topológicas da SF para elétrons com spin para cima sejam bem diferentes das da SF para elétrons com spin para baixo.

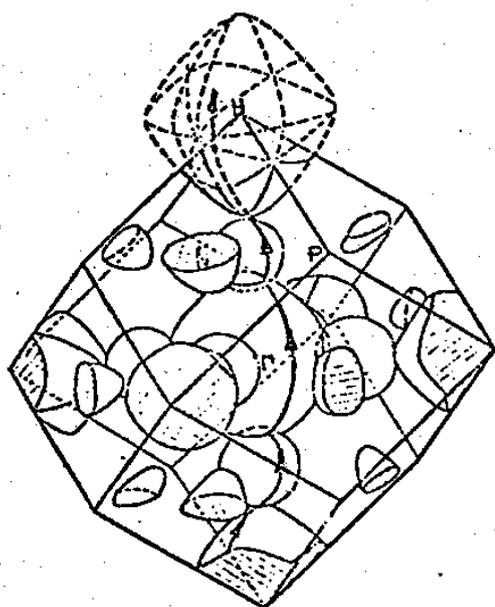
Já é notório<sup>32</sup> que em metais da primeira série de transição (Sc a Ni ou Cu) os elétrons 3d se encontram numa banda estreita e, a princípio, podem ser considerados como localizados, enquanto que os elétrons  $s$  estão numa banda larga e,

portanto, são não localizados e podem ser considerados como elétrons de condução. Entretanto, a relação entre as larguras das bandas é menos importante do que o fato de que as bandas  $d$  e  $s$  se superpõem. Assim, o número de elétrons de condução é dado pelo número total de elétrons  $3d$  e  $4s$  do átomo livre.

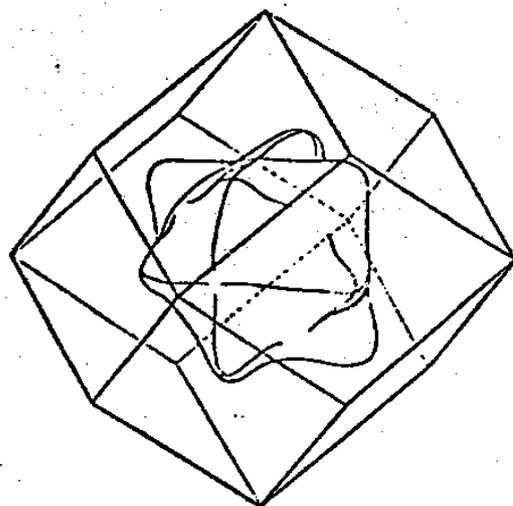
Nestes metais, as posições dos níveis de Fermi para elétrons de spin maioria e minoria são determinados pela exigência de que a soma dos números de ocupação,  $n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$ , concorde com o número total de elétrons fora da camada fechada do  $[Ar]$ , enquanto que a diferença,  $n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ , deve ser igual ao número de magnetons observado experimentalmente. Para o Fe, o número de magnetons encontrado é  $2.21^{33}$ .

O Fe tem sido objeto de uma série de cálculos de estrutura de bandas onde foram empregados uma variedade de diferentes métodos. O primeiro cálculo que dá uma descrição razoável de sua estrutura de bandas foi feito por Wood<sup>34</sup>, para a fase paramagnética do Fe, usando o método APW, onda plana aumentada. Posteriormente, Wakoh e Yamashita<sup>35</sup> aplicaram o método da função de Green de Kohn-Korriga-Rostoker (KKR) no cálculo da estrutura de bandas do Fe ferromagnético. O potencial cristalino foi determinado autoconsistentemente, considerando que os elétrons com spins diferentes movem-se em potenciais diferentes.

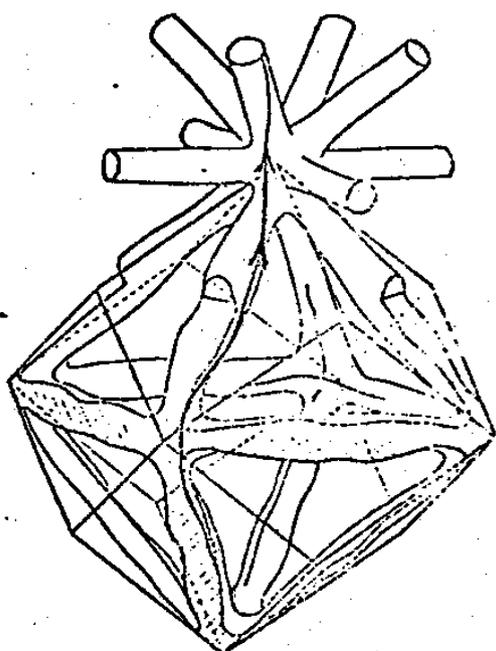
Como resultado de seus cálculos Wakoh e Yamashita obtiveram 5.1 elétrons e 2.9 elétrons nas bandas de spin para baixo e para cima, respectivamente. Além disso, seus cálculos predizem que o Fe é um metal compensado ( $n_e = n_h$ ).



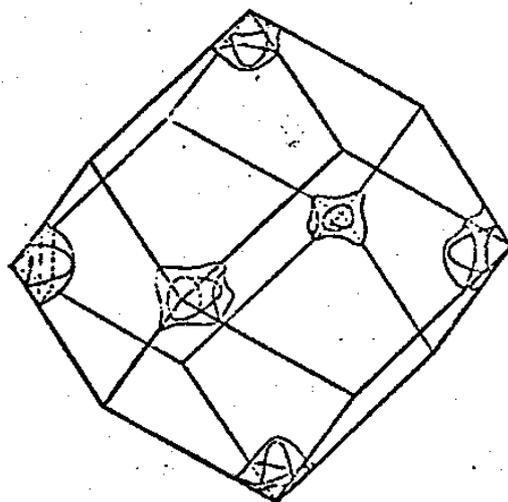
(a) spin minoria (elêtrons).  
Hã uma òrbita aberta se-  
gundo a direçãõ [100].



(b) spin maioria (elêtrons).



(c) spin maioria (buracos).  
A òrbita aberta estã in-  
dicada por uma linha con-  
tĩnua.



(d) "bolsos" tipo buracos de  
spin maioria.

Fig. 4: Superfície de Fermi do Fer<sub>10</sub>, segundo Wakoh e Yamashita [35].

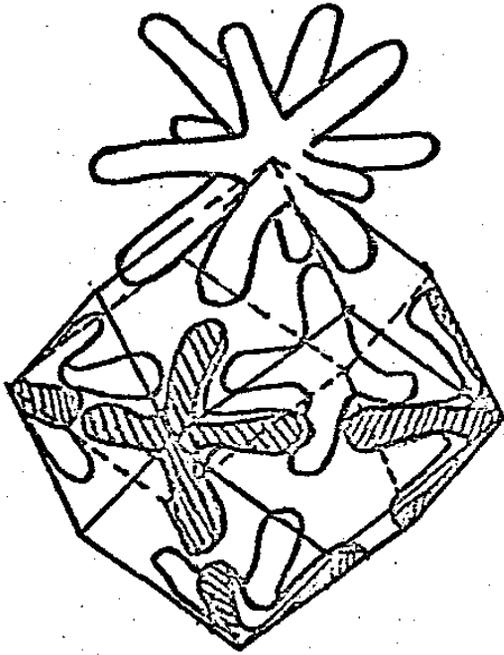
A SF encontrada por eles, mostrada na Fig. 4, consiste de:

(a) SF de spin minoria (Fig. 4(a)): é similar a do cromo (Cr não magnético), esta semelhança provém do fato de que nos metais do grupo do Cr existem 3.0 elétrons por átomo nas bandas com spin para cima e para baixo, e este valor está muito próximo dos 2,9 elétrons na banda com spin para cima do Fe. Existem "bolsos" de buracos (hole pockets) em torno de N, buracos octaédrais em torno de H, uma porção central em torno de  $\Gamma$  correspondente a elétrons, e bolsos de elétrons ao longo da linha  $\Gamma$ -H (usualmente chamados lentes).

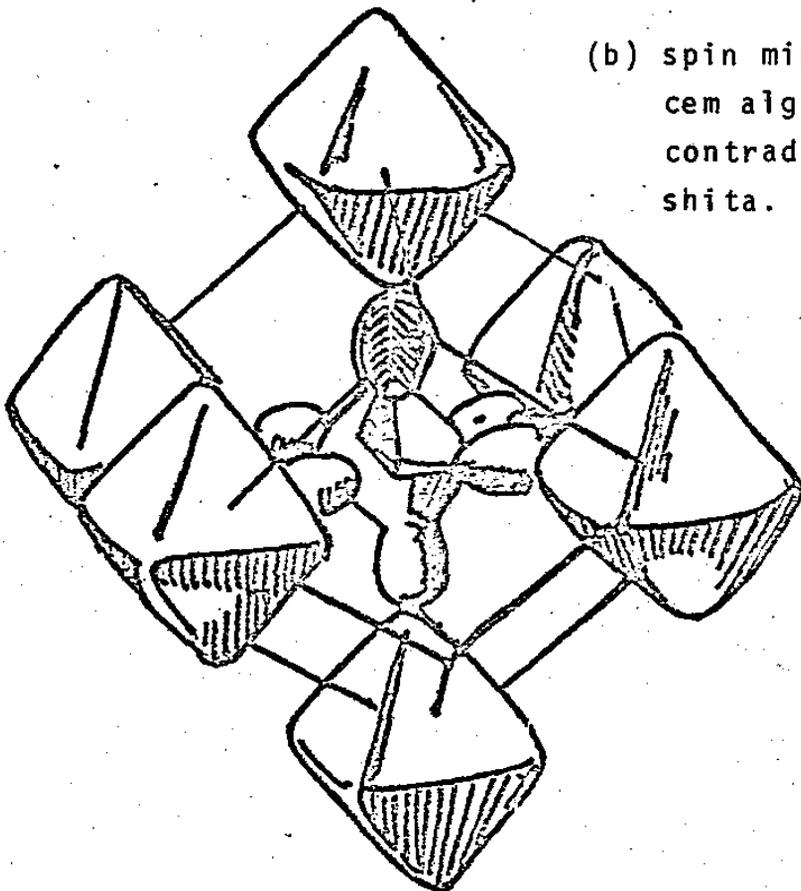
(b) SF para as bandas com spin maioria: uma superfície do tipo elétron de caráter s-d, em torno de  $\Gamma$  (Fig. 4(b)), dois bolsos de buracos em torno dos pontos H (Fig. 4(d)), e braços do tipo buraco que ligam os pontos H nas direções  $[110]$  (Fig. 4(c)).

Esta superfície de Fermi é capaz de suportar órbitas abertas em certas direções e estas foram encontradas experimentalmente em medidas de magnetoresistência<sup>36,37</sup>. A superfície de spin minoria contém uma órbita aberta ao longo de  $[001]$  (Fig. 4(a)) e na SF de spin maioria encontramos uma órbita aberta ao longo dos braços que ligam os pontos H (Fig. 4(c)). Reed e Fawcett<sup>37</sup> observaram órbitas abertas nas direções  $[110]$  e  $[001]$ , entretanto, a falta de saturação completa levou-os a pensar que haviam poucas órbitas ou que elas resultam do efeito de ruptura magnética.

A SF calculada por Wakoh e Yamashita<sup>35</sup> não está completamente de acordo com os resultados experimentais do efeito



(a) folha da SF de spin maioria que sofre alterações significativas comparada com a de Wakoh e Yamashita.



(b) spin minoria. Não aparecem algumas das folhas encontradas por Wakoh e Yamashita.

Fig. 5: SF do Fe proposta por Gold et al [38].

de de Haas-van Alphen<sup>38,39</sup>, nem com o modelo de SF proposto, tendo estas medidas como base<sup>38</sup>. As alterações na SF de spin maioria propostas por Gold et al<sup>38</sup> são as seguintes: desaparecem as órbitas abertas aos longo dos braços que unem os pontos H, surgindo um gap nas linhas H-N-H nos pontos N, como pode ser visto na Fig. 5(a). Eles propõem que exista um ponto de contato entre o braço (direção [110]) da Fig. 5(a) e a porção maior da SF de spin maioria (Fig. 4(b)). Este ponto de contato pode gerar órbitas abertas na direção [100]. Estes pontos de contato tem possibilidade de desaparecer devido a pequenos gaps provenientes da interação de spin-órbita, neste caso poderia haver formação de órbitas abertas por ruptura magnética em campos magnéticos relativamente baixos (gaps de interação de spin-órbita são da ordem de  $10^{-2}$  eV).

Tawill e Callaway<sup>40</sup> propuseram um cálculo de estrutura de bandas para o Fe ferromagnético, usando um cálculo "tight-binding" autoconsistente. Seus resultados para a SF concordam com os obtidos por Wakoh e Yamashita<sup>35</sup>. Entretanto, eles encontraram que a separação de energia devido a interação de troca entre bandas de spins diferentes não é rígida, e não somente varia sobre a banda d, como também é substancialmente menor (por um fator de 2 ou maior) para bandas de simetria p e s em relação as de simetria d. Secções da superfície de Fermi, por eles calculada, são apresentadas nas Figs. 6 e 7.

Aparecem aqui novamente, na SF de spin maioria, os braços segundo as linhas HN. A principal alteração em relação ao modelo de SF de Wakoh e Yamashita<sup>35</sup> aparece na SF de spin maioria, eles obtiveram uma porção central, em torno do ponto

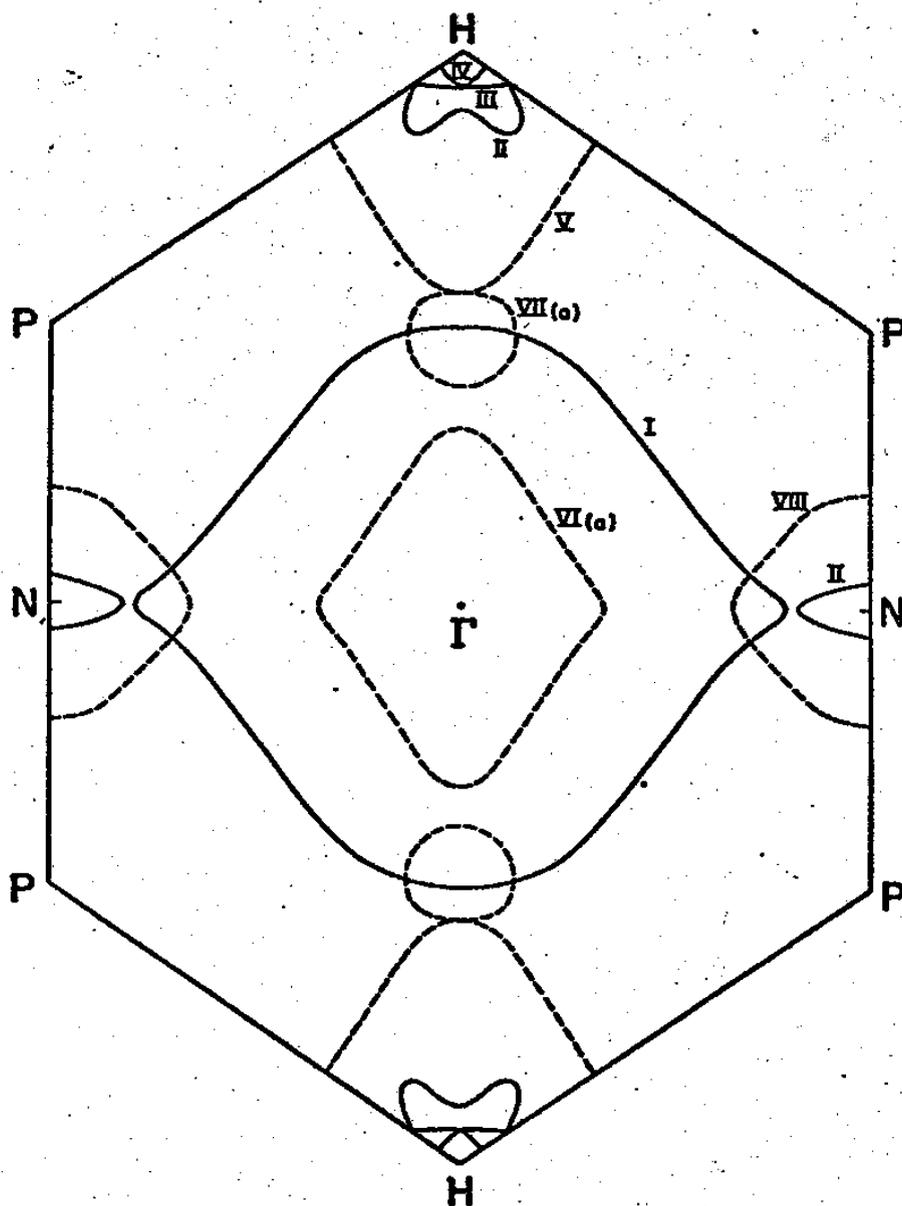
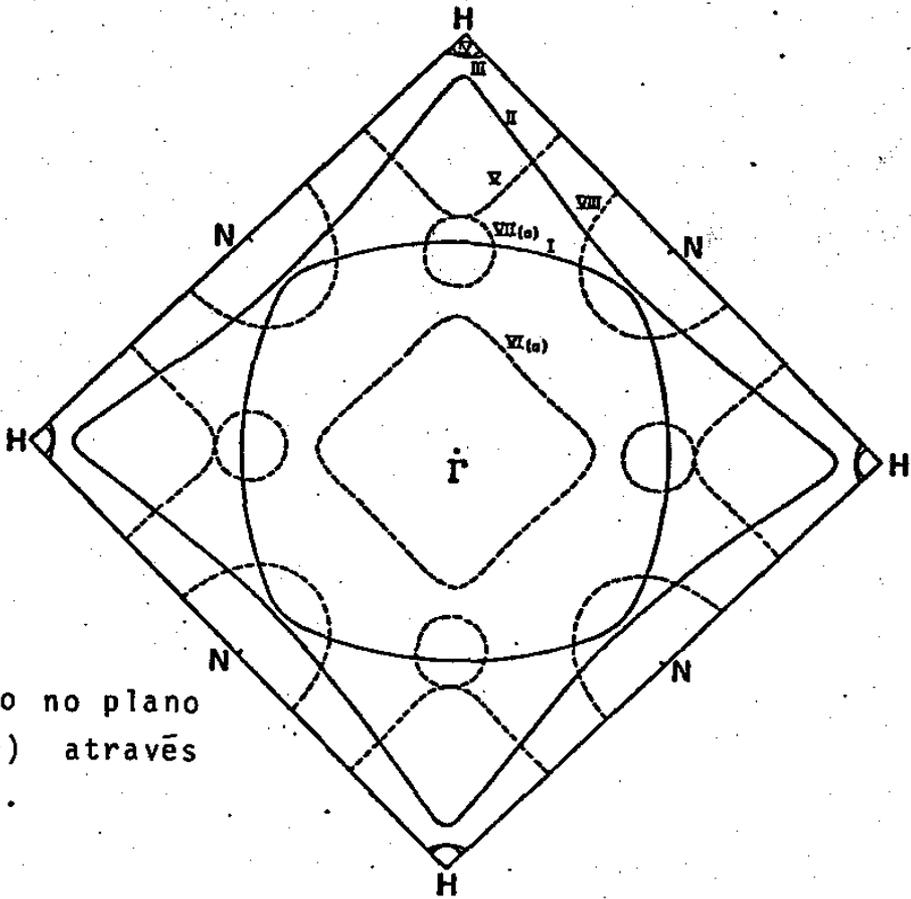
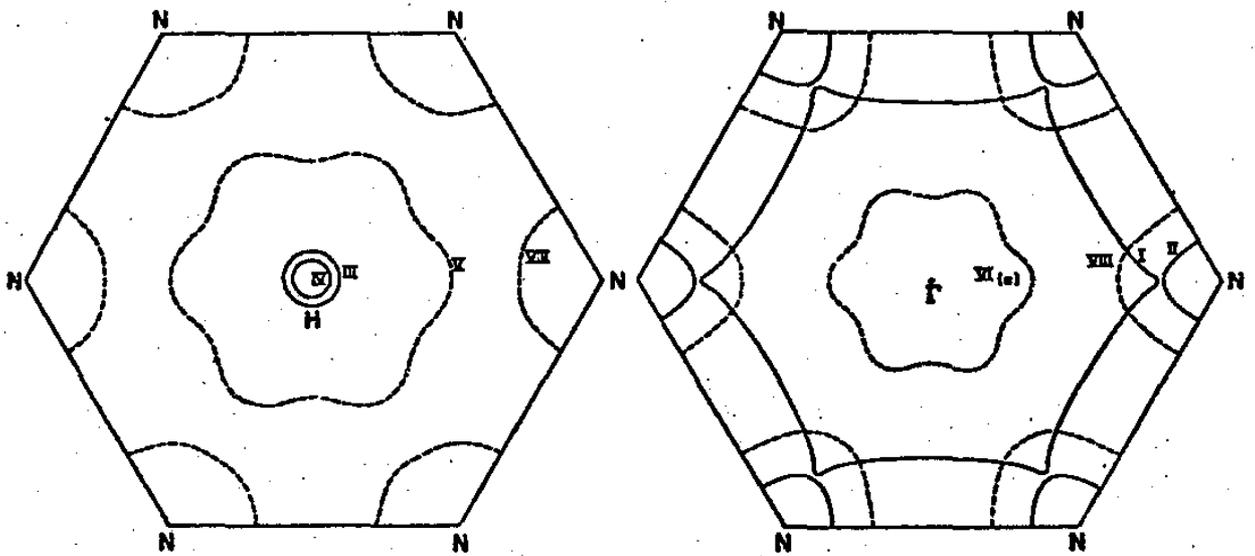


Fig. 6: secção da SF do ferro, no plano (110) que passa por  $\Gamma$ , calculada por Tawil e Callaway [40].



(a) secção no plano (100) através de r.



(b) secção no plano (111) através do ponto H.

(c) secção no plano (111) através de r.

Fig. 7: secções da SF do Fe, segundo Tawil e Callaway [40].

F, que toca o resto da SF, desaparecendo assim a possibilidade de uma órbita aberta na direção [100] (ver Figs. 6 e 7).

Como no caso anterior<sup>35</sup> se predizem mais porções da SF que as que são observadas<sup>38,39</sup>. Além disso, não foi possível a identificação de algumas das frequências de de Haas-van Alphen encontradas por Gold et al<sup>38,39</sup>. Certamente, o problema é complicado pelo acoplamento de spin-órbita que pode quebrar as degenerescências em muitos pontos e criar pequenos gaps suscetíveis de ruptura magnética, podendo assim aparecerem órbitas abertas adicionais relevantes para observações de magnetoresistência.

Um cálculo de estrutura de bandas levando em conta a interação de spin-órbita foi apresentado por Callaway et al<sup>4</sup>. Os resultados (Figs. 8, 9 e 10) são similares aqueles de Tawil e Callaway<sup>40</sup>, com a exceção de que degenerescências acidentais são removidas em alguns pontos e surgem pequenos gaps e órbitas hibridizadas em spin<sup>4</sup>. A ruptura magnética pode produzir várias classes de órbitas abertas, algumas delas observadas experimentalmente através de medidas de magnetoresistência<sup>5,41</sup>. Em seus cálculos eles não encontraram um mecanismo óbvio para a órbita aberta na direção [100] proposta no trabalho de Gold et al<sup>38</sup>, a menos que se reduza muito a separação de energia devida a interação de troca, porém com a conseqüente redução do número de magnetons<sup>4</sup>.

Com referência às propriedades de simetria na teoria de bandas dos metais ferromagnéticos, a presença de uma magnetização destrói a simetria de inversão temporal, com a conseqüente separação das bandas de spins diferentes<sup>42</sup>. Se o cam

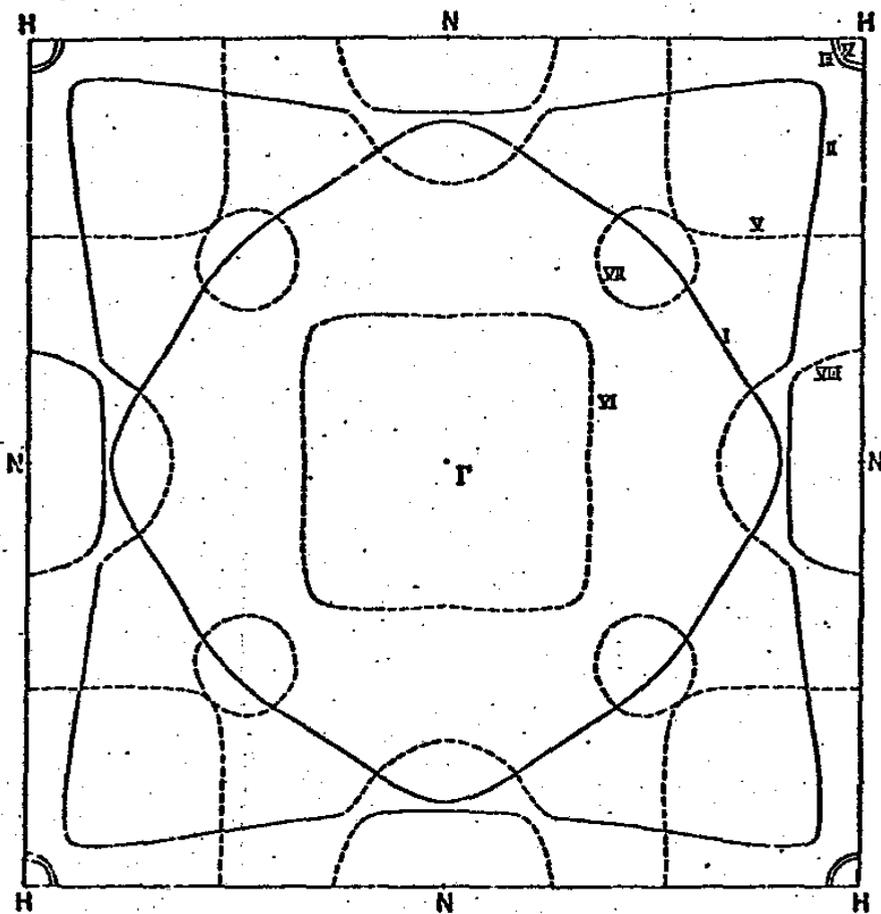


Fig. 8: SF do Fe, incluindo a interação de spin-órbita, segundo Callaway et al [4]. Secção no plano (100) através de  $\Gamma$ . A linha contínua representa estados de spin predominantemente maioria.



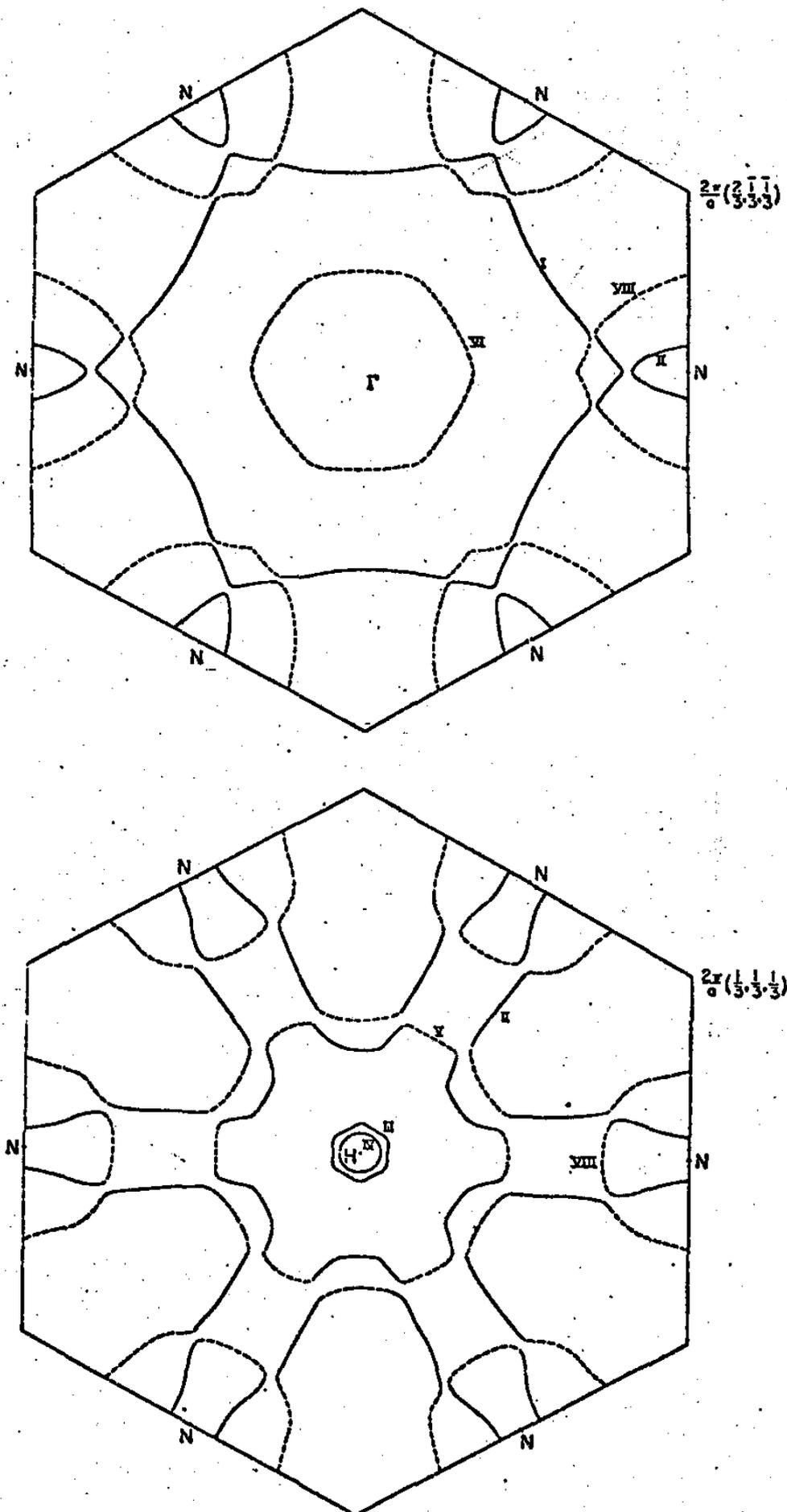


Fig. 10: SF do Fe, segundo Callaway et al [4]. (a) secção no plano (111) através de  $\Gamma$ ; (b) secção no plano (111) através do ponto H.

po está aplicado numa direção arbitrária, não existe simetria, exceto a de translação (supondo campo magnético uniforme). Porém, quando o campo é aplicado num eixo de simetria do cristal, podem aparecer degenerescências acidentais em linhas de simetria paralelas ao campo ou em planos de simetria perpendiculares a ele (ver, por exemplo, Fig. 6 e 7). A presença da interação de spin-órbita remove muitas das degenerescências acidentais e produz bandas hibridizadas em spin (Figs. 8, 9 e 10). Assim, os cálculos de estrutura de bandas dos metais ferromagnéticos devem ser compatíveis com a quase total ausência de degenerescências acidentais.

Os estudos experimentais de efeitos galvanomagnéticos no Fe para campos magnéticos muito intensos (até 215 kOe) revelaram um comportamento estranho e muito interessante<sup>5,6,41</sup>. A magnetoresistência transversal apresenta uma dependência funcional do tipo  $\Delta\rho/\rho_0 = a B^n$ , para todas as direções do campo magnético e da corrente. No intervalo intermediário,  $30 < B < 100$  kG, o expoente  $n$  toma um valor próximo de 2 para todas as direções do campo e da corrente, revelando um comportamento típico de um metal compensado, porém  $n$  decresce para campos magnéticos mais altos, alcançando valores entre 1.3 e 1.5 para 150 kG. Os valores relativos do expoente variam para as diferentes direções do campo, mas observa-se uma redução substancial de  $n$ , em todas as direções, para campos mais altos. Este comportamento é ilustrado nas Figs. 11 e 12. Para campos mais altos, até 215 kOe, as medidas revelaram que o expoente continuou decrescendo, alcançando valores menores que 1.0 para várias direções<sup>6</sup>, porém não foi observada saturação.

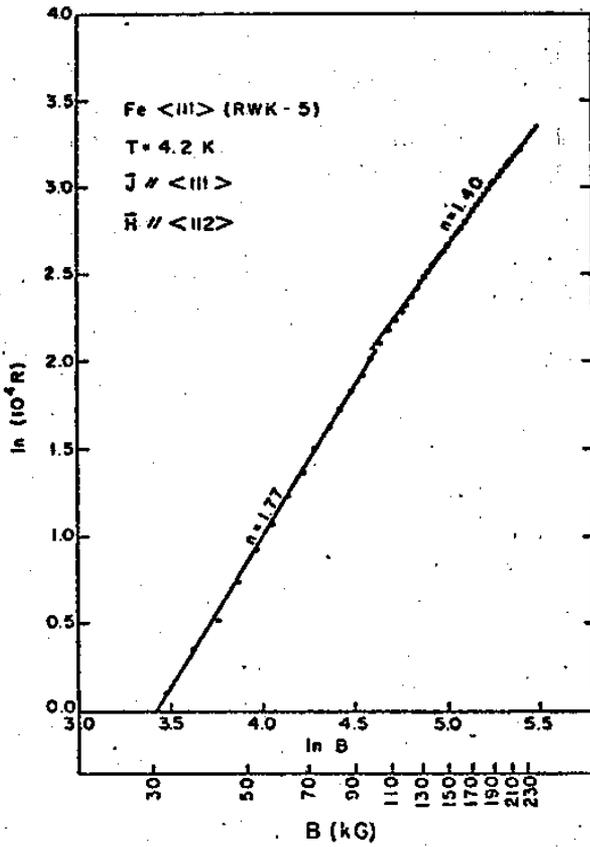


Fig. 11: magnetoresistência transversal do Fe segundo ref. [7]. O expoente na relação  $\Delta\rho/\rho_0 = a B^n$  é indicado para duas regiões do campo magnético acima e abaixo de B=110 kG (Fig. 10 da ref. [7]).

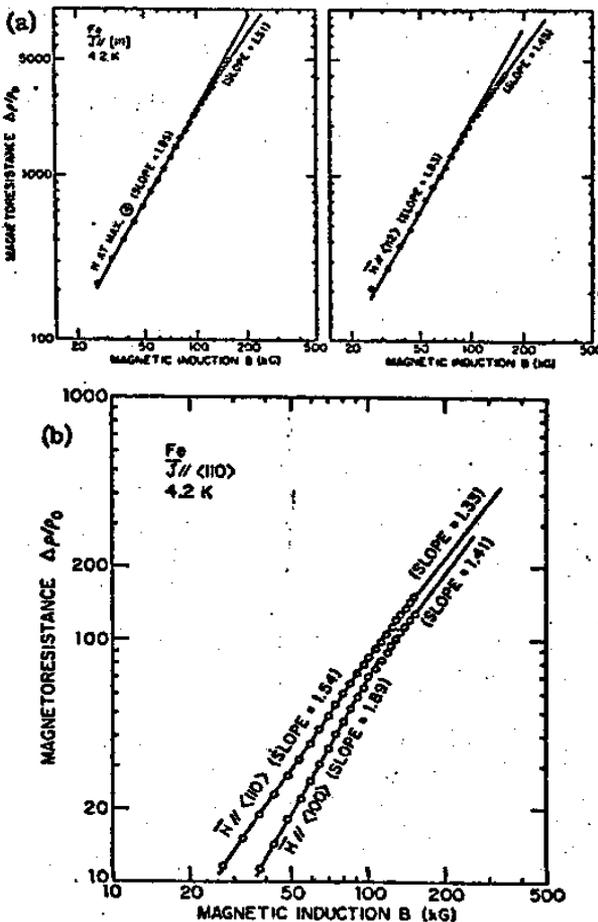


Fig. 12: magnetoresistência transversal do Fe segundo Coleman et al [5]. Note a quebra da inclinação nos gráficos log-log (Fig. 6 da ref. [5]).

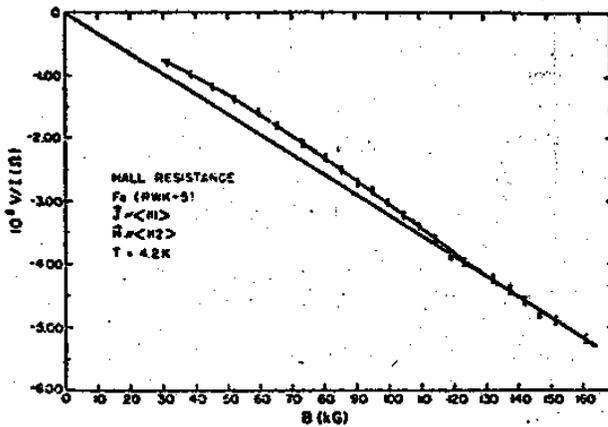


Fig. 13: resistência de Hall a 4.2 K, como função do campo magnético, no intervalo de 30-160 kG, segundo referência [7] (Fig. 7 da ref. [7]).

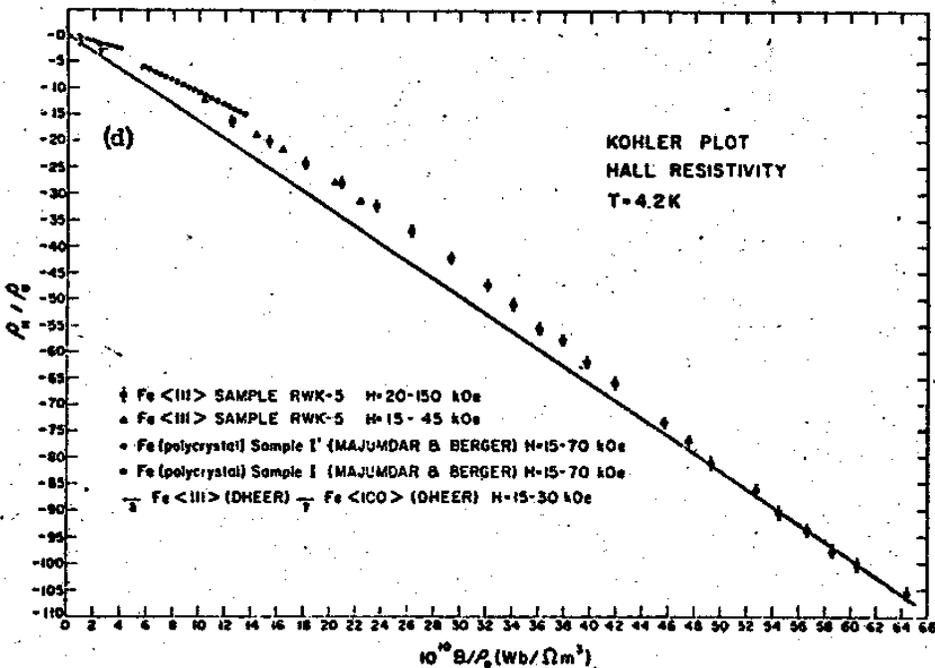


Fig. 14: gráfico de Kohler da resistividade de Hall, segundo Klaffky e Coleman (Fig. 14(d) da ref. [7]).

Este fenômeno parece estar associado com a ruptura magnética entre dois regimes orbitais que conduzem a comportamentos quadráticos ( $n = 2$ ) da magnetoresistência, sendo que o coeficiente para campos altos é menor do que aquele para campos baixos. No regime intermediário  $n$  decresce bastante, chegando a alcançar valores negativos<sup>8</sup>.

Os resultados para a resistividade de Hall, para temperaturas baixas, como função do campo magnético até 150 kOe<sup>7</sup> apresentam uma transição entre dois comportamentos lineares. Este fato é ilustrado nas Figs. 13 e 14. Como sugerimos no capítulo 2 a seguir, o efeito de ruptura magnética entre dois regimes orbitais parece explicar este comportamento (Figs. 18(a) e 18(b))<sup>9</sup>.

Outra característica que surge dos estudos experimentais é a troca de sinal no coeficiente de Hall ordinário observada quando a temperatura é variada num intervalo próximo a 70 K (para campo magnético baixo)<sup>7</sup>, associada com uma mudança no caráter (tipo elétron ou tipo buraco) da órbita com contribuição predominante para o efeito Hall. Sugerimos no capítulo 2 que este fato é devido a efeitos de temperatura sobre o tempo de relaxação efetivo, quando mecanismos de relaxação dependentes e independentes do spin são considerados<sup>10</sup>.

## CAPÍTULO 2

### PROPRIEDADES DE TRANSPORTE EM METAIS FERROMAGNÉTICOS COM CAMPO MAGNÉTICO APLICADO

#### 2.1 - Propriedades de transporte em presença de ruptura magnética

Para campos magnéticos tais que a condição de ruptura magnética seja satisfeita, podemos encontrar transições entre os vários comportamentos clássicos do tensor magnetoresistividade vistos no capítulo 1.

O pacote de ondas de um elétron segue uma trajetória aleatória na rede de órbitas acopladas produzidas por ruptura magnética. Como cada trajetória está associada a uma certa probabilidade, a probabilidade que o pacote de ondas vá de um ponto da rede de órbitas até outro ponto é dada pela soma das probabilidades de todas as possíveis trajetórias que unem estes dois pontos.

Com propósitos ilustrativos, vamos calcular a magnetoresistência produzida por uma órbita do tipo mostrado na Fig. 15(b). Este é o caso de órbitas acopladas por ruptura magnética segundo uma cadeia linear no espaço recíproco. Podemos ter uma cadeia linear de órbitas com junção dupla (Fig. 15(a)) quando a SF esférica se estende além dos limites da zo-

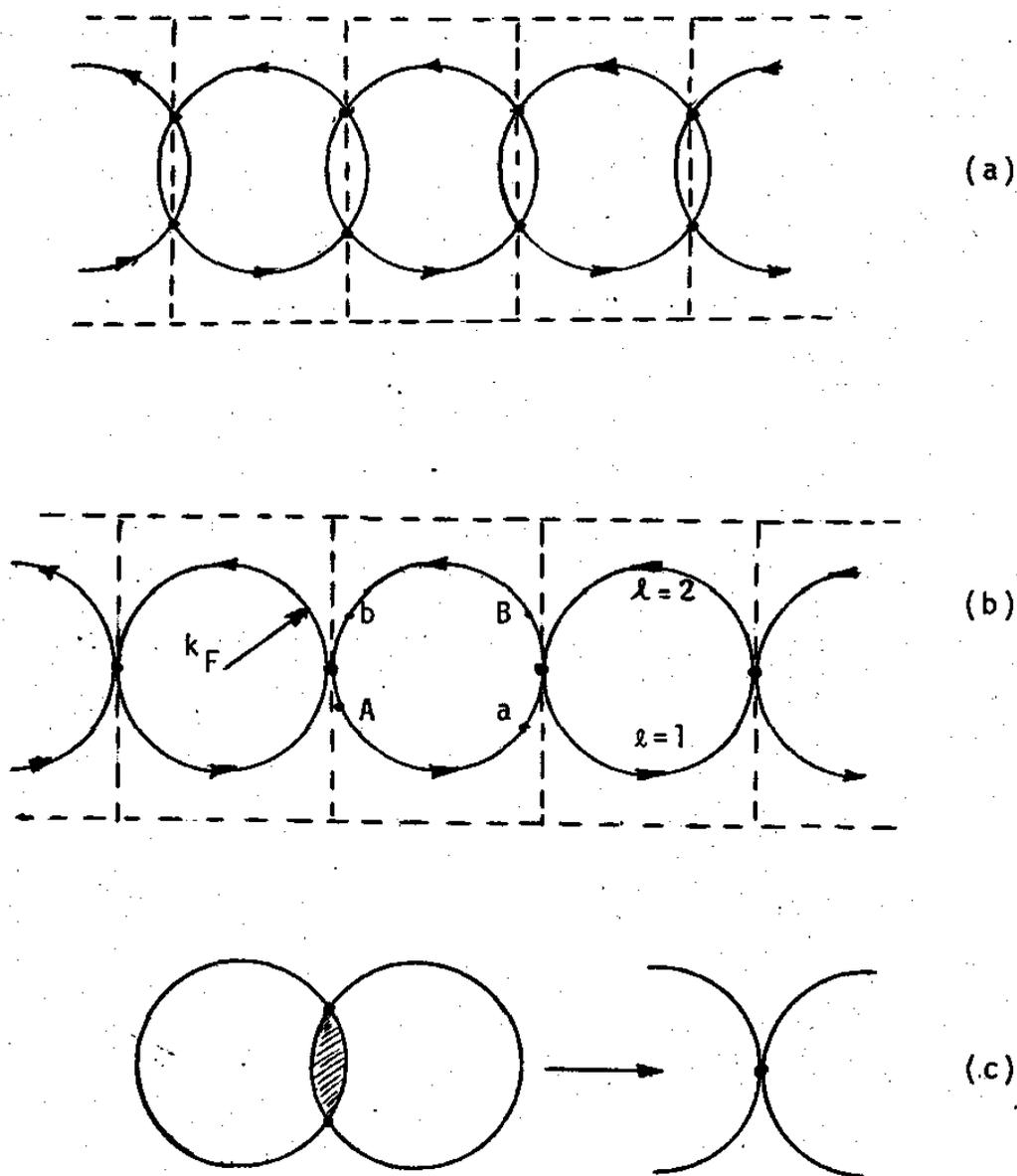


Fig. 15: (a)  $\bar{o}$  rbitas acopladas por ruptura magnética segundo cadeia linear no espaço recíproco. (b) cadeia linear no caso limite de uma junção simples. (c) limite de uma junção dupla ( $\bar{a}$  esquerda) para uma junção simples ( $\bar{a}$  direita).

na de Brillouin. O caso da junção simples pode ser considerado como um caso limite de uma junção dupla quando a distância entre os centros das esferas de Fermi torna-se igual ao seu diâmetro (Fig. 15(c)).

Seja  $\ell$  um arco da SF e sejam a e b pontos que estão situados na entrada da junção e muito próximos dela. Os pontos A e B estão na saída da junção e situados depois dela.

Se

$$g_{\ell}(\vec{k}) \equiv f_{\ell}(\vec{k}) - f^{(0)}(\vec{k}) = \phi_{\ell}(\theta_{\vec{k}}) \delta(\epsilon - \epsilon_F) \quad (2.1)$$

é o desvio a partir do valor de equilíbrio da função de distribuição no  $\ell$ -ésimo arco da SF ( $\ell = 1, 2$ ), onde  $\theta_{\vec{k}}$  é o ângulo que descreve  $\vec{k}$  no plano da órbita, para todos os pontos da órbita a menos do ponto de junção, teremos

$$\begin{aligned} \phi_{\ell}(\theta_{\vec{k}}) &= \phi_{\ell}(\theta_{0\ell}) \exp(-(\theta_{\vec{k}} - \theta_{0\ell})/\omega_c \tau) + \\ &+ \int_{\theta_{0\ell}}^{\theta_{\vec{k}}} d\theta_k \exp((\theta_{\vec{k}} - \theta_k)/\omega_c \tau) \left( -\frac{|e| v_F}{\omega_c} \frac{\vec{E} \cdot \vec{k}'}{k_F} \right) \end{aligned} \quad (2.2)$$

A expressão (2.2) é a solução da equação de Boltzmann, quando não há ruptura magnética e é equivalente às relações (1.13) e (1.14) do capítulo 1. Ela relaciona o valor da função de distribuição no ponto  $\theta_{\vec{k}}$  da órbita com seu valor no ponto inicial  $\theta_{0\ell}$ , na ausência de ruptura magnética, isto é, num mesmo arco da órbita. Todos os desvios na órbita se somam e contribuem para o desvio no ponto  $\theta_{\vec{k}}$ , e enquanto suas amplitudes decaem a distribuição de equilíbrio num tempo de relaxação  $\tau$  percorrem a órbita sob a ação do campo magnético.

Com relação a Fig. 15(b), obtemos para os arcos  $\lambda = 1$  e  $\lambda = 2$

$$\phi_1(\theta_a) = \phi_1(\theta_A) \exp((\theta_A - \theta_a)/\omega_c \tau) + \vec{\Lambda}_1(\theta_A, \theta_a) \cdot \vec{E} \quad (2.3)$$

$$\phi_2(\theta_b) = \phi_2(\theta_B) \exp((\theta_B - \theta_b)/\omega_c \tau) + \vec{\Lambda}_2(\theta_B, \theta_b) \cdot \vec{E} ,$$

onde

$$\Lambda_\lambda(\theta_i, \theta_f) \equiv \int_{\theta_i}^{\theta_f} d\theta_k \left( -\frac{|e| v_F}{\omega_c} \frac{\vec{k}}{k_F} \right) \exp((\theta_k - \theta_f)/\omega_c \tau) . \quad (2.4)$$

$\Lambda_\lambda(\theta_i, \theta_f)$  é similar ao caminho efetivo definido no cap. 1.

A inclusão da ruptura magnética aparece nas seguintes relações probabilísticas

$$\phi_1(A) = T \phi_2(b) + S \phi_1(a) \quad (2.5)$$

$$\phi_2(B) = S \phi_2(b) + T \phi_1(a) ,$$

onde  $T$  é dado pela equação (1.29) e  $S = 1 - T$ . O caso  $T = 0$  descreve uma órbita aberta e  $T = 1$  uma órbita fechada de elétron livre. Ao substituirmos  $\phi_1(a)$  e  $\phi_2(b)$  (das relações (2.3)) nas equações (2.5), estas se reduzem a um sistema de duas equações lineares para  $\phi_1(A)$  e  $\phi_2(B)$ . Conhecidos estes valores o problema está totalmente determinado porque com a relação (2.2) podemos conhecer a função de distribuição em qualquer ponto da órbita. Obtemos

$$\phi_1(A) = \frac{((1 - e^{-\gamma} S)(S \vec{\Lambda}_1 + T \vec{\Lambda}_2) + e^{-\gamma} T(T \vec{\Lambda}_1 + S \vec{\Lambda}_2)) \cdot \vec{E}}{(1 - e^{-\gamma} S)^2 - e^{-2\gamma} T^2} \quad (2.6)$$

$$\phi_2(B) = \frac{((1 - e^{-\gamma} S)(T \vec{\Lambda}_1 + S \vec{\Lambda}_2) + e^{-\gamma} T(S \vec{\Lambda}_1 + T \vec{\Lambda}_2)) \cdot \vec{E}}{(1 - e^{-\gamma} S)^2 - e^{-2\gamma} T^2}$$

com  $\gamma \equiv \pi / \omega_c \tau$ .

Com o uso da eq. (2.2) podemos calcular a função de distribuição  $\phi_{\lambda}(\theta_{\vec{k}})$  em cada um dos arcos e o tensor resistividade usando as expressões (1.15) e (1.18).

Na Fig. 16 mostramos o resultado obtido<sup>20</sup> para este modelo. A magnetoresistência transversal do gráfico corresponde a direção paralela à órbita aberta no espaço recíproco. Cada curva corresponde a um valor diferente do campo de ruptura, e inclui os casos do elétron livre ( $\omega_0 \tau = 0$ ) e da órbita aberta ( $\omega_0 \tau$  muito grande,  $\omega_0 \tau = 10^4$  no gráfico).

Cabrera e Falicov<sup>8</sup> consideraram o caso quando a ruptura se produz entre dois regimes orbitais, com magnetoresistência quadrática em B, porém com coeficientes diferentes. Seguindo o método para calcular o tensor resistividade desenvolvido nesta seção<sup>20</sup>, eles fizeram uma série de cálculos para a magnetoresistência transversal, usando dois modelos de órbitas diferentes (ilustrados na Fig. 17).

Seus resultados são mostrados, em escala logarítmica dupla, na Fig. 17, para três valores do parâmetro  $\omega_0 \tau$ , o produto da frequência de ruptura pelo tempo de relaxação (no caso da órbita aberta,  $\rho$  corresponde a componente paralela a direção de abertura da órbita no espaço recíproco), em todos os gráficos  $\rho_0$  é o valor da resistividade para campo magnético nulo.

Podemos ver que em todos os casos existe uma transição entre dois comportamentos quadráticos, passando por uma região de inclinação menor, às vezes negativa. A mudança da in-

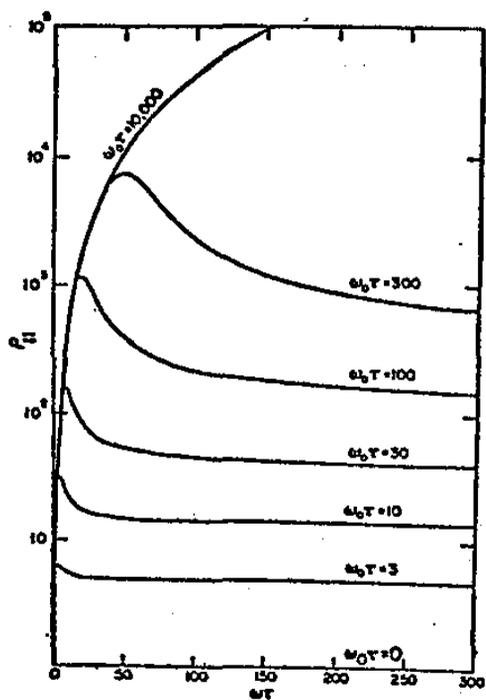


Fig. 16: magnetoresistência da cadeia linear na direção de abertura da órbita no espaço recíproco.

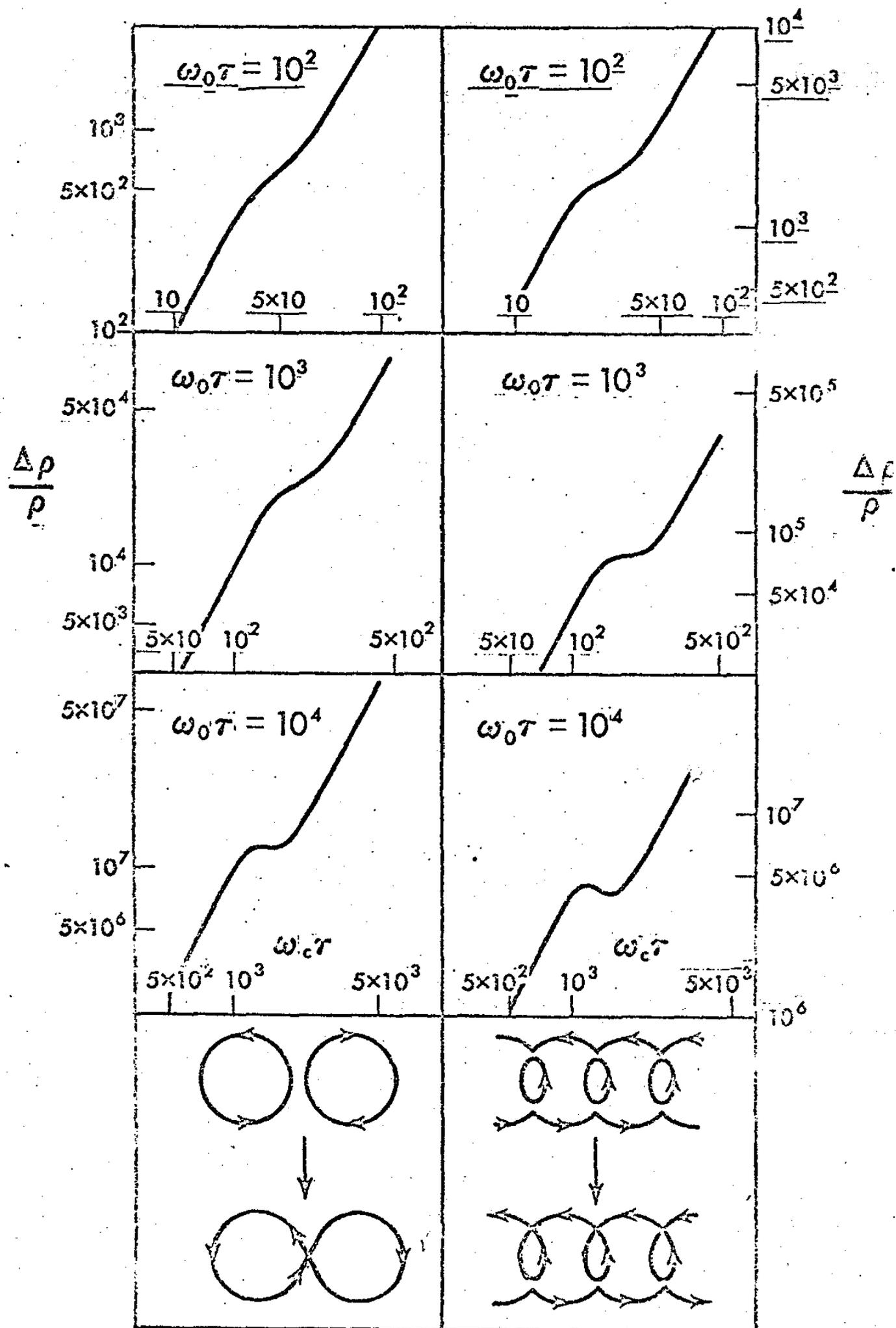


Fig. 17

clinação é mais marcante para valores maiores de  $\omega_0\tau$ . As curvas para  $\omega_0\tau$  pequeno se parecem muito com as curvas encontradas experimentalmente para o Fe<sup>5,6</sup>, descritas no final da seção 1.5 (ver Figs. 11 e 12) para campos magnéticos muito altos (até 215 kOe).

A teoria prediz que a variação da inclinação será mais acentuada e poderá alcançar valores negativos com o aumento da pureza das amostras e, portanto, com o aumento do valor de  $\omega_0\tau$ . Uma variação de uma ordem de grandeza de  $\omega_0\tau$  deveria produzir um efeito muito forte e uma alteração visível na curva de magnetoresistência transversal.

Os resultados experimentais para a resistividade de Hall do Fe<sup>6,7</sup> (Fig. 13 e 14) também apresentam evidências de que ocorra ruptura magnética entre dois regimes orbitais, com resistividade de Hall linear em B, e estes resultados estão diretamente relacionados com o comportamento observado na magnetoresistência transversal.

O efeito Hall de metais magnéticos é bem diferente daquele de metais não magnéticos<sup>43</sup>. Em adição ao efeito Hall normal ou ordinário, linear em B, existe uma grande contribuição que surge quando a amostra está magnetizada. O efeito Hall anômalo (também conhecido como efeito Hall ferromagnético, extraordinário ou espontâneo) é obtido extrapolando os dados experimentais encontrados para  $B > 4M_S$  através de

$$\rho_H = R_0 B + \rho_{aH} \quad (2.7)$$

Na literatura, o parâmetro  $R_S$  definido por

$$\rho_H = R_0 B + 4\pi M_S R_S \quad (2.8)$$

é muitas vezes introduzido para caracterizar o efeito Hall anômalo, sugerindo uma proporcionalidade entre  $\rho_{aH}$  e a magnetização de saturação  $M_S$ .

Neste trabalho estudamos a contribuição normal ou ordinária para o efeito Hall de metais ferromagnéticos, que surge como resultado da força de Lorentz sobre o movimento dos elétrons.

Calculamos a resistividade de Hall ordinária<sup>9</sup> seguindo o mesmo método desenvolvido nesta seção. De acordo com resultados experimentais para a magnetoresistência a campos baixos<sup>5,6</sup> o Fe parece ser um metal compensado. Num modelo simplificado como o modelo de duas bandas esféricas (uma esfera de Fermi para elétrons e outra para buracos) com mesma massa efetiva obtêm-se, para o caso compensado, uma resistividade de Hall nula (seção 1.3). Este é um resultado bastante patológico, uma vez que experimentalmente uma resistividade de Hall é medida.

Para remover em primeira aproximação a simetria esférica introduzimos diferentes massas efetivas (isotrópicas) para portadores do tipo elétron e do tipo buraco.

Consideramos em nosso cálculos dois modelos de órbitas:

(a) duas órbitas compensadas, uma do tipo elétron e outra do tipo buraco, quebram-se por ruptura magnética em órbitas abertas na mesma direção.

(b) duas órbitas compensadas as quais se quebram por ruptura magnética numa órbita aberta e numa órbita fechada do tipo buraco.

Os parâmetros usados no nosso cálculo são

$$\omega_0 \tau = |e| H_0 \tau / m_e c \quad , \quad (2.9)$$

$$r \equiv m_e / m_h \quad ,$$

onde  $m_e$  e  $m_h$  são as massas efetivas de elétrons e buracos, respectivamente. Todos os casos correspondem a órbitas com módulo do vetor de onda de Fermi,  $k_F$ , constante e não é incluída dependência em  $k_H$ , assim os modelos são supostos serem pequenas secções cilíndricas da Superfície de Fermi.

Os resultados da resistividade de Hall ordinária para  $\omega_0 \tau = 20$  e para vários valores do parâmetro  $r$  são mostrados nas Figs. 18 e 19. Em todos os gráficos  $\rho_0$  é dado por  $\rho_0 \equiv m_e / ((1 + r) n e^2 \tau)$ , onde  $n$  é a densidade de elétrons no cristal. Figs. 18(a) e 18(b) correspondem ao modelo (a) acima, para  $m_e < m_h$  ( $r = 0.5$ ) e  $m_e > m_h$  ( $r = 1.5$ ), respectivamente. As resistividades de Hall mostram uma transição de um comportamento linear para outro comportamento linear, passando por uma região intermediária que apresenta uma complicada dependência com o campo magnético. Este comportamento é muito similar aos resultados encontrados experimentalmente para o  $Fe^{6,7}$  (Fig. 13 e 14). As Figs. 18(a) e 18(b) estão em escala logarítmica dupla, portanto o valor positivo da resistividade de Hall é tomado.

Na Fig. 19 encontramos os resultados para o modelo

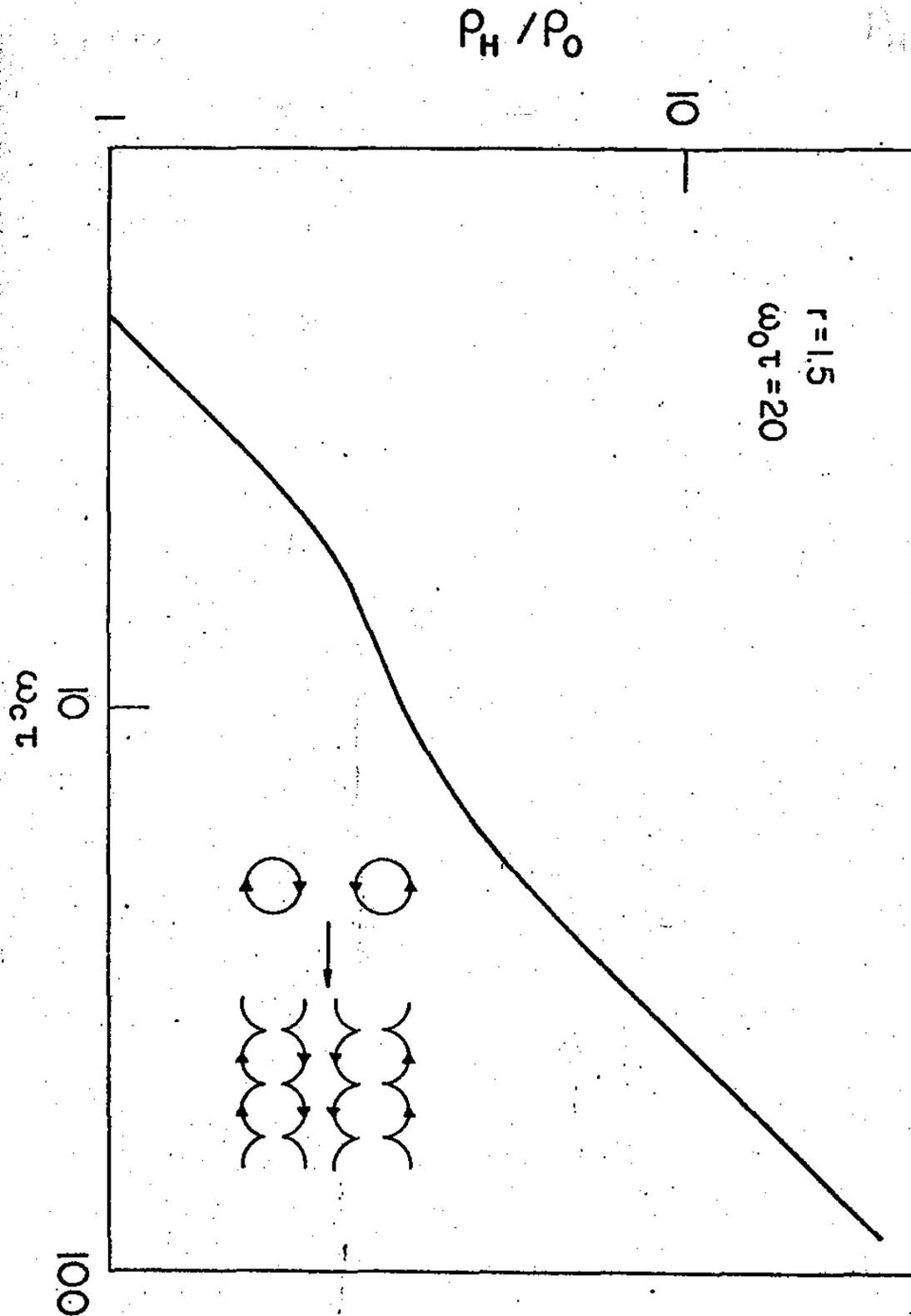


Fig. 18(a): resistividade de Hall como função de  $\omega_c \tau$  em escala logarítmica dupla para o caso  $r = 1.5$  e  $\omega_0 \tau = 20$ , quando temos uma transição de órbitas fechadas e compensadas para órbitas abertas na mesma direção. A resistividade de Hall é normalizada em relação ao valor da resistividade para campo nulo.

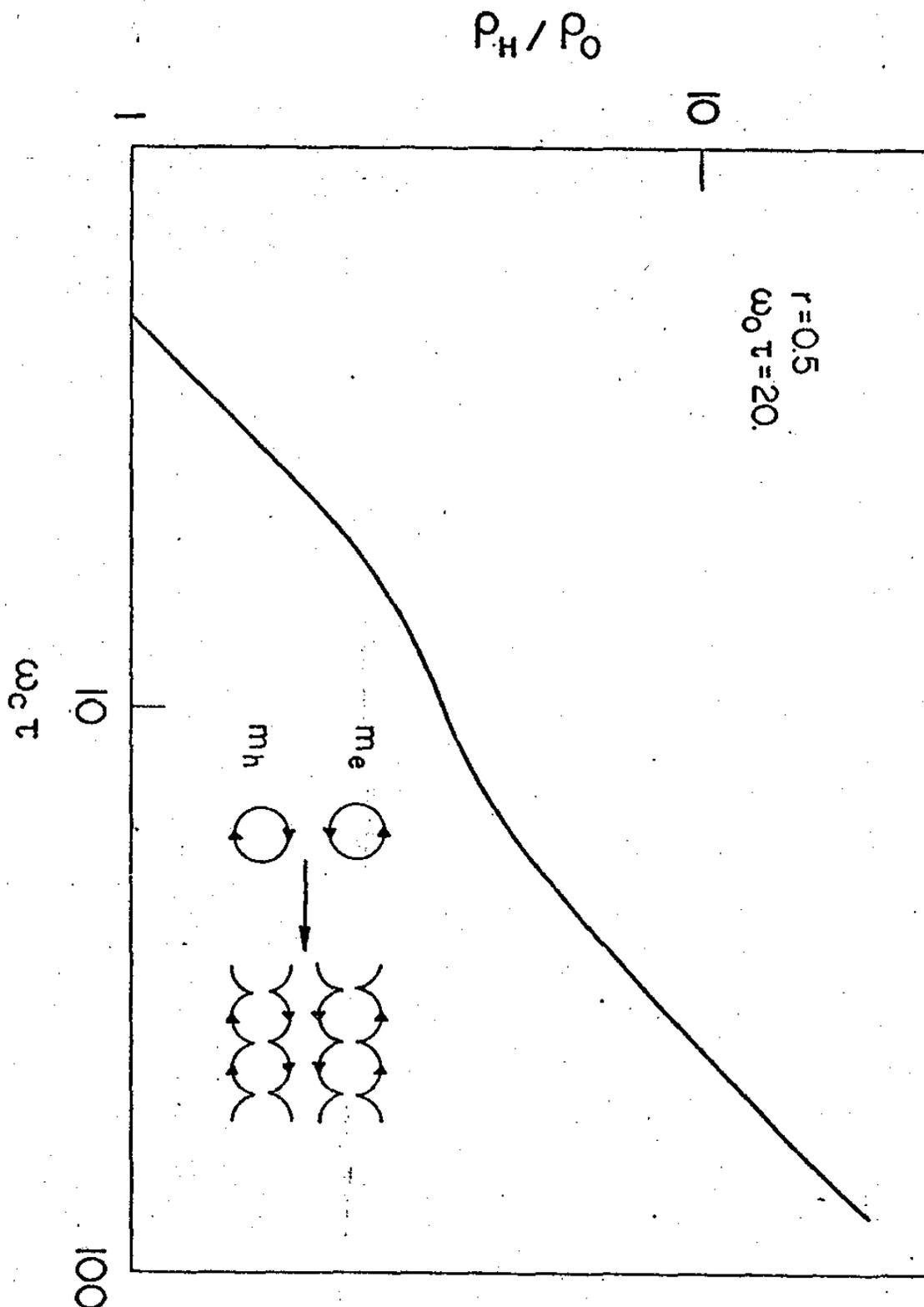


Fig. 18(b): a resistividade de Hall ( $\rho_{xy}/\rho_0$ ) como função de  $\omega_c \tau$  em escala logarítmica dupla para as mesmas topologias de órbitas mostradas na Fig. 18(a), mas para diferentes valores dos parâmetros.

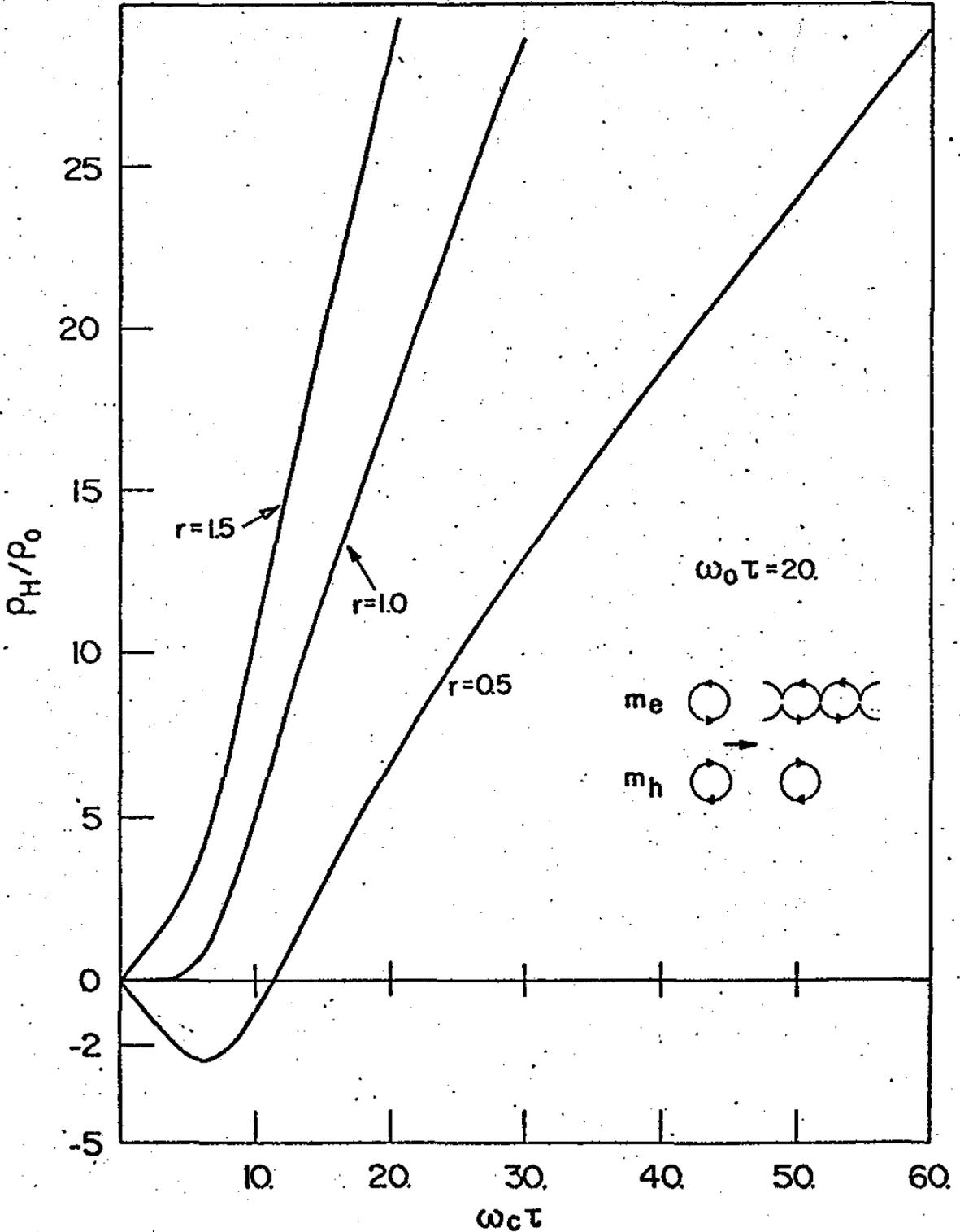


Fig. 19: a resistividade de Hall como função de  $\omega_c \tau$  para uma transição de órbitas fechadas e compensadas para duas órbitas abertas e uma fechada do tipo buraco. O parâmetro  $r$  toma os valores 0.5, 1.0 e 1.5. Para  $r = 0.5$  o comportamento para campo baixo é dominado pelo caráter de buraco e o fenômeno de ruptura magnética causa uma troca de sinal na resistividade de Hall.

(b) acima, para vários valores de  $r$ . Para  $r < 1$ , ou seja,  $m_h > m_e$ , o comportamento para campos baixos é dominado pelo caráter de buraco, enquanto que para  $m_h < m_e$ , o caráter do elétron é dominante. Para campos magnéticos altos o comportamento apresentado pela resistividade de Hall é característico de órbitas abertas, então neste limite o efeito da órbita aberta predomina sobre o das órbitas fechadas e obtemos comportamentos similares para os vários valores de  $r$ .

O caso  $r = 1$  conduz a resistividade de Hall nula para campos baixos como já havíamos visto na seção 1.3.

A superfície de Fermi do Fe ferromagnético<sup>35,40</sup> é suficientemente complicada para permitir muitos exemplos de transições entre regimes orbitais como os apresentados acima. A interação de spin-órbita remove a degenerescência acidental em alguns pontos de simetria, surgindo muitos gaps capazes de sofrer ruptura magnética<sup>4</sup>. Como um resultado ocorrem alterações na topologia da SF com conseqüentes efeitos na magnetoresistência e efeito Hall para campos altos.

Na próxima seção estudaremos o efeito de mecanismos de espalhamento dependentes do spin sobre o efeito Hall em metais ferromagnéticos.

## 2.2 - Mecanismos de espalhamento dependentes do spin

Os cálculos teóricos de estrutura de bandas para o Fe assim como os resultados experimentais sobre sua superfície de Fermi resultaram num modelo de bandas que se parece com o

modelo de Stoner<sup>30</sup>, com uma separação de energia devido a interação de troca que varia não somente entre bandas de diferente simetria mas também dentro de cada banda<sup>40</sup>.

Se a interação de spin-órbita é levada em conta<sup>4</sup>, as bandas com spin maioria e minoria se hibridizam e grande parte das degenerescências acidentais são removidas como uma consequência da redução de simetria<sup>42</sup>. Isto produz uma alteração muito grande na topologia da SF, permitindo a presença de orbitas com spin hibridizado e de muitos gaps capazes de sofrer ruptura magnética sob a aplicação de um campo magnético externo.

A estrutura de bandas, que resulta do efeito combinado da interação de troca e do acoplamento de spin-órbita, é muito sensível à orientação da magnetização, particularmente em alguns pontos de maior simetria<sup>42</sup>.

O efeito da influência da separação de energia devido a interação de troca sobre a magnetoresistência transversal, através de mecanismos de relaxação, foi estudada recentemente por Cabrera e Falicov<sup>44</sup>. Nosso objetivo nesta seção é estudar, dentro do modelo por eles desenvolvido, o efeito de novos mecanismos de espalhamento sobre o efeito Hall em metais ferromagnéticos.

Muitos processos elásticos são tais que o elétron conserva seu spin. Isto significa que uma partícula na SF de um dado spin somente pode ser espalhada, através de uma destas colisões, para outro ponto da SF de mesmo spin. Este mecanismo que conserva o spin é caracterizado por um tempo de relaxa-

ção,  $\tau$ , relativamente curto. Entretanto, a interação de spin-órbita, embora fraca, está presente e torna possíveis as colisões com troca de spin. Este espalhamento dependente do spin é caracterizado por um segundo tempo de relaxação  $\tau_s$ , relativamente longo ( $\tau_s > \tau$ , e em muitos casos  $\tau_s \gg \tau$ ). Estas colisões com troca de spin são responsáveis pelo equilíbrio final encontrado pelos elétrons com spin maioria e minoria.

Na ausência de forças externas, uma perturbação criada na distribuição de equilíbrio decairá primeiro numa distribuição uniforme em cada spin num tempo  $\tau$  (porque o mecanismo de espalhamento ordinário não pode trocar o spin), e depois a distribuição de equilíbrio é alcançada num tempo  $\tau_s$ . O mecanismo de relaxação é mostrado no gráfico da Fig. 20, para um modelo simples de superfície de Fermi. Para tempos intermediários  $\tau < t < \tau_s$  temos um estado de quase-equilíbrio que consiste numa distribuição uniforme de elétrons na SF de cada spin, porém sem equilíbrio entre os diferentes spins, numa situação equivalente àquela que produziria uma variação da separação de energia devido a interação de troca (exchange splitting) na estrutura de bandas.

A seguir analisamos as novas equações de evolução (rate equations). Estas são formuladas de maneira autoconsistente, de modo que haja conservação do número de partículas em qualquer instante de tempo. A formulação é completamente geral e pode ser aplicada a qualquer problema similar onde dois mecanismos diferentes de espalhamento combinam-se de tal forma que a perturbação decai ao equilíbrio passando por um estado intermediário de quase-equilíbrio ( $\tau_s/\tau \gg 1$ ).

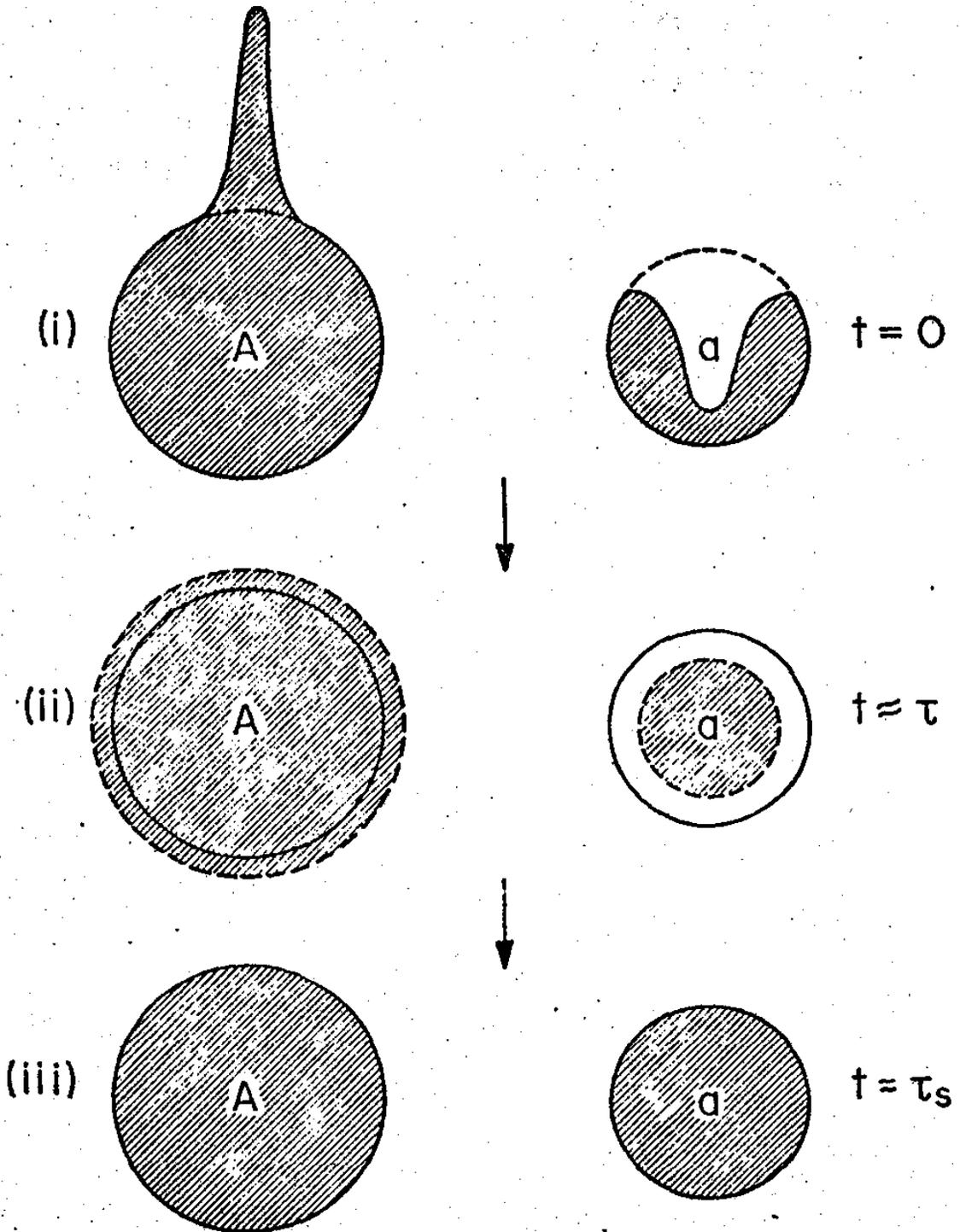


Fig. 20.

Para formular a teoria de maneira geral, chamemos  $g_L(\vec{k}) \delta(\epsilon_L(\vec{k}) - \epsilon_F) (= f_L(\vec{k}) - f^{(0)}(\vec{k}))$ , onde  $L = A$  ou  $a$ , os desvios da função de distribuição desde seu valor no equilíbrio. Estes desvios estão localizados na SF no espaço recíproco, e os índices  $A$  e  $a$  indicam dois conjuntos diferentes de estados (no nosso caso, spin maioria e minoria, respectivamente).

Cada um destes estados,  $A$  e  $a$ , estão fortemente acoplados separadamente em cada uma das folhas da SF, mas estão fracamente acoplados entre si através de um mecanismo de espalhamento extra, caracterizado por um tempo de relaxação  $\tau_s$  (no nosso caso,  $\tau_s$  é o tempo típico de espalhamento que troca o spin).

Definimos agora distribuições uniformes sobre as superfícies de Fermi  $L$

$$n_L \equiv \Delta_L \int \delta(\epsilon_L(\vec{k}) - \epsilon_F) d^3k \equiv \int g_L(\vec{k}) \delta(\epsilon_L(\vec{k}) - \epsilon_F) d^3k \quad (2.10)$$

Conservação do número de partículas requer que

$$\sum_L \int g_L(\vec{k}) \delta(\epsilon_L(\vec{k}) - \epsilon_F) d^3k \equiv 0 \quad (2.11)$$

independentemente do tempo.

Na ausência de forças externas, a evolução desta distribuição uniforme é descrita por

$$dn_L/dt = -n_L/\tau_s \quad (2.12)$$

As equações (2.10) a (2.12) dão

$$n_A + n_a = d/dt (n_A + n_a) = 0 \quad (2.13)$$

O mecanismo ilustrado na Fig. 20 dá a seguinte equação de evolução para  $g_L(k)$

$$\partial/\partial t g_L(\vec{k}) = -(g_L(\vec{k}) - \Delta_L)/\tau + F_L(\vec{k}) \quad , \quad (2.14)$$

onde o primeiro termo do lado direito descreve uma relaxação rápida de  $g_L(k)$  para uma distribuição uniforme  $\Delta_L$  e  $F_L(k)$  deve ser determinado de forma autoconsistente. A integração de (2.14) e o uso de (2.10) e (2.12) dá

$$\begin{aligned} \partial/\partial t \int g_L(\vec{k}) \delta(\epsilon_L(\vec{k}) - \epsilon_F) d^3k &= dn_L/dt = -n_L/\tau_s = \\ &= \int F_L(\vec{k}) \delta(\epsilon_L(\vec{k}) - \epsilon_F) d^3k \end{aligned} \quad (2.15)$$

Se supomos que  $F_L(\vec{k})$  é uniforme sobre a SF as eqs. (2.10) e (2.15) dão

$$F_L = -\Delta_L/\tau_s \quad (2.16)$$

e podemos escrever a relação (2.14) como

$$\partial/\partial t g_L(\vec{k}) = -g_L(\vec{k})/\tau + \Delta_L/\tau_{ef} \quad , \quad (2.17)$$

onde  $\tau_{ef}$  é um tempo de relaxação efetivo definido por

$$(\tau_{ef})^{-1} \equiv (\tau)^{-1} - (\tau_s)^{-1} \quad (2.18)$$

O caso normal, quando não existe diferença entre os conjuntos de estados A e a (não se distinguem os spins), corresponde ao limite  $\tau_s \rightarrow \tau$ . Neste limite  $\tau_{ef} \rightarrow \infty$  e desaparece o segundo termo do lado direito da equação (2.17), reduzindo-se esta usual equação para o termo de colisão da equação de Boltzmann na aproximação de tempo de relaxação.

A equação (2.10)-(2.17), uma equação integrodiferencial pode ser resolvida agora e conduz a

$$g_L(\vec{k}, t) = \Delta_{L0} e^{-(t/\tau_s)} + C_L(\vec{k}) e^{-(t/\tau)} \quad , \quad (2.19)$$

onde as constantes  $\Delta_{L0}$  satisfazem a equação

$$\Delta_{A0} \int \delta(\epsilon_A(\vec{k}) - \epsilon_F) d^3k = - \Delta_{a0} \int \delta(\epsilon_a(\vec{k}) - \epsilon_F) d^3k \quad , \quad (2.20)$$

e as funções  $C_L(k)$  são tais que

$$\int C_L(\vec{k}) \delta(\epsilon_L(\vec{k}) - \epsilon_F) d^3k = 0 \quad . \quad (2.21)$$

A função  $g_L(\vec{k})$  em  $t = 0$  é

$$g_L(\vec{k}, 0) = \Delta_{L0} + C_L(\vec{k}) \quad , \quad (2.22)$$

e decai, para  $(\tau/\tau_s) \ll 1$ , a  $\Delta_{L0}$  num tempo  $\tau$  relativamente curto, e finalmente alcança o equilíbrio num tempo muito maior  $\tau_s$ .

Devemos agora introduzir o novo termo da equação (2.17) no termo de colisão da equação de Boltzmann.

Como os spins estão hibridizados pelo acoplamento de spin-órbita, a função de distribuição  $\underline{f}(\vec{k})$  pode ser escrita como uma matriz 2x2 no espaço de spin. Em termos de  $\underline{f}(\vec{k})$ , a densidade de corrente de partículas pode ser escrita como

$$\underline{J} = -|e| \sum_{\alpha\beta} f_{\alpha\alpha}(v, \vec{k}) \vec{v}_{\alpha\beta} \quad , \quad (2.23)$$

e  $n_A$  e  $n_a$ , as densidades de partículas de spin maioria e minoria, são dadas pelos termos diagonais de  $\underline{f}(\vec{k})$

$$n_A = \sum_{v\vec{k}} f_{11}(v, \vec{k}), \quad n_a = \sum_{v\vec{k}} f_{22}(v, \vec{k}) \quad , \quad (2.24)$$

onde  $\alpha$  é um índice de spin,  $v$  é um índice de banda e  $\vec{v}_{\alpha\beta}$  é a

velocidade de grupo dada por

$$\vec{v}_{\alpha\nu\vec{k}} = 1/\hbar \nabla_{\vec{k}} \epsilon_{\alpha\nu}(\vec{k}) \quad (2.25)$$

A equação de transporte tem a seguinte forma geral (omitimos de agora em diante o índice de banda  $\nu$ )

$$\begin{aligned} \partial/\partial t f_{\alpha\beta}(\vec{k}) + \vec{F}^{\alpha\beta,\lambda\mu} \cdot \nabla_{\vec{k}} f_{\lambda\mu}(\vec{k}) = \\ = (-\partial/\partial t f_{\alpha\beta}(\vec{k}))_{\text{col}} \end{aligned} \quad (2.26)$$

onde  $\vec{F}^{\alpha\beta,\lambda\mu}$  é uma força externa generalizada que pode misturar os estados de spin (a convenção de soma foi usada na equação (2.26)).

Como o acoplamento de spin-órbita é uma interação fraca (produz gaps da ordem de  $10^{-2}$  eV)<sup>4</sup>, podemos substituir a região hibridizada da órbita eletrônica no espaço recíproco por uma junção de ruptura magnética. Neste caso em todos os pontos, exceto nas junções, somente os elementos diagonais de  $\underline{f}(\vec{k})$  são diferentes de zero e a eq. (2.26) se reduz a equações desacopladas para  $f_{11}(\vec{k})$  e  $f_{22}(\vec{k})$  ao longo dos segmentos de órbitas onde os elétrons não sofrem ruptura magnética. As junções misturam as duas funções de distribuição. Denominamos agora  $f_A(\vec{k})$  e  $f_a(\vec{k})$  aos elementos diagonais de  $\underline{f}(\vec{k})$ .

Para superfícies de Fermi esféricas temos para o desvio da função de distribuição de seu valor no equilíbrio

$$g_L(\vec{k}) = g_L(\theta, \phi) \quad (2.27)$$

onde  $\theta$  e  $\phi$  são os ângulos polares para a esfera.

Quando aplicamos um campo magnético externo pode-

mos descrever o espaço  $\vec{k}$  pelo seguinte conjunto de variáveis  $(\epsilon, k_H, \phi)$ <sup>45</sup>, onde  $\epsilon$  é uma energia constante e igual a energia de Fermi,  $k_H$  é a projeção do vetor de onda  $\vec{k}$  ao longo da direção do campo magnético, também é constante, e  $\phi$  é um ângulo que descreve a órbita no plano perpendicular ao campo magnético.

Na ausência de ruptura magnética, a equação para  $g_L(\vec{k})$  no estado estacionário, levando-se em conta o termo de colisão (relação (2.17)), é dada por<sup>45</sup>

$$\begin{aligned} \partial/\partial\phi g_L(\phi) + 1/\omega_c\tau g_L(\phi) &= \\ &= -|e| v_{FL}/\omega_c (\vec{E}\cdot\vec{k}/k_{FL}) + \Delta_L/\omega_c\tau e f \end{aligned} \quad (2.28)$$

A equação acima está linearizada no campo elétrico  $\vec{E}$  (regime da lei de Ohm), porém considera os efeitos do campo magnético (curvatura) em todas as ordens.

Integração da equação (2.28) conduz a

$$\begin{aligned} g_L(\phi) &= g_L(\phi_0) \exp(-(\phi - \phi_0)/\omega_c\tau) + \\ &+ \int_{\phi_0}^{\phi} d\phi' \exp((\phi' - \phi)/\omega_c\tau) (-|e| v_{FL}/\omega_c (\vec{E}\cdot\vec{k}'/k_{FL}) + \Delta_L/\omega_c\tau e f) , \end{aligned} \quad (2.29)$$

que relaciona a função  $g_L$  no ponto  $\phi$  da órbita com seu valor no ponto  $\phi_0$ , na ausência de ruptura magnética. O desvio  $g_L$  num dado ponto  $\phi$  pode ser obtido como a soma dos desvios em outros pontos da órbita; as amplitudes decaem com um tempo de relaxação  $\tau$  a uma distribuição uniforme que conserva o spin. Esta distribuição decai com um tempo  $\tau_s$  a distribuição de equilíbrio; ao mesmo tempo os desvios são impulsionados ao longo das

órbitas pelo campo magnético.

A fim de permitir efeitos de ruptura magnética, supomos que em certos pontos das órbitas possam ocorrer transições interbandas com uma probabilidade

$$T = 1 - S = \exp(-H_0/H) \quad , \quad (2.30)$$

onde  $H_0$  é o campo de ruptura (equação (1.30)).

O cálculo dos tensores galvanomagnéticos segue o mesmo tratamento de Falicov e Sievert<sup>20</sup> (descrito nas seções 1.2 e 2.1). As junções de ruptura magnética dividem as órbitas acopladas em  $n$  segmentos não equivalentes e o problema se reduz a um conjunto de  $n$  equações lineares para os valores iniciais  $g_L^{(n)}(\phi_0)$  nas junções. Com o conhecimento destes valores, os parâmetros  $\Delta_L$  são determinados autoconsistentemente através das relações (2.10) e (2.13), a fim de conservar partículas em qualquer instante de tempo.

Cabrera e Falicov<sup>44</sup> usaram vários modelos de órbitas, incluindo ou não ruptura magnética, para o cálculo da magnetoresistência transversal. Seus resultados são mostrados nas Figs. 21-24. Todas as curvas estão normalizadas em relação a resistividade para campo nulo,  $\rho_0$ , no caso normal ( $\tau = \tau_s$ , ou seja,  $\tau/\tau_{ef} = 0$ ), e são apresentados como função do parâmetro  $\omega_c \tau$ ; foram feitos cálculos para três valores do parâmetro  $\tau/\tau_{ef}$ . Se o modelo é compensado ou não também é indicado nas figuras, compensado quando  $k_{F1} = k_{F2}$  e não compensado quando  $k_{F1} \neq k_{F2}$ , desde que  $n \propto k_F^2$ .

Como pode ser visto nas Figs. 21-24, o novo meca-

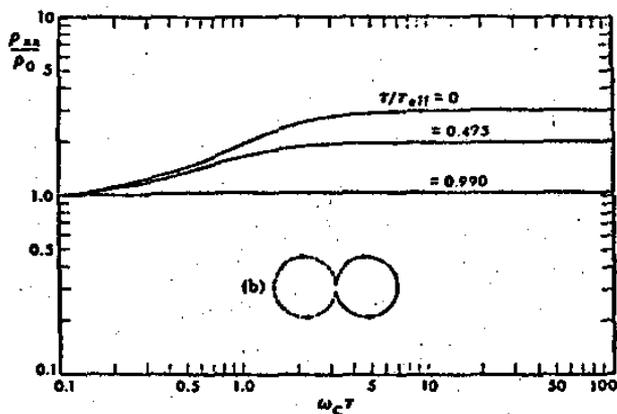
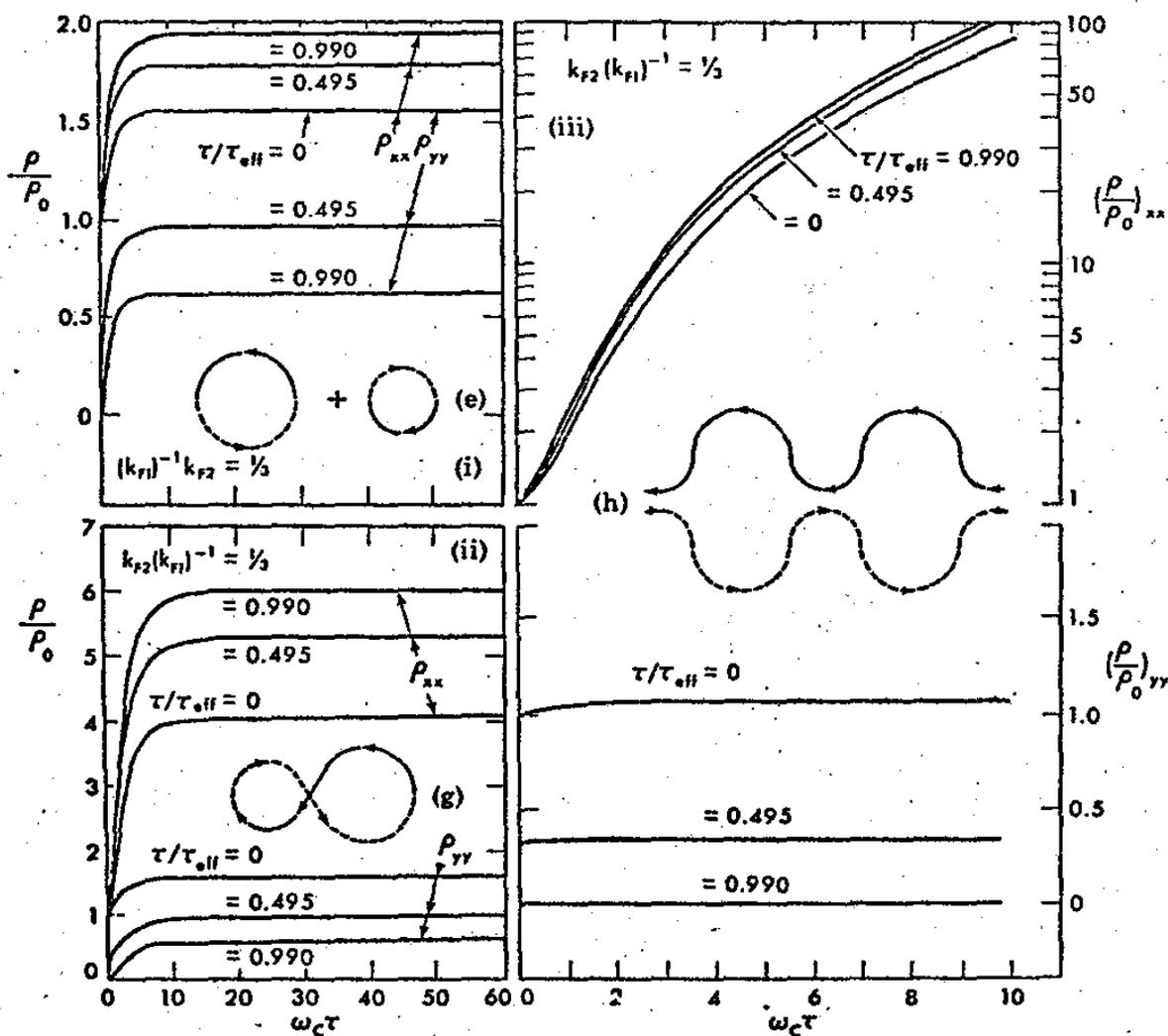


Fig. 21: magnetoresistância transversal  $\rho_{xx}/\rho_0$  como função de  $\omega_c\tau$  em escala logarítmica dupla.



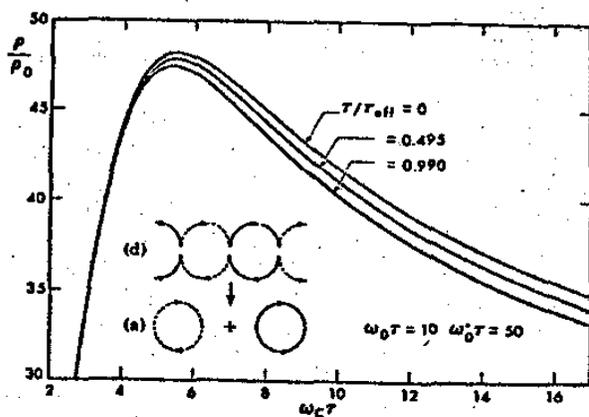


Fig. 23: magnetoresistência transversal como função de  $\omega_c \tau$ , incluindo efeitos de ruptura magnética. A resistividade vai de um regime quadrático à saturação (Fig. 6 da ref. [44]).

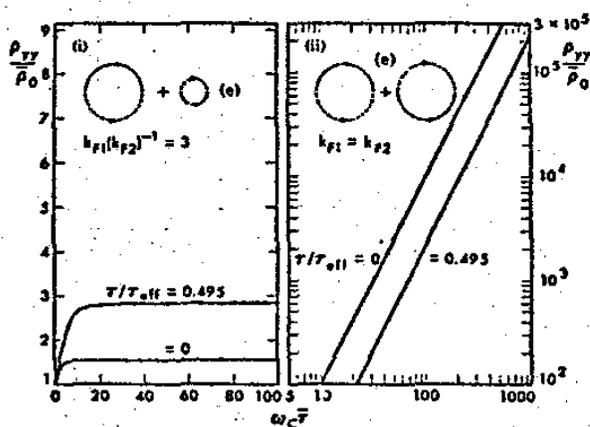


Fig. 24: magnetoresistência transversal renormalizada  $\rho_{xx}/\rho_0$  como função do parâmetro efetivo  $\omega_c \tau$ . (i)  $k_{F1} = 3k_{F2}$ ; (ii)  $k_{F1} = k_{F2}$  (caso compensado) (Fig. 9 da ref. [44]).

nismo de relaxação não conduz a nenhum efeito qualitativo novo no comportamento da magnetoresistência como função de  $\omega_c \tau$ . As principais alterações, quando  $\Delta_L \neq 0$ , reduzem-se a modificações dos valores de saturação e dos coeficientes dos regimes quadráticos.

Um  $\Delta_L$  (definido na eq. (2.10)) não nulo produz uma variação no número de elétrons com spin para cima e para baixo, produzindo assim uma pequena modificação das propriedades ferromagnéticas equivalente a uma variação da separação de energia devido a interação de troca. Um processo como o mostrado na Fig. 20 é um processo que aumenta o ferromagnetismo, processos com o efeito oposto, redução do ferromagnetismo, também são possíveis.

Nossos cálculos para o efeito Hall, dentro do modelo desenvolvido acima, compreendem dois casos diferentes:

(a) a constante de Hall ordinária é calculada incluindo os dois mecanismos de relaxação acima descritos<sup>10</sup>;

(b) a resistividade de Hall é calculada incluindo os dois mecanismos de relaxação na presença de ruptura magnética<sup>46</sup>.

Os resultados de cálculos para vários modelos da topologia da Superfície de Fermi, para os dois casos acima, são apresentados nas subseções seguintes.

### 2.2.a - Efeito Hall ordinário incluindo dois mecanismos de relaxação

O efeito combinado das forças impulsoras e dos me-

canismos de relaxação causa uma variação no número de elétrons com spin maioria e minoria. Dependendo da topologia da Superfície de Fermi, encontramos em nossos resultados que esta variação pode produzir modificações, tanto quantitativas como qualitativas (tal como uma inversão de sinal), na constante de Hall ordinária. Um efeito similar é encontrado quando o efeito de ruptura magnética modifica o caráter de órbitas eletrônicas do tipo elétron para buraco ou vice-versa, ou quando uma órbita aberta é formada<sup>9,20</sup>.

Nesta seção estamos tratando com um efeito que está inteiramente ligado aos mecanismos de relaxação considerados e não está relacionado com alterações na topologia da Superfície de Fermi.

Entretanto, em metais ferromagnéticos reais, com Superfícies de Fermi complexas, hibridizadas em spin pelo acoplamento de spin-órbita e daí com muitos gaps capazes de sofrer ruptura magnética<sup>4</sup>, os dois efeitos apareceriam superpostos e um cuidado especial deve ser tomado a fim de distinguir as diferentes contribuições.

Em nossos cálculos usamos o modelo de duas bandas com Superfícies de Fermi esféricas, e como estamos interessados no caso do Fe<sup>5,6</sup>, supomos iguais concentrações para portadores do tipo elétron e do tipo buraco, isto é,  $n_h = n_e = n$ . Como na seção 2.1, consideramos massas efetivas (isotrópicas) diferentes para elétrons e buracos, para remover em primeira aproximação a simetria esférica (muito conveniente para efeitos de cálculos).

Definimos o parâmetro  $\alpha$  como

$$\alpha \equiv \tau/\tau_{ef} \equiv 1 - (\tau/\tau_s) \quad (2.31)$$

Desde que  $0 \leq \tau/\tau_s \leq 1$ , os valores permitidos de  $\alpha$  estão definidos no intervalo

$$0 \leq \alpha \leq 1 \quad (2.32)$$

O valor limite  $\alpha = 0$  corresponde ao caso normal, quando não fazemos distinção entre os spins (seção 2.1), e  $\alpha = 1$  é o caso extremo quando não existe equilíbrio final entre os spins diferentes.

Os modelos aqui considerados são mostrados na Fig. 25.

O tensor resistividade  $\bar{e}$  é calculado como uma função de  $\chi = \omega_c \tau$  e em termos dos parâmetros  $\alpha$  e  $r$  ( $\equiv m_e/m_h$ ).

A constante de Hall  $\bar{e}$  é calculada através da definição<sup>43</sup>

$$R_H(\vec{H}) \equiv R_0(\rho_{xy}(\vec{H}) - \rho_{xy}(-\vec{H}))/2\rho_0 \omega_c \tau, \quad (2.33)$$

onde

$$R_0 \equiv 1/((1+r)(n|e|c)),$$

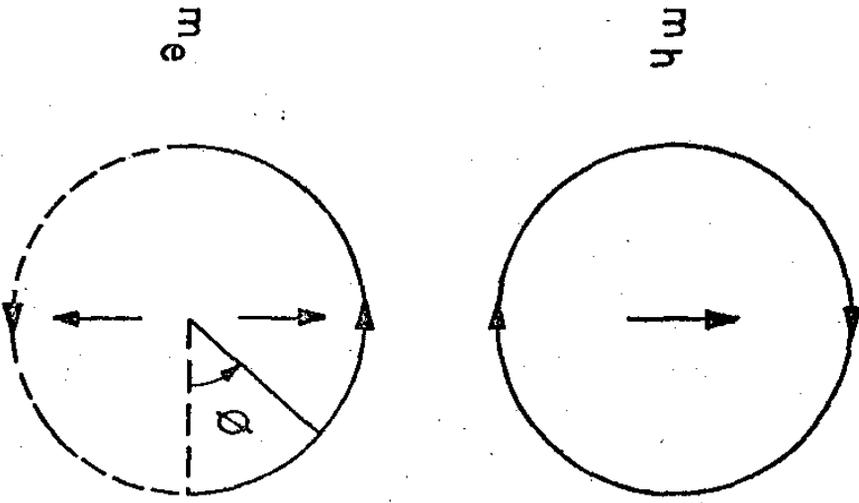
$$\rho_0 \equiv m_e/((1+r)(e^2 n \tau))$$

e

$$\omega_c \equiv |e|H/m_e c$$

Foram feitos cálculos numéricos para diversos valo-

d)



b)

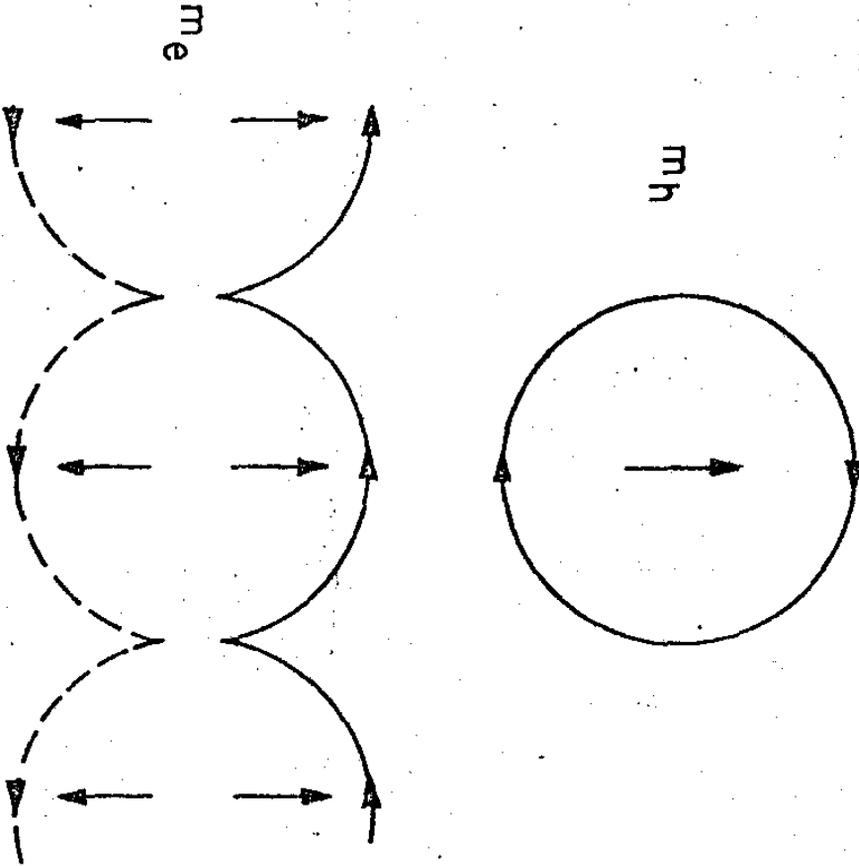


Fig. 25.

res de  $\alpha$ ,  $r$  e  $\chi$ . Os resultados de  $R_H/R_0$  são mostrados nas Figs. 26 e 27, como função da variável  $\alpha$ .

O modelo de órbitas referente aos resultados para a constante de Hall mostrados na Fig. 26 consiste de uma órbita do tipo buraco com spin para cima e uma órbita hibridizada em spin do tipo elétron (Fig. 25(a)).

Quando o metal é ferromagnético ele é não compensado se  $\Delta n$  for nulo, onde  $\Delta n$  é definido por<sup>47</sup>

$$\Delta n = - \sum_{i\uparrow} n_i^e(\uparrow) - \sum_{i\downarrow} n_i^e(\downarrow) + \sum_{j\uparrow} n_j^h(\uparrow) + \sum_{j\downarrow} n_j^h(\downarrow) \quad (2.34)$$

$i, j$  indicam as folhas da Superfície de Fermi.

Com referência a Fig. 26 e tendo-se em mente a equação (2.10), verificamos que uma distribuição  $\Delta$  sobre a SF, produz uma descompensação das órbitas fechadas, mudando o caráter do sistema, quando  $r > 1$ , do tipo elétron para tipo buraco quando  $\alpha$  varia de 0 até 1. Neste caso, o efeito de  $\alpha$  é favorecer o regime de buraco.

Devemos notar que efeitos de hibridização devido ao acoplamento de spin-órbita não são possíveis sob a ação de campos magnéticos muito fortes (gaps devido a interação de spin-órbita são da ordem de  $10^{-2}$  eV, que conduz a campos de ruptura da ordem de 10 kG), portanto o forte efeito de alinhamento imposto pelo campo magnético não permite a existência de órbitas hibridizadas para campos altos.

Como também podemos ver na Fig. 26, para um dado valor de  $\alpha$  e um valor fixo de  $r$ , a resistividade de Hall pode trocar de sinal como função do campo magnético através de  $\chi = \omega_c \tau$ . Por

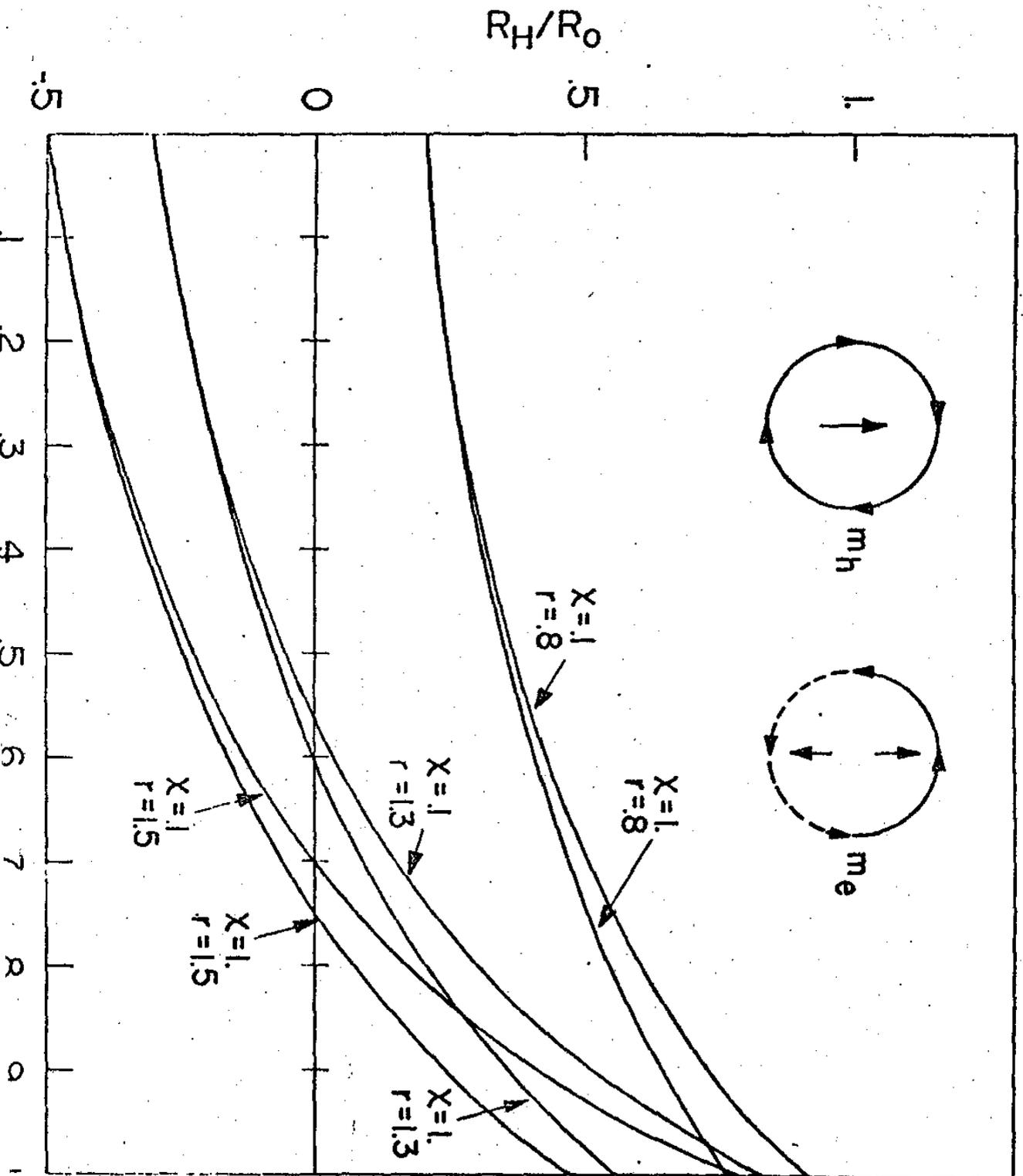


Fig. 26.

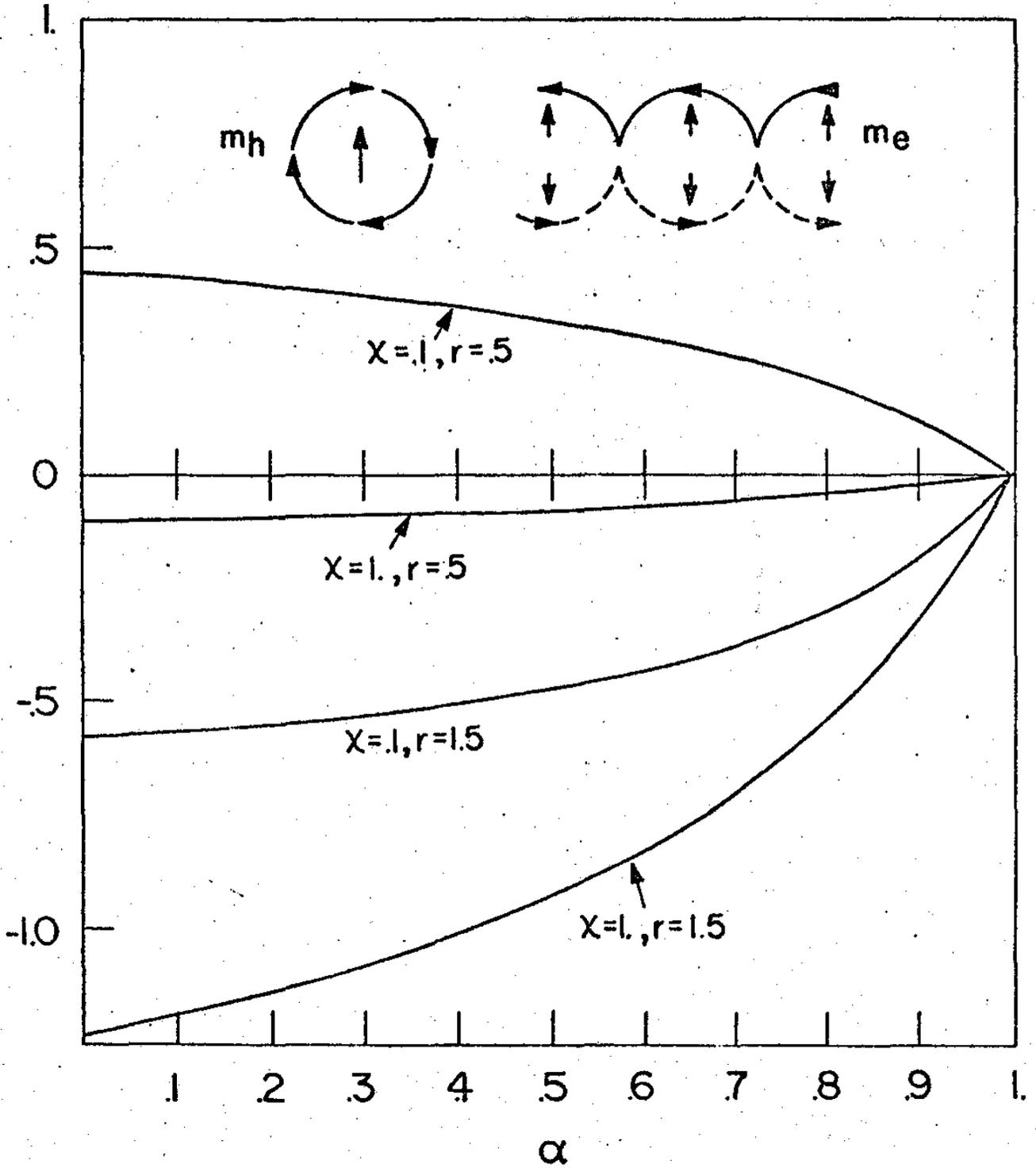


Fig. 27.

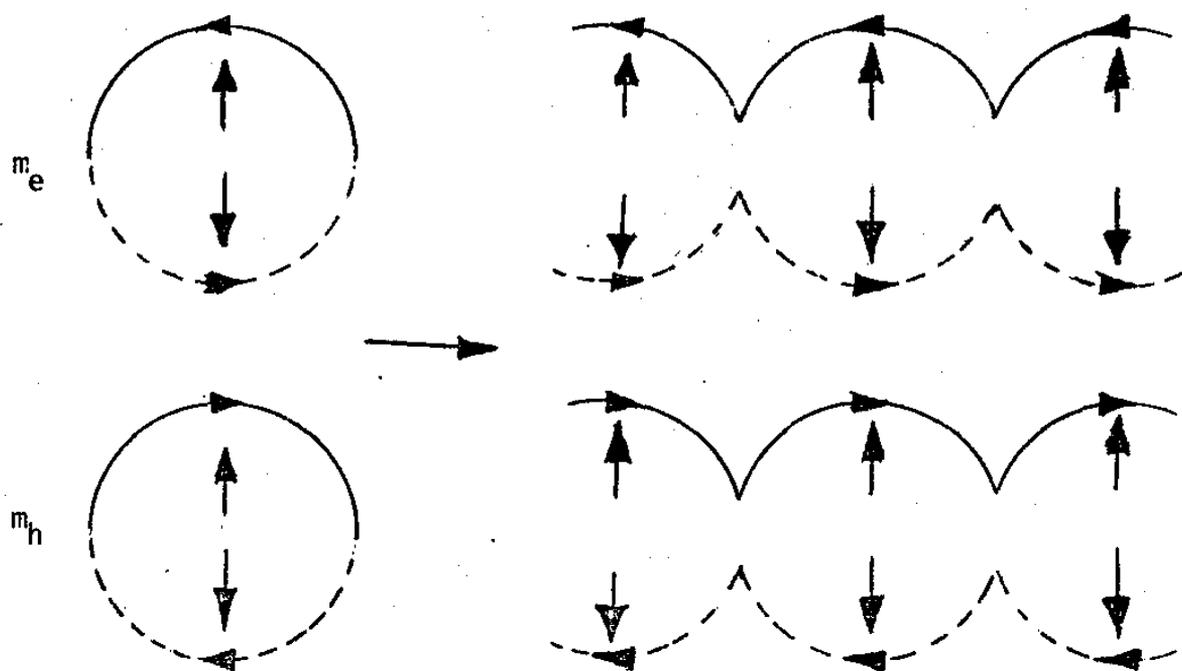
exemplo, para  $r = 1.5$  e  $\alpha \sim 0.73$ . Entretanto, a magnetoresistência transversal, para  $\alpha$  e  $r$  fixos, seguirá um dos clássicos comportamentos preditos pela teoria de Lifshitz<sup>19,44</sup>.

A Fig. 27 corresponde ao modelo topológico da Fig. 25(b), que consiste numa órbita fechada do tipo buraco com spin para cima e duas órbitas abertas de spins opostos. Verificamos que a constante de Hall não troca de sinal como função do parâmetro  $\alpha$ , entretanto possui uma variação considerável. Devido ao fato de não haver órbitas hibridizadas, no limite  $\alpha \rightarrow 1$  ( $\tau/\tau_S \rightarrow 0$ ) temos uma probabilidade praticamente nula de ocorrer transição com troca de spin (spin-flip). Assim, somente pode ocorrer relaxação entre folhas da SF de mesmo spin. Neste limite, obtemos como resultado uma magnetoresistividade nula na direção perpendicular às órbitas abertas e uma resistividade de Hall também nula.

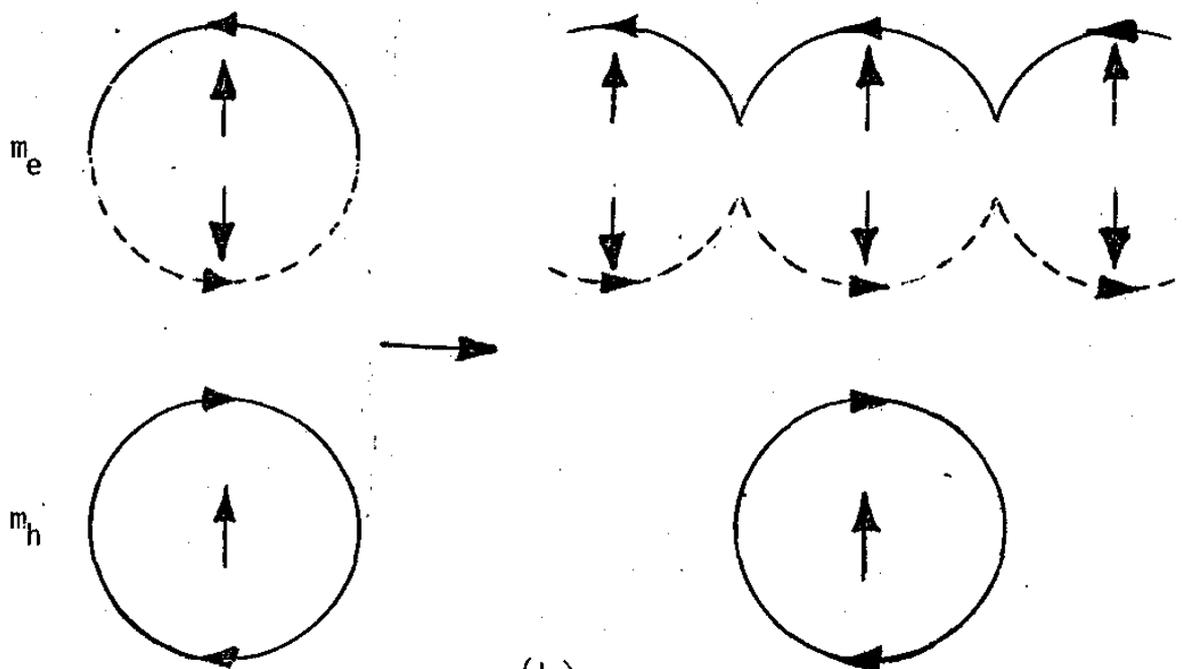
Na seguinte subseção apresentamos os resultados para a resistividade de Hall calculada dentro do modelo desenvolvido nesta seção e em presença de ruptura magnética. Como poderemos verificar o efeito de ruptura magnética não altera drasticamente os resultados discutidos acima.

## 2.2.b - Efeito Hall ordinário incluindo dois mecanismos de relaxação em presença de ruptura magnética

Os modelos que calculamos são apresentados na Fig. 28, onde aparecem as órbitas nos dois limites: sem ruptura magnética ( $T=0$ ) e com ruptura magnética completa ( $T=1$ ). No limite de campo baixo, todos os modelos correspondem a órbitas fechadas,



(a)



(b)

Fig. 28.

compensadas, e hibridizadas ou não em spin. As transições para o limite de campo alto são mostradas na figura.

O tensor resistividade é calculado como função de  $\chi$  ( $\equiv |e| H\tau/m_e c$ ), em termos dos parâmetros  $\alpha$ ,  $r$  e  $\omega_0\tau$  (o produto da frequência de ruptura pelo tempo de relaxação normal). Os parâmetros  $\alpha$  e  $r$  foram definidos na seção anterior.

Nas Figuras 29 e 30 apresentamos os resultados para a resistividade de Hall calculada usando os modelos da Fig. 28. Todas as curvas são funções do parâmetro adimensional  $\chi$  e são normalizadas em relação a resistividade para campo magnético nulo para o caso normal ( $\alpha = 0$ ),  $\rho_0$ . Em cada figura encontramos curvas para três valores de  $\alpha$ ,  $\alpha = 0$ ,  $\alpha = 0.6$ ,  $\alpha = 0.99$ , e para  $m_e < m_h$ ,  $m_e = m_h$  e  $m_e > m_h$ .

A Fig. 29 corresponde ao caso quando as órbitas de elétron e buraco, hibridizadas em spin, sob a ação do campo magnético quebram-se em órbitas abertas de spins opostos ao longo da mesma direção (Fig. 28(a)). Para  $\alpha = 0$ , a resistividade de Hall para  $r < 1$  e  $r > 1$  mostram uma transição entre dois comportamentos lineares (estas curvas são idênticas aquelas da Fig. 18, em gráfico logarítmico duplo, quando não existe distinção entre os spins). Estas curvas são similares aos resultados encontrados experimentalmente para o Fe a temperatura  $T = 4.2 \text{ K}$ <sup>7</sup>, mostrados nas Figs. 13 e 14. O efeito do novo mecanismo de relaxação é alterar os coeficientes dos dois comportamentos lineares. O limite  $\alpha \rightarrow 1$  parece saturar a resistividade de Hall para campo alto, para os casos  $r < 1$  e  $r > 1$ . No caso  $r = 1$ , a total simetria do modelo conduz a valores nulos da resistividade de Hall para quaisquer valores de  $\omega_c\tau$  e  $\alpha$ .

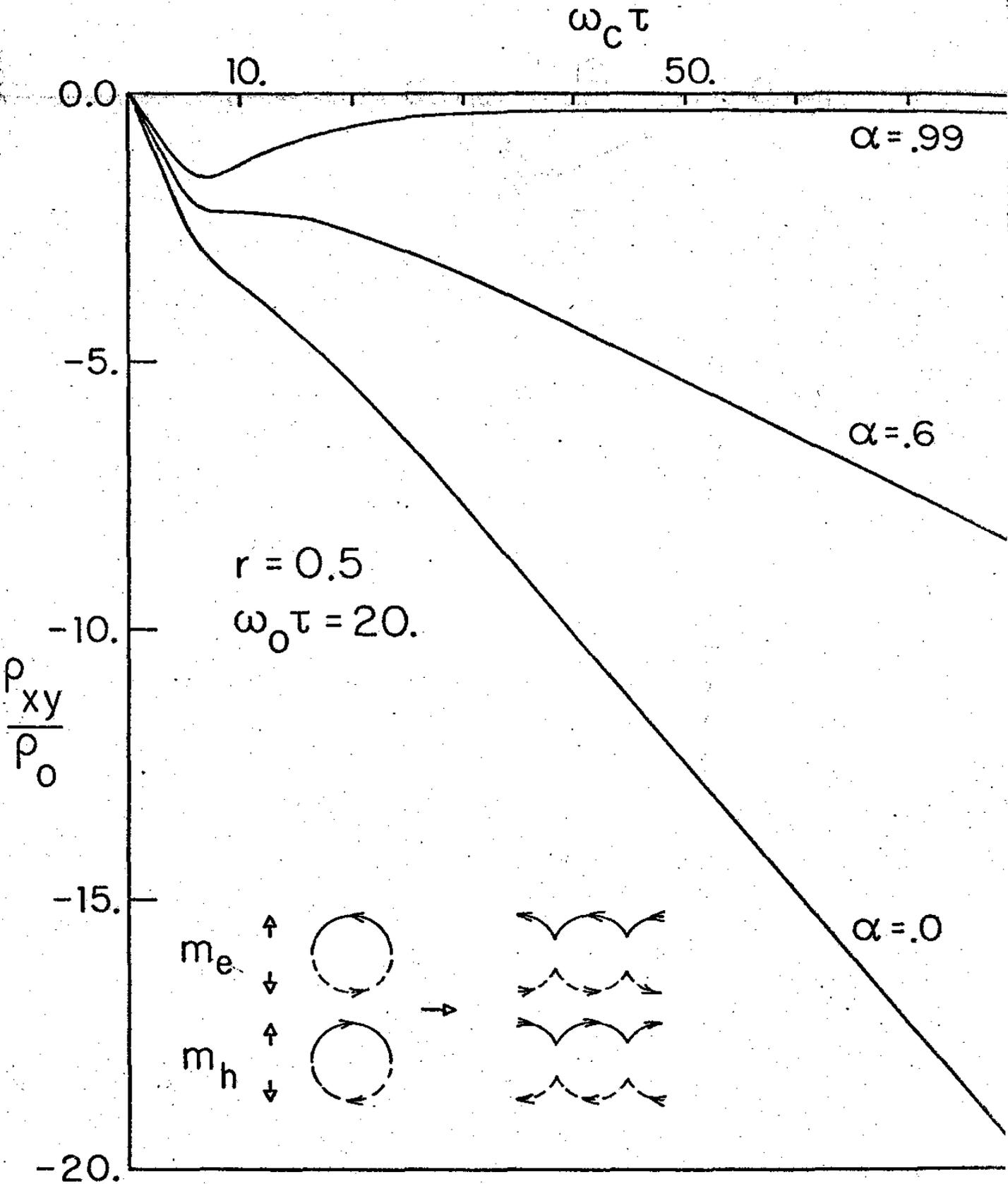


Fig. 29(a).

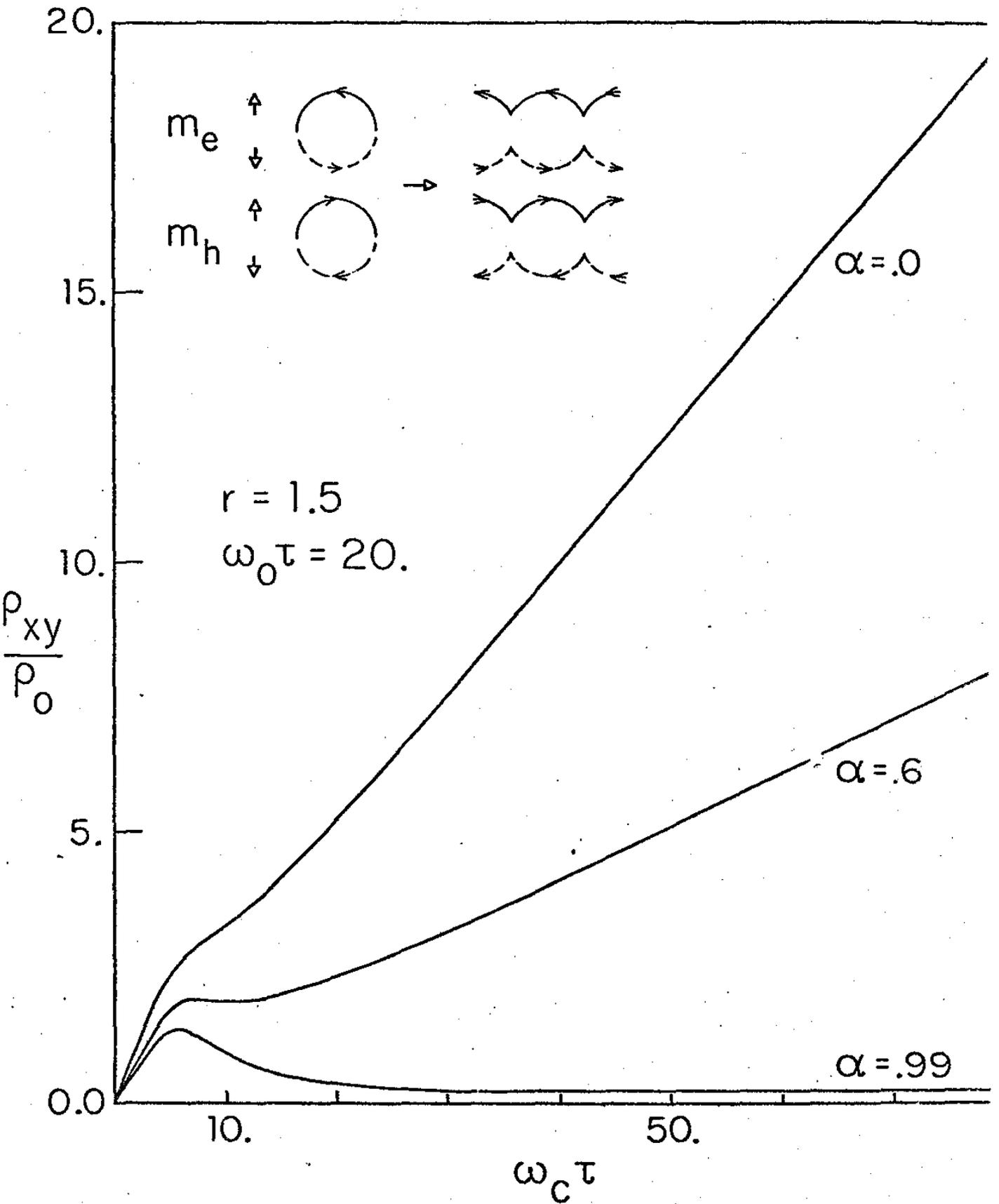


Fig. 29(b)

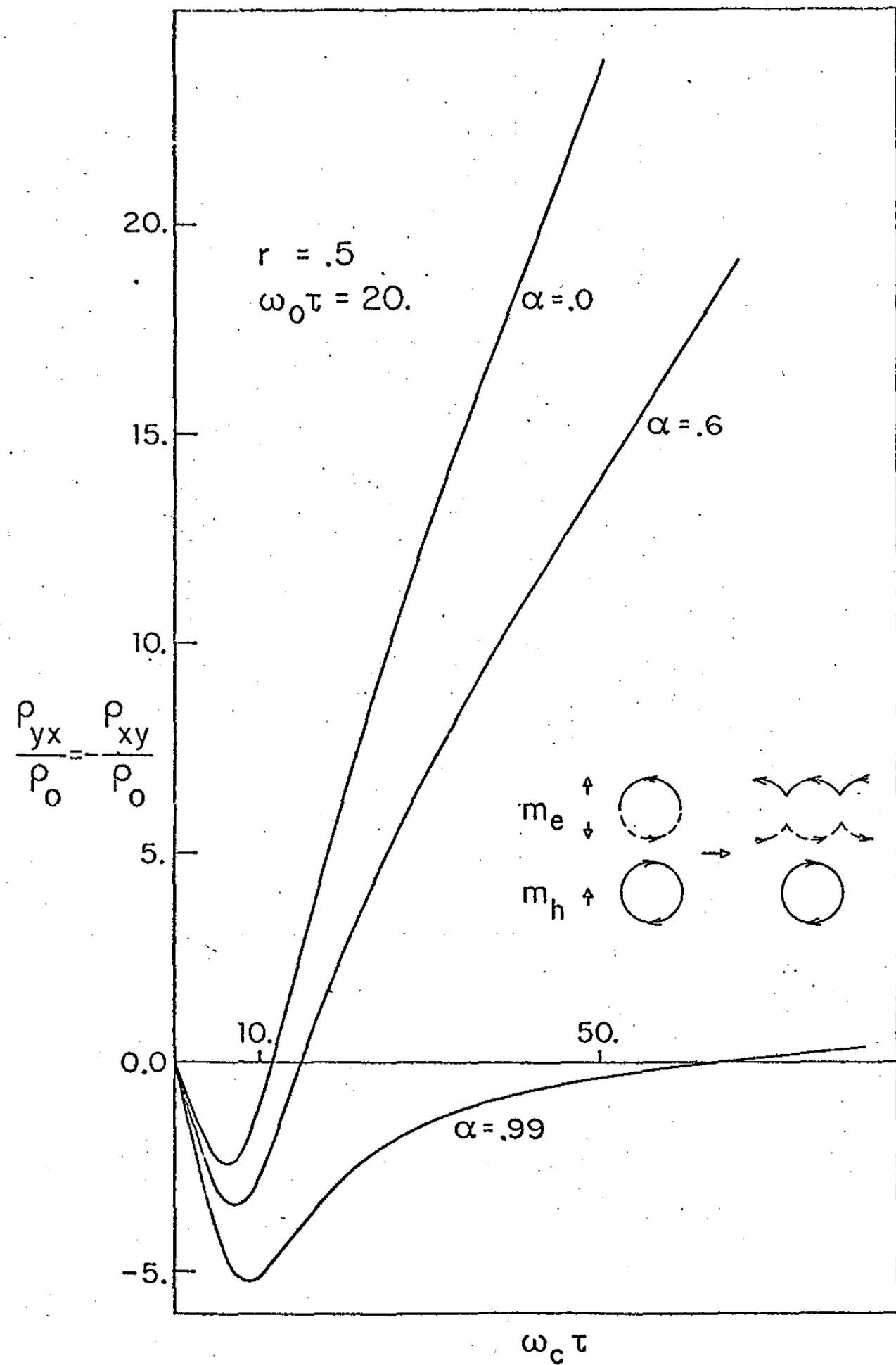


Fig. 30 (a)

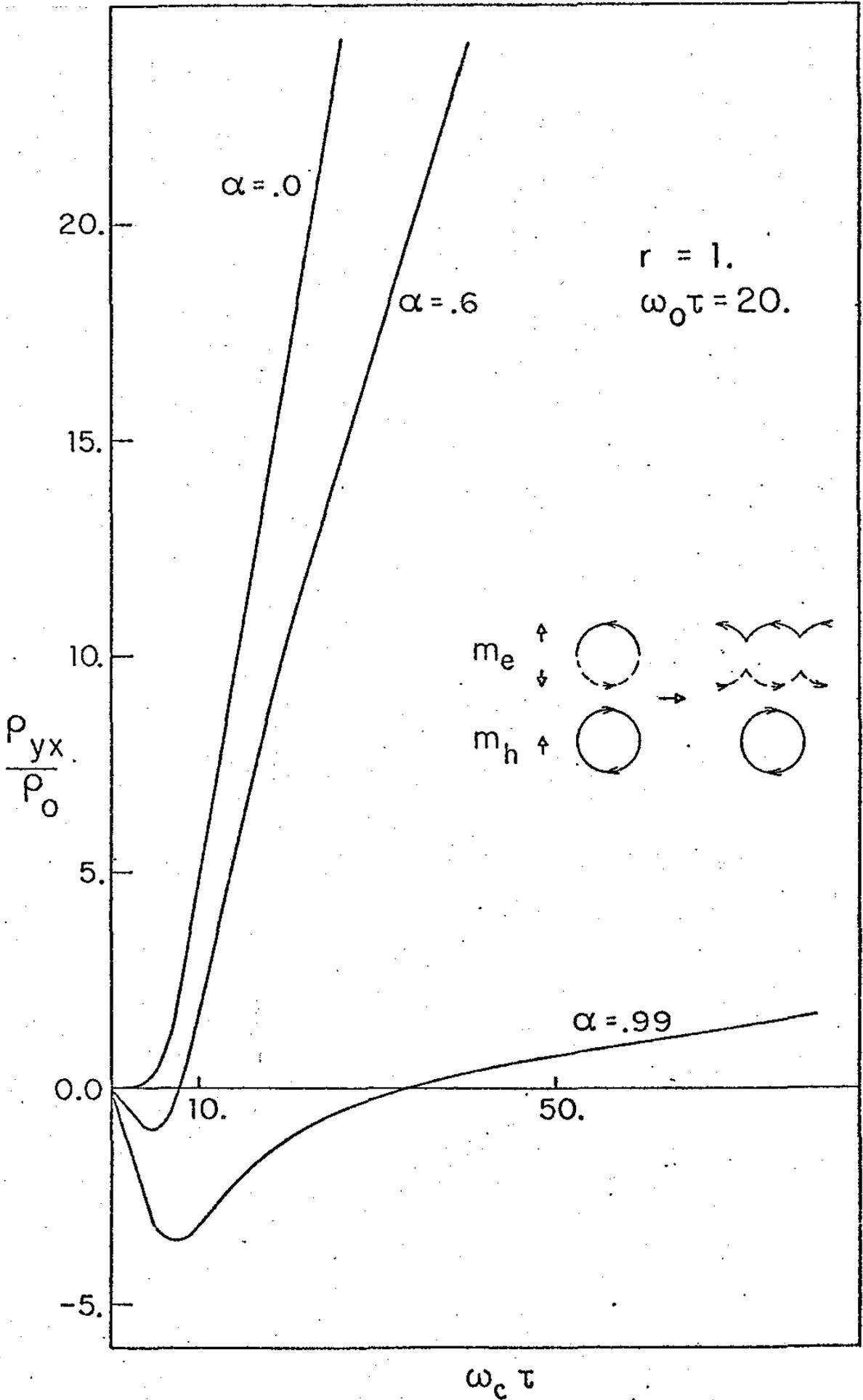


Fig. 30(b).

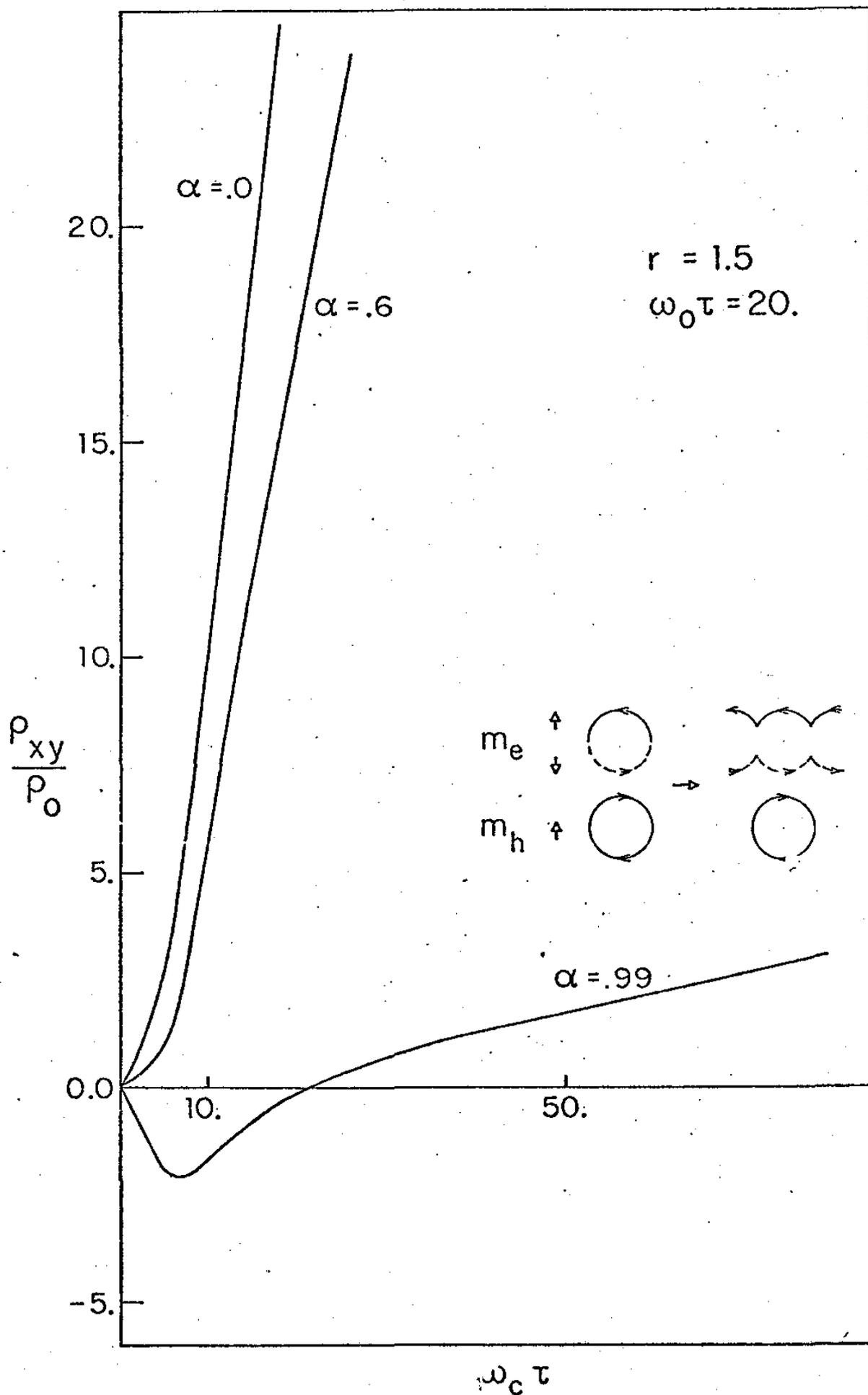


Fig. 30(c).

Na Fig. 30 apresentamos os resultados para a resistividade de Hall para uma combinação de órbitas compensadas, uma órbita do tipo buraco de spin maioria e uma órbita hibridizada em spin do tipo elétron, as quais por ruptura magnética quebram-se numa órbita fechada de buraco com spin maioria e duas órbitas abertas de spins opostos (Fig. 28(b)). Para  $\alpha = 0$  e  $r < 1$ , o comportamento para campo baixo é do tipo buraco, enquanto que para  $r > 1$ , domina o caráter de elétron. O comportamento que encontramos na Fig. 26, a alteração do caráter do sistema do tipo elétron para tipo buraco, quando  $r > 1$  e  $\alpha$  varia de 0 até 1, pode ser visto no limite de campo baixo da Fig. 30(c). Para  $r = 1$  (Fig. 30(b)), assim como para  $r > 1$ ,  $\alpha$  favorece o regime de buraco. Para campos magnéticos altos a contribuição das órbitas abertas para a resistividade é dominante e obtemos então, para cada valor de  $\alpha$ , comportamentos similares para os vários valores de  $r$ .

Para o caso não compensado,  $n_e \neq n_h$ , verificamos que a descompensação destrói o efeito de  $\Delta_L$ . Para os modelos da Fig. 28, até mesmo para  $\alpha = 0$ , encontramos uma resistividade de Hall linear para qualquer valor de  $\omega_c \tau$  e para os valores de  $\gamma \equiv n_e/n_h$ , diferentes de  $\gamma = 1$  (caso compensado).

A seguir apresentamos nossas conclusões.

### 2.3 - Conclusões

Com relação aos resultados encontrados neste capítulo desejamos colocar o seguinte:

(1) Superfícies de Fermi fechadas e compensadas, porém não esféricas, dão contribuições não nulas para a resistividade de Hall, que podem ser não lineares no campo magnético. Entretanto, Superfícies de Fermi esféricas com diferentes (isotrópicas) massas efetivas para diferentes tipos de portadores produzem um comportamento linear para o caso compensado.

(2) A magnetoresistência mostra uma dependência nos dois mecanismos de relaxação sendo uma função de  $\alpha = 1 - (\tau/\tau_S)$ . Temos assim um fenômeno dependente da pureza, onde impurezas normais a afetam principalmente o tempo de relaxação normal  $\tau$ , enquanto impurezas magnéticas também afetam  $\tau_S$  — conduzindo a desvios da Regra de Kohler na ausência de efeitos de ruptura magnética (ruptura magnética sempre introduz desvios da Regra de Kohler).

(3) Efeitos de temperatura produzem variações de  $\alpha$ . Com temperaturas crescentes,  $\alpha$  varia na direção  $\alpha \rightarrow 1$ , desde que estes efeitos atuam principalmente sobre o tempo de relaxação normal. Este fato pode produzir uma mudança de sinal na constante de Hall ordinária quando variamos a temperatura, como em nosso exemplo da Fig. 26. Este resultado já foi encontrado experimentalmente para o Fe, porém foi atribuído a mudanças na mobilidade de portadores como função da temperatura ou a possíveis alterações na topologia da Superfície de Fermi com a temperatura<sup>7</sup>.

(4) O parâmetro  $\alpha$  pode depender sensivelmente da direção do campo magnético. Os tempos de relaxação são considerados como quantidades médias sobre uma dada órbita eletrônica, portanto o desvio do campo magnético de uma dada direção,

mesmo quando a topologia da órbita não é alterada, pode induzir uma variação em  $\alpha$ , que pode ser de considerável magnitude para Superfícies de Fermi complicadas (como nos metais ferromagnéticos reais).

(5) Quando a troca de sinal da resistividade de Hall (para valores fixos de  $r$  e  $\alpha$ ), como função de  $\chi = \omega_c \tau$ , está inteiramente associada aos mecanismos de relaxação considerados, a magnetoresistência transversal seguirá um dos clássicos comportamentos preditos pela teoria de Lifshitz<sup>19,44</sup>, entretanto na presença de ruptura magnética a transição de um regime para outro será refletida também na magnetoresistência transversal quando medida como função de  $\chi = \omega_c \tau$ <sup>8</sup>. Portanto, um estudo experimental comparativo das diferentes componentes do tensor magnetoresistividade seria de grande interesse para distinguirmos entre estas duas situações físicas.

## CAPÍTULO 3

**MAGNETORESISTÊNCIA E RESISTIVIDADE  
DE LIGAS FERROMAGNÉTICAS AMORFAS  
DE METAL DE TRANSIÇÃO COM METAL NOBRE**

Os metais ferromagnéticos apresentam propriedades de transporte eletrônico muito interessantes. Dentre estas, eles possuem anisotropia da resistividade em relação a direção da magnetização e efeito Hall espontâneo, devido ao espalhamento anisotrópico dos elétrons de condução pelos momentos magnéticos do metal. Também metais não magnéticos muitas vezes apresentam um complicado comportamento num campo magnético, porque os elétrons que são responsáveis pela condutividade pertencem a diferentes porções da superfície de Fermi com massas efetivas e caminhos livre médios distintos. Num cristal perfeito, encontramos além disto a transição entre os limites de campo baixo ( $\omega_c \tau \ll 1$ ,  $\omega_c = |e| H/mc$ ) e campo alto ( $\omega_c \tau \gg 1$ ), quando tanto o efeito Hall como a magnetoresistência variam drasticamente com o campo magnético. Estas complicações devido aos efeitos eletrônicos podem ser evitados estudando-se metais amorfos. Isto se deve, principalmente, ao fato de que os efeitos de estrutura de bandas ficam escondidos devido ao pequeno caminho livre médio dos elétrons, e assim os elétrons de condução comportam-se como elétrons livres.

Estudos experimentais de fenômenos de resistividade e magnetoresistência em ligas ferromagnéticas amorfas — de composição  $T_xAu_{1-x}$ , onde  $T$  é um metal de transição: Fe, Co ou Ni — de Bergmann et al<sup>14,15</sup> apresentam interessantes resultados:

(1) magnetoresistência negativa — a resistividade decresce com o campo magnético (Fig. 31(a));

(2) um gráfico das inclinações das curvas de magnetoresistência como função da temperatura mostra um máximo a uma temperatura próxima da temperatura de transição ferromagnética,  $T_c$  (Fig. 31(b));

(3) a resistividade para temperaturas baixas obedece uma lei  $T^2$ , e acima da temperatura crítica de Curie a resistividade é quase constante (Fig. 32(a));

(4) o coeficiente  $\alpha = d\rho/dT^2$  aumenta com o decréscimo da concentração dos átomos magnéticos (Fig. 32(b)).

Propomos aqui<sup>16</sup> um modelo para explicar os comportamentos da resistividade e magnetoresistência destas ligas ferromagnéticas amorfas.

Supomos um modelo de spins localizados para os átomos de metal de transição na liga. Atualmente, existem muitas evidências experimentais de que grande parte do momento dos metais de transição é espacialmente localizado<sup>48,51</sup>. Um modelo sobre o origem do ferromagnetismo no Fe, Co e Ni foi desenvolvido por Mary Beth Stearns<sup>11</sup>, que atribui a origem do ferromagnetismo, nestes metais, ao acoplamento indireto dos elétrons

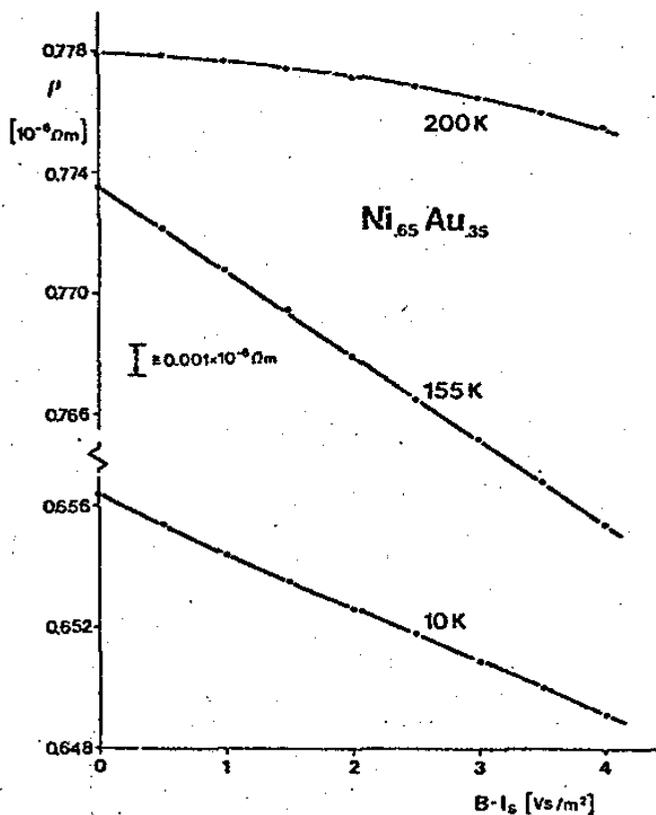


Fig. 31(a): magnetoresistência da liga amorfa  $Ni_{0.65}Au_{0.35}$  para  $T < T_c$ ,  $T = T_c$  e  $T > T_c$  [14]:

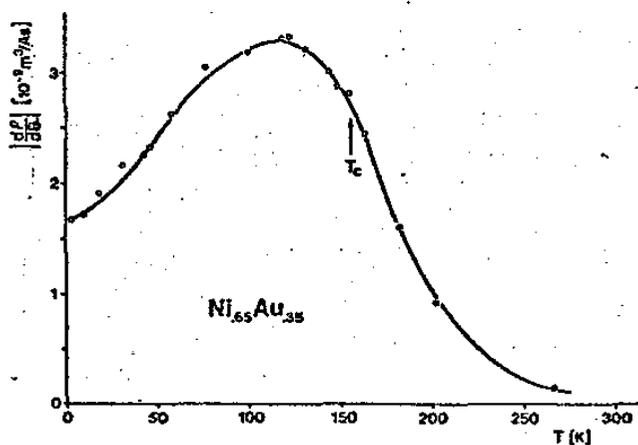


Fig. 31(b):  $|d\rho/dB|$  da liga amorfa  $Ni_{0.65}Au_{0.35}$  como função da temperatura em  $B = 40$  kG [14].

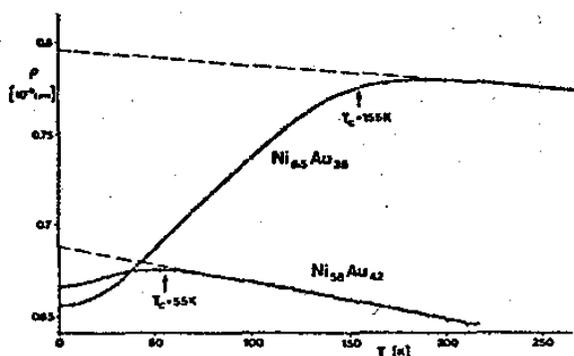


Fig. 32(a): resistividade como função da temperatura para duas ligas ferromagnéticas amorfas do tipo Ni-Au. As temperaturas de Curie correspondentes são marcadas com uma flecha [15].

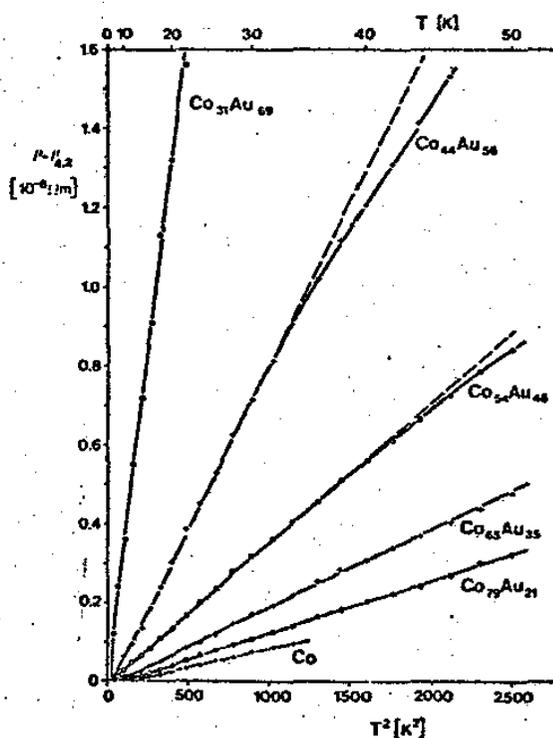


Fig. 32(b): resistividade da série de ligas  $\text{Co}_x\text{Au}_{1-x}$ , como função de  $T^2$  [15].

tipo d localizados através de um pequeno número de elétrons tipo d itinerante. O modelo sugere que cerca de 5% dos elétrons 3d estão em bandas itinerantes e 95% estão em bandas d suficientemente estreitas que eles podem ser considerados como localizados.

Consideramos os graus de desordem na liga amorfa em dois níveis: a desordem estrutural é levada em conta no fator de estrutura e a desordem magnética quando consideramos eixos aleatórios de fácil magnetização.

A seguir apresentamos o hamiltoniano que descreve uma liga ferromagnética amorfa do tipo  $T_x Au_{1-x}$  e na seção 3.2 calculamos a resistividade e magnetoresistência. Finalmente na seção 3.3 apresentamos a discussão dos resultados e conclusões.

### 3.1 - Hamiltoniano na aproximação de campo molecular

O hamiltoniano que descreve uma liga ferromagnética amorfa de metal de transição com metal nobre consiste de vários termos

$$\mathcal{H}_{tot} = \mathcal{H}_{cond} + \mathcal{H}_{Heis} + \mathcal{H}_{int} + \mathcal{H}_{ext} + \mathcal{H}_C \quad , \quad (3.1)$$

$\mathcal{H}_{cond}$  descreve a energia cinética dos elétrons de condução

$$\mathcal{H}_{cond} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon_{\vec{k}} C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma} \quad , \quad (3.2)$$

onde  $C_{\vec{k}\sigma}^\dagger$  cria um elétron com spin  $\sigma$  num estado de vetor de onda  $\vec{k}$ , que caracteriza a banda de condução e que é definido mais adiante.

A interação entre os momentos localizados<sup>11</sup> dos elétrons 3d do metal de transição é do tipo de uma interação efetiva de Heisenberg entre átomos magnéticos vizinhos mais próximos

$$\mathcal{H}_{\text{Heis}} = -J \sum_{[j,j']} \vec{J}_j \cdot \vec{J}_{j'}, \quad (3.3)$$

onde  $J$  é a constante de troca, os índices  $j$  e  $j'$  indicam sítios (sem apresentarem uma simetria cristalina) ocupados por átomos magnéticos e  $[j,j']$  indica que a interação de troca é entre vizinhos mais próximos.

$\mathcal{H}_{\text{int}}$  é uma interação de troca local entre os elétrons de condução e os momentos localizados

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -J' \sum_j \vec{J}_j \cdot \vec{\sigma}_j \quad (3.4)$$

onde  $j$  é um sítio do metal de transição,  $\sigma_j$  é a matriz de spin de Pauli para os elétrons de condução e  $J'$  é a constante de acoplamento de troca. Este hamiltoniano pode ser reescrito como

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = -J' \sum_j (\delta\vec{J}_j \cdot \vec{\sigma}_j + \langle \vec{J}_j \rangle \cdot \vec{\sigma}_j) \quad (3.5)$$

onde definimos  $\delta\vec{J}_j$ , a flutuação do momento localizado  $\vec{J}$  no sítio

tio  $j$ , como  $\delta\vec{J}_j \equiv \vec{J}_j - \langle \vec{J}_j \rangle$ .

O efeito de um campo magnético externo, aplicado na direção  $z$ , é incluído no usual termo Zeeman

$$\mathcal{H}_{\text{ext}} = - \mu_B g H \left( \sum_{i,\sigma} \sigma n_{i\sigma} + \sum_j J_j^z \right), \quad (3.6)$$

onde  $g$  é o fator de Landé,  $\mu_B$  é o magneton de Bohr,  $H$  é o campo magnético aplicado e  $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  (onde  $c_{i\sigma}^\dagger$  cria um elétron com spin  $\sigma$  no sítio  $i$ ).

Introduzimos uma anisotropia magnética aleatória (RMA), proposta por Harris et al.<sup>12</sup>, supondo uma distribuição aleatória de eixos de fácil magnetização nos sítios do metal de transição, que evidencia a estrutura amorfa do sistema. Supondo que ela seja uma anisotropia uniaxial, o hamiltoniano  $\mathcal{H}_C$  pode ser escrito como

$$\mathcal{H}_C = - D \sum_j (J_j z_j^i)^2, \quad (3.7)$$

onde  $z_j^i$  é o eixo de fácil magnetização no sítio  $j$  do metal de transição. A hipótese básica do modelo de anisotropia magnética aleatória local<sup>12</sup> é que a estrutura topologicamente desordenada dos materiais amorfos faz com que o "campo cristalino" — o campo elétrico devido aos íons em torno de cada átomo — varie de ponto a ponto no material. O cálculo da energia de anisotropia magnética aleatória tem como base os métodos usuais de cálculo de campo cristalino<sup>52-54</sup>.

Analisando o hamiltoniano para a liga, eq. (3.1),

na aproximação de campo molecular, obtemos

$$H_{\text{tot}} = H_{\text{cond}} + H_m + H_{\text{int}} \quad , \quad (3.8)$$

com

$$H_{\text{cond}} = \sum_{\vec{k}\sigma} (\epsilon_{\vec{k}} - \sigma \Delta) C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma} \equiv \sum_{\vec{k}\sigma} E_{\vec{k}\sigma} C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma} \quad , \quad (3.9)$$

onde  $\Delta$  é o campo molecular sobre os elétrons de condução e é dado por

$$\Delta \equiv x \frac{\mu_B}{d} \langle J^Z \rangle + \mu_B g H \quad ; \quad (3.10)$$

$$H_m = - \sum_j (D (J_j z_j^z)^2 + \lambda J_j^Z) \quad , \quad (3.11)$$

onde  $\lambda$  é o campo molecular nos sítios dos átomos de metal de transição e é dado por

$$\lambda \equiv \mu_B g H + x z \frac{\mu_B}{d} \langle J^Z \rangle \quad , \quad (3.12)$$

$z$  é o número médio de átomos magnéticos vizinhos mais próximos de um dado átomo magnético e  $x$  é a concentração dos átomos de metal de transição na liga amorfa. A média  $\langle J^Z \rangle$  consiste numa média estatística e numa média sobre os ângulos  $\theta$  e  $\phi$  que definem  $z_j^z$  no sistema de coordenadas de laboratório

$$\langle J^Z \rangle = \int_0^\pi \sin^2 \theta_j \, d\theta_j P(\theta_j) \langle J^Z(\theta_j) \rangle \quad , \quad (3.12a)$$

onde  $P(\theta_j)$  é a função de distribuição dos eixos de fácil mag-

netização,  $z_i^z$ .

$H_{int}$  descreve a interação dos spins dos elétrons de condução com as flutuações dos momentos localizados

$$H_{int} = -\gamma \sum_j \delta J_j \cdot \vec{\sigma}_j \quad (3.13)$$

O hamiltoniano (3.13) pode ser desenvolvido escrevendo as matrizes de Pauli,  $\sigma_i^\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ), em termos dos operadores de criação e destruição,  $C_{i\alpha}^+$  e  $C_{i\alpha}$ , de elétrons na representação de sítios

$$\begin{aligned} \sigma_i^+ &= \sigma_i^x + i \sigma_i^y = 2 C_{i\uparrow}^+ C_{i\downarrow} \\ \sigma_i^- &= \sigma_i^x - i \sigma_i^y = 2 C_{i\downarrow}^+ C_{i\uparrow} \end{aligned} \quad (3.14)$$

e

$$\sigma_i^z = C_{i\uparrow}^+ C_{i\uparrow} - C_{i\downarrow}^+ C_{i\downarrow}$$

Obtemos assim

$$\begin{aligned} H_{int} = -\gamma \sum_i \{ &\delta J_i^+ C_{i\uparrow}^+ C_{i\uparrow} + \delta J_i^- C_{i\downarrow}^+ C_{i\downarrow} + \\ &+ \delta J_i^z (C_{i\uparrow}^+ C_{i\uparrow} - C_{i\downarrow}^+ C_{i\downarrow}) \} \end{aligned} \quad (3.15)$$

onde usamos as relações

$$\delta J_i^\pm = \delta J_i^x \pm i \delta J_i^y \quad (3.16)$$

e a concentração aparece porque passamos de uma soma sobre sítios ocupados por átomos magnéticos para uma soma sobre os sítios do material.

O hamiltoniano (3.8) conduz a uma transição de fase ferromagnética.

Neste ponto é conveniente transformar o hamiltoniano (3.15) para a representação dos vetores de onda  $\vec{k}$  devido às dificuldades de cálculo que surgem quando se trabalha na representação de sítio. Porém, para transformar o hamiltoniano (3.15) devemos considerar que num material desordenado a transformação da representação de sítio para a representação dos vetores de onda  $\vec{k}$  não é mais unitária<sup>55</sup>. Num amorfo não é possível definir o espaço recíproco devido a desordem estrutural. Porém, se supomos condições de contorno periódicas sobre um volume  $V$  grande do material desordenado, tal que a densidade de estados permaneça homogênea e igual a  $(V/8\pi^3)$ , podemos definir, como um artifício matemático, uma rede fictícia no espaço real e fazer corresponder com esta uma zona de Brillouin.

Num cristal perfeito a transformação de operadores entre as representações  $\vec{k}$  e de sítio é dada por

$$\begin{aligned}
 c_{i\sigma} &= N_0^{-1/2} \sum_{\vec{k}} \exp(-i \vec{k} \cdot \vec{R}_i) c_{\vec{k}\sigma} = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}}(\vec{R}_i) c_{\vec{k}\sigma}, \\
 c_{\vec{k}\sigma} &= N_0^{-1/2} \sum_i \exp(i \vec{k} \cdot \vec{R}_i) c_{i\sigma} = \sum_i B_{\vec{k}}(\vec{R}_i) c_{i\sigma},
 \end{aligned}
 \tag{3.17}$$

onde  $\vec{R}_i$  são os vetores posição dos sítios da rede periódica e onde os  $N_0$  vetores  $\vec{k}$  estão contidos dentro da primeira zona de

Brillouin. Então, neste caso, temos uma transformação unitária, desde que  $\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}} = \underline{\underline{I}}$ . No material desordenado a matriz  $\underline{\underline{A}}$  não possui mais a simples inversa  $\underline{\underline{B}}$ ; introduzimos, então, uma matriz  $\underline{\underline{R}}$  definida pela equação:

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{\underline{B}} = \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{R}} \quad , \quad \underline{\underline{A}}^{-1} = \underline{\underline{B}} (\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{R}})^{-1} \quad (3.18)$$

Os elementos da matriz  $\underline{\underline{R}}$  na representação  $\vec{k}$  são

$$R_{kk'} = \sum_i A_{\vec{k}}(i) B_{\vec{k}'}(i) - \delta_{kk'} = N_0^{-1} \sum_i \exp(-i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}_i) - \delta_{kk'} \quad (3.19)$$

onde supomos que no material desordenado os átomos não se afastem muito dos sítios  $\vec{R}_i$  da rede cristalina,  $\vec{r}_i$  é o vetor posição do  $i$ -ésimo sítio do material. Obtemos a transformação dos operadores entre as duas representações, num material desordenado, como

$$C_{i\sigma} = \sum_{\vec{k}} A_{\vec{k}}(i) C_{\vec{k}\sigma} = N_0^{-1/2} \sum_{\vec{k}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) C_{\vec{k}\sigma} \quad (3.20)$$

e

$$\begin{aligned} C_{\vec{k}\sigma} &= \sum_i A_{\vec{k}}^{-1}(i) C_{i\sigma} = \sum_{ik'} (\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{R}})_{kk'}^{-1} B_{\vec{k}'}(i) C_{i\sigma} \quad (3.21) \\ &= N_0^{-1/2} \sum_{ik'} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_i) (\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{R}})_{kk'}^{-1} C_{i\sigma} \end{aligned}$$

O elemento de matriz  $(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{R}})_{kk'}^{-1}$  está relacionado com o fator de estrutura do material. Num cristal perfeito o fator de estrutura é  $\delta_{\vec{k}', \vec{k} + \vec{G}}$ , onde  $\vec{G}$  é um vetor da rede recíproca. Para um

sistema desordenado ou amorfo a função delta é alargada, porém estudos de difração de nêutrons e de raios-X de muitos materiais amorfos têm mostrado que um forte pico permanece na região de  $(\vec{k} - \vec{k}')$  pequeno<sup>55,56</sup>, indicando a ordem de curto alcance ainda presente nestes materiais. Definimos:  $S(\vec{k} - \vec{k}') \equiv \sum_i A_{k'}(i) B_k(i)$ , e assim  $S(\vec{k} - \vec{k}') = \delta_{k,k'} + R_{kk'}$ . O fator de estrutura do material é definido como  $|S(k)|^2$ , então

$$S(\vec{k}) = S^*(\vec{k}) S(\vec{k}) = N_0^{-2} \sum_{i,i'} \exp(i \vec{k} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_{i'})), \quad (3.22)$$

ou também

$$S(\vec{k}) = 1/N_0 (1 + \int d^3 \rho n g(\rho) \exp(i \vec{k} \cdot \vec{\rho})), \quad (3.23)$$

onde  $ng(\rho) d^3 \rho$  é a probabilidade de se observar um segundo átomo em  $d^3 \rho$  dado um átomo na origem  $\rho = 0$ ,  $n$  é a densidade  $N_0/V$ , e  $g(\rho) = g^{(2)}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$  é a probabilidade que qualquer átomo tenha um vizinho a uma distância  $\vec{\rho}$ .  $g(\rho) \rightarrow 0$ , quando  $\rho \rightarrow 0$ , desde que o potencial entre os átomos é altamente repulsivo na vizinhança de  $\rho = 0$ , e  $g(\rho) \rightarrow 1$  quando  $\rho \rightarrow \infty$  - a influência do átomo central diminui quando a distância entre este e outro átomo torna-se muito grande.

Usando-se as relações (3.20)-(3.22), transformamos o hamiltoniano (3.15) para a representação de vetores de onda  $\vec{k}$

$$H_{int} = - \frac{\chi d^3}{\sqrt{N_0}} \sum_{k',k,q} S(k' - k - q) \{ \delta J_q^+ C_{k'+}^+ C_{k+} + \delta J_q^- C_{k'+}^+ C_{k+} + \delta J_q^z (C_{k'+}^+ C_{k+} - C_{k'+}^+ C_{k+}) \}, \quad (3.24)$$

$$\text{onde } \delta J_i^\alpha =$$

$$= N_0^{-1/2} \cdot \sum_{\vec{q}} \exp(-i \vec{q} \cdot \vec{r}_i) \delta J_q^\alpha, \quad (\alpha = x, y, z) \quad (3.25)$$

Na seguinte seção estudamos a resistividade e a magnetoresistência destas ligas ferromagnéticas amorfas, onde os elétrons de condução são espalhados pelos desvios dos momentos localizados cuja interação é dada pelo hamiltoniano (3.24).

### 3.2 - Cálculo da magnetoresistência e resistividade

Propomos aqui que o mecanismo responsável pelo comportamento da magnetoresistência e da resistividade nas ligas ferromagnéticas amorfas, do tipo  $T_x Au_{1-x}$ <sup>14,15</sup>, seja o espalhamento dos elétrons de condução pelas flutuações dos momentos localizados.

Existem na literatura vários trabalhos sobre magnetoresistência devido a flutuações de spin para os casos de ordenamento ferromagnético<sup>57,59</sup>, onde a magnetoresistência é negativa e antiferromagnético<sup>60</sup>, onde ela é positiva. No caso ferromagnético o caráter negativo da magnetoresistência tem origem no fato de que o campo magnético aumenta o campo efetivo que atua nos spins localizados e suprime suas flutuações, conduzindo a um decréscimo da resistividade como função do campo. Por outro lado, no estado antiferromagnético com campo paralelo à magnetização das sub-redes, as flutuações de spin podem ser suprimidas numa sub-rede, enquanto podem ser aumentadas na

outra, e o comportamento da magnetoresistência é determinado pela variação da soma das flutuações de spin das duas sub-redes, que pode conduzir a magnetoresistência positiva.

Para calcular o tensor resistividade usamos a fórmula de Kubo-Nakano<sup>17,18</sup> para a resistividade. Num sistema com simetria esférica, o tensor resistividade torna-se diagonal. Sua transformada de Fourier no limite estático é dada por<sup>17</sup>

$$\rho_{VV}(\omega \rightarrow 0) = \left( \frac{\pi k_B T}{\hbar^2} \right) \frac{\langle [J_V, H_{int}(\omega)] \rangle \langle [H_{int}(-\omega), J_V] \rangle_{\omega=0}}{\langle J_V J_V \rangle^2}, \quad (3.26)$$

onde  $J_V$  é o operador densidade de corrente.

$$J_V = (-|e|\hbar) \sum_{\vec{k}\sigma} (\nabla_{\vec{k}} E_{\vec{k}\sigma})_V C_{\vec{k}\sigma}^\dagger C_{\vec{k}\sigma}, \quad (3.27)$$

$H_{int}(\omega)$ , dado por

$$H_{int}(\omega) = 1/2\pi \int_{-\infty}^{\infty} H_{int}(t) \exp(-i\omega t) dt, \quad (3.28)$$

é a transformada de Fourier do hamiltoniano de interação (3.24), na representação de interação<sup>6,1</sup>

$$H_{int}(t) = \exp(iH_0 t/\hbar) H_{int} \exp(-iH_0 t/\hbar), \quad (3.29)$$

$$\text{com } H_0 = H_{\text{cond}} + H_m \quad (\text{eq. (3.9) e (3.11)}) \quad (3.30)$$

e o símbolo  $\langle \dots \rangle$  representa a média sobre o ensemble canônico do sistema não perturbado

$$\langle A \rangle = \text{Tr} (A \exp (-\beta H_0)) / \text{Tr} (\exp (-\beta H_0)) \quad , \quad (3.31)$$

com  $\beta = 1/k_B T$ .

Como  $H_{\text{cond}}$  é diagonal na representação  $n_{\vec{k}\sigma}$  ( $\tilde{n}_{\vec{k}\sigma} = c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma}$ ) encontramos que

$$c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger (t) c_{\vec{k}\sigma} (t) = c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \exp (i (E_{\vec{k}'\sigma'} - E_{\vec{k}\sigma})t/\hbar), \quad (3.32)$$

fazendo-se a transformada de Fourier, obtemos

$$c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} (\omega) = c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \delta (\omega_{\vec{k}\sigma}^{\vec{k}'\sigma'} - \omega) \quad , \quad (3.33)$$

onde definimos  $\omega_{\vec{k}\sigma}^{\vec{k}'\sigma'} \equiv (E_{\vec{k}'\sigma'} - E_{\vec{k}\sigma})/\hbar$ .

Usando-se o teorema da convolução<sup>63</sup> (se  $\mathcal{F}\{h(\omega)\} = F(t).G(t)$ , então:  $h(\omega) = (f*g) = 1/2\pi \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega-\omega') g(\omega')$ ) obtemos a transformada de Fourier de  $H_{\text{int}}(t)$

$$\begin{aligned} H_{\text{int}}(\omega) = & \frac{-x \hbar^2}{2\pi \sqrt{N_0}} \sum_{\vec{k}'\vec{k}q} S(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}) \{ \delta J_q^{\bar{z}} (\omega - \omega_{\vec{k}\uparrow}^{\vec{k}'\uparrow}) c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} + \\ & + \delta J_q^{\downarrow} (\omega - \omega_{\vec{k}\uparrow}^{\vec{k}'\downarrow}) c_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\uparrow} + \delta J_q^{\bar{z}} (\omega - \omega_{\vec{k}\downarrow}^{\vec{k}'\uparrow}) c_{\vec{k}'\uparrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} + \\ & + \delta J_q^{\downarrow} (\omega - \omega_{\vec{k}\downarrow}^{\vec{k}'\downarrow}) c_{\vec{k}'\downarrow}^\dagger c_{\vec{k}\downarrow} \} \quad . \quad (3.34) \end{aligned}$$

Ao avaliarmos o comutador  $[J_\nu, H_{\text{int}}(\omega)]$ , aparecem comutadores do tipo

$$K_\nu [c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma}, c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}\sigma}] = (k' - k)_\nu c_{\vec{k}'\sigma'}^\dagger c_{\vec{k}\sigma} \quad , \quad (3.35)$$

e ao calcularmos a média  $\langle [J_\nu, H_{int}(\omega)] [H_{int}(-\omega), J_\nu] \rangle$ , aparecem termos do tipo

$$\langle \delta J_q^\alpha (\omega - \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'}) \delta J_{q_1}^\gamma (-\omega + \omega_{k_1\sigma_1}^{k'_1\sigma'_1}) \rangle \cdot \langle C_{k'\sigma'}^\dagger C_{k\sigma} C_{k_1\sigma_1}^\dagger C_{k_1\sigma_1} \rangle \quad (3.36)$$

Para calcular as correlações dos operadores de criação e destruição dos elétrons de condução usamos o teorema de Wick<sup>62</sup>

$$\begin{aligned} \langle C_{k'\sigma'}^\dagger C_{k\sigma} C_{k_1\sigma_1}^\dagger C_{k_1\sigma_1} \rangle &= C_{k'\sigma'}^\dagger \overline{C_{k\sigma}} \langle C_{k_1\sigma_1}^\dagger C_{k_1\sigma_1} \rangle - \\ &- C_{k'\sigma'}^\dagger \overline{C_{k_1\sigma_1}^\dagger} \langle C_{k\sigma} C_{k_1\sigma_1} \rangle + C_{k'\sigma'}^\dagger \overline{C_{k_1\sigma_1}} \langle C_{k\sigma} C_{k_1\sigma_1}^\dagger \rangle \\ &= \delta_{k'k} \delta_{\sigma'\sigma} \delta_{k_1k_1} \delta_{\sigma_1\sigma_1} f_{k'\sigma'}^0 f_{k_1\sigma_1}^0 + \\ &+ \delta_{k'k_1} \delta_{\sigma'\sigma_1} \delta_{kk_1} \delta_{\sigma\sigma_1} f_{k'\sigma'}^0 (1 - f_{k\sigma}^0) \end{aligned} \quad (3.37)$$

onde  $f_{k\sigma}^0$  é a função de distribuição de Fermi-Dirac, e onde somente o segundo termo contribui para a resistividade (eq.(3.26)), desde que o primeiro termo anula a resistividade (ver eq.(3.35)).

Devemos calcular agora as correlações  $\langle \delta J_q^\alpha (\omega - \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'}) \cdot \delta J_{q_1}^\gamma (-\omega + \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'}) \rangle$ . Tendo-se em mente as transformações (3.20), (3.21) e (3.25), e o fato de que na aproximação de campo molecular são temos correlações no mesmo sítio, encontramos

$$\begin{aligned} \langle \delta J_q^\alpha (\omega - \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'}) \delta J_{q_1}^\gamma (-\omega + \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'}) \rangle &= \\ &= \frac{1}{(2\pi \sqrt{N_0})^2} \sum_{i q_1 q_1'} \exp(i(\vec{q}' + \vec{q}') \cdot \vec{r}_i) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times (1 + R)_{qq_1}^{-1} (1 + R)_{q_1 q_1}^{-1} \times \\
 & \times \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i(\omega - \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'})t) \int_{-\infty}^{\infty} d\tau \exp(i(\omega - \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'})\tau) \times \\
 & \times \langle \delta J_j^\alpha(t - \tau) \delta J_j^\gamma(0) \rangle, \quad (3.38)
 \end{aligned}$$

onde  $\delta J_j^\alpha(t) = \exp(iH_m t/\hbar) \delta J_j^\alpha \exp(-iH_m t/\hbar)$ , e usamos a propriedade cíclica do traço ( $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(CAB) = \text{Tr}(BCA)$ ).

O hamiltoniano  $H_m$  que descreve os íons magnéticos (eq. (3.11)) é uma soma de hamiltonianos de uma partícula, cada um dos quais pode ser escrito em termos dos ângulos  $\theta$  e  $\phi$  que definem  $z_j^i$  no sistema de coordenadas de laboratório. Promediando o hamiltoniano (3.11) sobre o ângulo  $\phi$ , obtemos um hamiltoniano que é diagonal na representação das autofunções do operador de momentum angular,  $|JM\rangle$

$$H_m = -\lambda J^z - \frac{D}{2} \{J^2 \sin^2 \theta + (3 \cos^2 \theta - 1) (J^z)^2\} \quad (3.39)$$

Assim as correlações  $\langle \delta J_j^\alpha(t - \tau) \delta J_j^\gamma(0) \rangle$  são calculadas como

$$\begin{aligned}
 & \langle \delta J_j^\pm(t - \tau) \delta J_j^\pm(0) \rangle = \\
 & = \frac{1}{Z} \sum_{M=-J}^J e^{-\beta E_{JM}} (J(J+1) - M(M \pm 1)) \cdot e^{i(t - \tau)\epsilon_\pm/\hbar}, \quad (3.40-a)
 \end{aligned}$$

$$\langle \delta J_j^z(t - \tau) \delta J_j^z(0) \rangle = \langle (J^z)^2 \rangle - \langle J^z \rangle^2, \quad (3.40-b)$$

onde

$$E_{JM} = \langle JM | \hat{H}_m | JM \rangle = -\lambda M - \frac{D}{Z} (J(J+1) \sin^2 \theta_i + (3 \cos^2 \theta - 1) M^2), \quad (3.41-a)$$

e

$$\epsilon_{\pm} (D, \lambda, M, \theta_i) = \frac{D}{Z} (3 \cos^2 \theta - 1) (1 \pm 2M) \pm \lambda. \quad (3.41-b)$$

Usando as relações (3.40) e (3.41) na equação (3.38)

obtemos

$$\langle \delta J_q^{\mp} \delta J_{q_1}^{\pm} \rangle = N_0^{-1} \sum_i A_q^{-1}(r_i) A_{q_1}^{-1}(r_i) \frac{1}{Z} \sum_{M=-J}^J e^{-\beta E_{JM}}$$

$$\cdot (J(J+1) - M(M \pm 1)) \cdot \delta(\omega - \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'} - \epsilon_{\pm}) \delta(-\omega + \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'} + \epsilon_{\pm}), \quad (3.42)$$

$$\langle \delta J_q^Z \delta J_{q_1}^Z \rangle = N_0^{-1} \sum_i A_q^{-1}(r_i) A_{q_1}^{-1}(r_i) \{ \langle (J^Z)^2 \rangle - \langle J^Z \rangle^2 \} \cdot$$

$$\cdot \delta(\omega - \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'}) \delta(-\omega + \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'}), \quad (3.43)$$

onde usamos a definição de  $A_q^{-1}(r_i)$  (eq. (3.21)).

As correlações (3.42) e (3.43) continuam como funções do ângulo  $\theta_i$ , para encontrar as correlações dos desvios dos momentos localizados,  $\langle \delta J^{\alpha} \delta J^{\gamma} \rangle$ , devemos promediar sobre as possíveis orientações dos eixos de fácil magnetização em cada sítio. Calculamos numericamente as médias das correlações (3.42) e (3.43) sobre o ângulo  $\theta$ , supondo uma distribuição completamente isotrópica ( $P(\theta) = 1$ ) para os eixos de fácil magnetização,  $z'$ , na liga amorfa. Verificamos que na média a troca

de energia dos elétrons de condução, quando espalhados pelos desvios dos momentos localizados, não depende do ângulo  $\theta$  nem do número quântico  $M$ , sendo dada por

$$\delta (\hbar \omega - \hbar \omega_{k\sigma}^{k'\sigma'} \mp \lambda) ,$$

onde  $\lambda$  é o campo molecular dos momentos localizados dos átomos de metal de transição.

Usamos a aproximação

$$\sum_i A_q^{-1}(r_i) A_{q_1}^{-1}(r_i) \equiv A(\vec{q}, \vec{q}_1) \sim \delta \vec{q}_1, - \vec{q} , \quad (3.44)$$

onde supomos que no amorfo os átomos não se afastem muito de suas posições no cristal.

Para baixas temperaturas é razoável aproximarmos

$$- (\partial f_{k\sigma}^{(0)} / \partial E_{k\sigma}) \approx \delta (E_{k\sigma} - \epsilon_F) ,$$

assim encontramos

$$\begin{aligned} f_{k'\uparrow}^{(0)} (1 - f_{k\uparrow}^{(0)}) \delta (-\omega_{k\uparrow}^{k'\uparrow} - \lambda) &\approx 2 k_B T \delta (E_{k\uparrow} - \epsilon_F) f^{(0)} (\epsilon_F + \lambda) e^{\beta\lambda} , \\ f_{k'\downarrow}^{(0)} (1 - f_{k\downarrow}^{(0)}) \delta (-\omega_{k\downarrow}^{k'\downarrow} + \lambda) &\approx 2 k_B T \delta (E_{k\downarrow} - \epsilon_F) f^{(0)} (\epsilon_F - \lambda) e^{-\beta\lambda} , \\ f_{k'\sigma}^{(0)} (1 - f_{k\sigma}^{(0)}) \delta (E_{k'\sigma} - E_{k\sigma}) &\approx 2 k_B T \delta (E_{k'\sigma} - E_{k\sigma}) \delta (E_{k\sigma} - \epsilon_F) f_{k'\sigma}^{(0)} , \end{aligned} \quad (3.45)$$

(com  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ )

onde  $\epsilon_F$  é a energia de Fermi.

Calculando o termo do denominador da fórmula de Nakano (eq. (3.26)) obtemos

$$\langle J_v J_v \rangle^2 = (e^2 k_B T V n/m)^2 \quad (3.46)$$

onde  $n$  é a densidade de elétrons de condução,  $V = V_0/N_0$ , sendo  $V_0$  o volume da amostra e  $N_0$  o número de sítios no material.

Após integrarmos o termo que resulta no numerador da eq. (3.26) sobre as superfícies de Fermi de spin para cima e spin para baixo, encontramos a seguinte expressão para a resistividade

$$\begin{aligned} \frac{\rho}{\rho_0} = & \frac{x^2 \mu^2 C}{n^2} \{ (\epsilon_F + \Delta)^2 + (\epsilon_F - \Delta)^2 \} \langle \delta J^z \delta J^z \rangle + \\ & + \{ (2 \epsilon_F - \lambda) ((\epsilon_F - \Delta) (\epsilon_F - \lambda + \Delta))^{1/2} (1 + e^{-\beta\lambda})^{-1} \\ & \cdot \langle \delta J^- \delta J^+ \rangle + \{ (2 \epsilon_F + \lambda) ((\epsilon_F + \Delta) (\epsilon_F + \lambda - \Delta))^{1/2} \\ & \cdot (1 + e^{\beta\lambda})^{-1} \} \cdot \langle \delta J^+ \delta J^- \rangle \} \quad (3.47) \end{aligned}$$

onde  $\rho_0$  é uma constante com dimensão de resistividade. Desde que não existe um cálculo para o fator de estrutura destas ligas amorfas, aproximamos a integral sobre a primeira zona de Brillouin do fator de estrutura  $|S(\vec{k})|^2$  por um valor constante  $C$ , supondo um espalhamento completamente difuso.

Na equação (3.47)  $n$  é a densidade de elétrons de

condução na liga ferromagnética amorfa, supomos que o metal nobre (Au) contribua com um elétron de condução e que o metal de transição (Fe, Co, Ni) contribua com um elétron 4s mais uma fração de 5% dos elétrons  $3d^{11}$ , assim que

$$n = \frac{N_0}{V_0} \{ (1 - x) \cdot 1 + \alpha x \} , \quad (3.48)$$

onde  $\alpha$  representa a contribuição dos elétrons de condução do metal de transição para os elétrons de condução da liga e  $x$  é a concentração dos átomos de metal de transição na liga. Portanto, a energia de Fermi (aproximação do elétron livre) é dada por

$$\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m = \frac{\hbar^2}{2m} \left( 3\pi^2 \frac{N_0}{V_0} \right)^{2/3} \{ (1 - x) + \alpha x \}^{2/3} . \quad (3.49)$$

A seguir apresentamos a discussão de nossos resultados e conclusões.

### 3.3 - Discussão dos resultados e conclusões

Os cálculos numéricos foram feitos em termos dos parâmetros adimensionais

$$j \equiv \mathcal{J}' / z \mathcal{J} ,$$

$$d \equiv D / z \mathcal{J} ,$$

$$\frac{\epsilon_F}{z \mathcal{J}} \equiv a \{ (1 - x) \cdot 1 + \alpha x \}^{2/3} , \quad (3.50)$$

$$t \equiv k_B T / zJ,$$

e

$$h \equiv \mu_B g H / zJ,$$

onde  $z$  é o número médio de vizinhos magnéticos mais próximos de um dado átomo magnético e  $(zJ)$  foi obtido de um cálculo de campo molecular<sup>60</sup> usando a temperatura de transição  $T_C$ <sup>60</sup> do metal de transição

$$zJ = 3 k_B T_C / \{2 S (S + 1)\} \quad (3.51)$$

onde supomos  $S = 1$  para os metais de transição. Encontramos na tabela abaixo os valores de  $T_C$ ,  $zJ$  e  $\alpha$  para Co, Fe e Ni

T	$T_C$ (K)	$zJ$ ( $10^{-2}$ eV)	$\alpha$
Co	1388	8.98	1.4
Fe	1043	6.75	1.35
Ni	627	4.06	1.45

Tabela 2

O parâmetro  $\alpha$  é escolhido de tal maneira que reproduza a energia de Fermi do Au no limite quando  $x \rightarrow 0$ .

O caso de uma anisotropia magneto cristalina uniaxial corresponde a uma distribuição  $P(\cos \theta) = \delta(1 - \cos \theta)$  dos eixos de fácil magnetização na liga cristalina. Comparando os resultados experimentais da magnetoresistência, para campo aplicado zero, para a liga ferromagnética  $Ni_{0.82} Au_{0.18}$  nas fa-

ses cristalina e amorfa (Fig. 1 da Ref. 37) com os nossos resultados para estas ligas (como cristalina e como amorfa com uma anisotropia uniaxial tendo o mesmo valor do parâmetro  $d$ ) obtemos uma estimativa para o valor da constante  $C$  (relação (3.47))

$$C \sim 1.0$$

Devido ao fato de que nossos resultados para a resistividade e magnetoresistência são similares (qualitativamente) para as diversas ligas  $T_x Au_{1-x}$ , quando variamos a concentração do metal de transição ou quando percorremos a série Fe, Co, Ni, são apresentamos os resultados relevantes para a liga  $Fe_{0.5}Au_{0.5}$  (Figs. 33-36). Os aspectos quantitativos que mostram a dependência da resistividade com cada um dos metais de transição e com suas concentrações nas ligas são mostrados nas figuras 37 e 38. A dependência da resistividade no parâmetro  $j$  numericamente resulta como sendo  $\rho/\rho_0 \propto j^2$ . Assim, apresentamos os resultados para um valor fixo de  $j$ ,  $j = 0.1$ .

Na figura 33 mostramos as curvas de magnetização (versus temperatura reduzida  $t$ ) para a liga  $Fe_{0.5}Au_{0.5}$ , sem campo magnético aplicado ( $h = 0$ ), para dois valores do parâmetro  $d$ ,  $d = 0.0$  e  $d = 0.6$ . O parâmetro  $d$  é uma medida do grau de competição entre os efeitos de alinhamento da interação de troca e de desalinhamento da anisotropia magnética aleatória (RMA). Podemos verificar que um valor de  $d$  diferente de zero aumenta a desordem do sistema de spins localizados e faz com que a temperatura de transição ferromagnética diminua em relação ao caso quando não consideramos RMA ( $d = 0.0$ ).

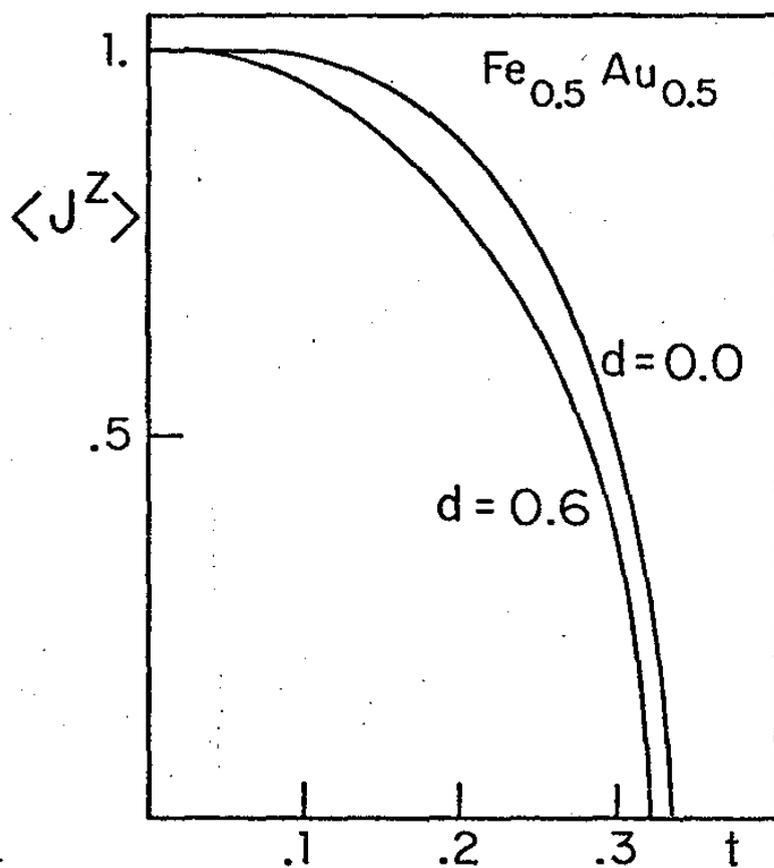


Fig. 33: magnetização para a liga  $\text{Fe}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$  como função da temperatura reduzida  $t$ . O parâmetro  $d$  altera a curva de magnetização e diminui o valor da temperatura de transição ferromagnética.

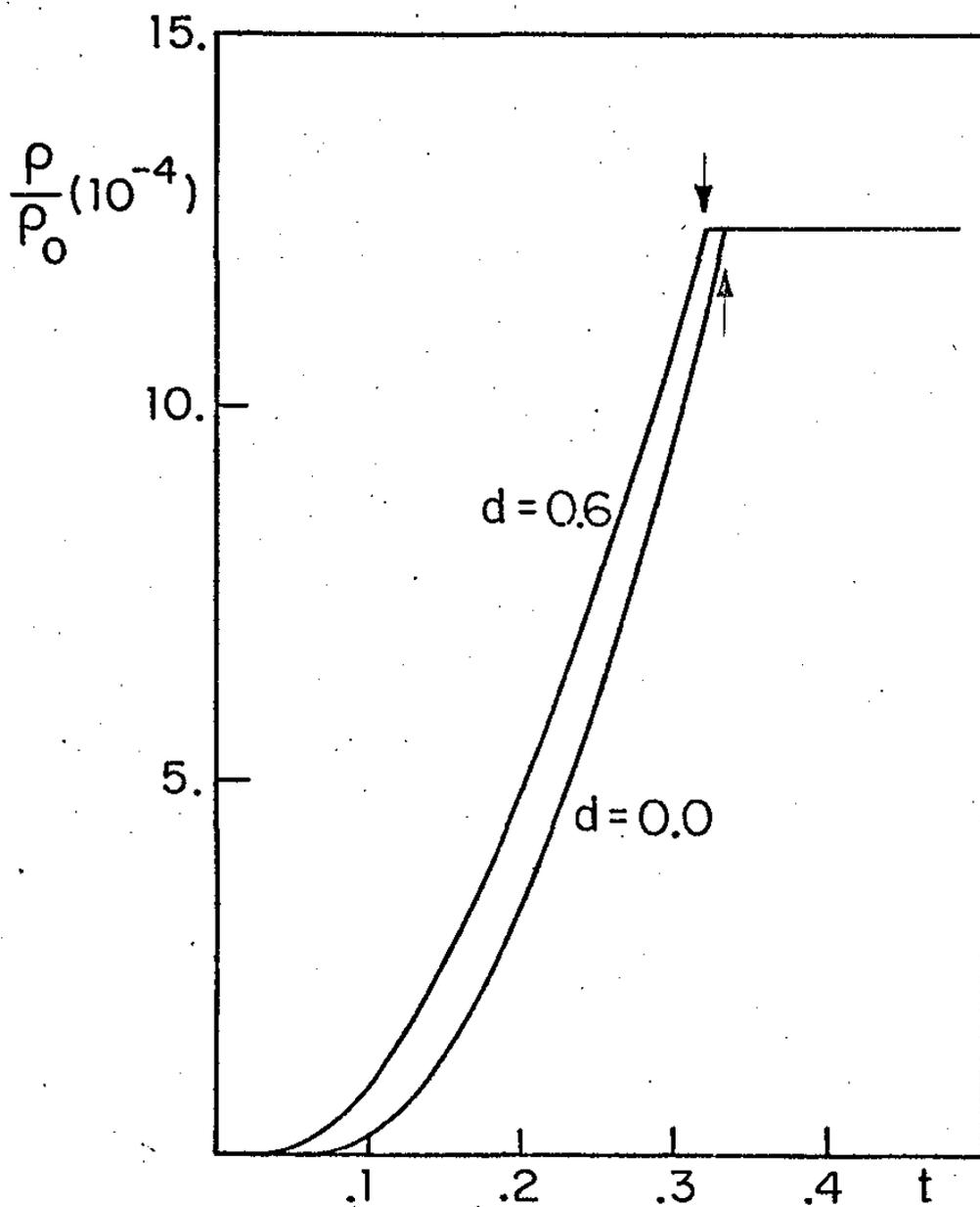


Fig. 34: resistividade para a liga  $\text{Fe}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$  como função da temperatura reduzida  $t$ , para dois valores do parâmetro  $d$ . As flechas indicam as temperaturas de Curie correspondentes.

As curvas de resistividade para a liga  $\text{Fe}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ , sem campo magnético aplicado, para  $d = 0.0$  e  $d = 0.6$  são mostradas na Fig. 34. Podemos ver que uma maior desordem ( $d = 0.6$ ) no sistema de spins localizados torna o meio mais resistivo para os elétrons de condução. Para temperaturas baixas a resistividade mostra um comportamento  $T^2$  e acima da temperatura de Curie ela satura. Para  $T \geq T_C$ ,  $\Delta$  e  $\lambda$  se anulam ( $h = 0$ . e  $\langle J^z \rangle = 0$ .), assim a resistividade (eq. (3.47) torna-se

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{x^2 g^2}{n^2} 2 \epsilon_F^2 \{ \langle (\delta J^z)^2 \rangle + (\langle \delta J^- \delta J^+ \rangle + \langle \delta J^+ \delta J^- \rangle) / 2 \}. \quad (3.52)$$

A partir da relação entre as componentes do operador momentum angular:  $J^2 = (J^z)^2 + (J^+ J^- + J^- J^+) / 2$ , obtemos uma regra de soma para as correlações dos desvios dos momentos localizados

$$J(J+1) - \langle J^z \rangle^2 = \langle (\delta J^z)^2 \rangle + (\langle \delta J^- \delta J^+ \rangle + \langle \delta J^+ \delta J^- \rangle) / 2. \quad (3.53)$$

Para  $J = 1$  e para  $T \geq T_C$  ( $\langle J^z \rangle = 0$ .)

$$\langle (\delta J^z)^2 \rangle + (\langle \delta J^- \delta J^+ \rangle + \langle \delta J^+ \delta J^- \rangle) / 2 = 2, \quad (3.54)$$

saturando assim a resistividade para  $T \geq T_C$ .

Na figura 35 mostramos os resultados da magnetoresistência para a liga  $\text{Fe}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$ , mantendo fixo o valor do parâmetro  $d$ , para diferentes valores da temperatura reduzida,  $t < t_C$ ,  $t = t_C$  e  $t > t_C$ . Encontramos um decréscimo da resistividade com o campo magnético, a magnetoresistência é negativa. Podemos notar que a magnetoresistência depende da tempera

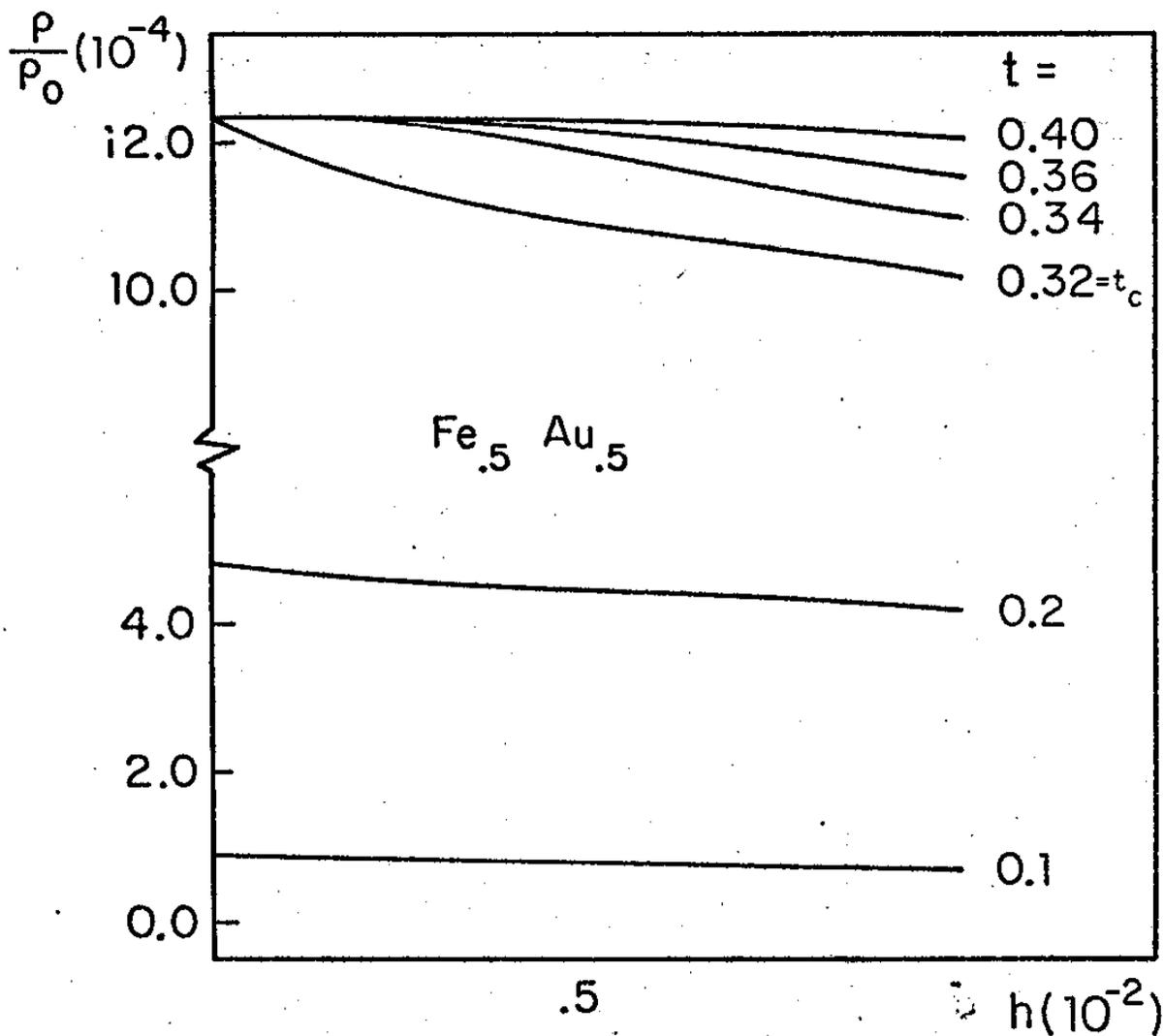


Fig. 35: curvas de magnetoresistência para a liga amorfa  $\text{Fe}_{0.5}\text{Au}_{0.5}$  para  $t < t_c$ ,  $t' = t_c$  e  $t > t_c$ .

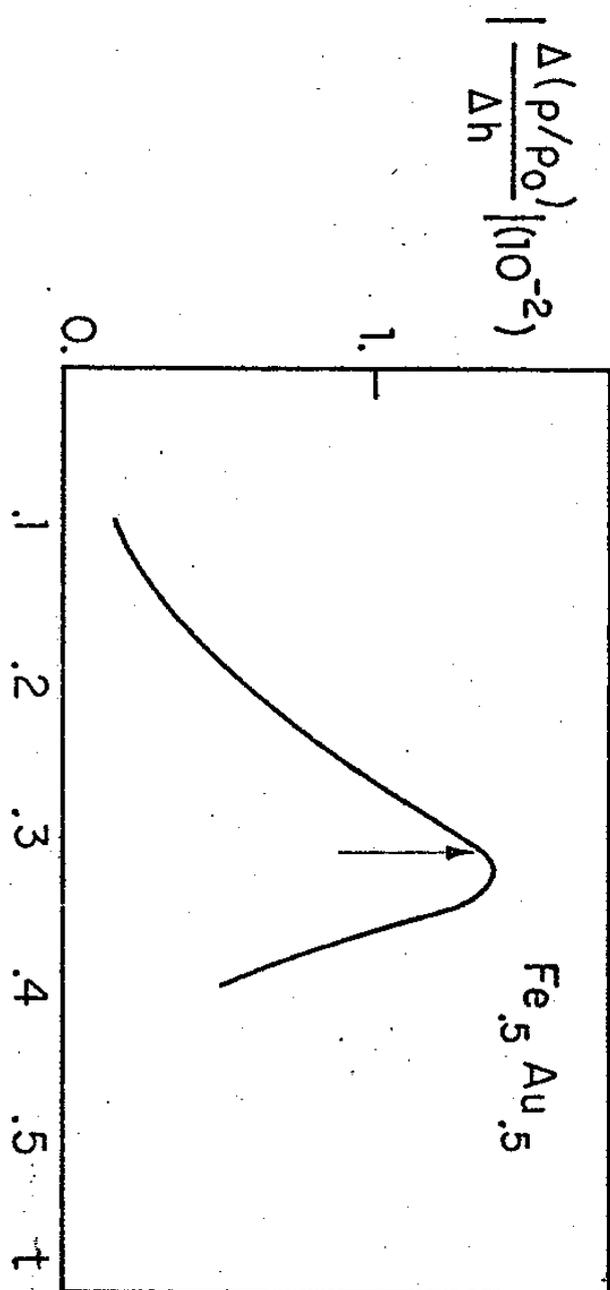


Fig. 36: inclinação das curvas de magnetoresistência da liga  $Fe_{0.5}Au_{0.5}$  como função da temperatura reduzida  $t$ .

tura, tanto a forma quanto a inclinação das curvas se alteram quando variamos a temperatura.

A curva de variação com a temperatura das inclinações da magnetoresistência (Fig. 35), para  $h = 10^{-2}$ , é apresentada na figura 36. Esta curva apresenta um máximo próximo à temperatura de transição ferromagnética e aproxima-se de zero para valores de  $t$  muito baixos e para temperaturas maiores que a temperatura  $t_C$ .

Nas figuras 37 e 38 apresentamos a variação da resistividade com a concentração do Fe na liga  $Fe_xAu_{1-x}$  e com o metal de transição na liga  $T_{0.5}Au_{0.5}$ , respectivamente. Vemos que o efeito da concentração do metal de transição na liga é tal que o coeficiente de inclinação do comportamento  $T^2$  da resistividade cresce com o decréscimo da concentração (Fig. 37). Como na Fig. 38 estamos relacionando a resistividade de ligas com os três metais de transição, as curvas são apresentadas como função da temperatura absoluta. A temperatura de Curie das ligas é tal que  $T_C (Ni) < T_C (Fe) < T_C (Co)$ .

Verificamos então que um modelo de spins localizados é uma boa descrição para os metais de transição (Fe, Co, Ni) em ligas ferromagnéticas amorfas de metal de transição com metal nobre em todo intervalo de concentrações por nós estudado.

Além disso o fato de que nossos resultados reproduzem qualitativamente os comportamentos experimentais observados da magnetoresistência e resistividade para estas ligas ferromagnéticas amorfas leva-nos a sugerir que o mecanismo de espalhamento responsável pela resistividade nestas ligas, seja o

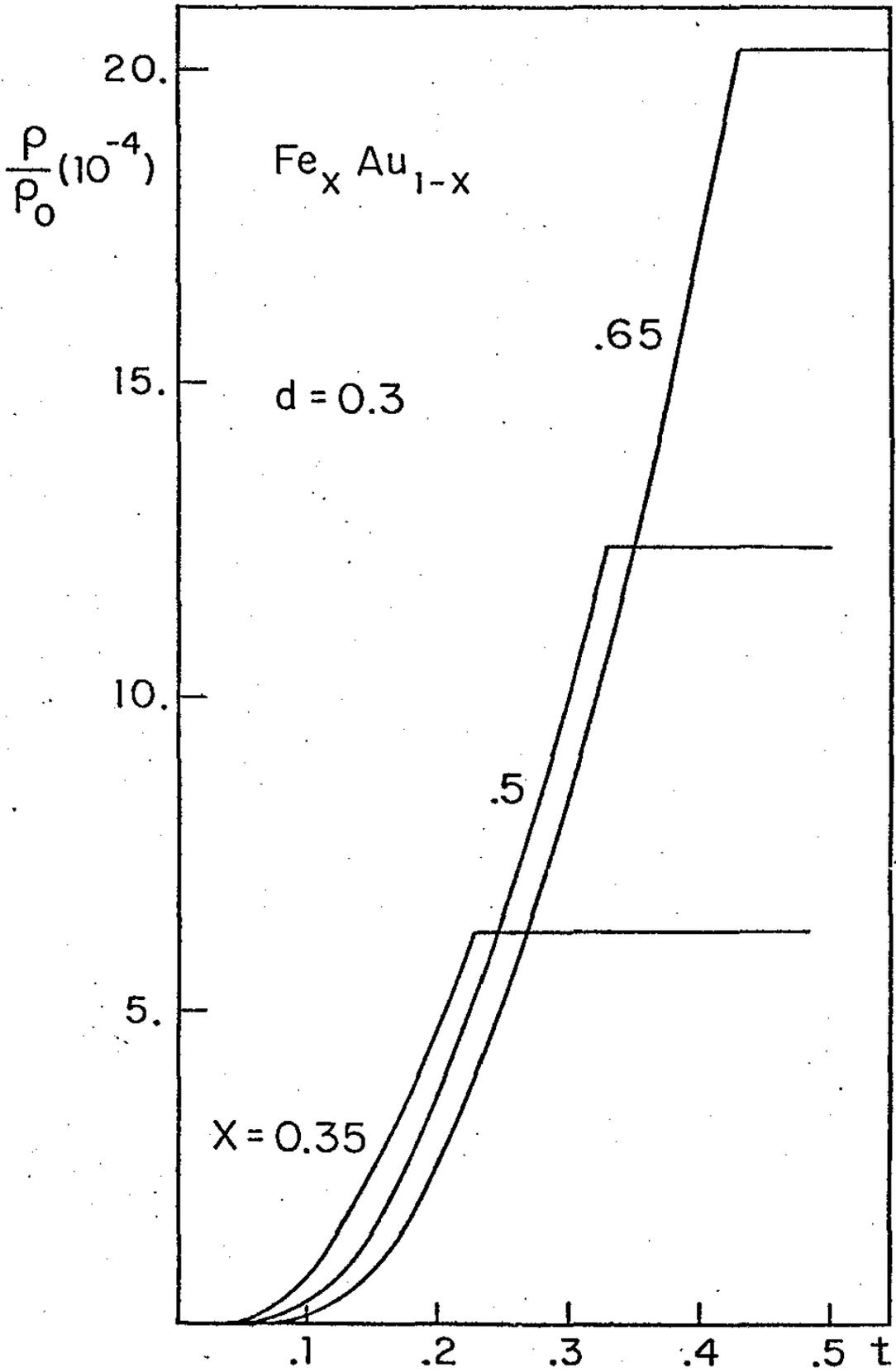


Fig. 37: resistividade das ligas  $\text{Fe}_x\text{Au}_{1-x}$  como função da temperatura reduzida  $t$ .

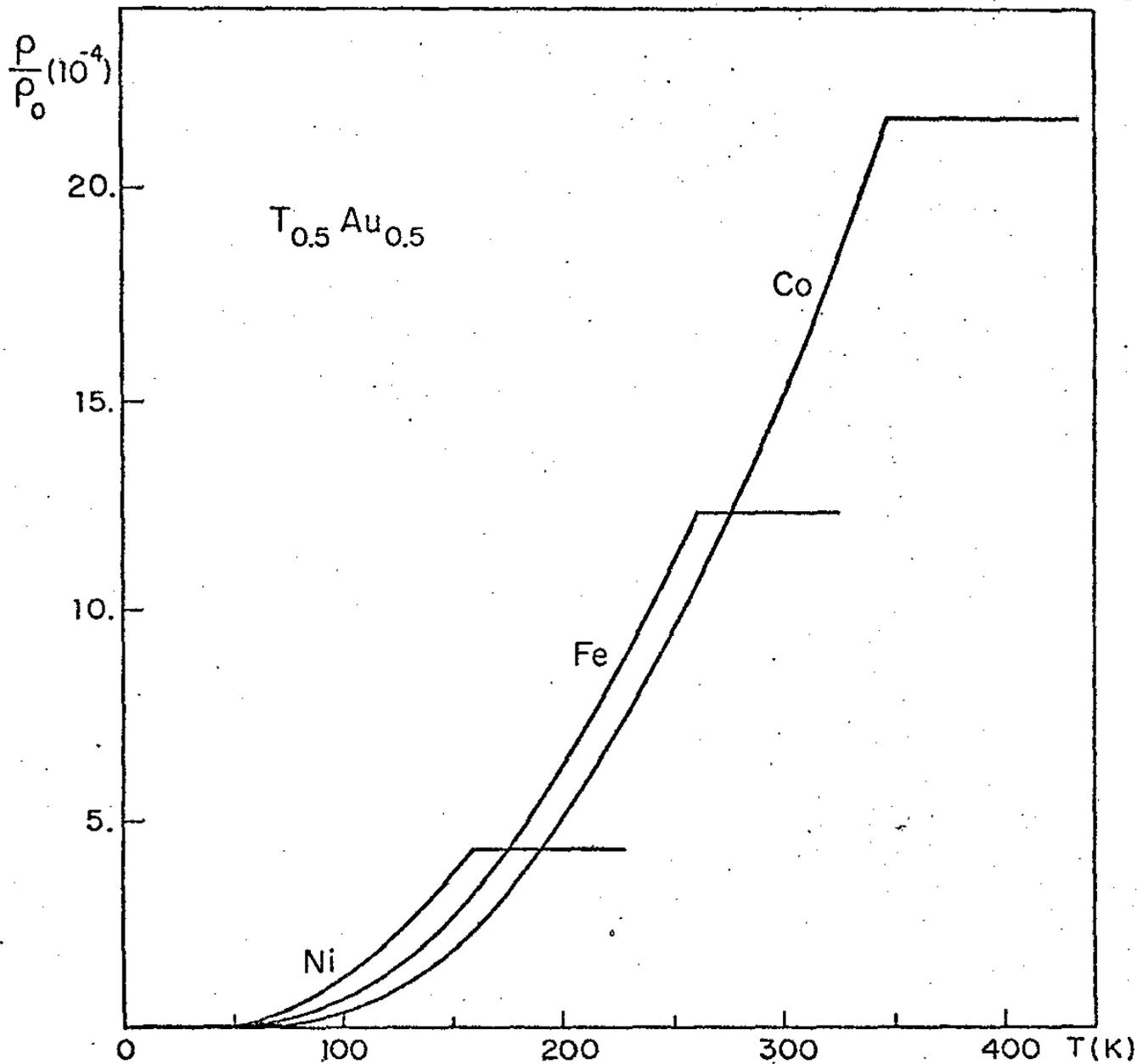


Fig. 38: resistividade das ligas  $T_{0.5}Au_{0.5}$  como função da temperatura.

espalhamento dos elétrons de condução pelas flutuações dos momentos localizados dos átomos de metal de transição. Este mecanismo é tal que o mais baixo valor da resistividade ocorre quando todos os spins estão alinhados, se existem desvios dos spins a resistividade cresce. A presença de uma anisotropia magnética aleatória, introduzindo eixos aleatórios de fácil magnetização, pode fazer com que os desvios de spin ocorram mesmo a temperaturas muito baixas. Quando um campo magnético é aplicado este aumenta o efeito do alinhamento dos spins e reduz a resistividade, resultando numa magnetoresistência negativa.

## REFERÊNCIAS

1. HERRING, C., ed. G.T. Rado e H.Suhl (New York, Academic Press, 1966), vol. IV, cap. VI.
2. HUBBARD, J., Phys. Rev. B19, 2626 (1979).
3. MORÁN-LÓPEZ, J.L. e FALICOV, L.M., Phys. Rev. B18, 2549 (1978).
4. SINGH, M., WANG, C.S. e CALLAWAY, J., Phys. Rev. B11, 287 (1975).
5. COLEMAN, R.V., MORRIS, R.C. e SELLMYER, D.J., Phys. Rev. B8, 317 (1973).
6. COLEMAN, R.V., LOWREY, W.H., MORRIS, R.C. e SELLMYER, D.J., Proc. of Colloq. on Phys. in High Magn. Fields, Grenoble, França, (1974).
7. KLAFFKY, R.W. e COLEMAN, R.V., Phys. Rev. B10, 2915 (1974).
8. CABRERA, G.G. e FALICOV, L.M., Phys. Rev. B10, 4803 (1974).
9. RIBEIRO TEIXEIRA, R.M. e CABRERA, G.G., Revista Brasileira de Física 9, 3 (1979).
10. RIBEIRO TEIXEIRA, R.M. e CABRERA, G.G., Solid State Comm. 10, 977 (1978).
11. STEARNS, M.B., Phys. Rev. B8, 4383 (1973).
12. HARRIS, R., PLISCHKE, M. e ZUCKERMANN, M.J., Phys. Rev. Letters 31, 160 (1973).

13. LARSEN, U., Phys. Rev. B18, 5014 (1978).
14. BERGMANN, G., Phys. Rev. B15, 1514 (1977).
15. BERGMANN, G. e MARQUARDT, P., Phys. Rev. B17, 1355 (1978).
16. RIBEIRO TEIXEIRA, R.M. e CABRERA, G.G., a ser publicado.
17. NAKANO, H., Prog. Theor. Phys. 17, 145 (1957).
18. KUBO, R., J. Phys. Soc. Japan 12, 570 (1957).
19. LIFSHITZ, I.M., AZBEL, M. Ya. e KAGANOV, M.I., Sov. Phys. JETP 3, 143 (1956); 4, 41 (1957).
20. FALICOV, L.M. e SIEVERT, P., Phys. Rev. 138, A88 (1965).
21. MERCOUROFF, W., "La Surface de Fermi des Métaux", (Paris, Masson, 1967).
22. FALICOV, L.M., "Fermi Surface Studies", em "Electrons in Crystalline Solids", (Viena, International Atomic Agency, 1973).
23. CRACKNELL, A.P., "The Fermi Surface of Metals", (Londres, Taylor e Francis, 1971).
24. HARRISON, W.A. e WEBB, M.B., editores, "The Fermi Surface", (New York, Wiley, 1960).
25. ZENER, C., Proc. Roy. Soc. 145, 523 (1934).
26. COHEN, M.H. e FALICOV, L.M., Phys. Rev. Lett. 7, 231 (1961).
27. PIPPARD, A.B., Proc. Roy. Soc. A270, 1 (1962).
28. HARRISON, W.A., Phys. Rev. 126, 497 (1962).
29. BLOUNT, E.I., Phys. Rev. 126, 1636 (1962).

30. STONER, E.C., Proc. Roy. Soc. 169A, 339 (1939).
31. HERRING, C., em "Magnetism", editado por G.T. Rado e H.Suhl, (New York, Academic Press, 1966) vol. IV, cap. XI, pāgs. 256-259.
32. MOTT, N.F., Proc. Soc. 47, 571 (1935); MOTT, N.F. e JONES, H., "The theory of the properties of metals and alloys", (New York, Dover, 1958).
33. DANAN, H., HERR, A. e MEYER, A.J.P., J. Appl. Phys. 39, 669 (1968).
34. WOOD, J.H., Phys. Rev. 126, 2, 517 (1962).
35. WAKOH, S. e YAMASHITA, J., J. Phys. Soc. Japan 21, 9 (1966).
36. REED, W.A. e FAWCETT, E., Phys. Rev. 136, A422 (1964).
37. FAWCETT, E., Adv. in Phys. 13, 139 (1964); ISIN, A. e COLEMAN, R.V., Phys. Rev. 137, A1609 (1965); REED, W.A. e FAWCETT, E., em Proc. of the International Conference on Magnetism, Nottingham, 120 (1964).
38. GOLD, A.V., HODGES, L., PANOUSIS, P.T. e STONE, D.R., Inter. J. Magn. 2, 357 (1971).
39. GOLD, A.V., J. Low Temp. Phys. 16, 3 (1974).
40. TAWIL, R.A. e CALLAWAY, J., Phys. Rev. B7, 4242 (1973).
41. ANGADI, M.M., FAWCETT, E. e RASOLT, M., Phys. Rev. Lett. 32, 613 (1974).
42. FALICOV, L.M. e RUVALDS, J., Phys. Rev. 172, 498 (1968).

43. HURD, C.M., "The Hall effect in metals and alloys", (New York-London, Plenum Press, 1972), pág. 10 (note que devido a um erro tipográfico a relação (1.10) seria identicamente nula em virtude das relações de Onsager).
44. CABRERA, G.G. e FALICOV, L.M., Phys. Rev. B11, 2651 (1975).
45. ZIMAN, J.M., "Principles of the Theory of Solids", (England, Cambridge U.P., 1972), 2<sup>a</sup> ed.
46. RIBEIRO TEIXEIRA, R.M. e CABRERA, G.G., a ser publicado.
47. FAWCETT, E., Adv. in Phys. 13, 139 (1964).
48. HOFMAN, J.A., PASKIN, H., TANER, K.J. e WEISS, R.J., J. Phys. Chem. Solids 1, 45 (1956).
49. LOWDE, R.D., Proc. R. Soc. London 235, 305 (1956); ERICSON, M. e JACROT, B., J. Phys. Chem. Solids 13, 325 (1960).
50. SHULL, C.G. e YAMADA, Y., J. Phys. Soc. Japan Suppl. 17, 1 (1965).
51. RHODES, P. e WOHLFARTH, E.P., Proc. R. Soc. A273, 247 (1963).
52. HUTCHINGS, M.T., em "Solid State Physics", ed. F. Seitz e D. Turnbull, (New York, Academic Press, 1964), vol. 16, pág. 227.
53. COCHRANE, R.W., HARRIS, R. e PLISCHKE, M., J. Non-Crystal. Solids 15, 239 (1974).
54. COCHRANE, R.W., HARRIS, R., PLISCHKE, M., ZOBIN, D. e ZUCKER MANN, M.J., J. Phys. F: Metal Phys. 5, 763 (1975).
55. TAYLOR, P.L. e WU, Shi-Yu, Phys. Rev. B2, 1752 (1970).

56. ELLIOT, R.J., KRUMHANSL, J.A. e LEATH, P.L., Rev. Mod. Phys. 46, 465 (1974).
57. KONDO, J., Prog. Theor. Phys. 27, 772 (1962).
58. HAAS, C., Phys. Rev. 168, 531 (1968).
59. YAMADA, H. e TAKADA, S., Prog. Theor. Phys. 48, 1828 (1972).
60. YAMADA, H. e TAKADA, S., J. Phys. Soc. Japan 34, 51 (1973).
61. MESSIAH, A., 'Quantum Mechanics', (New York, Wiley, 1958), p̄ag. 321.
62. MATTUCK, R.D., "A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem", (New York, McGraw-Hill, 1967), p̄ag. 258.
63. BUTKOV, E., "Mathematical Physics", (Reading Addison-Wesley, 1968).