



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Instituto de Física Gleb Wataghin

ALEX ENRIQUE CRISPIM

**Propriedades de Transporte em Sistemas com Ordenamento Magnético e
Interação Spin–Órbita**

**Transport Properties in Systems with Magnetic Ordering and Spin–Orbit
Interaction**

Campinas - SP
2024

ALEX ENRIQUE CRISPIM

**Propriedades de Transporte em Sistemas com Ordenamento Magnético e
Interação Spin–Órbita**

Dissertação apresentada ao Instituto de Física Gleb Wataghin como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Física, na área de Física

Orientador: Prof. Dr. Eduardo Miranda

ESTE TRABALHO CORRESPONDE À VER-
SÃO FINAL DA DISSERTAÇÃO DEFENDIDA
PELO ALUNO ALEX ENRIQUE CRISPIM, E
ORIENTADA PELO PROF. DR. EDUARDO
MIRANDA

Campinas - SP
2024

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP)
Biblioteca do Instituto de Física Gleb Wataghin
Lucimeire de Oliveira Silva da Rocha - CRB 8-9174

C868p Crispim, Alex Enrique, 1997-
Propriedades de transporte em sistemas com ordenamento magnético e
interação spin-órbita / Alex Enrique Crispim. – Campinas, SP : [s.n.], 2024.

Orientador(es): Eduardo Miranda.
Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual de Campinas
(UNICAMP), Instituto de Física Gleb Wataghin.

1. Ondas de spin. 2. Férmons pesados. 3. Magnetismo - Propriedades de
transporte. I. Miranda, Eduardo, 1963-. II. Universidade Estadual de
Campinas (UNICAMP). Instituto de Física Gleb Wataghin. III. Título.

Informações complementares

Título em outro idioma: Transport properties in systems with magnetic ordering and
spin-orbit interaction

Palavras-chave em inglês:

Spin waves

Heavy fermions

Magnetism - Transport properties

Área de concentração: Física

Titulação: Mestre em Física

Banca examinadora:

Ricardo Luís Doretto

Willian Massashi Hisano Natori

Victor Luiz Quito

Data de defesa: 02-12-2024

Programa de Pós-Graduação: Física

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0003-2827-1083>
- Currículo Lattes do autor: <https://lattes.cnpq.br/3481925078113280>



INSTITUTO DE FÍSICA
GLEB WATAGHIN

MEMBROS DA COMISSÃO EXAMINADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DO ALUNO ALEX
ENRIQUE CRISPIM - RA 262766, APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA GLEB
WATAGHIN, DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 02/12/2024.

COMISSÃO JULGADORA:

- Prof. Dr. Ricardo Luís Doretto – Presidente (IFGW/ UNICAMP)
- Prof. Dr. Willian Massashi Hisano Natori (IFGW/ UNICAMP)
- Prof. Dr. Victor Luiz Quito (Instituto de Física de São Carlos - USP)

OBS.: Ata da defesa com as respectivas assinaturas dos membros encontra-se no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria do Programa da Unidade.

CAMPINAS

2024

Este trabalho é dedicado à minha avó, Cecilia, e à minha esposa, Edilaine.

Agradecimentos

Este trabalho nunca seria possível sem o apoio de pessoas especiais a quem tenho muito a agradecer.

Sou eternamente grato ao meu orientador, Eduardo Miranda, por estar comigo ao longo deste trabalho, tendo me acolhido em um momento de grande dificuldade, me guiando, ensinando, promovendo discussões e aconselhando não apenas na esfera acadêmica, mas muito além dela. Houve diversos momentos de grande dificuldade durante a trajetória do meu mestrado e o apoio profissional e pessoal que recebi foram fundamentais para que este projeto fosse concluído. Levo desta experiência muito aprendizado e uma grande admiração do profissional e da pessoa que o professor Eduardo é.

Agradeço à minha esposa, Edilaine Souza Araujo, por sempre estar ao meu lado, por todo amor, toda felicidade, paciência, companheirismo, compreensão e motivação que tanto me ajudaram a prosseguir em momentos difíceis do mestrado e da vida. Sou muito grato, principalmente, por todo o apoio emocional que me manteve no lugar, quando muitas vezes me senti perdido e desmotivado.

Agradeço à minha avó, Cecilia Moreira Crispim, por tudo o que fez por mim. Todas as oportunidades que tive na vida, em particular meus estudos, não seriam possíveis sem todo o esforço que fez por mim. Sempre levarei seu grande amor e bondade para minha vida.

Reservo um especial agradecimento ao professor Eduardo Peres Novais de Sá (UFABC), por ter me enviado para à Unicamp e para o professor Eduardo Miranda. Sua influência teve papel importante em muitas de minhas escolhas.

Agradeço aos meus amados animais de estimação, Yumi (in Memoriam) e Bichinho (in Memoriam), que proporcionaram amor e conforto, mas que infelizmente acabaram nos deixando recentemente.

Por fim, agradeço ao Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovações e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico – CNPq, por financiar este trabalho sob o processo de número 130749/2020-6. Eu não poderia ter começado este projeto de mestrado sem este financiamento.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Resumo

Esta dissertação explora os efeitos nas propriedades de transporte de um modelo com ordem ferromagnética acoplada a portadores de carga por meio de um espalhamento de troca que leva em conta efeitos de spin-órbita. Motivados inicialmente por compostos de férmiões pesados como o CeRhIn₅, que possui anisotropias de transporte em sua fase ordenada ainda não compreendidas, investigamos um modelo simplificado com o intuito de entender se os ingredientes deste modelo seriam suficientes para explicar as anisotropias observadas, provendo, assim, uma explicação mais simplificada do que as hipóteses presentes na literatura vigente.

Para este estudo, utilizamos a teoria de ondas de spin, buscando prover uma explicação física simples para o fenômeno, descrevendo as excitações da rede de momentos localizados e a interação entre os momentos magnéticos localizados e os elétrons de condução por magnons. A equação de transporte de Boltzmann, foi empregada para estudar a função de distribuição do sistema e as propriedades de transporte desse. Devido à grande complexidade na solução da equação de Boltzmann, fizemos uso da aproximação de tempo de relaxação.

Nossa análise mostrou o surgimento de anisotropias na condutividade elétrica de sistemas com ordenamento ferromagnético e forte interação spin-órbita. Observamos que há uma anisotropia quando a magnetização da rede forma um ângulo com o campo elétrico aplicado e que há um aumento desta anisotropia com o aumento do ângulo, atingindo seu pico quando essas grandezas são ortogonais.

Embora os resultados obtidos não sejam suficientes para explicar as anisotropias observadas em sistemas como o CeRhIn₅, acima de um campo magnético crítico, acreditamos que nossos resultados possam estar relacionados à presença de uma sutil anisotropia observada abaixo do campo crítico.

A despeito desses achados, este estudo possui diversas limitações, apresentadas no capítulo final. Todavia, acreditamos que este trabalho provê motivação para investigações futuras do papel deste mecanismo nas propriedades de transporte de sistemas de férmiões pesados. Um entendimento completo da relevância desses mecanismos ainda requer investigações mais aprofundadas sobre o tema.

Palavras-chave: *Ondas de spin; Férmiões pesados; Magnetismo - Propriedades de transporte*

Abstract

This dissertation explores the effects in the transport properties of a model with ferromagnetic order coupled to charge carriers through exchange scattering in the presence of strong spin-orbit interaction. Motivated by heavy fermions compounds like CeRhIn₅, which presents transport anisotropies in its ordered phase not yet understood, we investigated a simplified model in order to understand if the model's ingredients would be sufficient to explain the observed anisotropies, providing, in this way, a simplified explanation for the anisotropies when compared to the hypotheses in the current literature.

For this study, we employed spin wave theory, aiming at providing a simple physical explanation for the phenomenon, describing the excitations of the lattice of ordered localized moments and its interaction with the conduction electrons through magnons. The transport Boltzmann equation was used to study the distribution function and the transport properties of the system. Due to the complexity of the Boltzmann equation, we made use of the relaxation time approximation.

Our analysis showed the emergence of anisotropies in the electrical conductivity of systems with ferromagnetic ordering and strong spin-orbit coupling. We observed the presence of an anisotropy when the lattice magnetization forms an angle with the applied electric field and that there is an increase of the anisotropy when the angle increases, reaching its maximum value when the two quantities are orthogonal.

Although the results obtained are not sufficient to explain the anisotropies observed in systems such as CeRhIn₅ above a critical magnetic field, we believe that our results may be related to the presence of a subtle anisotropy observed below the critical field.

Despite these findings, this study has several limitations, presented in the final chapter. Nevertheless, we believe that this work provides motivation for further investigation of the role of this mechanism in the transport properties of heavy fermions systems. A complete understanding of the relevance of these ingredients requires a more in-depth treatment of the subject.

Keywords: *Spin waves; Heavy fermions; Magnetism - Transport properties*

Lista de Abreviações

Abreviação	Significado
FM	Ferromagnetismo/Ferromagnético
AFM	Antiferromagnetismo/Antiferromagnético
MCS	Modelo de Coqblin-Schrieffer
HP	Holstein–Primakoff
HPG	Holstein–Primakoff Generalizada para $SU(N)$
RI	Representação irredutível

Sumário

Capítulo 1. Introdução	12
1.1 Contextualização	12
1.1.1 Sistemas Fortemente Correlacionados e Férmions Pesados	12
1.1.2 Teoria de Ondas de Spins	15
1.2 Objetivo deste Trabalho	16
1.3 Visão Geral dos Capítulos	17
1.4 Convenções	18
Capítulo 2. Teoria de Ondas de Spin	20
2.1 Modelo de Heisenberg e Transformação de Holstein–Primakoff	20
2.1.1 Sistema Ferromagnético	22
2.1.2 Transformação de Holstein–Primakoff	23
2.1.3 Solução Do Sistema Ferromagnético Por Ondas de Spin	25
2.1.4 Caso Antiferromagnético	27
2.2 Representação de Schwinger e Transformação de Holstein–Primakoff	29
2.3 Holstein–Primakoff Generalizada para simetria $U(N)$	31
Capítulo 3. Modelo de Coqblin–Schrieffer	34
3.1 Modelos de Anderson e Kondo e a Transformação de Schrieffer–Wolff	34
3.2 Derivação do Modelo de Coqblin–Schrieffer	38
Capítulo 4. Modelo Efetivo	42
4.1 Holstein–Primakoff Aplicação ao Modelo de Coqblin–Schrieffer	42
4.2 Dinâmica dos Mágmons	45
Capítulo 5. Equação de Boltzmann	49
5.1 Observações preliminares	49
5.2 Dinâmica da função de distribuição	49
5.3 Termo de Colisão	51
5.3.1 Forma Geral	51
5.3.2 Amplitude de Transição	52
5.3.3 Linearização do Termo de Colisão	52
5.3.4 Aproximação de Tempo de Relaxação	53
5.4 Aplicação do formalismo às ondas de spins para $j = 1/2$ e $\ell = 0$	54
Capítulo 6. Observáveis Físicos e Anisotropia	60

6.1	Condutividade Elétrica	60
6.2	Geometria do Problema e Considerações Físicas	62
6.3	Calculo de $\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k})$ Para j e ℓ genéricos.	63
6.3.1	Condutividade	66
6.4	Espalhamento por impurezas não magnéticas	67
6.5	Estudo da Anisotropia	69
6.5.1	Definição de Anisotropia	69
6.5.2	Métodos e Resultados Numéricos para a Anisotropia	69
Capítulo 7. Conclusão e Perspectivas Futuras		77
Referências Bibliográficas		79
Apêndices		84
Apêndice A. Derivação da Transformação de Holstein–Primakoff		84
Apêndice B. Cálculo dos elementos de matriz da interação elétron–mágnon		87
B.1	Alinhamento na direção $\hat{\mathbf{z}}$	87
B.2	Alinhamento em uma direção $\hat{\mathbf{m}}$ genérica	88
B.3	Cálculo de $Y_\ell^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$	89
Apêndice C. O Grupo $SU(N)$ e Algumas de suas Representações		91
C.1	O Grupo $SU(N)$ e Representações	91
C.1.1	O Grupo	91
C.1.2	Álgebra de Lie	92
C.1.3	Representações	92
C.2	Representação fundamental	93
C.3	Representações em Termos de Bósons e Férmions	94
C.3.1	Geradores e Representações de $SU(2)$ em Termo de Férmions	94
C.4	Caso Geral	96
C.5	Por que Trabalhamos na Representação Fundamental?	97

Capítulo **1**

Introdução

Neste primeiro capítulo, apresentaremos brevemente a história da física de sistemas fortemente correlacionados, férnions pesados e ondas de spin, os quais constituem os pilares desta dissertação. Em seguida, discutiremos as motivações e objetivos deste trabalho e o que foi realizado, de forma resumida. Ao final, apresentaremos a estrutura de capítulos da dissertação e as convenções utilizadas.

1.1 Contextualização

1.1.1 Sistemas Fortemente Correlacionados e Férnions Pesados

Sistemas fortemente correlacionados representam um campo desafiador da física da matéria condensada, tendo sido extensivamente estudados pelos últimos 70 anos, devido a questões fundamentais que desafiam os limites e fundamentos desta área da Física [1, 2]. A primeira dessas questões, conhecida desde o início da década de 30, foi a observação de um mínimo na resistividade elétrica, ρ , de ouro, cobre e outros metais a baixas temperaturas [3]. Posteriormente, este mínimo na resistividade foi relacionado à presença de impurezas magnéticas [4, 5]. Sarachick, Corenzwit e Longinotti demonstraram que era possível controlar se impurezas de ferro em uma amostra de nióbio possuiam caráter magnético ou não ao dopar o nióbio com molibdênio [5]. Este comportamento da resistividade é ilustrado na Fig. 1.1 para varias ligas de $\text{Mo}_x\text{Nb}_{1-x}$.

Este fenômeno, hoje conhecido como *efeito Kondo*, levou muito tempo para ser completamente compreendido e sua história é um tanto tortuosa. Vamos tentar resumi-la aqui. Em 1964, Kondo [6] demonstrou que ρ possui um termo proporcional a $-\ln T$ em terceira ordem de teoria de perturbação¹ no acoplamento de troca J do chamado modelo *s-d*. Esse modelo descreve um momento localizado de spin 1/2 acoplado através de um acoplamento de troca antiferromagnético de intensidade J com uma banda de elétrons de condução. Mais tarde, esse modelo passou a ser denominado de modelo ou Hamiltoniano Kondo. A conjunção desse termo logarítmico que cresce à medida que a temperatura decresce, resultado do espalhamento dos elétrons de condução pelos momentos localizados, com o espalhamento pelo fônlons da amostra (cuja contribuição decresce com a diminuição da temperatura [7]), é que dá origem ao mínimo na resistividade observado. Kondo pôde mostrar como a temperatura em que o mínimo ocorre

¹Uma ordem acima da aproximação de Born.

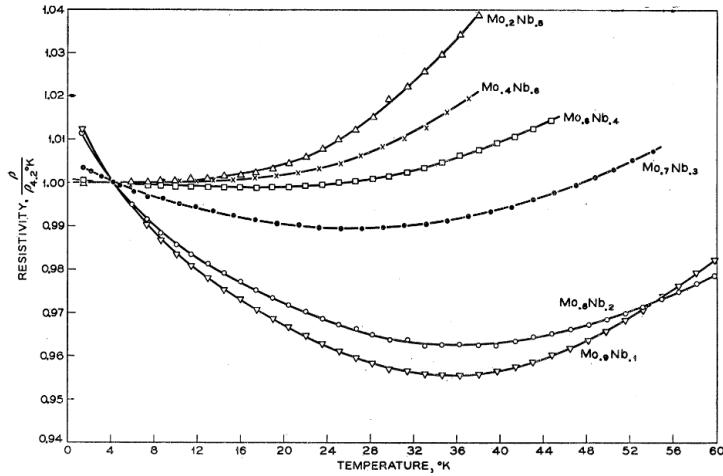


Figura 1.1: Resistividade em função da temperatura para $\text{Mo}_x\text{Nb}_{1-x}$ contendo 1% de Fe, mostrando um mínimo na resistividade a baixas temperaturas, que pode ser controlado pela porcentagem x de molibdênio dopado no nióbio. As resistividades estão normalizadas à temperatura de 4.2K . Figura extraída de [5].

depende da concentração de momentos localizados, em boa concordância com as observações experimentais.

Um pouco antes do trabalho de Kondo, em 1961, P. W. Anderson formulou o primeiro modelo capaz de explicar a formação de momentos magnéticos localizados em metais [8]. Este modelo, conhecido como modelo de impureza única de Anderson, descreve uma banda de elétrons de condução, uma impureza em um orbital d , uma hibridização entre a banda de condução e uma interação do tipo Hubbard, da forma $U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}$, onde $n_{d\sigma}$ é o número de elétrons com spin σ no sítio da impureza². Anderson mostrou que há formação de momentos localizados quando a repulsão coulombiana U é suficientemente grande e a energia do orbital da impureza é negativa e suficientemente grande em módulo.

Nesse regime em que o momento magnético se forma, pode-se procurar um Hamiltoniano efetivo que descreva a dinâmica efetiva do spin desse momento localizado em baixas energias. Como mostrado por Schrieffer e Wolff [9], essa dinâmica é descrita por um acoplamento de troca antiferromagnético (AFM) entre o spin e os elétrons da banda de condução, $J\mathbf{s} \cdot \mathbf{S}$, onde \mathbf{s} é a densidade de spins dos elétrons de condução na posição da impureza e \mathbf{S} é o spin do momento localizado [8, 10]. Esse termo é exatamente igual ao termo de troca do modelo usado por Kondo. Portanto, o modelo de impureza única de Anderson dá uma base microscópica para o modelo de Kondo. Como já mencionado, foi justamente com esse modelo que Kondo explicou o mínimo da resistividade dos metais contendo impurezas magnéticas.

Embora o resultado de Kondo explique o mínimo observado na resistividade, ele falha em descrever o comportamento assintótico quando $T \rightarrow 0$, pois o termo logarítmico diverge. Isso indica que a teoria de perturbação é inadequada para tratar o regime de baixas temperaturas. Empiricamente, observa-se que o espalhamento pelos momentos magnéticos satura, $\rho \rightarrow \text{const}$ quando $T \rightarrow 0$. A descrição do comportamento destes sistemas neste regime ficou conhecido como *problema Kondo*, servindo de grande motivação, no anos 60, para o estudo de sistemas

²Os modelos de Anderson e Kondo serão apresentados em mais detalhes no capítulo 3.

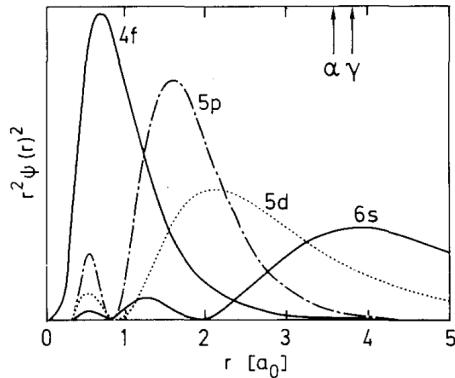


Figura 1.2: Funções de onda dos orbitais do Ce calculadas para configuração $4f^15d^16s^2$ [20]. É possível ver que o estado $4f$ é fortemente localizado e interno.

fortemente correlacionados [2]. A explicação final envolveu o desenvolvimento de importantes técnicas teóricas, como o grupo de renormalização, em suas versões analítica [11, 12] e numérica [13], teoria de líquidos de Fermi [14] e Ansatz de Bethe [15, 16, 17]. A partir do uso dessas várias técnicas, hoje compreendemos que o efeito Kondo descreve o processo pelo qual os momentos magnéticos localizados são blindados pelos spins do mar de elétrons na banda de condução, formando um centro espalhador unitário (ou seja, com defasagem $\delta = \pi/2$) sem spin [1] em $T = 0$ ³.

A base do efeito Kondo original está, como mencionado, no espalhamento de elétrons de condução por momento magnéticos localizados em baixa diluição e dispostos aleatoriamente na matriz metálica. Uma questão interessante é perguntar o que acontece se os momentos magnéticos formarem uma rede periódica. De fato, existem vários compostos na natureza com essa característica. Eles vieram a ser conhecidos como compostos de férmiões pesados. Nestes materiais, os momentos magnéticos localizados advém de íons de terras raras (como Ce, Pr, Sm ou Yb) ou actinídeos (como U ou Pu) que possuem a camada f incompletamente preenchida. Como pode ser visto no caso do Ce na Fig. 1.2 [18], os orbitais $4f$ ou $5f$, ocupam uma região bastante interna e compacta das camadas atômicas, sendo bastante blindados do efeito das camadas externas ($5p, 5d, 6s$, etc.). Isso faz com que a repulsão coulombiana entre os elétrons nessas camadas seja muito grande, favorecendo a localização do momento magnético. Além disso, orbitais das camadas f em íons adjacentes tem pouca sobreposição, se sua separação é显著mente maior do que $3,25 - 3,50 \text{ \AA}$, o chamado critério de Hill [19]. Portanto, tendem a interagir fracamente, ou seja, efeitos de troca ou supertroca são pequenos. O resultado disso tudo é que os momentos magnéticos são razoavelmente bem localizados e formam, em muitos casos, uma rede periódica.

A física dos férmiões pesados resulta, portanto, da interação da rede de elétrons f localizados, formando momentos magnéticos, com o mar de elétrons de condução, de maneira similar à descrita pelo modelo de Anderson ou de Kondo, mas aqui generalizada para a rede de elétrons f . Em analogia ao modelo Kondo, chamamos esse arranjo de uma “rede de Kondo”

³O efeito Kondo é uma manifestação do fenômeno de liberdade assintótica, conhecido por governar a física dos quarks. Em altas temperaturas, os momentos localizados são assintoticamente livres, mas em baixas temperaturas (muito abaixo da chamada temperatura Kondo), eles interagem fortemente com os elétrons de condução e se tornam “confinados” [1].

ou “rede de Anderson”, ou ainda, “modelo periódico de Anderson” [21]. Existe uma tendência de formação de singletos Kondo em baixas temperaturas, como discutido anteriormente para o caso de impurezas magnéticas diluídas. Entretanto, como aqui termos uma rede densa desses momentos, esses complexos Kondo emaranham-se de forma não trivial e apenas aproximadamente compreendida, originando uma miríade de comportamentos como portadores com massa efetiva da ordem de 10^2 a 10^3 vezes a massa do elétron⁴, supercondutores não convencionais, ordenamento antiferromagnético, isolantes Kondo, dentre outros comportamentos. Na maior parte dos materiais de terras raras, os momentos localizados tendem a se ordenar antiferromagneticamente, exemplos sendo U_2Zn_{17} , UCd_{11} e CeRhIn_5 [1, 18, 23]. Além disso, o grande acoplamento spin–órbita nos orbitais f combinam os momentos angulares de spin e orbital em um estado de momento angular total j bem definido. Em materiais compostos por íons Ce^{3+} , por exemplo, a configuração $4f^1$ ($\ell = 3$) leva a um multiplo fundamental com $j = \ell - s = 5/2$. Esta é uma das características que residem no coração da física de férmiões pesados.

Em 1969, Coqblin e Schrieffer generalizaram o modelo de impureza única de Anderson a fim de descrever impurezas de Ce^{3+} em metais [10], que exibem momentos magnéticos localizados de valor $j = 5/2$, já que o forte acoplamento spin–órbita para o Cério leva a um estado fundamental de momento angular total $j = 5/2$, com momento angular orbital $\ell = 3$. Uma vez que o potencial de hibridização impureza–condução é predominantemente esférico, apenas a onda parcial com momento angular $\ell = 3$ dos elétrons de condução irá hibridizar com as funções de onda dos átomos de Cério [10]. Estas considerações levam a um modelo que descrever um espalhamento de troca de momento angular de spin e orbital que, em contraste com a interação de Kondo, $\mathbf{s} \cdot \mathbf{J}$ cujas variações Δm do momento magnético total estão restritas aos valores 0 e ± 1 , apresenta variações Δm que vão de $-2j$ a $2j$. O modelo de Coqblin e Schrieffer de impureza única tem uma física semelhante ao modelo de Kondo, pois também gera um espalhamento dos elétrons de condução de cresce logaritmicamente com o decréscimo de temperatura. O modelo de Coqblin–Schrieffer será nosso ponto de partida para a obtenção de um modelo efetivo para interação entre elétrons e ondas de spin e será estudado no capítulo 3.

1.1.2 Teoria de Ondas de Spins

O conceito de ondas de spin foi criado por F. Bloch em 1930 [24], em um trabalho que introduziu o conceito no contexto de ferromagnetos, como um método de aproximação para estudar esses sistemas em baixas temperaturas. Neste trabalho, Bloch derivou a dependência com $T^{3/2}$ da magnetização de um ferromagneto, em três dimensões. Embora tenha sido criado no contexto de ferromagnetos, o conceito de ondas de spins é mais geral e descreve as excitações elementares em um material magnético ordenado, ferromagneticamente ou antiferromagneticamente, como uma onda de deslocamentos dos spins a partir da posição de equilíbrio pela rede magnética. A teoria de ondas de spin foi derivada de maneira semi–clássica por Heller e Kramers [25], embora a significância da energia de ponto zero tenha sido considerada apenas posteriormente por Klein e Smith [26]. Holstein e Primakoff introduziram uma transformação canônica dos operadores de spin, permitindo um tratamento quântico das ondas de spin por

⁴A razão entre a massa efetiva e a massa eletrônica da ordem de 10^2 a 10^3 é a origem do nome *férmiões pesados*. O termo férmiões pesados foi cunhado por Steglich, Aarts, *et al.* [22].

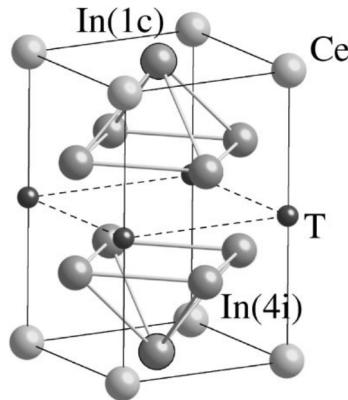


Figura 1.3: Estrutura cristalina do CeRhIn₅, uma estrutura tetragonal do tipo HoCoGa₅. Na figura, T = Rh. Figura extraída de [43].

operadores de criação e aniquilação bosônicos, o que ficou conhecida como transformação de Holstein–Primakoff [27]. Com esses trabalhos, ficou claro que a teoria de ondas de spin é uma teoria semi-clássica equivalente a uma expansão $1/S$, ou *large-S*. A descrição das ondas de spins em termos de operadores de bósons levou ao conceito de mágmons, os “quanta” de ondas de spin. Em 1952, Anderson estendeu a teoria de ondas de spin para sistemas antiferromagnéticos [28]. Nesse trabalho, Anderson calculou a energia do estado fundamental para spin 1/2 e mostrou que o resultado para uma cadeia linear está em bom acordo com o famoso resultado exato obtido por Bethe [29]. Esse acordo era inesperado, pelo caráter de aproximação *large-S* da teoria, sendo $S = 1/2$ o pior caso possível para a aproximação. Ainda assim, a teoria de ondas de spin apresenta resultados notavelmente bons [30].

No momento de escrita desta dissertação, a teoria de ondas de spin pode ser considerada bem matura e desenvolvida. Como aplicações atuais da teoria, podemos citar estudo de excitações de ondas de spin em ferromagnetos ultrafinos [31], spintrônica de mágmons [32], magnônica quântica [33], mágmons topológicos [34] e interação elétron–mágmon [35, 36, 37, 38, 39, 40, 41, 42], este último sendo um dos focos deste trabalho.

1.2 Objetivo deste Trabalho

O projeto desenvolvido nesta dissertação tem como objetivo o estudo das propriedades de transporte em sistemas de férmiões pesados, utilizando a teoria de ondas de spins, motivados pelo o intuito de prover uma descrição física simplificada e pelos bons resultados obtidos pela teoria, como citado anteriormente. No que se segue, apresentaremos as motivações iniciais para este trabalho e o que foi realizado.

Este trabalho foi inicialmente motivado por sistemas de férmiões pesados como o supercondutor antiferromagnético CeRhIn₅⁵, que apresentam anisotropias de transporte em sua fase ordenada antiferromagneticamente para campos magnéticos aplicados altos ainda não compreendidas [23]. Conjeturou-se que essas anisotropias tenham origem em flutuações de um parâmetro de ordem nemático. A ordem nemática, nesse caso, seria uma ordem de caráter

⁵O CeRhIn₅ faz parte de uma família de compostos de férmiões pesados chamados de compostos 1-1-5. Maiores detalhes podem ser consultados em [1].

orbital, ou de carga, que, quando presente, quebraria espontaneamente a simetria de rotação da rede cristalina para um estado menos simétrico, mas sem a quebra de reversão temporal, inversão ou translação [44]. Essa quebra de simetria tipicamente se manifesta em anisotropias onde as propriedades eletrônicas dependem da direção em que são mensuradas, daí a motivação para essa e outras conjecturas para anisotropias encontradas em cupratos supercondutores, supercondutores a base de Fe [45, 46, 47, 48] e no CeRhIn₅.

Mais especificamente, experimentos feitos no CeRhIn₅ mostraram uma anisotropia de transporte em sua fase AFM, quando um campo suficientemente alto é aplicado [23] (Fig. 1.4). No caso deste composto, nota-se que as anisotropias só ocorrem dentro do estado AFM e aparecem apenas acima de um campo magnético crítico, onde está bem caracterizada a presença de uma nova fase AFM [49, 50, 51, 52, 53, 54, 55]. A ordem AFM, para a qual é sabido que a direção dos spins dos elétrons *f* está contida nos planos de Ce e In [56] (veja Fig. 1.3), quebra a simetria de rotação *C*₄ do composto tetragonal. No entanto, tal quebra ocorre no setor de spin *e*, em princípio, não se manifestaria no setor de carga, não acarretando em qualquer anisotropia de transporte. Por outro lado, tanto os elétrons *f* do Ce quanto os elétrons *p* do In sofrem forte interação spin–órbita, que emaranha os graus de liberdade de spin e de carga. É conhecido que isso pode resultar em anisotropias de transporte [57]. Isso nos motivou a investigar se essas anisotropias não podem ter uma explicação que não invoque ordem ou flutuações nemáticas.

Movidos por essa motivação, começamos investigando modelos dos planos de Ce e In, que levassem em conta tanto a ordem AFM como a forte interação spin–órbita, com o intuito de estudar as propriedades de transporte e descobrir se esses ingredientes eram suficientes para explicar o comportamento de compostos como o CeRhIn₅.

Inicialmente, estudamos um modelo de rede, com uma estrutura de bandas mais realista quando comparado ao modelo apresentado neste trabalho. No entanto, dificuldades intrínsecas do problema nos levaram a direcionar nossos esforços para a busca do modelo mais simples que possuísse os ingredientes necessários capazes de explicar as anisotropias observadas. Essas dificuldades, mais especificamente fortes divergências nas equações de transporte, também nos levaram a considerar sistemas tridimensionais, em lugar de um sistema puramente bidimensional consistindo apenas dos planos de Ce e In. Além disso, optamos pelo estudo de um sistema ferromagnético, uma vez que o tratamento de um sistema AFM apresenta maiores dificuldades, devido ao aumento da célula unitária e a consequente diminuição da primeira zona de Brillouin. Com isso, chegamos a um *toy model* com as características desejadas. O estudo deste modelo revelou, de fato, anisotropias nas propriedades de transporte, como veremos.

Concluímos esta seção ressaltando que, embora este trabalho tenha alcançado seu objetivo de demonstrar que anisotropias podem surgir em um modelo com as características mencionadas, ele ainda deixa diversas questões em aberto e oferece vários caminhos para futuras investigações. Discutiremos isso em maiores detalhes no último capítulo.

1.3 Visão Geral dos Capítulos

O restante desta dissertação está estruturada da seguinte maneira. No capítulo 2, apresentaremos a teoria de ondas de spin em maiores detalhes, uma vez que este é um dos pilares da nossa abordagem. Introduziremos a transformação de Holstein–Primakoff e aplicaremos a

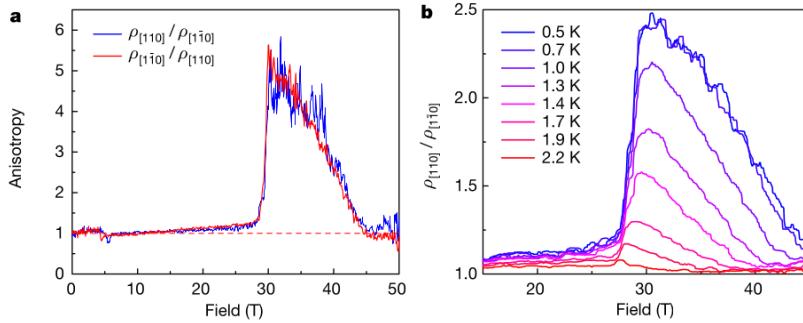


Figura 1.4: Evidência de nematicidade no transporte de CeRhIn₅. (a) anisotropia na resistividade a 500 mK, definida como a razão da resistividade em direções perpendiculares no plano *ab*, como função do campo magnético em duas direções diferentes (vermelho e azul). (b) Dependência com a temperatura e intensidade do campo magnético aplicado para a anisotropia da resistividade. Com o aumento da temperatura, a anisotropia é reduzida até se tornar inobservável acima de 2.2 K. Figura extraída de [23].

teoria ao modelo de Heisenberg tanto ferromagnético quanto antiferromagnético. Em seguida, relacionaremos a transformação de Holstein–Primakoff com a representação de Schwinger para momentos angulares para então obtermos uma generalização da Holstein–Primakoff de simetria $SU(2)$ para $SU(N)$, a fim de aplicá-la ao nosso modelo de estudo. O capítulo 3 contém uma apresentação dos modelos de Anderson, Kondo e do modelo de Coqblin–Schrieffer. Apresentaremos a transformação de Schrieffer–Wolff aplicada ao modelo de Anderson, relacionando-o com o modelo de Kondo, para então utilizá-la no contexto do modelo de Coqblin–Schrieffer. No capítulo 4, aplicaremos a transformação de Holstein–Primakoff generalizada para $SU(N)$ ao modelo de Coqblin–Schrieffer e o modelo XXZ a fim de derivarmos o modelo efetivo para interação elétron–mágnon e para a dinâmica dos mágnons. Veremos que as considerações do termo cinético dos mágnons leva à simplificação de que apenas um tipo de mágnon contribui para a física do problema, no limite de baixas temperaturas. O capítulo 5 apresenta a teoria da equação semiciclística de Boltzmann, outro pilar sobre o qual se funda este trabalho. Com esse ferramental, estaremos aptos a estudar os efeitos na condutividade elétrica do espalhamento de elétrons de condução por mágnons, assunto do capítulo 6, onde serão apresentados os resultados finais deste projeto. Finalmente, no capítulo 7, concluímos este trabalho apresentando discussões sobre os resultados encontrados e investigações futuras ainda em aberto.

1.4 Convenções

Ao longo desta dissertação adotaremos algumas convenções, a saber:

1. Uso de abreviações específicas, que estão definidas na lista de abreviações e ao longo do texto;
2. A adoção de unidades de medidas nas quais as constantes de Planck e de Boltzmann são dadas por $\hbar = k_B = 1$. Deste modo, não há distinção entre unidades de temperatura e energia ou de momento e vetor de onda;
3. O potencial químico será sempre absorvido nas dispersões eletrônicas, de modo que $\epsilon_{\mathbf{k}}$

denota o que é usualmente escrito como $\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$;

4. As distribuições de Fermi–Dirac e Bose–Einstein serão denotadas por f^0 e b , respectivamente.

Capítulo **2**

Teoria de Ondas de Spin

Em sistemas magnéticos ordenados, as excitações elementares são conhecidas como ondas de spin. Elas descrevem as excitações do sistema como uma onda de desvios de cada spin com relação ao seu estado “congelado” ao longo da rede. Em uma perspectiva equivalente de quasi-partículas, as ondas de spin são chamadas de mágmons, representando os modos bosônicos das redes de spins, de maneira análoga às excitações de fômons em redes de íons.

Neste capítulo, exploraremos a teoria das ondas de spin para sistemas ferromagnéticos e antiferromagnéticos utilizando o modelo de Heisenberg. Abordaremos como a teoria das ondas de spin constitui uma aproximação semi-clássica (“large- S ”) e como podemos derivar os espectros associados a essas ondas. Além disso, analisaremos o papel crucial da transformação de Holstein-Primakoff na teoria das ondas de spin. Ao final do capítulo, estenderemos a teoria de ondas de spins de simetria $SU(2)$ para $SU(N)$ para aplicá-la em nosso modelo de estudo, a fim de investigar o espalhamento de elétrons por ondas de spin.

2.1 Modelo de Heisenberg e Transformação de Holstein–Primakoff

Nosso ponto de partida é o modelo de Heisenberg isotrópico, descrito pelo seguinte Hamiltoniano [58]

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.1)$$

onde J é a constante de acoplamento entre os spins e $J > 0$ representa um sistema ferromagnético (FM) e $J < 0$ um sistema antiferromagnético (AFM). A notação $\langle i,j \rangle$ significa que a soma é feita sobre os sítios i e j sendo primeiros vizinhos. Uma outra forma de se escrever o modelo é definindo um vetor $\boldsymbol{\eta}$ que liga um sítio i aos seus primeiros vizinhos e escrever

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \sum_i \sum_{\boldsymbol{\eta}} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+\boldsymbol{\eta}}. \quad (2.2)$$

Iremos trabalhar na maior parte do tempo com a primeira forma, empregando a segunda forma de escrita quando for conveniente.

Utilizando os operadores de levantamento e abaixamento da teoria de momento

angular, $S^\pm = S^x \pm iS^y$, o Hamiltoniano de Heisenberg pode ser escrito como

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right]. \quad (2.3)$$

Se cada spin tem tamanho S , ou seja, $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i = S(S+1)$, $\forall i$, nós denotamos os auto-vetores de momento angular de cada spin por $|s_z\rangle = |S, s_z\rangle$, com s_z entre $-S$ e $+S$ (omitiremos nas próximas equações o índice de sítio por simplicidade). A ação dos operadores de levantamento e abaixamento de momento angular é

$$S^\pm |s_z\rangle = \sqrt{S(S+1) - s_z(s_z \pm 1)} |s_z \pm 1\rangle. \quad (2.4)$$

A menos de uma constante multiplicativa, os operadores $S^+(S^-)$ aumentam (diminuem) de uma unidade o momento angular na direção z do sistema. Em termos destes operadores, as relações de comutação de momento angular são

$$[S^+, S^-] = 2S^z, \quad [S^z, S^\pm] = \pm S^\pm. \quad (2.5)$$

Consideremos agora o spin total do sistema, $\mathbf{S}_T = \sum_i \mathbf{S}_i$. Calculando o comutador de \mathbf{S}_T com o Hamiltoniano, temos ($\alpha = x, y, z$)

$$[S_T^\alpha, H] = J \sum_{\langle i,j \rangle} [S_T^\alpha, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j]. \quad (2.6)$$

Como \mathbf{S}_T é dado pela soma sobre todos os spins da rede e $[S_i^\alpha, S_j^\beta] = 0$ para $i \neq j$, é suficiente considerar o termo \mathbf{S}_i de \mathbf{S}_T para o comutador acima. Neste caso, temos

$$[S_i^\alpha, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] = \sum_\mu [S_i^\alpha, S_i^\mu S_j^\mu], \quad (2.7)$$

$$= \sum_\mu [S_i^\alpha, S_i^\mu] S_j^\mu, \quad (2.8)$$

$$= i \sum_{\mu\lambda} \epsilon^{\alpha\mu\lambda} S_i^\lambda S_j^\mu, \quad (2.9)$$

$$= i (\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_i)^\alpha, \quad (2.10)$$

Voltando ao comutador $[S_T^\alpha, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j]$, podemos utilizar o resultado anterior e temos

$$[S_T^\alpha, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] = \sum_k [S_k^\alpha, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j], \quad (2.11)$$

$$= [S_i^\alpha, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j] + [S_j^\alpha, \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j], \quad (2.12)$$

$$= i (\mathbf{S}_j \times \mathbf{S}_i)^\alpha + i (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j)^\alpha, \quad (2.13)$$

$$= 0. \quad (2.14)$$

Com isso, vemos que o Hamiltoniano do sistema comuta com o operador de spin total, independente do sinal da constante de acoplamento. Isso nos diz que o Hamiltoniano possui uma

simetria de rotação global e, portanto, podemos diagonalizar os operadores H , \mathbf{S}_T^2 e S_T^z simultaneamente. Em particular, podemos trabalhar em setores de S_T^z bem definidos. Embora o Hamiltoniano possua simetria de rotação, seu estado fundamental ordenado não possui a mesma simetria. Como veremos a seguir, no caso FM, por exemplo, o estado fundamental consiste em todos os spins alinhados em uma mesma direção. Isso constitui o que chamamos de uma quebra espontânea de simetria [58].

2.1.1 Sistema Ferromagnético

Para estudar o modelo, vamos nos concentrar primeiramente no caso ferromagnético ($J > 0$). Consideremos a direção $\hat{\mathbf{z}}$ como a direção de alinhamento dos momentos magnéticos do sistema. Para o caso FM, o parâmetro de ordem é a magnetização do sistema, $\mathbf{M} \propto \mathbf{S}_T$, que claramente comuta com o Hamiltoniano e, portanto, é uma constante de movimento. Como os operadores H , \mathbf{S}_T^2 e S_T^z podem ser diagonalizados simultaneamente, vamos considerar os diferentes setores de S_T^z . Para um sistema de N sítios, podemos ter $S_T^z = NS$, representando o estado em que todos os spins possuem $s_z = S$, temos também o setor $S_T^z = (N-1)S + (S-1) = NS-1$, onde todos menos um spin possui $s_z = S$ e o spin diferente possui $s_z = S-1$, e assim por diante. Em particular, o estado $S_T^z = NS$ é auto-estado do sistema e, além disso, corresponde ao estado fundamental. Isso é fácil de ver, pois

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j |SSS \cdots S\rangle = \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \right] |SSS \cdots S\rangle = S^2 |SSS \cdots S\rangle, \quad (2.15)$$

assim, $H |SSS \cdots S\rangle = -JS^2 N \frac{z}{2} |SSS \cdots S\rangle$, onde z representa o número de primeiros vizinhos. O estado $|SSS \cdots S\rangle$ é conhecido como estado ordenado ferromagnético.

Para entendermos melhor as excitações do sistema, vamos considerar o setor $S_{Tz} = NS - 1$. Para simplificar, tomemos apenas dois spins com $S = \frac{1}{2}$ e vamos estudar a ação do termo $S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+$ sobre um termo deste setor. Neste caso, temos

$$(S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+) |\uparrow\downarrow\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle. \quad (2.16)$$

Vemos então que a ação deste termo consiste em trocar os spins de lugar. Em um sistema de $N > 2$ spins, o efeito deste termo no setor $S_{Tz} = NS - 1$ é de delocalizar o *spin flip* ao longo do sistema. Os auto-estados do sistema no setor de $S_{Tz} = NS - 1$ devem ser então superposições de estados de um *spin flip* de modo que o *flip* seja delocalizado. Temos então que os auto-estados são da forma

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} |\uparrow\uparrow \cdots, s_{iz} = \downarrow, \cdots \uparrow\rangle, \quad (2.17)$$

uma onda de spin *flips* delocalizados, justificando o nome onda de spin. Definindo a correlação transversa de spin no estado $|\mathbf{k}\rangle$ como o valor esperado do operador

$$\mathbf{S}_{i\perp} \cdot \mathbf{S}_{j\perp} = \mathbf{S}_{ix} \cdot \mathbf{S}_{jx} + \mathbf{S}_{iy} \cdot \mathbf{S}_{jy}, \quad (2.18)$$

temos que

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{S}_{i\perp} \cdot \mathbf{S}_{j\perp} | \mathbf{k} \rangle = \frac{2S}{N} \cos [\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)], \quad (2.19)$$

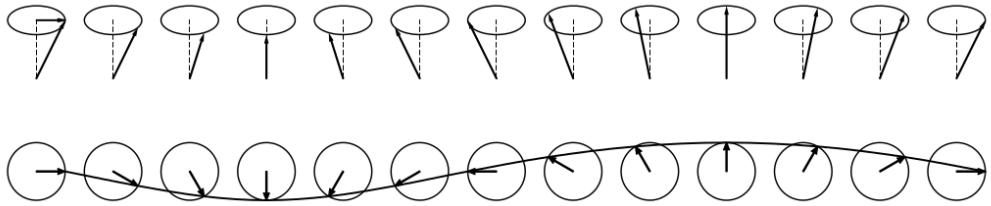


Figura 2.1: Representação esquemática de spins clássicos em um estado de onda de spin. Figura extraída de [59].

mostrando que cada spin possui uma componente na direção transversa à direção de magnetização, em média, e as orientações das componentes transversas de spins separados por $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ diferem pelo ângulo $\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)$. Este resultado nos sugere a visualização do estado $|\mathbf{k}\rangle$ conforme apresentado na Fig. 2.1.

Formalmente, os setores de um número finito de spin *flips* não possuem solução exata geral, apenas em alguns poucos casos particulares. Se, no entanto, focarmos no regime em que a densidade de spin *flips* é baixa, o sistema pode ser tratado como um gás fracamente interagente de ondas de spins, isto é, os estados excitados de N_0 spin flips são aproximados pelos estados $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \dots, \mathbf{k}_{N_0}\rangle$, consistindo de N_0 ondas de spins superpostas, de maneira análoga a excitações de fônon. No entanto, no caso de excitações magnéticas, isso é apenas uma aproximação, com as ondas de spins não obedecendo ao princípio de superposição rigorosamente [7]. Essa aproximação, por outro lado, reproduz corretamente as propriedades do sistema em baixas temperaturas.

2.1.2 Transformação de Holstein–Primakoff

Como vimos, há uma quebra espontânea de simetria no estado fundamental FM, com os estados excitados sendo caracterizados por setores com um número não nulo de spin flips. Nesses setores, um estado com desvio de n unidades de momento angular de S , i.e. $S_z = S - n$ pode ser construído por aplicações sucessivas dos operadores S^\pm .

A transformação de Holstein–Primakoff nos fornece uma descrição de sistemas magnéticos em sua fase ordenada por meio de operadores bosônicos que relacionam a componente z do spin com os desvios de seu valor máximo. Seja s_{iz} a projeção do spin na direção z do momento localizado na posição i . Definimos o desvio n_i da componente s_{iz} de seu valor máximo por $s_{iz} = S - n_i$. Com isso, introduzimos a base de números de desvios por $|n_i\rangle$ relacionada de maneira um-para-um com a base $|s_{iz}\rangle$ de modo que

$$S_z |n_i\rangle = (S - n_i) |n_i\rangle. \quad (2.20)$$

Introduzindo operadores de criação e aniquilação bosônicos a_i e a_i^\dagger tais que

$$a_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle, \quad (2.21)$$

$$a_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle, \quad (2.22)$$

$$a_i^\dagger a_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle, \quad (2.23)$$

a transformação de Holstein–Primakoff que relaciona os operadores de momento angular S_z e S^\pm com os operadores bosônicos a, a^\dagger , de modo a descrever o sistema magnético pelos desvios n_i , é definida como

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i, \quad (2.24)$$

$$S_i^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S} \right)^{1/2} a_i, \quad (2.25)$$

$$S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S} \right)^{1/2}, \quad (2.26)$$

onde os desvios n_i do spin total satisfazem o vínculo

$$a_i^\dagger a_i = n_i \leq 2S. \quad (2.27)$$

A derivação e maiores detalhes da transformação de Holstein–Primakoff são apresentadas no apêndice A.

O próximo passo é fazer a aproximação já mencionada de considerar o número de spin *flips* baixo o suficiente em comparação com o número total de spins do sistema. Neste caso [58, 60],

$$\left\langle \sum_i \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S} \right)^{1/2} \right\rangle \simeq N, \quad (2.28)$$

onde $\langle \bullet \rangle$ denota o valor esperado. Isso sugere que fazemos a aproximação $1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S} \simeq 1$. Se S é pequeno, isso pode introduzir um erro considerável mas, uma vez que tomamos a média sobre todo o sistema, o erro na energia será pequeno quando $\langle \sum_i a_i^\dagger a_i \rangle \ll 2NS$. Além disso, conforme mencionado no capítulo 1, a teoria de ondas de spin dá bons resultados mesmo para $S = 1/2$. Prosseguimos então considerando $a_i^\dagger a_i \ll 2S$ e expandindo o termo $\left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S} \right)^{1/2}$:

$$\left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S} \right)^{1/2} = 1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{4S} - \frac{(a_i^\dagger a_i)^2}{32S^2} + \mathcal{O}(S^{-3}). \quad (2.29)$$

A expressão anterior nos sugere que a aproximação feita consiste em uma aproximação semi-clássica de “*large-S*”. Quanto maior o valor de S , melhor se torna a aproximação de baixa densidade de spin *flips*. Uma vez que os termos S_i^α aparecem quadraticamente no Hamiltoniano, em ordem mais baixa, podemos tomar S_i^\pm linear em a_i, a_i^\dagger , que consiste em manter apenas o primeiro termo da expansão anterior. Nesta aproximação, a transformação de Holstein–Primakoff fica simplesmente

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i, \quad (2.30)$$

$$S_i^+ \simeq \sqrt{2S} a_i, \quad (2.31)$$

$$S_i^- \simeq \sqrt{2S} a_i^\dagger. \quad (2.32)$$

Um ponto que é importante citar é que para que haja um isomorfismo entre os espaços de Hilbert gerado pelos estados de spin, $|s_{iz}\rangle$, e os estados bosônicos $|n_i\rangle$ é necessário que $n_i \leq 2S$. Esta restrição sobre o número de bôsons é muito importante e deve ser levada em conta; falaremos em mais detalhes sobre este vínculo na seção 2.2. Porém, como trabalhamos na aproximação $n_i \ll 2S$, iremos desconsiderar este vínculo durante os cálculos.

2.1.3 Solução Do Sistema Ferromagnético Por Ondas de Spin

Substituindo a transformação de Holstein–Primakoff no Hamiltoniano e mantendo apenas termos de ordem S (quadráticos nos operadores a_i e a_i^\dagger), obtemos

$$H = -JS \sum_{i,\eta} \left[a_i^\dagger a_{i+\eta} + a_i a_{i+\eta}^\dagger - a_i^\dagger a_i - a_{i+\eta}^\dagger a_{i+\eta} + S + \mathcal{O}(S^{-1}) \right], \quad (2.33)$$

$$= -JS^2 N \frac{z}{2} - JS \sum_{i,\eta} \left[a_i^\dagger a_{i+\eta} + a_i a_{i+\eta}^\dagger - 2a_i^\dagger a_i \right], \quad (2.34)$$

O Hamiltoniano anterior apresenta um acoplamento entre excitações adjacentes. Como é bem conhecido, a técnica para diagonalizar Hamiltonianos quadráticos desta forma se dá pela transformada de Fourier. Então, definimos novos operadores $a_{\mathbf{k}}$ e $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ como

$$a_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} a_{\mathbf{k}}, \quad (2.35)$$

$$a_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} a_{\mathbf{k}}^\dagger. \quad (2.36)$$

Tal transformação preserva as relações de comutação canônica, isto é, $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}^\dagger] = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ e $[a_{\mathbf{k}}, a_{\mathbf{k}'}] = 0$. Aplicando a transformada ao Hamiltoniano, temos

$$H = -JS^2 N \frac{z}{2} - JS \frac{1}{N} \sum_{j,\eta,\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left[e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_j} e^{i\mathbf{k}' \cdot \eta} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} + e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_j} \times \right. \\ \left. \times e^{-i\mathbf{k}' \cdot \eta} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^\dagger - 2e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_j} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \right]. \quad (2.37)$$

Da periodicidade da rede, segue que

$$\frac{1}{N} \sum_j e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_j} = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}. \quad (2.38)$$

Com isso,

$$H = -JS^2N\frac{z}{2} - JS \sum_{\eta, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left[e^{i\mathbf{k}' \cdot \eta} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} + e^{-i\mathbf{k}' \cdot \eta} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}'}^\dagger - 2a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}'} \right], \quad (2.39)$$

$$= -JS^2N\frac{z}{2} - JS \sum_{\eta, \mathbf{k}} \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \eta} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \eta} a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger - 2a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right], \quad (2.40)$$

$$= -JS^2N\frac{z}{2} - JS \sum_{\eta, \mathbf{k}} \left[e^{i\mathbf{k} \cdot \eta} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \eta} (1 + a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}) - 2a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} \right], \quad (2.41)$$

$$= -JS^2N\frac{z}{2} - JSz \sum_{\mathbf{k}} (\gamma_{\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{k}} - 2) a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \quad (2.42)$$

onde definimos

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\eta} e^{i\mathbf{k} \cdot \eta}. \quad (2.43)$$

Para redes com um centro de simetria, $\gamma_{\mathbf{k}} = \gamma_{-\mathbf{k}}$ e podemos escrever neste caso particular

$$H = -JS^2N\frac{z}{2} + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}}, \quad \omega_{\mathbf{k}} = 2JSz(1 - \gamma_{\mathbf{k}}). \quad (2.44)$$

Com isso, o Hamiltoniano está diagonalizado. Temos um Hamiltoniano com energia de estado fundamental $E_0 = -JS^2N\frac{z}{2}$, concordando com o que encontramos anteriormente, e excitações de quasi-partículas com espectro $\omega_{\mathbf{k}} = 2JSz(1 - \gamma_{\mathbf{k}})$. As quasi-partículas do sistema recebem o nome de mágmons, por descreverem excitações do sistema magnético. Em particular, como o sistema é FM, às vezes nos referimos a elas como mágmons ferromagnéticos. Como último exemplo para este caso, vamos considerar uma rede cúbica tridimensional. Neste caso, os vetores η que ligam cada ponto da rede aos seus primeiros vizinhos são dados por $\eta \in \{\pm a\hat{\mathbf{x}}, \pm a\hat{\mathbf{y}}, \pm a\hat{\mathbf{z}}\}$ e temos $z = 6$ primeiros vizinhos. Com isso, $\gamma_{\mathbf{k}}$ é igual a

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{6} \left(e^{i\mathbf{k} \cdot a\hat{\mathbf{x}}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot a\hat{\mathbf{x}}} + e^{i\mathbf{k} \cdot a\hat{\mathbf{y}}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot a\hat{\mathbf{y}}} + e^{i\mathbf{k} \cdot a\hat{\mathbf{z}}} + e^{-i\mathbf{k} \cdot a\hat{\mathbf{z}}} \right), \quad (2.45)$$

$$= \frac{1}{3} (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (2.46)$$

Assim, a dispersão se torna

$$\omega_{\mathbf{k}} = 12JS \left[1 - \frac{1}{3} (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) \right]. \quad (2.47)$$

Para $\mathbf{k} \rightarrow 0$, o resultado anterior se reduz à

$$\omega_k = 6JSa^2k^2. \quad (2.48)$$

Com isso, vemos que a dispersão de mágmons ferromagnéticos em uma rede quadrada possui a forma de baixas energias k^2 e vai a zero no limite $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Este é o *modo de Goldstone* [61, 62], que é uma consequência da quebra de simetria de rotação do Hamiltoniano pelo estado fundamental, que apresenta uma direção preferencial de alinhamento [58]. O modo de Goldstone domina o regime de baixas temperaturas e as correlações de grandes comprimentos de onda, justamente por não possuir um *gap* em seu espectro. Este fato será muito importante quando

desenvolvermos nosso modelo de ondas de spin no capítulo 4, onde aplicaremos uma generalização da transformação de HP ao modelo de Coqblin–Schrieffer.

2.1.4 Caso Antiferromagnético

O caso antiferromagnético (AFM), ($J < 0$) possui um física diferente do sistema FM. Embora este trabalho se concentre em um sistema FM, por completeza, vamos estudar o caso AFM do modelo de Heisenberg, devido à sua grande importância. Embora o estado fundamental do sistema não corresponda exatamente ao estado de Néel antiferromagnético, este pode ser tomado como ponto de partida como uma boa aproximação [28]. Para este caso, o estado de Néel é escolhido tal que as magnetizações das sub-redes A e B do sistema apontem nas direções $+\hat{\mathbf{z}}$ e $-\hat{\mathbf{z}}$, respectivamente. Sendo $|0\rangle$ o estado fundamental do sistema, para um sítio $i \in A$, temos

$$S_i^z |0\rangle = +S |0\rangle, \quad (2.49)$$

$$S_i^+ |0\rangle = 0, \quad (2.50)$$

$$S_i^- |0\rangle = \sqrt{2S} |s_{iz} = S-1\rangle. \quad (2.51)$$

Por outro lado, para $j \in B$,

$$S_i^z |0\rangle = -S |0\rangle, \quad (2.52)$$

$$S_i^+ |0\rangle = \sqrt{2S} |s_{iz} = -S+1\rangle, \quad (2.53)$$

$$S_i^- |0\rangle = 0. \quad (2.54)$$

As relações anteriores nos mostram que S_i^- atuando sobre $|0\rangle$, cria uma excitação para um sítio i na sub-rede A e S_i^+ se comporta como um operador de destruição. Por outro lado, S_j^+ cria uma excitação e S_j^- destrói o estado, para $j \in B$. Sendo assim, a aplicação da HP deve ser feita de maneira separada para cada sub-rede, ordenando com $S^z = +S$ para a sub-rede A e $S^z = -S$ para B . Outra abordagem, é definir operadores \tilde{S}_j^z , \tilde{S}_j^+ e \tilde{S}_j^- como

$$\tilde{S}_j^z = -S_j^z, \quad \tilde{S}_j^\pm = \tilde{S}^\mp, \quad \text{para } j \in B. \quad (2.55)$$

É fácil verificar que esta transformação é canônica verificando que as relações de comutação são preservadas:

$$[\tilde{S}^z, \tilde{S}^\pm] = [-S^z, S^\mp] = -(\mp S^\mp) = \pm \tilde{S}^\pm, \quad (2.56)$$

$$[\tilde{S}^+, \tilde{S}^-] = [S^-, S^+] = -2S^z = 2\tilde{S}^z. \quad (2.57)$$

Isso nos diz que estes operadores, por satisfazerem a mesma álgebra que os operadores de spin usuais, podem ser representados por bôsons de HP.

Aplicando a última transformação ao Hamiltoniano de Heisenberg, obtemos

$$H = -|J| \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z \tilde{S}_j^z + \frac{1}{2} |J| \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ \tilde{S}_j^+ + S_i^- \tilde{S}_j^-). \quad (2.58)$$

Agora, tanto S_i^z quanto \tilde{S}_j^z assumem valor $+S$ no vácuo, de modo que podemos aplicar a HP como no caso FM, Eqs. (2.30)–(2.32), para ambos os conjuntos de operadores. Com isso,

$$S_i^z \tilde{S}_j^z \rightarrow S^2 - S \left(a_i^\dagger a_i + a_j^\dagger a_j \right) + \mathcal{O}(S^0), \quad (2.59)$$

$$S_i^+ \tilde{S}_j^+ \rightarrow 2S a_i a_j + \mathcal{O}(S^0), \quad (2.60)$$

$$S_i^- \tilde{S}_i^- \rightarrow 2S a_i^\dagger a_j^\dagger + \mathcal{O}(S^0), \quad (2.61)$$

e o Hamiltoniano se escreve

$$H = -|J| S \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S - a_i^\dagger a_i - a_j^\dagger a_j \right) + |J| S \sum_{\langle i,j \rangle} \left(a_i a_j + a_i^\dagger a_j^\dagger \right), \quad (2.62)$$

$$= -|J| N S^2 \frac{z}{2} + 2JS \frac{z}{2} \sum_i a_i^\dagger a_i + JS \sum_{i,\eta} (a_i a_{i+\eta} + \text{h.c.}), \quad (2.63)$$

Diferentemente do caso FM, a presença dos operadores $S^+ \tilde{S}^+$ leva a presença de termos anômalos, da forma aa e $a^\dagger a^\dagger$, que não preservam o número total de bósons. Neste caso, o Hamiltoniano não é diretamente diagonalizado por transformada Fourier, como no caso FM. De fato, tomando a transformada de Fourier, obtemos

$$H = -|J| N S^2 \frac{z}{2} + JSz \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} + \frac{1}{2} JSz \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + \text{h.c.}), \quad (2.64)$$

onde $\gamma_{\mathbf{k}}$ segue a definição da Eq. (2.43).

Para diagonalizar o Hamiltoniano da Eq. (2.64), devemos eliminar os termos anômalos. Isto é feito por meio da transformação de Bogoliubov. Definindo

$$\begin{cases} b_{\mathbf{k}} &= \cosh \theta_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} - \sinh \theta_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}}^\dagger, \\ b_{\mathbf{k}}^\dagger &= -\sinh \theta_{\mathbf{k}} a_{-\mathbf{k}} + \cosh \theta_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger, \end{cases} \quad (2.65)$$

ou invertendo a relação,

$$\begin{cases} a_{\mathbf{k}} &= \cosh \theta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}} + \sinh \theta_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}}^\dagger, \\ a_{\mathbf{k}}^\dagger &= \sinh \theta_{\mathbf{k}} b_{-\mathbf{k}} + \cosh \theta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger, \end{cases} \quad (2.66)$$

com $\theta_{\mathbf{k}} \in \mathbb{R}$, o termo anômalo pode ser eliminado impondo que

$$\tanh 2\theta_{\mathbf{k}} = -\gamma_{\mathbf{k}}. \quad (2.67)$$

Após manipulações simples, o resultado final para o Hamiltoniano é

$$H = -\frac{1}{2} JS^2 Nz + \frac{1}{2} JSz \sum_{\mathbf{k}} \left[(1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2)^{1/2} - 1 \right] + \sum_{\mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}, \quad (2.68)$$

$$\omega_{\mathbf{k}} = JSz (1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2)^{1/2}. \quad (2.69)$$

Como no caso FM, vamos considerar o caso especial de uma rede quadrada para a dispersão,

no limite $\mathbf{k} \rightarrow 0$. Com isso, é direto vermos que

$$\omega_k = JS\sqrt{2z}k, \quad (2.70)$$

ou seja, no caso AFM, a dispersão vai a zero linearmente com k . Similar ao caso FM, a dispersão se anula no limite de $\mathbf{k} = 0$, mostrando que o magnôn AFM é um bóson de Goldstone, advindo da simetria global de rotação quebrada [58].

2.2 Representação de Schwinger e Transformação de Holstein–Primakoff

Como vimos, a transformação de HP desempenha papel fundamental na teoria de ondas de spins. Essa transformação nos fornece uma representação dos operadores momento angular em termos de operadores bosônicos. Para entender melhor a transformação de HP e, em particular, sua generalização para simetria $U(N)$, é conveniente estudarmos a representação de Schwinger e sua relação com a HP [58]. Ambas as representações podem ser utilizadas para estudar o modelo de Heisenberg, porém sua conveniência depende de estarmos na fase ordenada ou desordenada do modelo.

A representação de Schwinger é uma outra alternativa para expressar os operadores de momento angular em termos de operadores bosônicos. Nesta representação, definimos dois bósons, a e b , em termos dos quais os operadores de spin são escritos como

$$J^+ = a^\dagger b, \quad (2.71)$$

$$J^- = b^\dagger a, \quad (2.72)$$

$$J^z = \frac{1}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b). \quad (2.73)$$

Note que a direção $\hat{\mathbf{z}}$ é tomada como a direção na qual iremos diagonalizar os operadores de momento angular, isto é, escolhemos diagonalizar simultaneamente \mathbf{J}^2 e J^z . Embora essa direção seja arbitrária, a escolha desta será importante quando relacionarmos as transformações de Schwinger e HP.

Da mesma forma que a HP, a transformação de Schwinger resulta em um isomorfismo entre os espaços de Hilbert gerados pela base $|J, m\rangle$ e pela base $|n_a, n_b\rangle$ dos número de bósons a e b apenas quando

$$n_a + n_b = a^\dagger a + b^\dagger b = 2J. \quad (2.74)$$

Neste subespaço, a magnitude do momento angular total é bem definida e igual a J . Os estados de momento angular são facilmente descritos em termos dos operadores de criação a^\dagger e b^\dagger e o vácuo $|0\rangle = |n_a = 0, n_b = 0\rangle$,

$$|J, m\rangle = \frac{(a^\dagger)^{J+m}}{\sqrt{(J+m)!}} \frac{(b^\dagger)^{J-m}}{\sqrt{(J-m)!}} |0\rangle. \quad (2.75)$$

Em particular, temos

$$|J, J\rangle = \frac{(a^\dagger)^{2J}}{\sqrt{(2J)!}} |0\rangle, \quad (2.76)$$

$$|J, J-1\rangle = \frac{(a^\dagger)^{2J-1}}{\sqrt{(2J-1)!}} b^\dagger |0\rangle, \quad (2.77)$$

$$\vdots \quad (2.78)$$

$$|J, -J\rangle = \frac{(b^\dagger)^{2J}}{\sqrt{(2J)!}} |0\rangle. \quad (2.79)$$

Os estados acima nos sugerem pensar o bóson a como carregando uma quantidade de momento angular igual a $\frac{1}{2}$ na direção $\hat{\mathbf{z}}$ enquanto que cada bóson b carrega uma quantidade de momento angular igual a $\frac{1}{2}$ na direção $-\hat{\mathbf{z}}$. De fato, a Eq. (2.73) reforça esta ideia quando nos diz que o momento angular na direção $\hat{\mathbf{z}}$ é dado por $\frac{1}{2}(n_a - n_b)$.

Por conta da simetria entre os bósons a e b , seguindo a ideia anterior de que cada bóson carrega uma quantidade de momento angular nas direções $\pm\hat{\mathbf{z}}$, a representação de Schwinger é conveniente para tratar o modelo de Heisenberg na fase simétrica, isto é, quando a simetria de rotação do Hamiltoniano não é quebrada [58].

A representação das Eqs. (2.71)–(2.73), consistindo de dois sabores de bósons, define os geradores do grupo $SU(2)$. Uma generalização para N sabores de bóson define os geradores do grupo $SU(N)$, como veremos na próxima seção. Esta generalização é o primeiro passo para generalizar a HP para $SU(N)$.

Outro passo importante para a generalização da HP é entender a relação entre a representação de HP e a representação de Schwinger. De fato, ambas as representações estão intimamente relacionadas e podem ser conectadas eliminando o bóson a , mantendo-se o vínculo da Eq. (2.74)

$$\begin{aligned} \text{Schwinger} & \quad \text{Holstein-Primakoff} \\ b & \leftrightarrow b \\ a & \leftrightarrow \sqrt{2S - b^\dagger b} \\ a^\dagger a + b^\dagger b & = 2S \leftrightarrow b^\dagger b \leq 2S \end{aligned}$$

Ao fazermos este procedimento de eliminar o bóson a , estamos escolhendo o estado $|n_a = 2S, n_b = 0\rangle = |J, J\rangle$ como estado fundamental do sistema e os demais estados como excitações. Como os bósons a carregam momento angular na direção $\hat{\mathbf{z}}$, a transformação para a representação de HP escolhe, necessariamente, a direção $+\hat{\mathbf{z}}$ como a direção de alinhamento dos momentos magnéticos. Embora a escolha do operador J^z tenha sido arbitrária na representação de Schwinger, nesta passagem para a HP ela é muito importante, pois essa escolha define a direção de alinhamento do estado fundamental na fase de simetria quebrada.

Com as informações anteriores, vemos que, enquanto a representação de Schwinger provê uma representação simétrica, a representação de HP escolhe uma direção preferencial de alinhamento. Assim, da mesma forma como a representação de Schwinger é conveniente para

tratar a fase simétrica do modelo, a transformação de Holstein–Primakoff é utilizada para tratar a fase de simetria quebrada do modelo [58].

Estes últimos pontos serão fundamentais para a generalização da HP e sua aplicação ao modelo de Coqblin–Schrieffer, para obtermos o modelo efetivo com o qual trabalharemos.

2.3 Holstein–Primakoff Generalizada para simetria $U(N)$

A representação de Schwinger apresentada na seção anterior pode ser generalizada para o grupo $U(N)$, permitindo-nos generalizar a transformação de HP para este grupo e aplicá-la a modelos com simetria $U(N)$ para $N > 2$, como é o caso do MCS do capítulo 3. Isso se faz necessário porque, diferentemente do caso da interação de troca usual, onde a variação do momento angular é sempre $\Delta m = -1, 0, 1$ (e portanto podia ser descrita por (J^+, J^-, J^z)), no MCS a variação de momento angular em um processo de espalhamento pode ser de $\Delta m = -2j, \dots, -1, 0, 1, \dots, 2j$ [10], sendo necessário utilizar “operadores de levantamento e abaixamento” que aumentam ou diminuem o momento angular na direção z de mais de uma unidade.

Para generalizar a representação de Schwinger para o grupo $U(N)$, começamos definimos N bôsons a_1, \dots, a_N [58]. O estado de Fock de N bôsons é gerado pela base $|n_1, \dots, n_N\rangle$. Para obter um isomorfismo com o espaço de Hilbert de momento angular j , devemos gerar os $2j + 1$ estados $|j, m\rangle$ de momento angular, à partir dos estados bosônicos. Isso significa impor um vínculo sobre o espaço de Fock de N bôsons. Para entender como construir este vínculo, é interessante considerarmos um exemplo.

Vamos adotar momento angular $j = 3/2$ e $N = 4$ bôsons. Podemos então rotular os bôsons como a_0, a_1, a_2, a_3 e representar os estados como $|n_0, n_1, n_2, n_3\rangle$. Para $j = 3/2$, temos 4 estados, então, podemos fazer a seguinte associação entre estados bosônicos e estados de momento angular:

$$|1, 0, 0, 0\rangle = |3/2, -3/2\rangle, \quad (2.80)$$

$$|0, 1, 0, 0\rangle = |3/2, -1/2\rangle, \quad (2.81)$$

$$|0, 0, 1, 0\rangle = |3/2, +1/2\rangle, \quad (2.82)$$

$$|0, 0, 0, 1\rangle = |3/2, +3/2\rangle. \quad (2.83)$$

Como temos o mesmo número de bôsons e estados, iremos impôr $n_0 + n_1 + n_2 + n_3 = 1$, ou seja, o vínculo de Schwinger se torna

$$\sum_i a_i^\dagger a_i = 1, \quad \text{quando } N = 2j + 1. \quad (2.84)$$

De modo geral, a simetria do MCS é $SU(2j + 1)$ onde j é o momento angular em questão. Os $2j + 1$ bôsons de Schwinger nos permitem escrever todas as transições possíveis do modelo. Assim, o caso $N = 2j + 1$ será nosso caso de interesse neste trabalho. Sendo assim, vamos considerar N bôsons de Schwinger com vínculo $\sum_i n_i = 1$. De modo mais geral, o vínculo da representação de Schwinger é $\sum_i n_i = r$, onde r depende da representação do grupo sobre

a qual escolhemos trabalhar e do número de bôsons utilizados. Ao tomarmos $r = 1$ estamos escolhendo a representação fundamental do grupo. Deste modo, conseguimos criar uma relação de um–para–um entre os estados $|n_0, \dots, n_N\rangle$ e $|j, m\rangle$. Cabe mencionar que o vínculo $r = 1$ possui razões físicas mais profundas do que as discutidas aqui. Reservamos o apêndice C para explicarmos essas razões em mais detalhes.

Os geradores do grupo $U(N)$ podem ser escritos em termos dos bôsons de Schwinger como [63]

$$A_j^i = a_j^\dagger a_i. \quad (2.85)$$

É imediato verificar que a álgebra do grupo $U(n)$, $[A_j^i, A_l^k] = \delta_l^i A_j^k - \delta_j^k A_l^i$ é satisfeita pelos operadores $a_j^\dagger a_i$:

$$[A_j^i, A_l^k] = [a_j^\dagger a_i, a_l^\dagger a_k], \quad (2.86)$$

$$= a_j^\dagger [a_i, a_l^\dagger a_k] + [a_j^\dagger, a_l^\dagger a_k] a_i, \quad (2.87)$$

$$= a_j^\dagger \left(a_l^\dagger [a_i, a_k] + [a_i, a_l^\dagger] a_k \right) + \left(a_l^\dagger [a_j^\dagger, a_k] + [a_j^\dagger, a_l^\dagger] a_k \right) a_i, \quad (2.88)$$

$$= \delta_l^i a_j^\dagger a_k - \delta_j^k a_l^\dagger a_i, \quad (2.89)$$

$$= \delta_l^i A_j^k - \delta_j^k A_l^i. \quad (2.90)$$

No caso de estarmos interessados no subgrupo $SU(N)$, fazemos a substituição dos A_j^i pela sua versão sem traço, $B_j^i = A_j^i - \frac{1}{N} \delta_j^i \sum_{k=1}^N a_k^\dagger a_k$ ¹. Voltando às Eqs. (2.80)–(2.83), é fácil ver que a aplicação dos operadores A_j^i sobre os estados $|n_0, \dots, n_3\rangle$ nos permite descrever qualquer transição de um estado $|j, m\rangle$ para $|j, m'\rangle$, fundamental para a descrição do MCS que faremos no capítulo 3.

O próximo passo, é fazer obter a representação de HP a partir da representação de Schwinger. Fazemos isso escolhendo um dos estados $|n_0, \dots, n_N\rangle$ como estado fundamental do sistema e fazemos a associação anterior entre bôsons de Schwinger e de Holstein–Primakoff [58, 63]. Ao escolhermos um estado como estado fundamental, estamos eliminando 1 bôson da nossa teoria, os bôsons restantes devem, então, criar excitações sobre o estado fundamental. Similar ao exemplo de Schwinger, podemos fazer a seguinte associação ao eliminarmos um bôson, escolhendo o estado fundamental.

$$|3/2, -3/2\rangle \rightarrow |0\rangle, \quad (2.91)$$

$$|3/2, -1/2\rangle \rightarrow a_1^\dagger |0\rangle = |1\rangle, \quad (2.92)$$

$$|3/2, +1/2\rangle \rightarrow a_2^\dagger |0\rangle = |2\rangle, \quad (2.93)$$

$$|3/2, +3/2\rangle \rightarrow a_3^\dagger |0\rangle = |3\rangle. \quad (2.94)$$

No caso acima, podemos associar o índice j de a_j^\dagger como sendo a quantidade de momento angular carregada pelo bôson. Assim, esta representação também nos permite definir bôsons que carreguem mais de uma unidade de momento angular, permitindo descrever uma teoria com transições por bôsons que inclua variações de momento angular com $|\Delta m| > 1$. Como o vínculo

¹Compare com os operadores de Hubbard $X^{mm'}$ do capítulo 3.

de Schwinger era $\sum_i n_i = r$, removendo um dos n_i da soma, a condição se torna $\sum_{i \neq j} n_i \leq r$ (com $r = 1$ em nosso caso de interesse). Assim como antes, trocamos o operador a_j escolhido para [63]

$$a_j \rightarrow \theta(r) = \left(r - \sum_{i \neq j} a_i^\dagger a_i \right)^{1/2}. \quad (2.95)$$

No espaço de Fock $0 \leq \sum_{i \neq j} n_i \leq r$, o operador $\theta(r)$ acima é bem definido. Ao fazermos este procedimento, estamos escolhendo um estado preferencial como estado fundamental e escrevendo os demais estados como excitações bosônicas sobre este estado fundamental.

Com isso, nossa receita para a transformação de Holstein–Primakoff generalizada (HPG) é [63]

1. Definir N bôsons de Schwinger a_i ($i = 1, 2, \dots, N$), com vínculo $\sum_i a_i^\dagger a_i = r$, onde r depende da representação adotada para o grupo $U(N)$ e do número de bôsons;
2. Representar os geradores do grupo como $A_j^i = a_j^\dagger a_i$;
3. Escolher um índice $k = \bar{k}$ (uma “direção”) para o estado fundamental e fazer a substituição $a_{\bar{k}} \rightarrow \theta(r)$ e $a_{\bar{k}}^\dagger \rightarrow \theta(r)$, com $\theta(r) = \left(r - \sum_{i \neq \bar{k}} a_i^\dagger a_i \right)^{1/2}$ e alterar o vínculo para $\sum_{i \neq \bar{k}} a_i^\dagger a_i \leq r$;

Com isso, temos definida a transformação HPG e estamos prontos para aplicá-la ao MCS. Note que a condição de aproximação utilizada no modelo de Heisenberg ao aplicar a HP, $\langle a^\dagger a \rangle \ll 2S$ se torna $\langle a_i^\dagger a_i \rangle \ll r$. No caso $r = 1$, os número de bôsons deve ser baixíssimo, em média. Tal condição é obtida no regime de baixíssimas temperaturas, onde há pouquíssimas excitações [60].

Capítulo **3**

Modelo de Coqblin–Schrieffer

O modelo de Coqblin–Schrieffer (MCS) é um modelo teórico proposto originalmente por B. Coqblin e J. R. Schrieffer em 1969. Ele é empregado na descrição do comportamento de sistemas de elétrons em materiais que possuem impurezas magnéticas, considerando o espalhamento simultâneo do momento angular orbital e do spin.

Este modelo é derivado através da aplicação da transformação de Schrieffer–Wolff sobre o modelo de Anderson para a configuração $4f^1$ do átomo de Cério. Como resultado deste processo, o modelo obtido apresenta características qualitativamente distintas do modelo de Kondo convencional.

O principal objetivo de nossa investigação é encontrar um modelo mínimo capaz de descrever as anisotropias em sistemas de fermions pesados. Acreditamos que o modelo mais simples capaz de englobar a física que buscamos abordar seja o modelo de Coqblin–Schrieffer. Este modelo leva em consideração efeitos de spin-órbita, que acreditamos serem fundamentais para explicar a origem de certas anisotropias observadas em materiais magnéticos ordenados.

3.1 Modelos de Anderson e Kondo e a Transformação de Schrieffer–Wolff

Os modelos de Anderson e Kondo surgiram, historicamente, para o estudo de formação de momentos magnéticos localizados em metais e como estes momentos interagiam com os elétrons de condução [1]. Este problema, hoje conhecido como problema Kondo (veja o capítulo 1), surge quando se cresce uma amostra composta por um metal com boa condutividade elétrica, como os metais nobres (*e.g.* Cu, Ag, Au), que não possuem comportamento magnético forte, com uma pequena concentração de um outro elemento, por exemplo metais de transição (como Fe, Co, Ni, Mn), que possuem forte tendência à formação de momentos magnéticos localizados¹, neste contexto chamados de impurezas. Os íons das impurezas podem apresentar ou não momentos localizados (um spin localizado em um sítio de impureza).

Nesta seção, apresentamos os modelos de Anderson e Kondo e sua relação através da transformação de Schrieffer–Wolff, com o intuito de familiarizar o leitor para a derivação do modelo de Coqblin–Schrieffer.

¹De modo geral, podemos citar elementos com a camada d ou f não totalmente preenchida.

O modelo de impureza de Anderson, em sua forma mais simples, é composto de quatro ingredientes:

1. A matriz metálica da amostra é descrita por uma única banda de elétrons de condução com spin 1/2 e dispersão $\epsilon_{\mathbf{k}}$, descritos pelo Hamiltoniano $H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$;
2. A impureza magnética é descrita por um orbital (d , no caso mais simples) não degenerado podendo ser ocupado por elétrons com spin apontando para cima ou para baixo, em relação a uma dada direção, cujo Hamiltoniano é $H'_0 = \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma}$;
3. Um termo de hibridização entre o orbital d e os elétrons de condução, dado por $H_1 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \text{h.c.})$;
4. Uma interação do tipo Hubbard para descrever a repulsão Coulombiana entre os elétrons, quando mais de um elétron ocupa o orbital d , $H_2 = U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}$.

O Hamiltoniano do modelo é então composto pela soma $H_A = H_0 + H'_0 + H_1 + H_2$ [8]:

$$H_A = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} (V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \text{h.c.}) . \quad (3.1)$$

Vamos analisar o caso $V_{\mathbf{k}} = 0$. Neste caso, a banda de condução e a impureza estão desacopladas. A impureza do tipo Hubbard possui um espectro bem específico: sua energia é zero para $n_d = 0$, com $n_d = 1$ a energia é ϵ_d , que vamos tomar como negativa, e a energia é $2\epsilon_d + U$ para $n_d = 2$. Quando $n_d = 1$, o orbital d é ocupado por um elétron com spin para cima ou para baixo e temos a formação de um momento localizado.

Ligando a hibridização ($V_{\mathbf{k}} \neq 0$), transições podem ocorrer entre os orbitais d e a banda de condução. Vamos focar no processo de espalhamento de elétrons de condução pela impureza, restringindo-nos ao sub-espacão $n_d = 1$ e assumindo $V_{\mathbf{k}}$ pequeno. Este espalhamento pode ocorrer em segunda ordem em teoria de perturbação sob a ação do termo de hibridização. A amplitude de tal processo é da forma

$$W_{\mathbf{kk}'} = V_{\mathbf{k}} \frac{1}{E_{\text{ini}} - E_{\text{int}}} V_{\mathbf{k}'}, \quad (3.2)$$

onde E_{ini} corresponde à energia inicial e E_{int} à energia do estado intermediário.

O processo de espalhamento é descrito das seguintes maneiras. Um elétron da banda de condução $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ “salta” para o orbital d , em seguida um dos elétrons no orbital d “salta” para a banda de condução para um estado $|\mathbf{k}'\sigma'\rangle$. Outra possibilidade consiste no elétron inicialmente no orbital d “saltar” para a banda de condução, seguido de um elétron da banda de condução “saltando” de volta para o orbital d . No primeiro processo, temos um estado intermediário com o orbital d duplamente preenchido, enquanto no segundo, o orbital está vazio. Analisando esses processos, vemos que quando o sistema passa ao estado final, o spin do elétron de condução pode assumir qualquer valor. Temos, então, a possibilidade de um espalhamento que pode alterar o

spin dos elétrons de condução. As amplitudes para os vários processos possíveis são

$$W(\mathbf{k}\sigma; d - \sigma \rightarrow \mathbf{k}'\sigma; d - \sigma) = \frac{V_{\mathbf{k}}V_{\mathbf{k}'}}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_d - U}; \quad (3.3)$$

$$W(\mathbf{k}\sigma; d\sigma \rightarrow \mathbf{k}'\sigma; d\sigma) = -\frac{V_{\mathbf{k}}V_{\mathbf{k}'}}{\epsilon_d - \epsilon_{\mathbf{k}'}}; \quad (3.4)$$

$$W(\mathbf{k}\sigma; d - \sigma \rightarrow \mathbf{k}' - \sigma; d\sigma) = -V_{\mathbf{k}}V_{\mathbf{k}'} \left[\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_d - U} + \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_{\mathbf{k}'}} \right], \quad (3.5)$$

onde os sinais de menos ocorrem por conta da troca entre os elétrons de condução e da impureza. Os processos de spin *flip* acima (Eq. (3.5)) podem ser descritos pelo Hamiltoniano de Kondo [9, 64], dado por

$$H_K = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\alpha\beta} J_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \left(c_{\mathbf{k}\alpha}^{\dagger} \frac{\sigma}{2} c_{\mathbf{p}\beta} \right) \cdot \mathbf{S}_d, \quad (3.6)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}} J_{\mathbf{k}\mathbf{p}} \left[S_d^+ c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{p}\uparrow} + S_d^- c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{p}\downarrow} + S_d^z \left(c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{p}\uparrow} - c_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} c_{\mathbf{p}\downarrow} \right) \right]. \quad (3.7)$$

Da forma do Hamiltoniano, é fácil ver que processos de espalhamento de spin *flip* em primeira ordem em H_K podem descrever os processos de segunda ordem de H_1 . De fato, tomando-se

$$\frac{1}{2} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k}}V_{\mathbf{k}'} \left[\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_d - U} + \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_{\mathbf{k}'}} \right], \quad (3.8)$$

os processos e as amplitudes de espalhamento obtidos por ambos os modelos são os mesmos. Portanto, em até segunda ordem em teoria de perturbação em $V_{\mathbf{k}}$, os processos de espalhamento do modelo de Anderson podem ser pensados como espalhamentos pelo spin da impureza descritos pelo modelo de Kondo.

Esta relação entre os modelos de Anderson e Kondo pode ser feita mais precisamente através da transformação de Schrieffer–Wolff [9]. Esta transformação, que gera o Hamiltoniano de Kondo a partir do Hamiltoniano de Anderson, é equivalente a uma diagonalização do Hamiltoniano de Anderson dentro do sub–espaço $n_d = 1$, até segunda ordem em teoria de perturbação em $V_{\mathbf{k}}$.

A aplicação da transformação se inicia separando o Hamiltoniano de Anderson em um termo de ordem zero e um termo de primeira ordem,

$$H_0'' = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}, \quad (3.9)$$

$$H_1' = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left(V_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + \text{h.c.} \right). \quad (3.10)$$

A transformação de Schrieffer–Wolff é descrita pela transformação canônica de H para \tilde{H} tal que

$$\tilde{H} = e^S H e^{-S}, \quad (3.11)$$

$$= H + [S, H] + \frac{1}{2} [S, [S, H]] + \dots, \quad (3.12)$$

para alguma matriz S . Para que a transformação seja canônica, e^S deve ser unitária, assim é necessário que S seja anti-hermitiana. Se escolhermos S de modo a cancelar a dependência linear na perturbação H'_1 , isto é,

$$H'_1 + [S, H''_0] = 0, \quad (3.13)$$

então o novo Hamiltoniano em ordem $\mathcal{O}(V_{\mathbf{k}}^2)$ é dado por

$$\tilde{H} = H''_0 + \frac{1}{2} [S, H'_1], \quad (3.14)$$

incorporando os efeitos de segunda ordem em $V_{\mathbf{k}}$. O operador S pode ser construído notando-se que, pela forma da Eq. (3.13), S deve conter termos proporcionais a $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_\sigma$ (e seu Hermitiano conjugado) e seu comutador com a interação de Hubbard do orbital d gera um resultado proporcional a $n_{d-\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_\sigma$. A forma exata da transformação é [9]

$$S = \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}} \left[\frac{1 - n_{d-\sigma}}{\epsilon_d - \epsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{n_{d-\sigma}}{\epsilon_d + U - \epsilon_{\mathbf{k}}} \right] \left(d_\sigma^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_\sigma \right). \quad (3.15)$$

Calculando o comutador $[S, H'_1]$, nós obtemos

$$\begin{aligned} [S, H'_1] &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} (T_{\mathbf{k}\mathbf{k}} + J_{\mathbf{k}\mathbf{k}} n_{d-\sigma}) n_{d\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} \left(T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + \frac{n_d}{2} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'\sigma} \\ &+ \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\alpha\beta} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} c_{\mathbf{k}'\beta} \right) \cdot \mathbf{S}_d + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\sigma}^\dagger d_{-\sigma} d_\sigma + \text{h.c.} \right), \end{aligned} \quad (3.16)$$

onde $J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ é definido na Eq. (3.8) e

$$T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = V_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}'} \left(\frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_{\mathbf{k}}} + \frac{1}{\epsilon_d - \epsilon_{\mathbf{k}'}} \right). \quad (3.17)$$

Restringindo-nos ao sub-espaco $n_d = 1$, o primeiro termo da Eq. (3.16) é uma constante e pode ser desconsiderado. O segundo termo nos fornece um potencial espalhador que, essencialmente, renormaliza o potencial sentido pelos elétrons de condução. O último termo possui uma transição de pares, portanto nos removendo do subespaço $n_d = 1$. Assim, ficamos com o resultado efetivo

$$\tilde{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\alpha\beta} J_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \left(c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \frac{\boldsymbol{\sigma}}{2} c_{\mathbf{k}'\beta} \right) \cdot \mathbf{S}_d, \quad (3.18)$$

de onde identificamos o Hamiltoniano de Kondo.

É importante notar que a transformação de Schrieffer–Wolff, embora mais formal, não representa nada mais que o processo de descrever um Hamiltoniano em segunda ordem de teoria de perturbação por um novo Hamiltoniano cujos efeitos de primeira ordem reproduzem os efeitos do Hamiltoniano original, como vimos em nossa primeira análise mais simples. Este procedimento de segunda ordem descreve o processo de supertroca, originando geralmente uma interação AFM.

Para concluir esta seção, é importante mencionar que o efeito da transformação de Schrieffer–Wolff, em segunda ordem, pode ser obtido de forma mais direta substituindo a

interação H'_1 por

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{abc} \langle b | H'_1 | c \rangle \langle c | H'_1 | a \rangle \left(\frac{1}{\epsilon_a - \epsilon_c} + \frac{1}{\epsilon_b - \epsilon_c} \right) |b\rangle\langle a|, \quad (3.19)$$

onde $|a\rangle$ e $|b\rangle$ representam o estado inicial e final, respectivamente, e $|c\rangle$ os estados intermediários [10].

3.2 Derivação do Modelo de Coqblin–Schrieffer

O modelo de Anderson também é utilizado no estudo de sistemas de férmons pesados [65]. Para derivar o MCS a partir do modelo de Anderson, vamos considerar uma impureza de Cério interagindo com um mar de elétrons de condução. Posteriormente, generalizaremos o resultado final para uma rede de íons de Cério. Escolhemos a base de momento angular total para escrever o Hamiltoniano devido ao fato de que o grande acoplamento spin–órbita para o Cério resulta em um estado fundamental de momento angular total $j = 5/2$, com momento angular orbital $\ell = 3$. Vamos nos concentrar apenas no multiplet do estado fundamental da rede. Para descrever os elétrons de condução, adotamos a base $|k, m\rangle = |k, j, \ell, s, m\rangle$ dada pela magnitude k do momento cristalino, a magnitude j do momento angular total, a magnitude ℓ do momento angular orbital, o spin s e a projeção do momento angular total \mathbf{J} sobre uma direção genérica (porém fixada) $\hat{\mathbf{m}}^2$, denotado por m ($m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$). Além disso, o momento angular orbital dos elétrons de condução será fixado como igual ao dos íons da rede de momentos localizados ($\ell = 3$ no caso do Ce), pois, uma vez que estamos interessados apenas no estado $\ell = 3$ dos íons de Cério e, como o potencial de mistura é predominantemente esfericamente simétrico³, apenas a onda parcial com $\ell = 3$ dos elétrons de condução irá se hibridizar com as funções de onda dos íons da rede [10].

Na sequência, seguimos os passos descritos da Ref. [10]. Começamos definindo o operador c_{km}^\dagger que cria um elétron de condução com vetor de onda k , momento angular total j e projeção de \mathbf{J} na direção $\hat{\mathbf{m}}$ igual a m e o operador f_m^\dagger que cria uma impureza de momento angular j e cuja projeção na direção $\hat{\mathbf{m}}$ é m . Com isso, o Hamiltoniano de Anderson é dado por $H = H_0 + H_1$, onde

$$H_0 = \sum_{km} \epsilon_k c_{km}^\dagger c_{km} + \sum_m \epsilon_0 f_m^\dagger f_m + \frac{1}{2} U \sum_{mm'} f_m^\dagger f_m f_{m'}^\dagger f_{m'}, \quad (3.20)$$

$$H_1 = \sum_{km} \left(V_k c_{km}^\dagger f_m + \text{h.c.} \right), \quad (3.21)$$

e onde ϵ_k é a energia de um elétron de condução com momento de magnitude k , ϵ_0 a energia do estado localizado, ambas medidas com relação à energia de Fermi ϵ_F dos elétrons de condução. No Hamiltoniano acima, também são desprezados multipletos diferentes do multiplet fundamental, resultando apenas na presença da integral de Coulomb U . Utilizando a Eq. (3.19), com

²Futuramente, a direção $\hat{\mathbf{m}}$ corresponderá à direção da magnetização da rede, quando generalizarmos o modelo para uma rede de momentos localizados.

³O potencial de hibridização é devido a uma impureza, ou um átomo, de Ce, que corresponde a um potencial esférico. As regras de seleção desse potencial, portanto, conservam o momento angular orbital ℓ .

estados inicial e final dados por

$$|a\rangle = c_{km}^\dagger f_{m'}^\dagger |0\rangle, \quad |a\rangle = c_{k'm'}^\dagger f_m^\dagger |0\rangle, \quad (3.22)$$

e os dois estados intermediários possíveis sendo

$$c_{km}^\dagger c_{k'm'} |0\rangle, \quad \text{e} \quad f_m f_{m'} |0\rangle, \quad (3.23)$$

fazemos a troca do termo de interação H_1 para H_2 , obtendo

$$H_2 = - \sum_{kk'mm'} J_{kk'} c_{k'm'}^\dagger f_m^\dagger f_{m'} c_{km}, \quad (3.24)$$

com $J_{k_F k_F} = |V_{k_F}|^2 U/\epsilon_0 (\epsilon_0 + U)$. Podemos tomar $J_{kk'}$ como aproximadamente constante na região $\epsilon_0 < (\epsilon_k, \epsilon_{k'}) < \epsilon_0 + U$. No que se segue, tomaremos $J_{kk'} = J$ como constante com *cutoff* $J = 0$ se $|\epsilon_k|$ ou $|\epsilon_{k'}| > D$, com $D \simeq |\epsilon_0|$. A interação da Eq. (3.24) descreve um espalhamento simultâneo dos momentos angulares orbital e de spin; as projeções dos momentos magnéticos totais dos elétrons de condução e da impureza são trocados no processo de espalhamento. Note que a variação $\Delta m = m - m'$ não está restrita a $0, \pm 1$, como obteríamos em um modelo com interação $\mathbf{S} \cdot \mathbf{J}$ (tipo Kondo).

Em contraste com uma interação do tipo Kondo, a média de H_2 sobre os valores possíveis de n_{fm} quando $m = m'$ é não nula. Portanto, H_2 contém tanto espalhamento de troca como espalhamento potencial. Para obter um modelo apenas com interação de troca, removemos o termo de espalhamento potencial adicionando o termo

$$H_3 = \frac{J}{2j+1} \sum_{km, k'm'} c_{k'm'}^\dagger c_{km} n_{fm}. \quad (3.25)$$

Finalmente, o Hamiltoniano total do MCS é [10]

$$H_{\text{CS}} = \sum_{km} \epsilon_k c_{km}^\dagger c_{km} - J \sum_{km, k'm'} c_{k'm'}^\dagger c_{km} \left(f_m^\dagger f_{m'} - \frac{\delta_{mm'}}{2j+1} \sum_{m''} f_{m''}^\dagger f_{m''} \right), \quad (3.26)$$

onde a soma sobre k está restrita a $|\epsilon_k| < D$. Para $j = s$ e $\ell = 0$, o termo de interação do Hamiltoniano acima se reduz ao Hamiltoniano de Kondo. De modo similar à aplicação da transformação de Schrieffer–Wolff ao modelo de Anderson, o potencial coulombiano U entre os elétrons nos orbitais f é muito grande e a energia do orbital da impureza é negativa e suficientemente grande em módulo, de tal maneira que o número de elétrons- f no sítio da impureza de Ce^{3+} é fixado em 1. Assim,

$$\sum_m f_{im}^\dagger f_{im} = 1 \quad \text{para todo sítio } i, \quad (3.27)$$

que é um vínculo sobre o espaço de Hilbert disponível para os elétrons- f . Esta condição é análoga à imposição $n_d = 1$, discutida acima para o modelo de Anderson, e está relacionada com a escolha do parâmetro $r = 1$ na transformação de Holstein–Primakoff generalizada (capítulo 2). Esta

condição é de suma importância de modo que reservamos o apêndice C para uma discussão mais detalhada.

Embora a forma acima seja interessante para alguns estudos onde há apenas uma impureza e temos uma simetria esférica em torno dessa, para o caso de uma rede de íons de Cério, e para o estudo de espalhamento de elétrons neste cenário, é mais conveniente trabalharmos com operadores de ondas planas para os elétrons de condução. Assim, definimos um operador $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ que cria um elétron com momento \mathbf{k} e spin σ . A transformação de c_{km}^\dagger para $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ é dada por

$$c_{km}^\dagger = \sum_{\hat{\mathbf{k}}\sigma} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \langle km | \mathbf{k}\sigma \rangle, \quad (3.28)$$

onde a soma na equação anterior é para todos os ângulos $\hat{\mathbf{k}}$ com $|\mathbf{k}| = k$ fixado e sobre todos os valores de projeções de spin σ . O estado $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ denota um elétron de spin σ cuja função de onda é uma onda plana de vetor de onda \mathbf{k} e o estado $|km\rangle = |k, j, \ell, s, m\rangle$ denota o estado com onda parcial de número de onda k e momento angular total j dado pela soma de ℓ com s e projeção m . Com isso, o Hamiltoniano final se escreve

$$H_{\text{CS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', mm'} \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \left(f_m^\dagger f_{m'} - \frac{\delta_{mm'}}{2j+1} \sum_{m''} f_{m''}^\dagger f_{m''} \right), \quad (3.29)$$

onde $\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm}$ é dado por

$$\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} = J \langle \mathbf{k}\sigma | km \rangle \langle k'm' | \mathbf{k}'\sigma' \rangle. \quad (3.30)$$

Para \mathbf{L} , \mathbf{S} e \mathbf{J} projetados em uma direção $\hat{\mathbf{m}}$ arbitrária, o resultado dos elementos de matriz $\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm}$ é dado por

$$\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} = 4\pi J(jm | \ell, m - \sigma; \frac{1}{2}, \sigma) (jm' | \ell, m' - \sigma'; \frac{1}{2}, \sigma') Y_\ell^{m-\sigma*}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) Y_\ell^{m'-\sigma'}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}'), \quad (3.31)$$

onde $(jm | \ell, m_\ell; s, m_s)$ são os coeficientes de Clebsch–Gordan e $Y_\ell^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$ são harmônicos esféricos rodados, dados por

$$Y_\ell^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) = \sum_{m'} Y_\ell^{m'}(\hat{\mathbf{k}}) D_{m', m}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma), \quad (3.32)$$

sendo $D^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma)$ a matriz de Wigner que roda a direção $\hat{\mathbf{z}}$ para $\hat{\mathbf{m}}$ segundo a convenção zyz . Pode-se mostrar que as funções $Y_\ell^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$ são os auto-valores de

$$\mathbf{L}^2 Y_\ell^{m_\ell}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) = \ell(\ell+1) Y_\ell^{m_\ell}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) \quad (3.33)$$

$$(\hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{L}) Y_\ell^{m_\ell}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) = m_\ell Y_\ell^{m_\ell}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}). \quad (3.34)$$

Maiores detalhes sobre $Y_\ell^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$ e os cálculos para a derivação dos elementos de matriz $\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm}$ são apresentado no apêndice B.

O resultado do Hamiltoniano da Eq. (3.29) pode ser diretamente generalizado para

uma rede de íons de Cério, partindo do modelo para uma impureza. O resultado é [10]

$$H_{\text{CS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{1}{N_m} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', mm', i} \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} X_i^{mm'}, \quad (3.35)$$

$$X_i^{mm'} = f_{im}^\dagger f_{im'} - \frac{\delta_{mm'}}{2j+1} \sum_{m''} f_{im''}^\dagger f_{im''}, \quad (3.36)$$

$$n_{if} = \sum_m f_{im}^\dagger f_{im} = 1, \quad (3.37)$$

onde f_{im}^\dagger cria um elétron- f de momento angular total j , projeção na direção $\hat{\mathbf{m}}$ igual a m e na posição \mathbf{R}_i (ou sítio i) da rede de íons de Cério e N_m é o número de elétrons na rede de momentos localizados. Os operadores $X_i^{mm'}$, juntamente com o vínculo $n_{if} = 1$, são conhecidos como operadores de Hubbard [18].

A Eq. (3.35) será nosso ponto de partida para o capítulo 4, onde derivaremos o modelo efetivo a ser utilizado na equação de Boltzmann para estudar o espalhamento de elétrons de condução por ondas de spin (ou magnons). Vale ressaltar que, posto nosso modelo, podemos enxergá-lo de forma mais genérica como um modelo de simetria $SU(2j+1)$ que descreve uma rede ou impureza de íons com multiplet fundamental j interagindo com elétrons de condução, não mais necessitando da referência direta aos íons de Cério, como fizemos ao longo da derivação do modelo. Também relembramos que a magnitude do momento angular orbital, ℓ , é fixada, embora não apareça de forma explícita na Eq. (3.35). De fato, poderíamos adicionar o rótulo ℓ a $\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm}$ para explicitar esta dependência. Optamos por não fazê-lo para manter a consistência com a notação da Ref. [10] e evitar sobrecarregar ainda mais a notação.

Capítulo **4**

Modelo Efetivo

Neste capítulo, aplicaremos a transformação de Holstein-Primakoff generalizada (HPG) ao modelo de Coqblin-Schrieffer (MCS) para derivar a interação efetiva entre elétrons de condução e ondas de spin, ou mágmons.

Em seguida, investigaremos a dinâmica dos mágmons aplicando a HPG ao modelo XXZ . O resultado nos revelará que apenas um dos modos dos mágmons será dispersivo, de modo que os demais serão exponencialmente suprimidos no limite de baixas temperaturas.

Por fim, estabeleceremos nosso modelo efetivo restringindo o termo de interação elétron-mágmon ao único modo dispersivo dos mágmons. Assim, obteremos um Hamiltoniano que descreve a dinâmica dos elétrons na banda de condução, dos mágmons e a interação entre eles, fornecendo os elementos necessários para estudar o espalhamento elétron-mágmon.

4.1 Holstein-Primakoff Aplicação ao Modelo de Coqblin-Schrieffer

Para derivar o modelo efetivo com que iremos trabalhar, nosso ponto de partida é a aplicação da transformação HPG (capítulo 2) ao MCS (capítulo 3) para uma rede de momento localizados, Eq. (3.35). Começamos reescrevendo o MCS como

$$H_{\text{CS}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{1}{N_m} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', mm', i} \mathcal{J}_{\mathbf{k}'\sigma', \mathbf{k}\sigma}^{mm'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} X_i^{mm'}, \quad (4.1)$$

$$X_i^{mm'} = f_{im}^\dagger f_{im'} - \frac{\delta_{mm'}}{2j+1} \sum_{m''} f_{im''}^\dagger f_{im''}, \quad (4.2)$$

$$n_{if} = \sum_m f_{im}^\dagger f_{im} = 1, \quad (4.3)$$

onde N_m é o número de momentos localizados, $\mathcal{J}_{\mathbf{k}'\sigma', \mathbf{k}\sigma}^{mm'}$ é o acoplamento definido na Eq. 3.31, $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ cria um elétron na banda de condução com momento \mathbf{k} e spin σ , f_{im}^\dagger cria um elétron- f na posição \mathbf{R}_i e com projeção de momento angular m . As projeções do momento angular total \mathbf{J} , denotadas por m , devem ser consideradas em relação à uma direção $\hat{\mathbf{m}}$ genérica. Os operadores $X_i^{mm'}$, juntamente com o vínculo da última equação, são conhecidos como operadores de Hubbard. Será neles que iremos aplicar a HPG, uma vez que a transformação ocorre nos operadores f_{im}, f_{im}^\dagger . No que se segue, omitiremos o índice de rede, para simplificar as expressões.

É interessante notar que os operadores $A_\nu^\mu = f_\nu^\dagger f_\mu$ são geradores do grupo $U(2j+1)$,

$$\begin{aligned}
[A_\nu^\mu, A_\beta^\alpha] &= \left[f_\nu^\dagger f_\mu, f_\beta^\dagger f_\alpha \right], \\
&= f_\nu^\dagger \left[f_\mu, f_\beta^\dagger f_\alpha \right] + \left[f_\nu^\dagger, f_\beta^\dagger f_\alpha \right] f_\mu, \\
&= f_\nu^\dagger \left(\left\{ f_\mu, f_\beta^\dagger \right\} f_\alpha - f_\beta^\dagger \left\{ f_\mu, f_\alpha \right\} \right) + \left(\left\{ f_\nu^\dagger, f_\beta^\dagger \right\} f_\alpha - f_\beta^\dagger \left\{ f_\nu^\dagger, f_\alpha \right\} \right) f_\mu, \\
&= f_\nu^\dagger \left(\delta_\beta^\mu f_\alpha - 0 \right) + \left(0 - f_\beta^\dagger \delta_\nu^\alpha \right) f_\mu, \\
&= \delta_\beta^\mu A_\nu^\alpha - \delta_\nu^\alpha A_\beta^\mu,
\end{aligned} \tag{4.4}$$

mostrando que A_ν^μ satisfaz a álgebra de $U(2j+1)$, onde utilizamos as relações de comutação

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B, \tag{4.5}$$

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}. \tag{4.6}$$

De modo similar, vimos no Capítulo 2 que $A_\nu^\mu = a_\nu^\dagger a_\mu$, onde a_μ, a_ν^\dagger são operadores bosônicos, satisfazem a mesma álgebra. Portanto, juntamente com as condições $n_f = \sum_m f_m^\dagger f_m = 1$ e $n_a = \sum_m a_m^\dagger a_m = 1$, isso nos mostra que os operadores de Hubbard são os geradores do grupo $SU(2j+1)$ e que a transformação de Schwinger ($f_m \rightarrow a_m$) preserva essa propriedade. Para maiores detalhes sobre o vínculo $n_f = n_a = 1$, veja o apêndice C.

O primeiro passo para a transformação HPG é a transformação de Schwinger que consiste apenas em trocar f por a , mudando a estatística dos operadores. O próximo passo consistem em escolher um índice \bar{m} e fazer $a_{\bar{m}}, a_{\bar{m}}^\dagger \rightarrow \theta(r)$ (veja a seção 2.3). Este último passo, como vimos, representa um ordenamento do sistema, que corresponde a uma escolha de ordenamento dos momentos magnéticos ao longo de uma direção preferencial. Por hora, deixaremos o índice \bar{m} como genérico e utilizaremos esta notação para indicar o índice de alinhamento dos momentos magnéticos. Então, deveremos aplicar a HPG transformando os operadores $f_{\bar{m}}, f_{\bar{m}}^\dagger$ em $X_i^{mm'}$ para $\theta(r)$ e os demais operadores f_m, f_m^\dagger para a_m, a_m^\dagger . Para isso, vamos considerar separadamente os casos $X^{mm'}$, $X^{\bar{m}m}$, $X^{m\bar{m}}$ e $X^{\bar{m}\bar{m}}$, onde m e m' são diferentes de \bar{m} . Primeiramente, note que

$$\sum_{m''} a_{m''}^\dagger a_{m''} \rightarrow \sum_{m'' \neq \bar{m}} a_{m''}^\dagger a_{m''} + [\theta(r)]^2, \tag{4.7}$$

$$= \sum_{m'' \neq \bar{m}} a_{m''}^\dagger a_{m''} + \left(r - \sum_{m'' \neq \bar{m}} a_{m''}^\dagger a_{m''} \right), \tag{4.8}$$

$$= r \tag{4.9}$$

Com isso, temos,

$$\begin{cases} X^{mm'} \rightarrow a_m^\dagger a_{m'} - \frac{r}{2j+1} \delta_{mm'}, \\ X^{\bar{m}m} \rightarrow \theta(r) a_m, \\ X^{m\bar{m}} \rightarrow a_m^\dagger \theta(r), \\ X^{\bar{m}\bar{m}} \rightarrow \frac{2j}{2j+1} r - \sum_{m'' \neq \bar{m}} a_{m''}^\dagger a_{m''}. \end{cases} \tag{4.10}$$

Como vimos no Capítulo 2, o limite de baixas temperaturas corresponde à condição

$$\left\langle \sum_{m'' \neq \bar{m}} a_{m''}^\dagger a_{m''} \right\rangle \ll r. \quad (4.11)$$

Sendo assim, iremos expandir $\theta(r)$ e manter apenas os termos de ordem mais baixa em r ¹. Portanto, os operadores de Hubbard ficam

$$\begin{cases} X^{mm'} \rightarrow -\frac{r}{2j+1} \delta_{mm'}, \\ X^{\bar{m}\bar{m}} \rightarrow \sqrt{r} a_m, \\ X^{m\bar{m}} \rightarrow \sqrt{r} a_m^\dagger, \\ X^{\bar{m}m} \rightarrow \frac{2j}{2j+1} r. \end{cases} \quad (4.12)$$

Vamos aplicar esta transformação ao termo de interação do Hamiltoniano do MCS,

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', mm', i} \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} X_i^{mm'}. \quad (4.13)$$

Recuperando o índice de rede e separando as somas em m e m' como fizemos para os operadores de Hubbard, temos

$$\begin{aligned} H_{\text{int}} \rightarrow & -\frac{1}{N_m} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', i} \sum_{m \neq \bar{m}} \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{mm} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \left(-\frac{r}{2j+1} \right) \\ & - \frac{\sqrt{r}}{N_m} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', i} \sum_{m \neq \bar{m}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \left(\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m\bar{m}} a_{im} + \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{\bar{m}m} a_{im}^\dagger \right) \\ & - \frac{1}{N_m} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', i} \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{\bar{m}\bar{m}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \frac{2j}{2j+1} r. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Juntando a primeira e a última linhas, temos

$$H'_0 = \frac{r}{2j+1} \frac{1}{N_m} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', i} \sum_{m \neq \bar{m}} \left(\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{mm} - \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{\bar{m}\bar{m}} \right) e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (4.15)$$

$$= \frac{r}{2j+1} \sum_{\mathbf{k}\sigma\sigma'} \sum_{m \neq \bar{m}} \left(\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} - \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{\bar{m}\bar{m}} \right) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (4.16)$$

onde utilizamos $\sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} = N_m \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ e eliminamos a soma em \mathbf{k}' . Então, vemos que o termo H'_0 renormaliza a dispersão dos elétrons de condução.

Como o termo H'_0 é da ordem de J , a renormalização da dispersão pode ser desprezada pois iremos assumir

$$\frac{J}{\epsilon_F} \ll 1, \quad (4.17)$$

¹Isso corresponde ao análogo da expansão *large-S* na Holstein–Primakoff usual.

onde ϵ_F denota a energia de Fermi. Portanto, o termo de interação fica

$$H_{\text{int}} \rightarrow -\frac{\sqrt{r}}{N_m} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma', i} \sum_{m \neq \bar{m}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \left(\mathcal{J}_{\mathbf{k}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m\bar{m}} a_{im} + \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{\bar{m}m} a_{im}^\dagger \right). \quad (4.18)$$

Para finalizar, vamos aplicar a transformada de Fourier aos operadores a_{im} para representá-los no espaço de momentos. Definindo operadores $a_{\mathbf{k}m}$, $a_{\mathbf{k}m}^\dagger$ por

$$a_{im} = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}m}, \quad (4.19)$$

$$a_{im}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_m}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} a_{\mathbf{k}m}^\dagger, \quad (4.20)$$

obtemos a forma final do termo de interação como

$$H_{\text{el-mag}} = -\sqrt{\frac{r}{N_m}} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} \sum_{m \neq \bar{m}} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \left(\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m\bar{m}} a_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}, m} + \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{\bar{m}m} a_{\mathbf{k}-\mathbf{k}', m}^\dagger \right). \quad (4.21)$$

Chamamos o Hamiltoniano acima de interação elétron–mágnon, pois este Hamiltoniano descreve o termo de interação entre elétrons e os *quanta* de ondas de spins, representados pelos bôsons a_m . A partir deste termo, calcularemos as taxas de transição a serem utilizadas na equação de Boltzmann.

4.2 Dinâmica dos Mágmons

Nosso Hamiltoniano atual possui a forma

$$H = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + H_{\text{el-mag}}. \quad (4.22)$$

Para continuar com nosso modelo, precisamos determinar a dinâmica dos mágmons, isto é, somar um termo H_{mag} ao Hamiltoniano acima da forma $\sum_{\mathbf{q}m} \omega_{\mathbf{q}m} a_{\mathbf{q}m}^\dagger a_{\mathbf{q}m}$. Nosso problema se resume, portanto, a calcular a dispersão $\omega_{\mathbf{q}m}$ dos mágmons $a_{\mathbf{q}m}$. Como modelo para descrever as interações entre os momentos localizados, vamos adotar o modelo XXZ ² e aplicar a transformação HPG.

Começamos escrevendo a interação entre os momentos localizados da rede como uma interação entre primeiros vizinhos descrito pelo Hamiltoniano

$$H_{\text{XXZ}} = -J' \sum_{\langle ij \rangle} \left[\Delta J_i^z J_j^z + \frac{1}{2} \left(J_i^+ J_j^- + J_i^- J_j^+ \right) \right]. \quad (4.23)$$

²Esta é uma escolha particular da dispersão dos mágmons; poderíamos ter escolhido qualquer outra forma de dispersão como, por exemplo, a interação RKKY, a qual resulta em uma dispersão anisotrópica para os mágmons. A escolha desta dispersão foi adotada por nos permitir obter uma dispersão simples da forma $\omega_{\mathbf{q}} = Aq^2 + \omega_0$, com a presença de um *gap* ω_0 . Este gap será desconsiderado na maior parte dos cálculos, mas será utilizado para a regularização de integrais que surgirão nos capítulos 5 e 6.

Pela física do nosso problema, vamos considerar que

$$\frac{J}{J'} \simeq 1, \quad (4.24)$$

ou seja, o acoplamento de interação entre os momentos localizados é da ordem da interação elétron-magnon. Escrevendo o operador J^z em termos dos operadores f_m e f_m^\dagger , podemos aplicar a HPG de maneira direta:

$$\begin{aligned} J^z &= \sum_{m=-j}^j m f_m^\dagger f_m, \\ &\xrightarrow{\text{HPG}} \sum_{m \neq \bar{m}} m a_m^\dagger a_m + \bar{m} \left(r - \sum_{m \neq \bar{m}} a_m^\dagger a_m \right), \\ &= \bar{m} r + \sum_{m \neq \bar{m}} (m - \bar{m}) a_m^\dagger a_m. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Para J^\pm temos

$$J^\pm = \sum_{m=-j}^j [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} f_{m \pm 1}^\dagger f_m, \quad (4.26)$$

onde utilizamos a notação $f_{j+1}^\dagger = f_{-j-1}^\dagger = 0$. Separamos a soma sobre m como

$$\sum_m = \sum_m' + (\text{termo com } m = \bar{m}) + (\text{termo com } m \pm 1 = \bar{m}), \quad (4.27)$$

$$\sum_m' = \sum_{\substack{m \neq \bar{m} \\ m \pm 1 \neq \bar{m}}}, \quad (4.28)$$

e definindo $\alpha_m^\pm = [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2}$, podemos escrever

$$J^\pm \xrightarrow{\text{HPG}} \sum_m' \alpha_m^\pm a_{m \pm 1}^\dagger a_m + \alpha_{\bar{m}}^\pm a_{\bar{m} \pm 1}^\dagger \theta(r) + \alpha_{\bar{m}}^\mp \theta(r) a_{\bar{m} \mp 1}. \quad (4.29)$$

Em ordem quadrática em a , temos

$$\begin{aligned} J^\pm &= \sum_m' \alpha_m^\pm a_{m \pm 1}^\dagger a_m + \sqrt{r} \left(\alpha_{\bar{m}}^\pm a_{\bar{m} \pm 1}^\dagger + \alpha_{\bar{m}}^\mp a_{\bar{m} \mp 1} \right), \\ &= \sqrt{r} \left(\alpha_{\bar{m}}^\pm a_{\bar{m} \pm 1}^\dagger + \alpha_{\bar{m}}^\mp a_{\bar{m} \mp 1} \right) + \mathcal{O}(r^0), \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde matemos apenas os termos de ordem \sqrt{r} .

Com isso, obtemos

$$J_i^z J_j^z = (\bar{m} r)^2 + \bar{m} r \sum_{m \neq \bar{m}} (m - \bar{m}) \left(a_{im}^\dagger a_{im} + a_{jm}^\dagger a_{jm} \right) + \mathcal{O}(r^0), \quad (4.31)$$

$$J_i^+ J_j^- = r \left(\alpha_{\bar{m}}^+ a_{i, \bar{m}+1}^\dagger + \alpha_{\bar{m}}^- a_{i, \bar{m}-1} \right) \left(\alpha_{\bar{m}}^- a_{j, \bar{m}-1}^\dagger + \alpha_{\bar{m}}^+ a_{j, \bar{m}+1} \right) + \mathcal{O}(r^{1/2}), \quad (4.32)$$

$$J_i^- J_j^+ = r \left(\alpha_{\bar{m}}^- a_{i, \bar{m}-1}^\dagger + \alpha_{\bar{m}}^+ a_{i, \bar{m}+1} \right) \left(\alpha_{\bar{m}}^+ a_{j, \bar{m}+1}^\dagger + \alpha_{\bar{m}}^- a_{j, \bar{m}-1} \right) + \mathcal{O}(r^{1/2}), \quad (4.33)$$

Para prosseguir, vamos particularizar para o caso

$$\bar{m} = +j.$$

Neste caso, $\alpha_{\bar{m}}^+ = 0$ e $a_{\bar{m}+1} = 0$, de modo que

$$J_i^+ J_j^- = r (\alpha_{\bar{m}}^-)^2 a_{i,\bar{m}-1} a_{j,\bar{m}-1}^\dagger + \mathcal{O}(r^{1/2}), \quad (4.34)$$

$$J_i^- J_j^+ = r (\alpha_{\bar{m}}^-)^2 a_{i,\bar{m}-1}^\dagger a_{j,\bar{m}-1} + \mathcal{O}(r^{1/2}). \quad (4.35)$$

Com isso, o termo H_{XXZ} fica

$$\begin{aligned} H_{\text{XXZ}} &\xrightarrow{\text{HPG}} H_{\text{mag}} = -J' \sum_{\langle ik \rangle} (jr)^2 + 2J' (jr) \Delta \sum_{\langle ik \rangle} \sum_{m \neq j} (j - m) a_{im}^\dagger a_{im} \\ &\quad - J' \frac{1}{2} r (\alpha_j^-)^2 \sum_{\langle ik \rangle} \left(a_{i,j-1}^\dagger a_{k,j-1} + \text{h.c.} \right). \\ &= -J' (jr)^2 N \frac{z}{2} + J' jr z \Delta \sum_{i,m \neq j} (j - m) a_{im}^\dagger a_{im} \\ &\quad - J' jr \sum_{\langle ik \rangle} \left(a_{i,j-1}^\dagger a_{k,j-1} + \text{h.c.} \right). \end{aligned}$$

Desprezando o termo constante e aplicando a transformada de Fourier, obtemos

$$H_{\text{mag}} = J' jr z \Delta \sum_{\mathbf{k}, m \neq j} (j - m) a_{\mathbf{k}m}^\dagger a_{\mathbf{k}m} - J' jr z \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},j-1}^\dagger a_{\mathbf{k},j-1}, \quad (4.36)$$

$$\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{z} \sum_{\delta} e^{i \mathbf{k} \cdot \delta}. \quad (4.37)$$

Definindo $b_{\mathbf{k}} = a_{\mathbf{k},j-1}$ e agrupando o termo com $m = j - 1$ da primeira soma na segunda, podemos escrever

$$H_{\text{mag}} = J' jr z \sum_{\mathbf{k}, m \neq j, j-1} (j - m) a_{\mathbf{k}m}^\dagger a_{\mathbf{k}m} + J' jr z \sum_{\mathbf{k}} (\Delta - \gamma_{\mathbf{k}}) b_{\mathbf{k}}^\dagger b_{\mathbf{k}}. \quad (4.38)$$

Com isso vemos que a dispersão dos bôsons $a_{\mathbf{k}m}$, ($m < j - 1$) é $\omega_m = J' r z j (j - m) \Delta$, que é constante (não dispersiva) e para o bôson $b_{\mathbf{k}}$ é $\omega_{\mathbf{k}} = J' r z (\Delta - \gamma_{\mathbf{k}})$.

No limite $\mathbf{k} \rightarrow 0$, para uma rede quadrada, $\gamma_{\mathbf{k}}$ assume a forma

$$\gamma_{\mathbf{k}} \simeq 1 - \frac{1}{z} \sum_{\delta} (\mathbf{k} \cdot \delta)^2. \quad (4.39)$$

Com isso,

$$\omega_{\mathbf{k}} \simeq J' jr \left[\sum_{\delta} (\mathbf{k} \cdot \delta)^2 + z (\Delta - 1) \right], \quad (4.40)$$

Assim, vemos que a dispersão não possui um *gap* no limite $\Delta \rightarrow 1$ (Heisenberg isotrópico) e recuperamos o resultado $\omega_{\mathbf{k}} \sim k^2$ para magnons ferromagnéticos em uma rede quadrada.

Vamos assumir que $\Delta = 1$ ou, no máximo, $\Delta \simeq 1$, de modo que, se houver um gap

na dispersão dos mágmons, este será muito pequeno. Nesse caso, a baixas temperaturas, apenas os bósons b contribuirão para o espalhamento dos elétrons de condução, pois os demais modos são exponencialmente suprimidos. Portanto, consideraremos o seguinte Hamiltoniano efetivo, derivado do termo XXZ:

$$H_{\text{mag}} = \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}}, \quad (4.41)$$

e a dispersão $\omega_{\mathbf{q}}$ é dada pela Eq. (4.40). No capítulo 5, empregaremos as expressões

$$\omega_{\mathbf{q}} = \frac{q^2}{2\mu} = J' \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2, \quad (4.42)$$

para a dispersão dos mágmons, onde μ faz o papel de uma massa para os mágmons e k_F é o momento de Fermi dos elétrons na banda de condução. Note que a dispersão dos mágmons deve ter um “cutoff” ultravioleta que determina a região na qual a Eq. (4.42) é válida. Por conservação de momento, a magnitude do momento do mágmon envolvido em um processo de espalhamento está restrito ao intervalo $0 < |\mathbf{q}| < 2k_F$, para elétrons em torno da superfície de Fermi, assim, tomaremos $2k_F$ como o cutoff superior para o momento dos mágmons nas integrais que envolverem os mesmos.

Como a contribuição dos bósons a_m é pequena para o espalhamento, manteremos apenas o bóson b no termo de interação. Portanto, nosso modelo efetivo é dado por

$$H_{\text{eff}} = H_0 + H_{\text{el-mag}}, \quad (4.43)$$

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\mathbf{q}} b_{\mathbf{q}}^\dagger b_{\mathbf{q}} \quad (4.44)$$

$$H_{\text{el-mag}} = -\sqrt{\frac{r}{N_m}} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} c_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} \left(\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{j-1, j} b_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}} + \mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{j, j-1} b_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}^\dagger \right). \quad (4.45)$$

No que se segue, adotaremos as dispersões eletrônica e magnônica como

$$\epsilon_k = \frac{k^2}{2m} - \mu, \quad \omega_q = \frac{q^2}{2\mu} = J' \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2. \quad (4.46)$$

Capítulo **5**

Equação de Boltzmann

A teoria cinética é o ramo da Física que estuda a fundamentação microscópica de fenômenos de transporte e outros processos fora do equilíbrio. Sua ideia central consiste em explicar as propriedades de sistemas fora do equilíbrio como consequência do espalhamento entre as partículas que constituem o sistema. Dentro da teoria cinética, a equação de Boltzmann governa a dinâmica semi-clássica da função de distribuição de posição e momento, da qual podemos extraír as propriedades físicas de interesse.

Neste capítulo, apresentaremos a teoria por trás da equação de Boltzmann, derivaremos o termo de colisão e faremos a linearização da equação de Boltzmann. Em seguida, discutiremos a aproximação de tempo de relaxação, que iremos utilizar nos cálculos do próximo capítulo. Concluimos este capítulo com a aplicação da equação de Boltzmann ao caso específico da interação de Kondo ($j = s = 1/2$ e $\ell = 0$), fornecendo um guia para os cálculos subsequentes.

5.1 Observações preliminares

Conforme descrito acima, a equação de Boltzmann é uma teoria semi-clássica. Isto porque apenas semiclassicamente podemos definir posição e momento simultaneamente para uma partícula como o elétron. Uma abordagem por métodos mais sofisticados de teoria de muitos corpos reproduz, no limite semiclassico, os mesmos resultados obtidos de maneira mais simples pela equação de Boltzmann [66, 67]. Assim, o estudo de transporte por meio da equação de Boltzmann se faz preferível, em grande parte dos casos.

No que se segue, apresentaremos a equação de Boltzmann de maneira similar à apresentada nas Refs. [68, 7, 69].

5.2 Dinâmica da função de distribuição

Seja $f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t)$ a função de distribuição semiclassica de uma banda n em um instante t , no ponto (\mathbf{r}, \mathbf{k}) do espaço de fase. A função de distribuição é definida tal que a quantidade

$$2 \times f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) \frac{d^d r d^d k}{(2\pi)^d} \quad (5.1)$$

é igual ao número de elétrons da banda n na região de volume $d^d r d^d k$ em torno do ponto (\mathbf{r}, \mathbf{k}) , no instante t , onde o fator de 2 está presente quando tratamos o spin como “transparente”. Em equilíbrio à temperatura T , f_n se reduz à distribuição de Fermi-Dirac,

$$f_n(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f^0(\epsilon_{n\mathbf{k}}) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{n\mathbf{k}}} + 1}, \quad (5.2)$$

onde definimos $\beta = 1/T$ como o inverso da temperatura, $\epsilon_{n\mathbf{k}}$ a dispersão da banda n e absorvemos o potencial químico na dispersão. Por simplicidade, no que se segue iremos suprimir o índice de banda, uma vez que restaurá-lo é imediato, pois as quantidades físicas são aditivas banda-a-banda. De maneira similar, um índice de spin pode ser adicionado de maneira aditiva. Faremos isso na seção 5.4.

Para determinar a dinâmica do sistema, consideramos um deslocamento infinitesimal de t para $t + dt$. Neste intervalo o ponto (\mathbf{r}, \mathbf{k}) do espaço de fase se desloca para $(\mathbf{r}', \mathbf{k}')$, onde, de acordo com a teoria semi-clássica para a dinâmica de elétrons de Bloch¹ [7],

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \dot{\mathbf{r}} dt, \quad (5.3)$$

$$\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \dot{\mathbf{k}} dt, \quad (5.4)$$

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v}_\mathbf{k} = \frac{\partial \epsilon_\mathbf{k}}{\partial \mathbf{k}}, \quad (5.5)$$

$$\dot{\mathbf{k}} = \mathbf{F}, \quad (5.6)$$

onde \mathbf{F} é a força que atua sobre a partícula e $\epsilon_\mathbf{k}$ a dispersão eletrônica. Por conservação de partículas, o número de partículas dentro do volume inicial deve se mover para o novo volume, portanto,

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) d^d r d^d k = f(\mathbf{r} + \dot{\mathbf{r}} dt, \mathbf{k} + \dot{\mathbf{k}} dt, t + dt) d^d r' d^d k'. \quad (5.7)$$

O teorema de Liouville afirma que o volume no espaço de fase é conservado, assim, $d^d r' d^d k' = d^d r d^d k$, e obtemos

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{r} + \dot{\mathbf{r}} dt, \mathbf{k} + \dot{\mathbf{k}} dt, t + dt). \quad (5.8)$$

Ao expandir a equação anterior em primeira ordem, chegamos ao resultado

$$\mathbf{v}_\mathbf{k} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial f}{\partial t} = 0. \quad (5.9)$$

Na presença de colisões entre as partículas, a equação (5.9) é modificada por um funcional responsável por contabilizar o efeito de colisões, que toma a forma

$$\mathbf{v}_\mathbf{k} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{\hbar} \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\partial f}{\partial t} = \mathcal{C}[f]. \quad (5.10)$$

A Eq. 5.10 recebe o nome de equação de Boltzmann. Ela será a base para o estudo dos efeitos do espalhamento de elétrons pelas ondas de spin.

¹O nome “elétrons de Bloch” se refere a elétrons em um potencial periódico, originário da rede de íons, que são descritos por funções de onda de Bloch, $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Essas funções satisfazem o teorema de Bloch, $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, onde \mathbf{R} é um vetor da rede de Bravais do cristal. Um potencial $V = 0$, resultando em uma superfície de Fermi esférica, é um caso particular de potencial periódico.

Antes de considerarmos o termo de colisão, vamos especializar para o caso de um campo elétrico uniforme fraco. Neste caso, a força atuando sobre o elétron é simplesmente $\mathbf{F} = -e\mathbf{E}$, onde $e > 0$ é a magnitude da carga fundamental. Considerando um regime estacionário, e que a distribuição é uniforme no espaço, temos $f(\mathbf{r}, \mathbf{k}, t) = f(\mathbf{k})$. Com isso, a equação de Boltzmann se torna

$$-e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = -e(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_k) \frac{\partial f(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_k} = \mathcal{C}[f(\mathbf{k})]. \quad (5.11)$$

Utilizamos a hipótese de um campo elétrico fraco ao considerar que a correção de ordem mais baixa em f é linear no campo elétrico, de modo que o lado esquerdo da equação de Boltzmann em ordem linear depende apenas de f^0 , resultando em uma equação cuja dependência com f está totalmente contida no termo de colisão

$$-e(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_k) \frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} = \mathcal{C}[f(\mathbf{k})]. \quad (5.12)$$

5.3 Termo de Colisão

O termo de colisão, $\mathcal{C}[\bullet]$, é um funcional que nos dá a taxa *líquida* de partículas *adicionadas* ao volume inicial $d^d r d^d k$. Ele é responsável por transformar a equação de Boltzmann em uma equação integro-diferencial. Nesta seção, derivaremos a forma geral do termo de colisão e, em seguida, faremos sua linearização para obter a equação de Boltzmann linearizada, com a qual iremos trabalhar.

5.3.1 Forma Geral

É conveniente separar o termo de colisão em duas partes,

$$\mathcal{C}[\bullet] = \mathcal{C}_+[\bullet] - \mathcal{C}_-[\bullet], \quad (5.13)$$

onde $\mathcal{C}_+[\bullet]$ corresponde a espalhamentos para dentro do volume $d^d r d^d k$, isto é, partículas adicionadas ao volume (*in-scattering*) e o termo $\mathcal{C}_-[\bullet]$ corresponde ao espalhamento de partículas para fora do volume em questão (*out-scattering*).

Seja $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ a taxa de transição do estado \mathbf{k}' para o estado \mathbf{k} (i.e., a probabilidade de transição por unidade de tempo). O termo $\mathcal{C}_+[f] d^d k dt / (2\pi)^3$, que conta o número de partículas entrando no volume $d^d k$ no intervalo de tempo dt é obtido da seguinte maneira. O número de elétrons em um volume $d^d k$ no entorno do ponto \mathbf{k}' é $f(\mathbf{k}') d^d k' / (2\pi)^3$. Destes, $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d^d k dt / (2\pi)^3$ serão espalhados de \mathbf{k}' para \mathbf{k} , se todos os níveis no volume $d^d k$ estiverem vazios. No entanto, pelo princípio de exclusão de Pauli, apenas a fração $1 - f(\mathbf{k})$ estão vazios, de modo que a fração de elétrons espalhados deve ser reduzida por este fator. Portanto, o número total de elétrons entrando no volume $d^d k$ em torno de \mathbf{k} como resultado de colisões no intervalo de tempo dt é

$$\frac{\mathcal{C}_+[f] d^d k dt}{(2\pi)^3} = \left[\frac{f(\mathbf{k}') d^d k'}{(2\pi)^3} \right] \left[\frac{W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d^d k dt}{(2\pi)^3} \right] [1 - f(\mathbf{k})]. \quad (5.14)$$

Integrando sobre \mathbf{k}' e posteriormente discretizando a integral, obtemos

$$\mathcal{C}_+[f(\mathbf{k})] = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})]. \quad (5.15)$$

De modo similar, derivamos o termo de *out-scattering* como

$$\mathcal{C}_-[f(\mathbf{k})] = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')]. \quad (5.16)$$

Podemos restaurar índices de spin ou de banda de forma simples, adicionando-os de modo a acompanhar cada momento e generalizando-se a soma de momento para momento, banda e spin. De modo mais claro, tomamos os momentos \mathbf{k} e \mathbf{k}' e os transformamos em $n\sigma\mathbf{k}$ e $n'\sigma'\mathbf{k}'$. A soma sobre \mathbf{k}' se torna então uma soma sobre n' , σ' e \mathbf{k}' .

5.3.2 Amplitude de Transição

A amplitude $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, associada a transição do estado $|\mathbf{k}'\rangle$ para o estado $|\mathbf{k}\rangle$, é um ingrediente fundamental para o termo de colisão e, claramente, para a equação de Boltzmann. Esta amplitude contém a física do espalhamento e corresponde à parte quântica da teoria semi-clássica que estamos abordando.

Para calcularmos a amplitude W , faremos uso da regra de ouro de Fermi para amplitude de transição, [70]

$$W(b, a) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle b | H_{\text{int}} | a \rangle|^2 \delta(\epsilon_b - \epsilon_a \pm \omega), \quad (5.17)$$

onde os sinais positivo e negativo na função δ estão associados ao processo de emissão e absorção, respectivamente, como pode ser visto do termo de interação da Eq. (4.45). O papel da função δ , presente na equação acima, corresponde à imposição de conservação de energia no processo de espalhamento.

Quando ω é identicamente nulo, dizemos se tratar de um espalhamento elástico, consistindo no caso em que a energia do elétron espalhado é conservada. Os chamados processos inelásticos ocorrem quando não há conservação de energia do elétron espalhado. Em particular, o espalhamento por meio da interação elétron-magnon é um processo inelástico. Nas seções 5.4 e 6.3, aplicaremos a regra de ouro para calcular as amplitudes de transição, onde ficará mais claro seu papel na teoria.

5.3.3 Linearização do Termo de Colisão

Para um sistema em equilíbrio, o termo de colisão deve se anular (não há fluxo líquido de partículas em equilíbrio), de modo que $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ satisfaz a equação do balanço detalhado [68],

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f^0(\mathbf{k}') [1 - f^0(\mathbf{k})] = W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')], \quad (5.18)$$

onde escrevemos f^0 para denotar a distribuição no equilíbrio. Isso nos permite escrever

$$\mathcal{C}[f(\mathbf{k})] = \sum_{\mathbf{k}'} \{ W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})] - W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')]\}, \quad (5.19)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')] \underbrace{\left\{ \frac{f(\mathbf{k}') [1 - f(\mathbf{k})]}{f^0(\mathbf{k}') [1 - f^0(\mathbf{k})]} - \frac{f(\mathbf{k}) [1 - f(\mathbf{k}')]}{f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')]} \right\}}_X. \quad (5.20)$$

Definindo $g(\mathbf{k}) = f(\mathbf{k}) - f^0(\mathbf{k})$, podemos fazer uso da aproximação de Chapman–Enskog [68, 69], ou seja, expandir em torno do equilíbrio, mantendo apenas termos de primeira ordem em g . Aplicando esta aproximação ao termo X , obtemos

$$X = \frac{[f^0(\mathbf{k}') + g(\mathbf{k}')][1 - f^0(\mathbf{k}) - g(\mathbf{k})]}{f^0(\mathbf{k}') [1 - f^0(\mathbf{k})]} - \frac{[f^0(\mathbf{k}) + g(\mathbf{k})][1 - f^0(\mathbf{k}') - g(\mathbf{k}')]}{f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')]}, \quad (5.21)$$

$$\simeq 1 + \frac{g(\mathbf{k}') [1 - f^0(\mathbf{k})] - f^0(\mathbf{k}') g(\mathbf{k})}{f^0(\mathbf{k}') [1 - f^0(\mathbf{k})]} - 1 - \frac{g(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')] - f^0(\mathbf{k}) g(\mathbf{k}')}{f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')]}, \quad (5.22)$$

$$= \frac{g(\mathbf{k}')}{f^0(\mathbf{k}')} - \frac{g(\mathbf{k})}{1 - f^0(\mathbf{k})} - \frac{g(\mathbf{k})}{f^0(\mathbf{k})} + \frac{g(\mathbf{k}')}{1 - f^0(\mathbf{k}')}, \quad (5.23)$$

$$= \frac{g(\mathbf{k}')}{f^0(\mathbf{k}') [1 - f^0(\mathbf{k}')]} - \frac{g(\mathbf{k})}{f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k})]}. \quad (5.24)$$

Definindo $\chi(\mathbf{k})$ como

$$\chi(\mathbf{k}) = \frac{g(\mathbf{k})}{f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k})]}, \quad (5.25)$$

obtemos o termo de colisão linearizado

$$\mathcal{C}_{\text{linear}}[f(\mathbf{k})] = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')] [\chi(\mathbf{k}') - \chi(\mathbf{k})]. \quad (5.26)$$

A equação de Boltzmann linearizada é obtida pela substituição $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}_{\text{linear}}$ na equação de Boltzmann.

5.3.4 Aproximação de Tempo de Relaxação

Observando a equação (5.26), vemos que a presença do termo²

$$\sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')] \chi(\mathbf{k}') \quad (5.27)$$

é responsável por tornar a equação de Boltzmann uma equação integral. A aproximação de tempo de relaxação consiste em desprezar este termo, de modo que a equação de Boltzmann perde seu caráter integral. Aplicando este resultado ao nosso caso particular, Eq. (5.12), obtemos

$$-e(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_\mathbf{k}) \frac{\partial f^0(\mathbf{k})}{\partial \epsilon_\mathbf{k}} = -\sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')] \chi(\mathbf{k}), \quad (5.28)$$

²Note que o momento \mathbf{k}' , que está sendo somado, é o argumento de χ .

Definindo

$$\frac{1}{a(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') f^0(\mathbf{k}) [1 - f^0(\mathbf{k}')], \quad (5.29)$$

a solução da equação de Boltzmann linearizada é

$$\chi(\mathbf{k}) = ea(\mathbf{k})(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_\mathbf{k}) \left(\frac{\partial f^0(\epsilon_\mathbf{k})}{\partial \epsilon_\mathbf{k}} \right). \quad (5.30)$$

Na equação anterior, $a(\mathbf{k})$ equivale ao tempo de relaxação, $\tau(\mathbf{k})$, diferindo deste por um termo adimensional no integrando³. Recuperando os índices de banda, podemos escrever

$$\chi_n(\mathbf{k}) = ea_n(\mathbf{k})(\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{n\mathbf{k}}) \left(\frac{\partial f^0(\epsilon_{n\mathbf{k}})}{\partial \epsilon_{n\mathbf{k}}} \right), \quad (5.31)$$

$$\frac{1}{a_n(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'n'} W(n\mathbf{k}, n'\mathbf{k}') f^0(\epsilon_{n\mathbf{k}}) [1 - f^0(\epsilon_{n'\mathbf{k}'})]. \quad (5.32)$$

Note que a amplitude de transição presente na equação final corresponde a espalhamentos para o estado $|n\mathbf{k}\rangle$, isto é *in-scattering*. Na próxima seção, consideraremos o espalhamento por mágmons que pode ocorrer tanto por absorção quanto por emissão de mágmons, sendo assim a amplitude W total para *in-scattering* será composta pela soma das amplitudes de absorção e de emissão.

5.4 Aplicação do formalismo às ondas de spins para $j = 1/2$ e $\ell = 0$

Para finalizar, aplicaremos os resultados obtidos para a equação de Boltzmann ao caso da interação de Kondo, correspondente a $j = 1/2$ e $\ell = 0$. Esta seção tem um objetivo pedagógico para o cálculo realizado para j e ℓ genéricos do próximos capítulo. Além disso, os resultados podem ser comparados com a referência [35]. Se $\ell = 0$, os harmônicos esféricos $Y_{\ell=0}^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$ se reduzem a $1/\sqrt{4\pi}$. Além disso, os coeficientes de Clebsch–Gordan se tornam $(jm|\ell, m - \sigma; \frac{1}{2}, \sigma) = (\frac{1}{2}m|0, 0; \frac{1}{2}, m_s) = \delta_{mm_s}$. Com isso, a Eq. (3.31) para $\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm}$ fica simplesmente

$$\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} = J\delta_{m\sigma}\delta_{m'\sigma'}. \quad (5.33)$$

Utilizando este termo de interação na interação elétron–mágmon, Eq. (4.45), obtemos o resultado usual,

$$H_{\text{el-mag}} = -J\sqrt{\frac{r}{N_m}} \sum_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'} \left(c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\uparrow} b_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} + c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}'\downarrow} b_{\mathbf{k}'-\mathbf{k}}^\dagger \right). \quad (5.34)$$

A amplitude de transição para *in-scattering* é composta por dois termos, correspondentes aos processos de absorção e emissão de um mágmon, conforme apresentado na Fig. 5.1.

³O tempo de relaxação é usualmente definido como $\tau^{-1}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$.

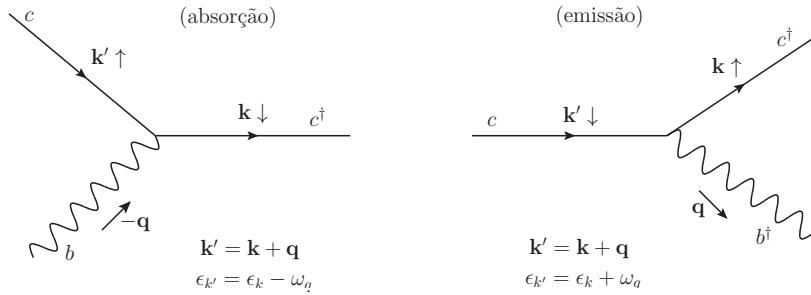


Figura 5.1: Processos de absorção e emissão de um magnônico descritos pelo Hamiltoniano da Eq. (5.34).

Seguindo a notação da figura, as amplitudes de absorção e emissão são dadas por

$$W^{\text{abs}} (\downarrow \mathbf{k}, \uparrow \mathbf{k}') = 2\pi \frac{r}{N_m} J^2 \sum_{\mathbf{q}} b(\omega_q) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k + \omega_q), \quad (5.35)$$

$$W^{\text{emi}} (\uparrow \mathbf{k}, \downarrow \mathbf{k}') = 2\pi \frac{r}{N_m} J^2 \sum_{\mathbf{q}} [b(\omega_q) + 1] \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k - \omega_q), \quad (5.36)$$

onde $b(\omega)$ é a distribuição de Bose-Einstein,

$$b(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1}. \quad (5.37)$$

O surgimento do termo $b(\omega)$ em W^{abs} ocorre por conta do valor esperado

$$|\langle \mathbf{k} \downarrow; n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} | H_{\text{el-mag}} | \mathbf{k}' \uparrow; n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} + 1 \rangle|^2 \quad (5.38)$$

que entra no cálculo da taxa de transição, através da regra de ouro de Fermi. A atuação dos operadores $c_{\mathbf{k}'\uparrow}$, $c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ nos estados $|\mathbf{k}' \uparrow\rangle$, $|\mathbf{k} \downarrow\rangle$, respectivamente, resulta em um fator de 1, por conta do princípio de exclusão de Pauli (apenas 1 elétron pode ocupar cada um dos estados). Por outro lado, temos $\langle n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} | b_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} | n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'} + 1 \rangle = \sqrt{n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}}$. O fator $n_{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$ é dado pela função de distribuição dos bôsons b , que é dada pela distribuição de Bose-Einstein. Em outras palavras, estamos considerando que os magnônicos estão em equilíbrio térmico e apenas os elétrons de condução estão fora do equilíbrio. Esta hipótese nos permite simplificar o problema que, de outro modo, consistiria em resolver duas equações de Boltzmann acopladas, uma para os elétrons de condução e outra para os magnônicos [68]. Essa aproximação se manterá ao longo de todos os cálculos, inclusive no capítulo 6.

A partir das Eqs. (5.35) e (5.36), podemos calcular a função $\chi_{\downarrow}(\mathbf{k})$ aplicando as Eqs. (5.31) e (5.32). As equações ficam

$$\chi_{\downarrow}(\mathbf{k}) = e a_{\downarrow}(\mathbf{k}) (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}}) \left(\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right), \quad (5.39)$$

$$\frac{1}{a_{\downarrow}(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} W^{\text{abs}} (\downarrow \mathbf{k}, \uparrow \mathbf{k}') f^0(\epsilon_k) [1 - f^0(\epsilon_{k'})]. \quad (5.40)$$

Utilizando a Eq. (5.35), podemos escrever $1/a_{\downarrow}(\mathbf{k})$ como

$$\frac{1}{a_{\downarrow}(\mathbf{k})} = 2\pi \frac{r}{N_m} J^2 \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}} b(\omega_q) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}} \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k + \omega_q) f^0(\epsilon_k) [1 - f^0(\epsilon_{k'})]. \quad (5.41)$$

Utilizando a conservação de momento, $\delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k} + \mathbf{q}}$, eliminamos a soma sobre \mathbf{k}' . Tomando o limite do contínuo na soma sobre \mathbf{q} , podemos escrever

$$\frac{1}{a_{\downarrow}(\mathbf{k})} = \frac{2\pi r J^2}{n_m} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} b(\omega_q) f^0(\epsilon_k) [1 - f^0(\epsilon_k - \omega_q)] \delta(\epsilon_{|\mathbf{k} + \mathbf{q}|} - \epsilon_k + \omega_q), \quad (5.42)$$

onde $n_m = N_m/V$ é a densidade de momentos magnéticos e utilizamos a conservação de energia para escrever $f^0(\epsilon_{k'}) = f^0(\epsilon_k - \omega_q)$. Prosseguimos multiplicando e dividindo o integrando por $1 - f^0(\epsilon_k)$ e utilizando as relações⁴

$$f^0(\epsilon) [1 - f^0(\epsilon)] = -T \frac{\partial f^0(\epsilon)}{\partial \epsilon}, \quad (5.43)$$

$$\left(-\frac{\partial f^0(\epsilon)}{\partial \epsilon} \right) = \delta(\epsilon) + \mathcal{O}(T/\epsilon_F)^2, \quad (5.44)$$

$$f^0(0) = \frac{1}{2}, \quad (5.45)$$

para obter

$$\frac{1}{a_{\downarrow}(\mathbf{k})} = \frac{4\pi r J^2 T}{n_m} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} b(\omega_q) [1 - f^0(-\omega_q)] \delta(\epsilon_{|\mathbf{k} + \mathbf{q}|} - \epsilon_k + \omega_q). \quad (5.46)$$

Para eliminar a função δ de conservação de energia, note que

$$\epsilon_{|\mathbf{k} + \mathbf{q}|} - \epsilon_k + \omega_q = \frac{k^2 + q^2 + 2kq \cos \gamma}{2m} - \frac{k^2}{2m} + \frac{q^2}{2\mu}, \quad (5.47)$$

onde γ é o ângulo entre \mathbf{k} e \mathbf{q} . Se rodarmos os eixos de integração de \mathbf{q} de modo que \mathbf{k} esteja na direção q_z , vamos ter que $\gamma = \theta_q$. Assim,

$$\delta(\epsilon_{|\mathbf{k} + \mathbf{q}|} - \epsilon_k + \omega_q) = \delta \left[\frac{kq \cos \theta_q}{m} + \frac{q^2}{2m} + \frac{q^2}{2\mu} \right], \quad (5.48)$$

$$= \frac{m}{kq} \delta \left[\cos \theta_q + \frac{q}{2k} \left(1 + \frac{m}{\mu} \right) \right]. \quad (5.49)$$

Com isso, a Eq. (5.46) fica

$$\frac{1}{a_{\downarrow}(\mathbf{k})} = \frac{4\pi r J^2 T}{n_m} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \int \frac{q^2 dq d(\cos \theta_q) d\phi_q}{(2\pi)^3} b(\omega_q) [1 - f^0(-\omega_q)] \times \quad (5.50)$$

$$\times \frac{m}{kq} \delta \left[\cos \theta_q + \frac{q}{2k} \left(1 + \frac{m}{\mu} \right) \right]. \quad (5.51)$$

Como o integrando não depende de ϕ_q , esta integral pode ser feita imediatamente. Para a integral sobre $\cos \theta_q$, lembremos do *cutoff* superior para os momentos dos mágons, que resulta

⁴Lembrando que estamos absorvendo o potencial químico na dispersão (veja seção 1.4).

na relação de desigualdade $0 \leq q \leq 2k_F$. Como $k \simeq k_F$, temos que $0 \leq q/2k \lesssim 1$. Para estimar a razão m/μ , note que dividindo ω_{2k_F} por $\epsilon_F = \epsilon_{k_F}$ temos

$$\frac{\omega_{2k_F}}{\epsilon_F} = \frac{J}{\epsilon_F} = \frac{4k_F^2/\mu}{k_F^2/m} = 4 \frac{m}{\mu}, \quad (5.52)$$

onde utilizamos a Eq. (4.46). Da Eq. (4.17), vemos que $m/\mu \ll 1$, de modo que

$$0 \leq \frac{q}{2k} \left(1 + \frac{m}{\mu} \right) \leq 1 + \Delta, \quad (\Delta > 0, \Delta \ll 1). \quad (5.53)$$

Uma vez que a integral sobre $\cos \theta_q$ é feita sobre o intervalo $[-1, 1]$, a relação anterior nos mostra que para $0 < q < q_{\max}$, onde $q_{\max} < 2k_F$, o argumento da função δ se anula, quando $-1 \leq \cos \theta_q < 0$. Sendo assim, o efeito da função δ consiste em reduzir o limite superior da integral sobre q de $2k_F$ para q_{\max} . No entanto, como a correção para q_{\max} , da ordem de $\Delta \sim J/\epsilon_F$, é muito pequena, podemos aproximar o limite superior de integração como sendo $2k_F$. Assim,

$$\int \frac{d(\cos \theta_q) d\phi_q}{(2\pi)^2} \delta \left[\cos \theta_q + \frac{q}{2k} \left(1 + \frac{m}{\mu} \right) \right] = \frac{1}{2\pi}. \quad (5.54)$$

Portanto, a Eq. (5.50) fica

$$\frac{1}{a_{\downarrow}(\mathbf{k})} \simeq \frac{mrJ^2T}{\pi n_m k_F} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \int_0^{2k_F} dq qb(\omega_q) [1 - f^0(-\omega_q)]. \quad (5.55)$$

Resta-nos calcular a integral radial. Para isso, note que $1 - f^0(-\omega) = f(\omega)$, assim,

$$\int_0^{2k_F} dq qb(\omega_q) [1 - f^0(-\omega_q)] = \int_0^{2k_F} dq qb(\omega_q) f^0(\omega_q). \quad (5.56)$$

Como $\omega_q = q^2/2\mu$, $q dq = \mu d\omega_q$, utilizando que $\omega_{2k_F} = J'$, obtemos

$$\frac{1}{a_{\downarrow}(\mathbf{k})} = \frac{\mu mrJ^2T}{\pi n_m k_F} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \int_0^{J'} d\omega b(\omega) f(\omega). \quad (5.57)$$

Definindo $x = \beta\omega = \omega/T$, temos

$$\int_0^{J'} d\omega b(\omega) f(\omega) = T \int_0^{J'/T} dx \frac{1}{e^x - 1} \frac{1}{e^x + 1}. \quad (5.58)$$

No regime de baixas temperaturas, podemos extrapolar o limite de integração superior para ∞ . O limite inferior, por outro lado, possui uma divergência logarítmica, uma vez que o integrando se comporta como $1/x$ próximo a $x = 0$. Esta divergência também surge nos cálculos da Ref. [35]. Podemos eliminar a divergência da integral adicionando um *cutoff* infravermelho, x_0 . Este *cutoff* pode ser entendido como uma pequeno gap na dispersão ω_q dos magnons, como sugerida pelo modelo *XXZ* (veja Eq. (4.40)). Introduzindo o *cutoff* x_0 , no limite $x_0 \rightarrow 0$, obtemos

$$\int_{x_0}^{\infty} dx \frac{1}{e^x - 1} \frac{1}{e^x + 1} = \frac{1}{2} \ln x_0^{-1}, \quad (x_0 < 1, \quad x_0 \rightarrow 0). \quad (5.59)$$

Com isso, obtemos

$$\frac{1}{a_{\downarrow}(\mathbf{k})} = \frac{\mu m r J^2 T^2}{2\pi n_m k_F} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \ln x_0^{-1}. \quad (5.60)$$

Voltando à Eq. (5.39) e utilizando $\mathbf{v}_k = \mathbf{k}/m$ para uma superfície de Fermi esférica, obtemos

$$\chi_{\downarrow}(\mathbf{k}) = -e \frac{2\pi n_m k_F^2}{\mu m^2 r J^2 T^2} \frac{1}{\ln x_0^{-1}} (\mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{k}}). \quad (5.61)$$

Note que há um cancelamento do termo $\partial f^0/\partial \epsilon$, resultando em $g = f^0(1 - f^0)\chi$ proporcional a $\partial f^0/\partial \epsilon$, mostrando que a física do problema está contida na superfície de Fermi, conforme esperado. O cálculo para $a_{\uparrow}(\mathbf{k})$ pode ser feito de maneira similar, com algumas mudanças sutis. Neste caso, temos

$$\frac{1}{a_{\uparrow}(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} W^{\text{emi}}(\uparrow \mathbf{k}, \downarrow \mathbf{k}') f^0(\epsilon_k) [1 - f^0(\epsilon_{k'})], \quad (5.62)$$

$$= \frac{2\pi r J^2}{N_m} \sum_{\mathbf{q}} [b(\omega_q) + 1] f^0(\epsilon_k) [1 - f^0(\epsilon_k + \omega_q)] \delta(\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \epsilon_k - \omega_q), \quad (5.63)$$

$$= \frac{4\pi r J^2 T}{N_m} \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k} \right) \sum_{\mathbf{q}} b(\omega_q) f^0(\omega_q) e^{2\beta\omega_q} \delta(\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \epsilon_k - \omega_q), \quad (5.64)$$

onde utilizamos as relações (5.43)–(5.45) e que

$$[b(\omega_q) + 1] [1 - f^0(\omega_q)] = b(\omega_q) f^0(\omega_q) e^{2\beta\omega_q}. \quad (5.65)$$

O argumento da função δ difere por um sinal negativo a frente de ω_q , o que resulta em

$$\delta(\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \epsilon_k - \omega_q) = \frac{m}{kq} \delta \left[\cos \theta_q + \frac{q}{2k} \left(1 - \frac{m}{\mu} \right) \right]. \quad (5.66)$$

Neste caso, a função δ não reduz o limite de integração de q , como no caso anterior. A integral angular pode ser feita diretamente, resultando em

$$\frac{1}{a_{\uparrow}(\mathbf{k})} = \frac{mr J^2 T}{\pi k_F n_m} \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k} \right) \int_0^{2k_F} dq q b(\omega_q) f^0(\omega_q) e^{2\beta\omega_q}, \quad (5.67)$$

$$\simeq \frac{m\mu r J^2 T^2}{\pi k_F n_m} \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k} \right) \int_{x_0}^{J'/T} dx \frac{1}{e^x - 1} \frac{1}{e^x + 1} e^{2x}. \quad (5.68)$$

Assim como antes, temos uma divergência logarítmica na integral sobre x , necessitando da introdução do *cutoff* x_0 . Para $x_0 < 1$, no limite $x_0 \rightarrow 0$, podemos escrever

$$\frac{1}{a_{\uparrow}(\mathbf{k})} = \frac{m\mu r J^2 T^2}{2\pi k_F n_m} \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_k} \right) \ln x_0^{-1}, \quad (5.69)$$

de onde vemos que o resultado para $1/a_{\uparrow}(\mathbf{k})$ é o mesmo obtido na Eq. (5.60).

Note que, pela Eq. (6.7), o resultado $1/a_{\downarrow}(\mathbf{k}) \sim T^2$ implica em uma resistividade ρ proporcional a T . Este resultado, quando comparado com a resistividade obtida na Ref. [35], mostra um desacordo na dependência da resistividade com a temperatura. A origem desta

discrepância na dependência com a temperatura se deve ao fato de que os cálculos em [35] foram feitos além da aproximação de tempo de relaxação, considerando todo o caráter integral da equação de Boltzmann linearizada (Eq. (5.26)). Este resultado pode ser observado quando consideramos o termo

$$\chi(\mathbf{k}') - \chi(\mathbf{k}) = \chi(\mathbf{k} - \mathbf{q}) - \chi(\mathbf{k}) \quad (5.70)$$

em primeira ordem em \mathbf{q} . Expandindo, obtemos

$$\chi(\mathbf{k}') - \chi(\mathbf{k}) = \mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{k}} \chi(\mathbf{k}). \quad (5.71)$$

Se adotarmos o Ansatz, $\chi(\mathbf{k}) \propto \mathbf{k}$ [35, 71], o termo de colisão da equação de Boltzmann terá uma forma similar ao lado direito da Eq. (5.41), com a adição do termo $q \cos \theta_q$. A integração sobre $\cos \theta_q$ neste caso aumenta a potencia de q em uma unidade, como pode ser visto da Eq. (5.49). Assim, a integração radial final será da forma

$$\int dq q^3 b(q^2) f(q^2) = \frac{1}{2} T^2 \int dx x \frac{1}{e^x - 1} \frac{1}{e^x + 1}, \quad (5.72)$$

o que aumenta em uma unidade a potencia da dependência com a temperatura do lado direito da equação de Boltzmann, resultando em $\rho \sim T^2$, em acordo com a Ref. [35]. Este resultado mostra uma das limitações da aproximação de tempo de relaxação⁵.

No próximo capítulo, generalizaremos o cálculo feito nesta seção para j genérico. Veremos que os passos aqui apresentados são a base para a generalização, com apenas a modificação do termo de interação elétron-mágnon.

⁵Um resultado bem conhecido que ilustra este ponto é a diferença na dependência com a temperatura da resistividade no problema elétron-fônons. Na aproximação de tempo de relaxação, o resultado obtido é $\rho \sim T^3$, enquanto que o resultado correto e observado experimentalmente é $\rho \sim T^5$. Esta discrepança se deve à diferença entre as definições do tempo de relaxação τ e do tempo de relaxação de transporte, usualmente denotado como τ_{tr} [68].

Capítulo **6**

Observáveis Físicos e Anisotropia

Neste capítulo, aplicaremos o formalismo da equação de Boltzmann e a aproximação de tempo de relaxação, desenvolvidos no capítulo 5, ao modelo efetivo obtido no capítulo 4, através da aplicação da Holstein–Primakoff generalizada (HPG) ao modelo de Coqblin–Schrieffer (MCS). Vamos generalizar o cálculo da seção 5.4 sobre a interação de troca usual, estendendo-o para o modelo das Eqs. (4.43)–(4.46) com $j > 1/2$ e $\ell > 0$. Em seguida, aplicaremos os resultados obtidos ao cálculo da condutividade elétrica e definiremos uma quantidade para mensurar a anisotropia que estamos buscando.

Na seção 6.4, introduzimos um termo de espalhamento por impurezas não magnéticas, buscando uma visão mais realista. Veremos que este termo também nos ajudará a estudar a influência do espalhamento elétron–mágnon na condutividade.

Concluiremos este capítulo apresentando os resultados numéricos obtidos para a anisotropia e para a condutividade elétrica.

6.1 Condutividade Elétrica

Nosso objetivo é estudar a possível anisotropia na condutividade elétrica do sistema (setor de carga), induzida pela orientação dos momentos magnéticos (setor de spin) na presença de forte interação spin–órbita. Para tal, devemos calcular a condutividade elétrica do sistema. Uma vez que a função de distribuição contém as informações estatísticas do sistema, a condutividade deverá ser obtida através dessa. Nesta seção, derivaremos a relação entre a condutividade elétrica e a função de distribuição que calcularemos na próxima seção.

Partindo da função de distribuição dos elétrons de condução, $f_\sigma(\mathbf{k})$, podemos calcular a densidade de corrente elétrica e, com isso, o tensor de condutividade elétrica. Como

$$f_\sigma(\mathbf{k}) \frac{d^3k d^3r}{(2\pi)^3} \quad (6.1)$$

é igual ao número de elétrons com spins σ no volume $d^3k d^3r$ em torno do ponto (\mathbf{r}, \mathbf{k}) do espaço de fase, temos que a densidade de carga é dada por $-e \sum_\sigma f_\sigma(\mathbf{k}) \frac{d^3k}{(2\pi)^3}$. Multiplicando pela velocidade $\mathbf{v}_\mathbf{k}$ dos elétrons e integrando, obtemos a densidade de corrente elétrica, \mathbf{J} , como

$$\mathbf{J} = -e \sum_\sigma \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \mathbf{v}_\mathbf{k} f_\sigma(\mathbf{k}), \quad (6.2)$$

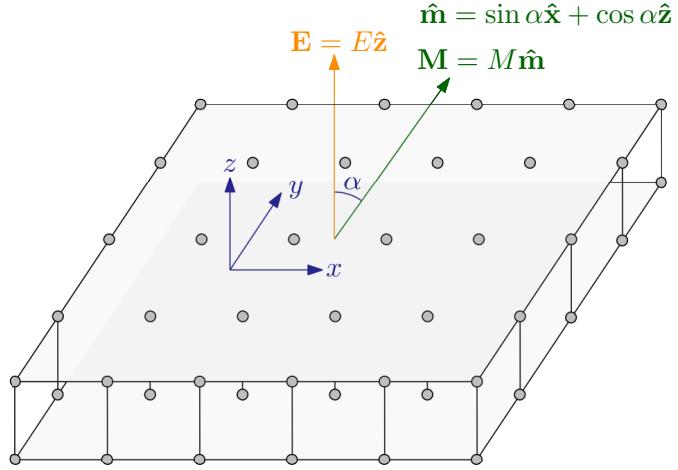


Figura 6.1: A geometria do problema é composta por uma rede tridimensional de momentos magnéticos interagindo com um mar de elétrons de condução (não representados). Apenas dois planos da rede de momentos localizados são mostrados. Um campo elétrico uniforme $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{z}}$ é aplicado na direção $\hat{\mathbf{z}}$. A rede desenvolve uma magnetização total $\mathbf{M} = M\hat{\mathbf{m}}$, que faz um ângulo α com a direção do campo elétrico. A física do problema depende apenas do ângulo α entre $\hat{\mathbf{z}}$ e $\hat{\mathbf{m}}$, de modo que adotamos $\hat{\mathbf{m}}$ no plano xz .

onde $\mathbf{v}_k = \partial\epsilon_k/\partial\mathbf{k}$ é a velocidade dos elétrons. Escrevendo $f_\sigma(\mathbf{k}) = f^0(\mathbf{k}) + g_\sigma(\mathbf{k})$, como não há corrente elétrica quando o sistema se encontra em equilíbrio, temos que

$$\mathbf{J} = -e \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \mathbf{v}_k g_{\sigma}(\mathbf{k}). \quad (6.3)$$

Utilizando a Eq. (5.25) e a relação da Eq. (5.43), podemos escrever

$$\mathbf{J} = -e \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(-T \frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \mathbf{v}_k \chi_{\sigma}(\mathbf{k}). \quad (6.4)$$

Assumindo o Ansatz

$$\chi_{\sigma}(\mathbf{k}) = -e \mathbf{E} \cdot \Phi_{\sigma}(\mathbf{k}), \quad (6.5)$$

temos

$$\mathbf{J} = e^2 \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(-T \frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \mathbf{v}_k (\Phi_{\sigma}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{E}). \quad (6.6)$$

Com isso, o tensor de condutividade fica

$$\sigma_{ij} = \frac{dJ_i}{dE_j} = e^2 \sum_{\sigma} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left(-T \frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) v_{ik} \Phi_{j\sigma}(\mathbf{k}). \quad (6.7)$$

A equação anterior apresenta a forma geral do tensor de condutividade elétrica, em termos da distribuição dos elétrons de condução, através da função $\Phi_{\sigma}(\mathbf{k})$.

6.2 Geometria do Problema e Considerações Físicas

Na figura 6.1, representamos a geometria do problema que estudamos. Ela é composta por uma rede de momentos magnéticos interagindo com um mar de elétrons de condução, a presença de uma magnetização na direção $\hat{\mathbf{m}}$ e um campo elétrico uniforme na direção $\hat{\mathbf{z}}$. Por conta do forte acoplamento spin–órbita dos momentos magnéticos (elétrons na camada f) e da interação de troca entre elétrons de condução e momentos magnéticos, que leva em conta os efeitos de spin–órbita, esperamos encontrar uma anisotropia na condutividade elétrica, quando o ângulo α entre $\hat{\mathbf{z}}$ e $\hat{\mathbf{m}}$ é variado. É esperado que a física do problema dependa apenas do ângulo α .

Para provar que a física depende apenas do ângulo α , note que o problema depende das funções $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$ na forma $|Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})|^2$, por conta da Eq. (3.31) e porque os elementos de matriz \mathcal{J} da interação elétron–mágnon entram na regra de ouro de Fermi com o módulo ao quadrado. A Eq. (3.32) nos diz que as funções $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$ são rotações dos harmônicos esféricos. A matriz de Wigner $D_{m',m}^{(\ell)}(\theta, \alpha, \phi)$ envolvida descreve uma rotação que leva a direção $\hat{\mathbf{z}}$ para $\hat{\mathbf{m}}$ da seguinte maneira: uma rotação em torno do eixo z de θ , seguido de uma rotação de α em torno do eixo y e mais uma rotação de ϕ em torno do eixo z ¹. Como a direção inicial é $\hat{\mathbf{z}}$, a primeira rotação equivale à identidade, logo, podemos tomar $\theta = 0$. Escrevendo $D_{m',m}^{(\ell)}(0, \alpha, \phi) = d_{m'm}^{(\ell)}(\alpha) e^{im\phi}$, da Eq. (3.32) temos que

$$Y_{\ell}^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) = \sum_{m'} Y_{\ell}^{m'}(\hat{\mathbf{k}}) d_{m'm}^{(\ell)}(\alpha) e^{im\phi}, \quad (6.8)$$

$$= e^{im\phi} \sum_{m'} Y_{\ell}^{m'}(\hat{\mathbf{k}}) d_{m'm}^{(\ell)}(\alpha), \quad (6.9)$$

de modo que $|Y_{\ell}^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})|^2$ é independente do ângulo ϕ . Portanto, a física do nosso problema depende apenas do ângulo entre o campo elétrico e a magnetização. Podemos, então, fixar uma destas direções. Escolhemos fixar o campo elétrico na direção z ($\hat{\mathbf{e}} = \hat{\mathbf{z}}$) e deixar a magnetização como parâmetro livre. Além disso, podemos fixar $\hat{\mathbf{m}}$ no plano xz .

Como a equação de Boltzmann é uma equação para a função $\chi_{\sigma}(\mathbf{k})$ (veja a Eq. (5.28)), a Eq. (6.5) nos mostra que a equação de Boltzmann irá determinar a componente z do vetor $\Phi_{\sigma}(\mathbf{k})$, com as demais componentes sendo satisfeitas identicamente, as quais podem ser adotadas como nulas. Portanto, apenas a componente $j = z$ do tensor de condutividade elétrica deverá ser considerada. Mais ainda, podemos nos concentrar na componente J_z da densidade de corrente elétrica e estudar a anisotropia do sistema através da componente σ_{zz} da condutividade elétrica, quando variamos a direção $\hat{\mathbf{m}}$ da magnetização, ou, de forma equivalente, do ângulo α . Portanto, de agora em diante, consideraremos apenas a componente σ_{zz} , que denotaremos

¹Esta é a convenção zyz para rotações, citada no capítulo 3

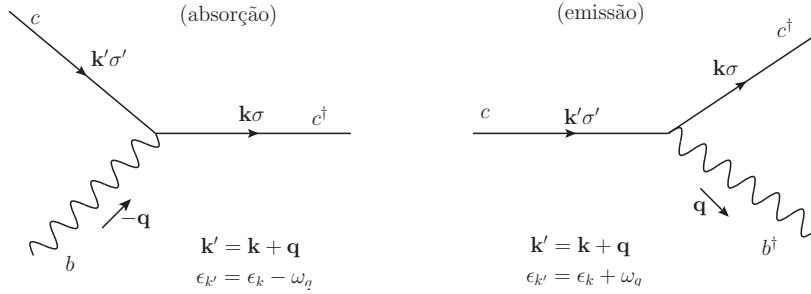


Figura 6.2: Processos de absorção e emissão de um mágnon para interação elétron–mágnon, descritos pelo Hamiltoniano da Eq. (4.45) com $\ell \geq 0$. Note que os spins iniciais e finais são arbitários, pois o momento angular total é conservado.

simplesmente por σ . Além disso, podemos escrever

$$\sigma = e^2 \sum_{\sigma} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left(-T \frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \frac{k}{m} \cos \theta \Phi_{z\sigma}(\mathbf{k}), \quad (6.10)$$

$$\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k}) = a_{\sigma}(\mathbf{k}) \frac{k}{m} \cos \theta \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right), \quad (6.11)$$

onde θ é o ângulo entre \mathbf{k} e a direção $\hat{\mathbf{z}}$ e utilizamos que $\mathbf{v}_k = \mathbf{k}/m$ para $\epsilon_k = k^2/2m - \mu$.

Note que o termo $\partial f^0/\partial \epsilon$ aparece tanto na expressão de σ quanto na expressão de $\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k})$, o que poderia ser preocupante pois $(\partial f^0/\partial \epsilon)^2 \sim [\delta(\epsilon - \epsilon_F)]^2 = \delta(\epsilon - \epsilon_F) \delta(0)$. Porém, como visto na seção 5.4, $1/a_{\sigma}(\mathbf{k})$ é proporcional ao mesmo termo, de modo a cancelar a dependência em $\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k})$, não apresentando a aparente divergência com $\delta(0)$.

6.3 Calculo de $\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k})$ Para j e ℓ genéricos.

Nosso próximo passo para o cálculo da condutividade elétrica é calcular $\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k})$. Para isso, basta obtermos o termo $a_{\sigma}(\mathbf{k})$ definido na Eq. (5.32), substituindo o índice de banda por um índice de spin. Começamos determinando a taxa de transição de *in-scattering* para o estado $|\mathbf{k}\sigma\rangle$,

$$W(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma') = W^{\text{abs}}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma') + W^{\text{emi}}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'), \quad (6.12)$$

composta pelos processos de absorção e emissão de um mágnon, Fig. 6.2.

Utilizando a regra de ouro de Fermi, Eq. (5.17) e o Hamiltoniano da interação elétron–mágnon, Eq. (4.45), obtemos

$$W^{\text{abs}}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma') = 2\pi \left(\frac{r}{N_m} \right) \sum_{\mathbf{q}} \left| \mathcal{J}_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'}^{j-1, j} \right|^2 b(\omega_q) \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k + \omega_q) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}}, \quad (6.13)$$

$$W^{\text{emi}}(\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma') = 2\pi \left(\frac{r}{N_m} \right) \sum_{\mathbf{q}} \left| \mathcal{J}_{\mathbf{k}\sigma, \mathbf{k}'\sigma'}^{j, j-1} \right|^2 [b(\omega_q) + 1] \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k - \omega_q) \delta_{\mathbf{k}', \mathbf{k}+\mathbf{q}}. \quad (6.14)$$

Uma vez que W é dado pelas somas dos termos de absorção e emissão e uma vez que estamos trabalhando na aproximação de tempo de relaxação, a regra de Matthiessen é válida [68, 7], de

modo que

$$\frac{1}{a_\sigma(\mathbf{k})} = \frac{1}{a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})} + \frac{1}{a_\sigma^{\text{emi}}(\mathbf{k})}. \quad (6.15)$$

Vamos começar calculando $1/a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})$. Definindo $|\mathcal{J}_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}^{j-1,j}|^2 = J^2 g_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}^j$, temos

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})} = 2\pi \left(\frac{r}{N_m} \right) \sum_{\mathbf{k}'\sigma'} \sum_{\mathbf{q}} J^2 g_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}^j b(\omega_q) f^0(\epsilon_k) [1 - f^0(\epsilon_{k'})] \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k + \omega_q) \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}+\mathbf{q}}. \quad (6.16)$$

Note que $(\mathcal{J}_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}^{m,m'})^* = \mathcal{J}_{\mathbf{k}'\sigma',\mathbf{k}\sigma}^{m',m}$, assim, para W^{emi} onde aparece o termo $|\mathcal{J}_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}^{j,j-1}|^2$, teremos $g_{\mathbf{k}'\sigma',\mathbf{k}\sigma}^j$. Em seguida vamos definir

$$h_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} = \sum_{\sigma'} g_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}^j. \quad (6.17)$$

Conforme mencionamos anteriormente (veja o capítulo 3), \mathcal{J} (e, portanto, g) dependem do momento angular orbital ℓ da rede de momentos localizados, pois apenas as componentes ℓ das funções de ondas destes hibridizam com os elétrons de condução. Escolhemos omitir o índice ℓ para evitar carregar ainda mais a notação de \mathcal{J} . Neste ponto, no entanto, optamos por tornar explícita a dependência de h em relação a ℓ . Com efeito, o valor de ℓ é determinante para a dependência angular de h . Além disso, explicitamos a dependência com a direção $\hat{\mathbf{m}}$ da magnetização. Note que $\mathcal{J}_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}^{m,m'}$ depende apenas dos ângulos $\hat{\mathbf{k}}$ e $\hat{\mathbf{k}'}$, não dependendo das magnitudes dos momentos inicial e final, de modo que h também terá esta propriedade, embora optemos por utilizar a notação $h_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell}$, onde fazemos menção a vetores ao invés de seus versores, para que a notação não fique carregada quando escrevermos $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$.

Prosseguimos eliminando a soma sobre \mathbf{k}' utilizando a conservação de momento, $\delta_{\mathbf{q},\mathbf{k}-\mathbf{k}'}$, tal que

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})} = \frac{2\pi r J^2}{N_m} \sum_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} b(\omega_q) f^0(\epsilon_k) [1 - f^0(\epsilon_k - \omega_q)] \delta(\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \epsilon_k + \omega_q). \quad (6.18)$$

Assim como na seção 5.4, vamos multiplicar e dividir o integrando por $1 - f^0(\epsilon_k)$ e utilizar as Eqs. (5.43)–(5.45). O resultado é

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})} = \frac{4\pi r J^2 T}{N_m} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \sum_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} b(\omega_q) f^0(\omega_q) \delta(\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \epsilon_k + \omega_q). \quad (6.19)$$

Na seção 5.4, o termo $h_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell}$ era apenas uma constante e as integrais angulares eram utilizadas simplesmente para eliminar a função δ . Quando $j > 1/2$ e $\ell > 0$, por outro lado, $h_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell}$ possui uma dependência angular, como pode ser visto da Eq. (3.31), o que parece tornar a integração mais complicada. No entanto, se expandirmos $h_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell}$ em torno de $\mathbf{q} = 0$, teremos uma série de potências em q . Para a integração radial, definiremos $x = \beta\omega_q \sim q^2/T$, de modo que cada potência de q contribui com uma potência de \sqrt{T} para a integral. No limite de baixas temperaturas, o termo de ordem q^0 é dominante. Assim, prosseguimos tomando $\mathbf{q} = 0$ em $h_{\mathbf{k},\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell}$, tendo em mente que estamos considerando o termo de contribuição dominante

no regime de baixas temperaturas. Portanto, assim como no cálculo para $j = 1/2$ e $\ell = 0$, as integrais angulares irão apenas eliminar a função δ e a integral radial terá a mesma forma que antes. Assim,

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})} = \frac{2rJ^2T}{n_m} h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \int q^2 dq b(\omega_q) f^0(\omega_q) \int \frac{d\Omega_q}{(2\pi)^2} \delta(\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \epsilon_k + \omega_q), \quad (6.20)$$

com $n_m = N_m/V$ e $d\Omega_q = d\phi_q d(\cos \theta_q)$. Alinhando o eixo de integração de \mathbf{q} tal que o vetor \mathbf{k} esteja na direção q_z , o termo $\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|}$ pode ser escrito em termo de k , q e $\cos \theta_q$. Para as dispersões da Eq. (4.46), seguindo os mesmos passos² para a obtenção da Eq. (5.54), chegamos a

$$\int \frac{d\Omega_q}{(2\pi)^2} \delta(\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \epsilon_k + \omega_q) = \frac{m}{2\pi k q}. \quad (6.21)$$

Portanto, $1/a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})$ fica

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})} = \frac{mrJ^2T}{\pi k_F n_m} h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) \int dq q b(\omega_q) f^0(\omega_q). \quad (6.22)$$

Utilizando o resultado da Eq. (5.59), chegamos ao resultado final

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})} = \frac{m\mu rJ^2T^2}{2\pi k_F n_m} h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} \ln x_0^{-1} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right). \quad (6.23)$$

Note que o resultado é similar ao obtido na Eq. (5.60), com a diferença sendo a introdução do termo puramente geométrico $h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell}$. Por outro lado, este fator geométrico é responsável por generalizar o resultado trivial $\chi \sim \hat{\mathbf{z}} \cdot \hat{\mathbf{k}}$ para uma forma funcional mais complexa.

Agora, basta repetirmos o processo para o cálculo de $1/a_\sigma^{\text{emi}}(\mathbf{k})$. Utilizando a definição de $g_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}^j$ e a relação $(\mathcal{J}_{\mathbf{k}\sigma,\mathbf{k}'\sigma'}^{m,m'})^* = \mathcal{J}_{\mathbf{k}'\sigma',\mathbf{k}\sigma}^{m',m}$, teremos $g_{\mathbf{k}'\sigma',\mathbf{k}\sigma}^j$ no integrando, conforme mencionamos anteriormente. Além disso, $b(\omega_q)$ é trocado por $b(\omega_q) + 1$ e o sinal de ω_q na função δ de conservação de energia é invertido. Com isso,

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{emi}}(\mathbf{k})} = \frac{2\pi rJ^2}{N_m} \sum_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} [b(\omega_q) + 1] f^0(\epsilon_k) [1 - f^0(\epsilon_k + \omega_q)] \delta(\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \epsilon_k - \omega_q).$$

Da mesma forma que antes, no regime de baixas temperaturas, basta considerarmos o termo com $\mathbf{q} = 0$ em $h_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell}$. Multiplicando e dividindo por $1 - f^0(\epsilon_k)$, podemos extrair o termo $-2T\partial f^0/\partial \epsilon$ e chegamos a

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{emi}}(\mathbf{k})} = \frac{2rJ^2T}{n_m} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right) h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} \int q^2 dq b(\omega_q) f^0(\omega_q) e^{2\beta\omega_q} \int \frac{d\Omega_q}{(2\pi)^2} \delta(\epsilon_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|} - \epsilon_k - \omega_q), \quad (6.24)$$

onde utilizamos a relação (5.65). Assim como antes, a integração angular é trivial, de onde obtemos o mesmo resultado. A integral radial resultante é a mesma encontrada na seção 5.4, de

²Veja a discussão na obtenção da Eq. (5.54).

onde vemos que o resultado é

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{emi}}(\mathbf{k})} = \frac{m\mu r J^2 T^2}{2\pi k_F n_m} h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} \ln x_0^{-1} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right). \quad (6.25)$$

Com isso,

$$\frac{1}{a_\sigma(\mathbf{k})} = \frac{1}{a_\sigma^{\text{abs}}(\mathbf{k})} + \frac{1}{a_\sigma^{\text{emi}}(\mathbf{k})} = \frac{m\mu r J^2 T^2}{\pi k_F n_m} h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} \ln x_0^{-1} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_k)}{\partial \epsilon_k} \right). \quad (6.26)$$

Retornando à Eq. (6.11), encontramos o resultado final para $\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k})$:

$$\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k}) = \left[\frac{m\mu r J^2 T^2}{\pi k_F n_m} h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} \ln x_0^{-1} \right]^{-1} \frac{k_F}{m} \cos \theta. \quad (6.27)$$

Podemos reescrever o último resultado de uma forma em que as quantidades físicas envolvidas estejam mais explícitas. Para isso, vamos utilizar a Eq. (4.46) para escrever $\mu = 2k_F^2/J'$. Com isso,

$$\frac{m\mu r J^2 T^2}{\pi k_F n_m} = \frac{2mk_F^2 r J^2 T^2}{\pi k_F J' n_m}, \quad (6.28)$$

$$= \frac{2m}{k_F^2} \frac{k_F^3 r J^2 T^2}{\pi n_m J'}, \quad (6.29)$$

$$= \frac{k_F^3 r J^2 T^2}{\pi n_m \epsilon_F J'}. \quad (6.30)$$

Por fim, eliminamos k_F^3 utilizando a densidade de elétrons de condução, cujo resultado bem conhecido é $n_c = k_F^3 / (3\pi^2)$, chegando a

$$\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k}) = \left[3\pi r \left(\frac{n_c}{n_m} \right) \left(\frac{J^2}{\epsilon_F J'} \right) T^2 h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell} \ln x_0^{-1} \right]^{-1} \frac{k_F}{m} \cos \theta, \quad (6.31)$$

onde vemos que a física do problema depende apenas das razões n_c/n_m , $J^2/\epsilon_F J' \simeq J/\epsilon_F$ e de T .

6.3.1 Condutividade

Nosso próximo passo é calcular a condutividade elétrica. Utilizando da Eq. (6.10), temos que a condutividade depende da seguinte integral

$$\int d\hat{\mathbf{k}} \frac{\cos^2 \theta}{h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{j,\ell}}. \quad (6.32)$$

Para estudar essa integral, consideremos o caso $j = 3/2$ e $\ell = 1$. A função $h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma}^{3/2,1}$ tem a forma

$$h_{\mathbf{k},\mathbf{k},\sigma;\hat{\mathbf{m}}}^{3/2,1} = \left[\frac{2}{3} \left| Y_{10}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) \right|^2 \delta_{\sigma\uparrow} + \frac{1}{3} \left| Y_{11}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) \right|^2 \delta_{\sigma\downarrow} \right] \left| Y_{11}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) \right|^2. \quad (6.33)$$

Vamos particularizar para $\hat{\mathbf{m}} = \hat{\mathbf{z}}$. Neste caso, temos $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) = Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{k}})$. Para $\sigma = \downarrow$, temos

$$h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \downarrow; \hat{\mathbf{z}}}^{\frac{3}{2}, 1} = \frac{1}{3} \left| Y_{11}(\hat{\mathbf{k}}) \right|^4 \sim \sin^4 \theta, \quad (6.34)$$

de modo que a condutividade elétrica dependa da integral

$$\int d\hat{\mathbf{k}} \frac{\cos^2 \theta}{\sin^4 \theta}, \quad (6.35)$$

divergente em $\theta = 0$ e $\theta = \pi$, resultando em uma condutividade infinita, ou resistividade nula. Para momento angular orbital $\ell > 0$, em geral $h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{j, \ell}$ é dado pela soma de termos da forma $|Y_{\ell m_1}|^2 |Y_{\ell m_2}|^2$, apresentando a mesma divergência. Este resultado está associado ao fato de que os elementos de matriz da interação elétron–mágnon se anulam em algumas direções, resultando em uma amplitude de espalhamento nula para determinados ângulos. Portanto, o espalhamento de elétrons puramente por mágnons, para $\ell > 0$, onde a interação elétron–mágnons possui uma estrutura que se anula em determinadas direções, resulta em uma condutividade infinita.

Na próxima seção, introduziremos um termo de espalhamento por impurezas não magnéticas, sempre presente em sistemas físicos reais. Este termo torna o problema mais realista e, por introduzir uma amplitude de espalhamento isotrópica, nos ajudará a estudar a influência do espalhamento elétron–mágnon na condutividade.

6.4 Espalhamento por impurezas não magnéticas

Espalhamento por impurezas não magnéticas é um fenômeno onipresente em sistemas físicos reais e nas amostras estudadas em laboratório. A despeito de esforços para sua redução, alguma concentração sempre se faz presente. Assim, a introdução deste mecanismo de espalhamento possui fortes motivações físicas. O efeito de espalhamento por impurezas não magnéticas em sistemas metálicos é responsável pela introdução de um valor residual não nulo na resistência elétrica à temperatura zero, que de outro modo seria nulo. Nesta seção, consideraremos o efeito do espalhamento por impurezas não magnéticas na condutividade.

O Hamiltoniano que consideraremos para descrever o espalhamento por impurezas é

$$H_{\text{imp}} = \sum_{i\sigma} V_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (\mathbf{R}_i \text{ aleatório}). \quad (6.36)$$

Pela regra de ouro de Fermi, a amplitude de transição é [67]

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta(\epsilon_{k'} - \epsilon_k), \quad (6.37)$$

sendo “transparante” para o spin. Com isso, o termo $1/a^{\text{imp}}(\mathbf{k})$ associado a este mecanismo de

espalhamento é simplesmente [67]

$$\frac{1}{a_\sigma^{\text{imp}}(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{k}'} w_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'} - \epsilon_{\mathbf{k}}) f^0(\epsilon_{\mathbf{k}}) [1 - f^0(\epsilon_{\mathbf{k}'})], \quad (6.38)$$

$$= \left(-T \frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \frac{1}{\tau_{\text{imp}}}, \quad (6.39)$$

onde utilizamos a relação (5.43) e definimos o tempo de relaxação associado ao espalhamento por impurezas não magnéticas, τ_{imp} . De modo geral, τ_{imp} depende de \mathbf{k} . Para o nosso caso, assumimos depender apenas da magnitude k , a qual toma o valor k_F , pela presença da derivada da função f^0 . Portanto, o consideramos como constante. Pela regra de Matthiessen, temos que o resultado da Eq. (6.26) se torna

$$\frac{1}{a_\sigma(\mathbf{k})} = \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \left[\frac{T}{\tau_{\text{imp}}} + 3\pi r \left(\frac{n_c}{n_m} \right) \left(\frac{J^2}{\epsilon_F J'} \right) T^2 h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{j, \ell} \ln x_0^{-1} \right]. \quad (6.40)$$

O resultado anterior nos sugere definir um tempo de espalhamento do processo inelástico como

$$\frac{1}{\tau_{\text{inel}}} = 3\pi r \left(\frac{n_c}{n_m} \right) \left(\frac{J^2}{\epsilon_F J'} \right) T. \quad (6.41)$$

de modo que podemos escrever

$$\frac{1}{a_\sigma(\mathbf{k})} = \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \left[\frac{T}{\tau_{\text{imp}}} + \frac{T}{\tau_{\text{inel}}} h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{j, \ell} \ln x_0^{-1} \right]. \quad (6.42)$$

Com isso, chegamos a forma final de $\Phi_{z\sigma}$ na presença de espalhamento por impurezas,

$$\Phi_{z\sigma}(\mathbf{k}) = \frac{\tau_{\text{imp}}}{T} \left[1 + h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{j, \ell} \frac{\tau_{\text{imp}}}{\tau_{\text{inel}}} \ln x_0^{-1} \right]^{-1} \frac{k_F}{m} \cos \theta. \quad (6.43)$$

Utilizando este resultado na Eq. (6.10), podemos escrever a condutividade como

$$\sigma = e^2 \left(\frac{k_F}{m} \right)^2 \tau_{\text{imp}} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) \cos^2 \theta \sum_{\sigma} \left[1 + h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{j, \ell} \frac{\tau_{\text{imp}}}{\tau_{\text{inel}}} \ln x_0^{-1} \right]^{-1}. \quad (6.44)$$

Como $h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma}^{j, \ell}$ depende apenas de $\hat{\mathbf{k}}$, a integral radial sobre k pode ser calculada exatamente. Temos

$$\int dk k^2 \left(-\frac{\partial f^0(\epsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}} \right) = \int dk k^2 \delta \left(\frac{k^2}{2m} - \frac{k_F^2}{2m} \right) = m k_F. \quad (6.45)$$

Assim,

$$\sigma = e^2 \frac{k_F^3}{2\pi m} \tau_{\text{imp}} \int \frac{d\Omega_k}{(2\pi)^2} \cos^2 \theta \sum_{\sigma} \left[1 + h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{j, \ell} \frac{\tau_{\text{imp}}}{\tau_{\text{inel}}} \ln x_0^{-1} \right]^{-1}. \quad (6.46)$$

Utilizando a densidade de estados dos elétrons de condução, $n_c = k_F^3 / 3\pi^2$, obtemos

$$\sigma = \frac{n_c e^2 \tau_{\text{imp}}}{m} \int d\Omega_k \frac{3}{8\pi} \cos^2 \theta \sum_{\sigma} \left[1 + h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{j, \ell} \frac{\tau_{\text{imp}}}{\tau_{\text{inel}}} \ln x_0^{-1} \right]^{-1}. \quad (6.47)$$

A forma final obtida na Eq. (6.47) nos permitirá estudar o papel do espalhamento por ondas de spin na condutividade elétrica. Note que para $T = 0$ ($\tau_{\text{inel}} = \infty$), a equação anterior reproduz o resultado bem conhecido, apresentando a forma convencional da condutividade DC obtida por Drude [7]. É imediato ver que a presença do termo de impureza regulariza a integral da condutividade resultando em um valor finito para essa.

6.5 Estudo da Anisotropia

6.5.1 Definição de Anisotropia

A Eq. (6.47) nos fornece uma expressão para a condutividade elétrica em função da direção $\hat{\mathbf{m}}$ e da razão $\tau_{\text{imp}}/\tau_{\text{inel}}$. Para estudarmos a anisotropia do sistema, vamos definir a quantidade A como

$$A = \frac{\sigma(\hat{\mathbf{z}}) - \sigma(\hat{\mathbf{m}})}{\sigma(\hat{\mathbf{z}})} = 1 - \frac{\sigma(\hat{\mathbf{m}})}{\sigma(\hat{\mathbf{z}})}. \quad (6.48)$$

Para prosseguir, definimos

$$I(z, \hat{\mathbf{m}}; x_0) = \int d\hat{\mathbf{k}} \frac{3}{8\pi} \cos^2 \theta \sum_{\sigma} \left[1 + h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{j, \ell} z \ln x_0^{-1} \right]^{-1} \quad (6.49)$$

de modo que podemos escrever a condutividade como

$$\sigma = \frac{e^2 n_c \tau_{\text{imp}}}{m} I \left(\frac{\tau_{\text{imp}}}{\tau_{\text{inel}}}, \hat{\mathbf{m}}; x_0 \right), \quad (6.50)$$

assim a anisotropia pode ser escrita em termos da quantidade adimensional I como

$$A(z, \hat{\mathbf{m}}; x_0) = 1 - \frac{I(z, \hat{\mathbf{m}}; x_0)}{I(z, \hat{\mathbf{z}}; x_0)}. \quad (6.51)$$

A última definição para a anisotropia nos permite estudá-la em função da direção $\hat{\mathbf{m}}$ e da razão $z = \tau_{\text{imp}}/\tau_{\text{inel}}$ entre os tempos de relaxação de impurezas não magnéticas e inelástico. Com isso, temos definida nossa quantidade para estudar a anisotropia do sistema. Note que, como $h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{j, \ell}$ possui uma dependência angular não trivial para $\ell > 0$, a função $I(z; \hat{\mathbf{m}}, x_0)$ não pode ser calculada analiticamente, sendo necessário o uso de métodos numéricos para o estudo da anisotropia.

6.5.2 Métodos e Resultados Numéricos para a Anisotropia

Vamos aplicar a Eq. (6.51) para estudar a anisotropia em função de z e de $\hat{\mathbf{m}}$. O primeiro passo é escolher um valor para o *cutoff* x_0 , satisfazendo $0 < x_0 < 1$. Escolhemos $x_0 = 10^{-2}$, onde o valor exato do *cutoff* não é muito importante, uma vez que a divergência é logarítmica e este é apenas um parâmetro para os cálculos. Para a direção da magnetização, vamos fixá-la no plano xz , formando um ângulo α com o eixo z . Assim,

$$\hat{\mathbf{m}}(\alpha) = \sin \alpha \hat{\mathbf{x}} + \cos \alpha \hat{\mathbf{z}}. \quad (6.52)$$

Vamos focar nos casos $(\ell, j) = (1, 3/2)$ e $(\ell, j) = (3, 5/2)$, sendo o primeiro um caso teste e o segundo correspondendo a uma rede de momentos magnéticos formados por íons de Ce na configuração $4f^1$. Utilizando as Eqs. (3.31) e (6.17), temos que

$$h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}}^{\frac{3}{2}, 1} = \left[\frac{2}{3} \left| Y_{10}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) \right|^2 \delta_{\sigma\uparrow} + \frac{1}{3} \left| Y_{11}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) \right|^2 \delta_{\sigma\downarrow} \right] \left| Y_{11}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) \right|^2, \quad (6.53)$$

$$h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}(\alpha)}^{\frac{5}{2}, 3} = \left[\frac{2}{7} \left| Y_{31}(\hat{\mathbf{m}}(\alpha), \hat{\mathbf{k}}) \right|^2 \delta_{\sigma\uparrow} + \frac{5}{7} \left| Y_{32}(\hat{\mathbf{m}}(\alpha), \hat{\mathbf{k}}) \right|^2 \delta_{\sigma\downarrow} \right] \times \left[\frac{1}{7} \left| Y_{32}(\hat{\mathbf{m}}(\alpha), \hat{\mathbf{k}}) \right|^2 + \frac{6}{7} \left| Y_{33}(\hat{\mathbf{m}}(\alpha), \hat{\mathbf{k}}) \right|^2 \right], \quad (6.54)$$

onde, pela Eq. (3.32), $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{m}}(\alpha), \hat{\mathbf{k}})$ pode ser escrito como

$$Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{m}}(\alpha), \hat{\mathbf{k}}) = \sum_{m'} Y_{\ell m'}(\hat{\mathbf{k}}) d_{m', m}^{(\ell)}(\alpha). \quad (6.55)$$

Com $h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}(\alpha)}^{j, \ell}$ definida, podemos calcular as funções

$$I(z, \alpha; x_0) = I(z, \hat{\mathbf{m}}(\alpha); x_0), \quad A(z, \alpha; x_0) = A(z, \hat{\mathbf{m}}(\alpha); x_0), \quad (6.56)$$

em função de z e α .

Os cálculos das funções I e A foram feitos de duas maneiras:

1. Fixando α para os valores $0, \frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{3}$ e $\frac{\pi}{2}$ e variando z de 0 a 100, em passos de 0,1;
2. Fixando z para os valores 1, 10 e 100 e variando α de 0 a $\frac{\pi}{2}$, em passos de 0,001.

Para realizar os cálculos, utilizamos a linguagem Julia³ [72] na versão 1.10.4 e Jupyter Notebook⁴ [73] na versão 7.1.2 com kernel IJulia na versão 1.7.2⁵, em um processador Intel(R) Core(TM) i5-10210U CPU @ 1.60GHz. O tempo total necessário para os cálculos de I e A , conforme mencionado, foi de aproximadamente 2,5 horas.

Ao longo dos cálculos, utilizamos as bibliotecas WignerD⁶, SphericalHarmonics⁷ e Cubature⁸ [74] para definir a função $I(z, \alpha; x_0)$ e calcular as integrais angulares envolvidas. Os gráficos foram gerados utilizando o pacote Plots⁹ na versão 1.40.4 [75], com Matplotlib¹⁰ [76] 3.8.4 como *back-end*, além dos pacotes PythonPlot¹¹ 1.0.3 e LaTeXStrings¹² 1.3.1. Para a realização de testes unitários, utilizamos o pacote Test¹³ da biblioteca padrão. Por fim, os pacotes ProgressMeter¹⁴ 1.10.0, SQLite¹⁵ 1.6.1 e DataFrames¹⁶ 1.6.1 [77] foram empregados

³The Julia Project. <https://julialang.org/>

⁴<https://jupyter.org/>

⁵<https://github.com/JuliaLang/IJulia.jl>

⁶<https://juliapackages.com/p/wigner>

⁷<https://juliapackages.com/p/sphericalharmonics>

⁸<https://juliapackages.com/p/cubature>

⁹<https://juliapackages.com/p/plots>

¹⁰<https://matplotlib.org/>

¹¹<https://juliapackages.com/p/pythonplot>

¹²<https://juliapackages.com/p/latexstrings>

¹³<https://docs.julialang.org/en/v1/stdlib/Test/>

¹⁴<https://juliapackages.com/p/progressmeter>

¹⁵<https://juliapackages.com/p/sqlite>

¹⁶<https://juliapackages.com/p/dataframes>

para o processamento, tratamento de dados e armazenamento em um banco de dados SQLite¹⁷ [78].

Para garantir a integridade dos cálculos, definimos as funções $Y_{\ell m}(\hat{\mathbf{m}}(\alpha), \hat{\mathbf{k}})$ e $h_{\mathbf{k}, \mathbf{k}, \sigma; \hat{\mathbf{m}}(\alpha)}^{j, \ell}$ e realizamos testes unitários com essas funções. Os testes foram feitos comparando os resultados obtidos numericamente com as expressões analíticas obtidas para valores específicos de α e $\hat{\mathbf{k}} = (\theta, \phi)$. Além disso, as propriedades $I(0, \alpha; x_0) = 1$ e $A(0, \alpha; x_0) = 0$ também foram testadas.

Todas as integrais e testes unitários foram calculados com um erro absoluto de 10^{-6} . Devido a essa precisão, as barras de erros foram omitidas dos gráficos, pois seriam menores do que a escala utilizada.

As figuras 6.3–6.8 apresentam os resultados de $I(z, \alpha; x_0)$, para $(\ell, j) = (1, \frac{3}{2})$ e $(\ell, j) = (3, \frac{5}{2})$, nas condições mencionadas anteriormente. Das figuras 6.3 e 6.7, é possível notar que as curvas para diferentes ângulos se distanciam conforme z aumenta. Este é um indicativo do surgimento da anisotropia. As figuras 6.4 e 6.8, nos mostram que a dependência angular de I se torna mais pronunciada à medida que z aumenta, ou seja, conforme a contribuição dos mágmons para o espalhamento aumenta em relação à contribuição do termo de impureza.

Nas figuras 6.5–6.10, temos os resultados numéricos para $A(z, \alpha; x_0)$. É possível ver que a anisotropia aumenta quando o termo de espalhamento por mágmons se torna mais relevante em relação ao termo de impurezas e que a anisotropia está mais pronunciada quanto mais próximo o ângulo entre o campo elétrico (direção $\hat{\mathbf{z}}$) e a magnetização (direção $\hat{\mathbf{m}}$) está de $\pi/2$ (figuras 6.5 e 6.9). Finalmente, nas figuras 6.6 e 6.10 confirmamos que a anisotropia aumenta monotonicamente com o ângulo entre $\hat{\mathbf{z}}$ e $\hat{\mathbf{m}}$, como era de se esperar, atingindo seu valor máximo quando $\alpha = \pi/2$.

Comparando as figuras 6.5, 6.9, 6.6 e 6.10, podemos observar que a anisotropia é mais pronunciada no caso $j = 5/2$, em comparação com $j = 3/2$. Acreditamos que este fato está associado ao aumento da contribuição do acoplamento spin–órbita.

O código desenvolvido para os cálculos numéricos, bem como o banco de dados SQLite contendo os dados utilizados para gerar as figuras supramencionadas, podem ser acessado no seguinte repositório no GitHub:

<https://github.com/AlexEnrique/Anisotropy-Spin-Waves-Coqblin-Schrieffer>.

Estes resultados demonstram que o modelo descrito nas Eqs. (4.43)–(4.45), derivado através da aplicação da teoria de ondas de spins ao MCS, é capaz de fornecer um mecanismo para a anisotropia nas propriedades de transporte em materiais com ordem ferromagnética, quando os elétrons de condução se hibridizam com os orbitais de momento angular $\ell > 0$ dos momentos magnéticos localizados. Através dessa hibridização, um elétron de condução pode emitir ou absorver mágmons, causando uma excitação na rede de momentos localizados e sendo espalhado nesse processo. Esse espalhamento apresenta uma dependência angular não trivial, que é influenciada pela direção da magnetização. Essa dependência angular não trivial da interação elétron–mágmon leva a uma dependência angular não trivial da função de distribuição (ou da função Φ), resultando em uma anisotropia nas propriedades de transporte, dependendo da direção entre a magnetização e o campo elétrico externo aplicado à amostra.

¹⁷<https://www.sqlite.org/>

Para concluir, observe que o valor máximo da anisotropia encontrado em nossos resultados é da ordem de 25% para $j = 5/2$ (veja Fig. 6.10). Esse valor, quando comparado com as anisotropias observadas para o CeRhIn₅ (Fig. 1.4) acima do campo crítico, revela uma diferença significativa em relação à magnitude das anisotropias observadas em [23]. Portanto, acreditamos que a anisotropia obtida em nossos resultados não é suficiente para explicar explicar as grandes anisotropias observadas nesses sistemas de férmiões pesados acima de um campo críticos. No entanto, logo abaixo do campo crítico, observa-se uma leve anisotropia, comparável àquela que identificamos. Acreditamos que os resultados obtidos possam estar relacionados a essa anisotropia sutil presente nessa região.

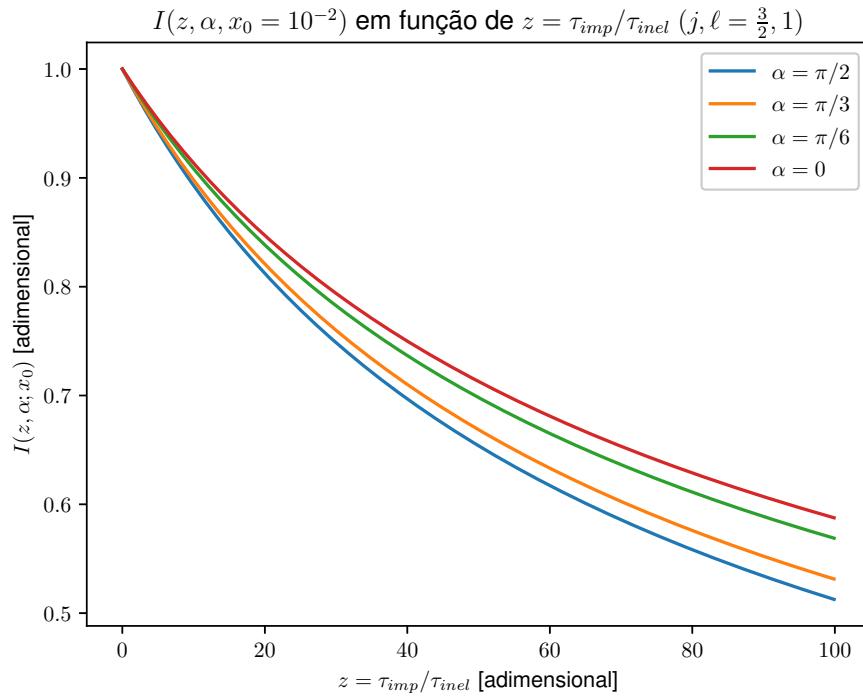


Figura 6.3: Resultados para $I(z, \alpha; x_0)$ para $j = 3/2$ e $\ell = 1$ em função de z , com $\alpha \in \{0, \frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}\}$ e um *cutoff* x_0 igual a 10^{-2} . A variável z toma valores no intervalo $[0, 100]$, com passo de 0, 1. O erro absoluto é menor ou igual a 10^{-6} .

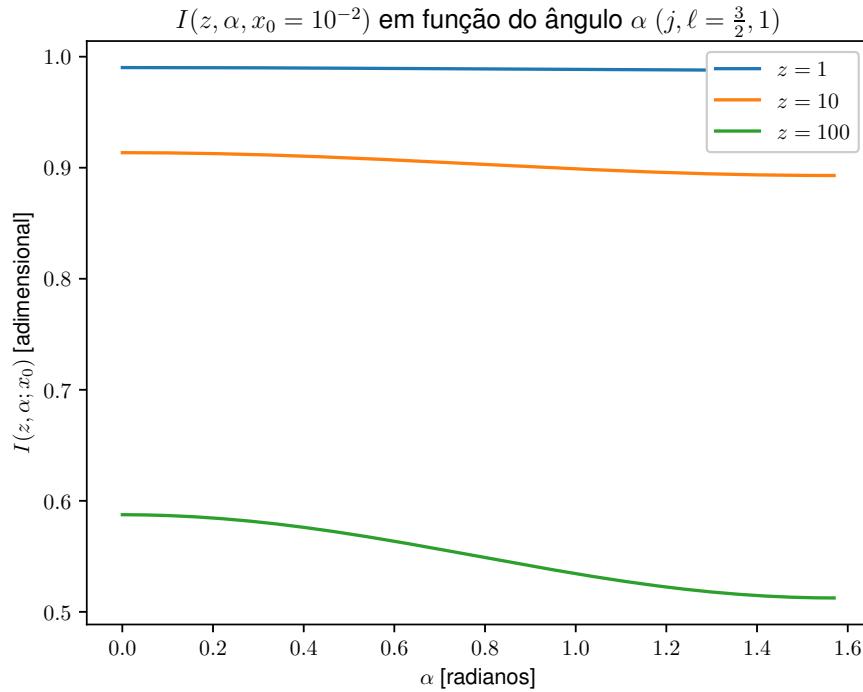


Figura 6.4: Resultados para $I(z, \alpha; x_0)$ para $j = 3/2$ e $\ell = 1$ em função do ângulo α , com $z \in \{1, 10, 100\}$ e $x_0 = 10^{-2}$. A variável α toma valores no intervalo $[0, \frac{\pi}{2}]$, com passo de 0, 001. O erro absoluto é menor ou igual a 10^{-6} .

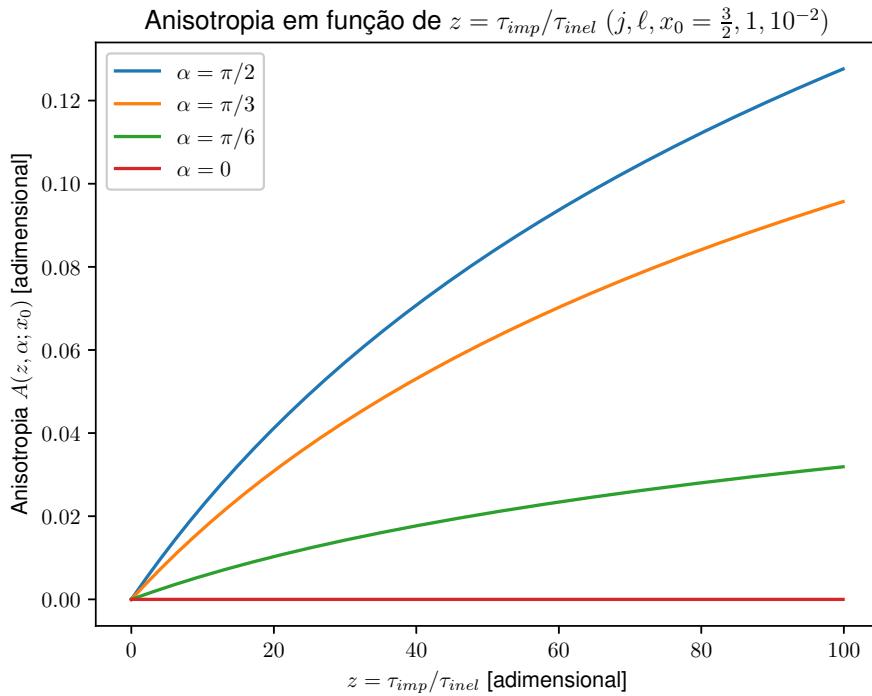


Figura 6.5: Resultados para $A(z, \alpha; x_0)$ para $j = 3/2$ e $\ell = 1$ em função de z para $\alpha \in \{0, \frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}\}$ e $x_0 = 10^{-2}$. A variável z toma valores no intervalo $[0, 100]$, com passo de 0,1. O erro absoluto é menor ou igual a 10^{-6} .

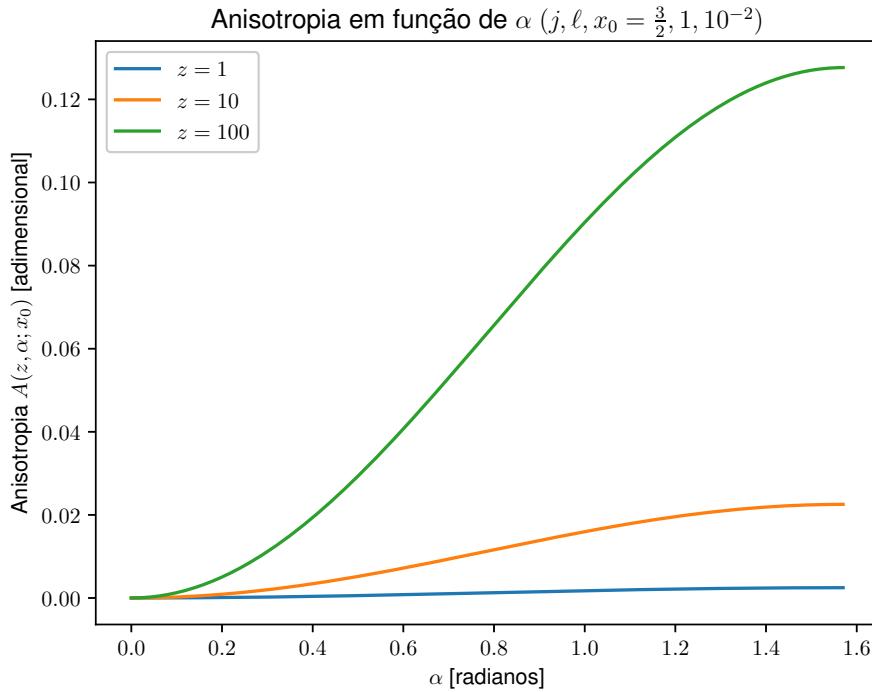


Figura 6.6: Resultados para $A(z, \alpha; x_0)$ para $j = 3/2$ e $\ell = 1$ em função do ângulo α para $z \in \{1, 10, 100\}$ e $x_0 = 10^{-2}$. A variável α toma valores no intervalo $[0, \frac{\pi}{2}]$, com passo de 0,001. O erro absoluto é menor ou igual a 10^{-6} .

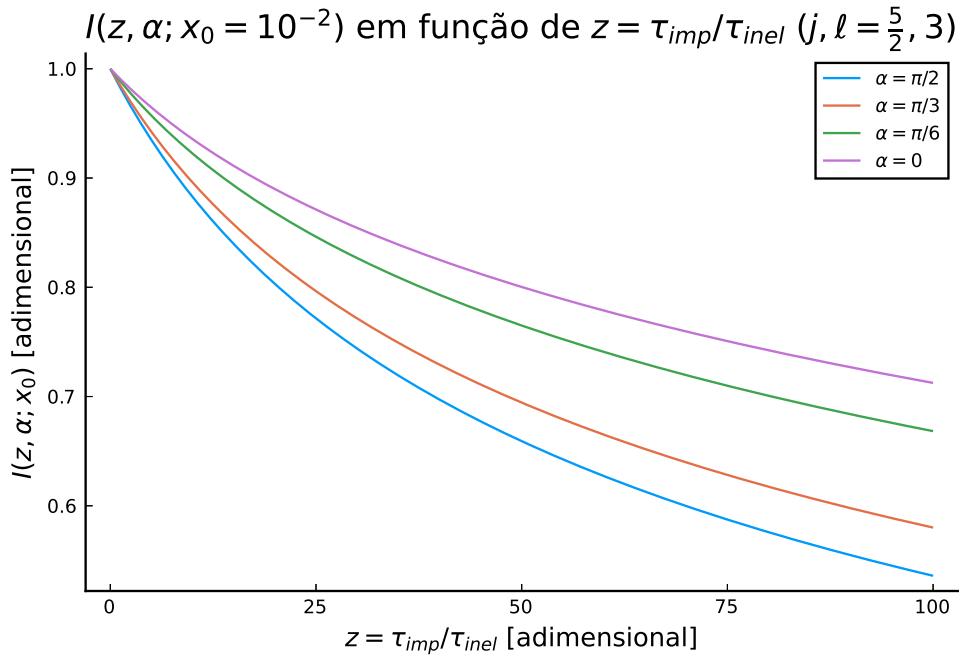


Figura 6.7: Resultados para $I(z, \alpha; x_0)$ para $j = 5/2$ e $\ell = 3$ em função de z com $\alpha \in \{0, \frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}\}$ e $x_0 = 10^{-2}$. A variável z toma valores no intervalo $[0, 100]$, com passo de 0,1. O erro absoluto é menor ou igual a 10^{-6} .

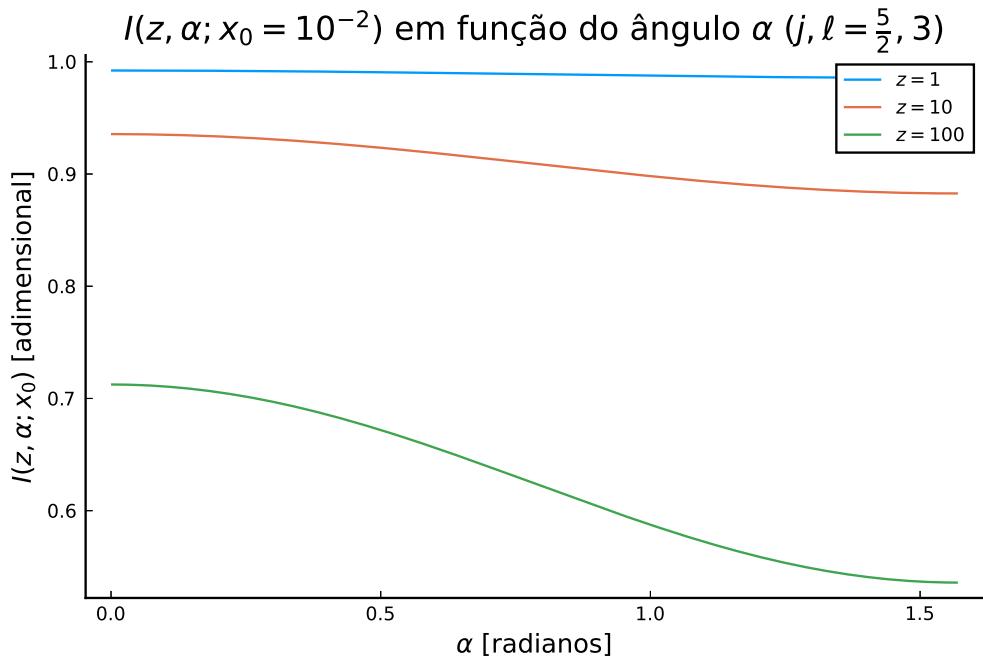


Figura 6.8: Resultados para $I(z, \alpha; x_0)$ para $j = 5/2$ e $\ell = 3$ em função do ângulo α com $z \in \{1, 10, 100\}$ e $x_0 = 10^{-2}$. A variável α toma valores no intervalo $[0, \frac{\pi}{2}]$, com passo de 0,001. O erro absoluto é menor ou igual a 10^{-6} .

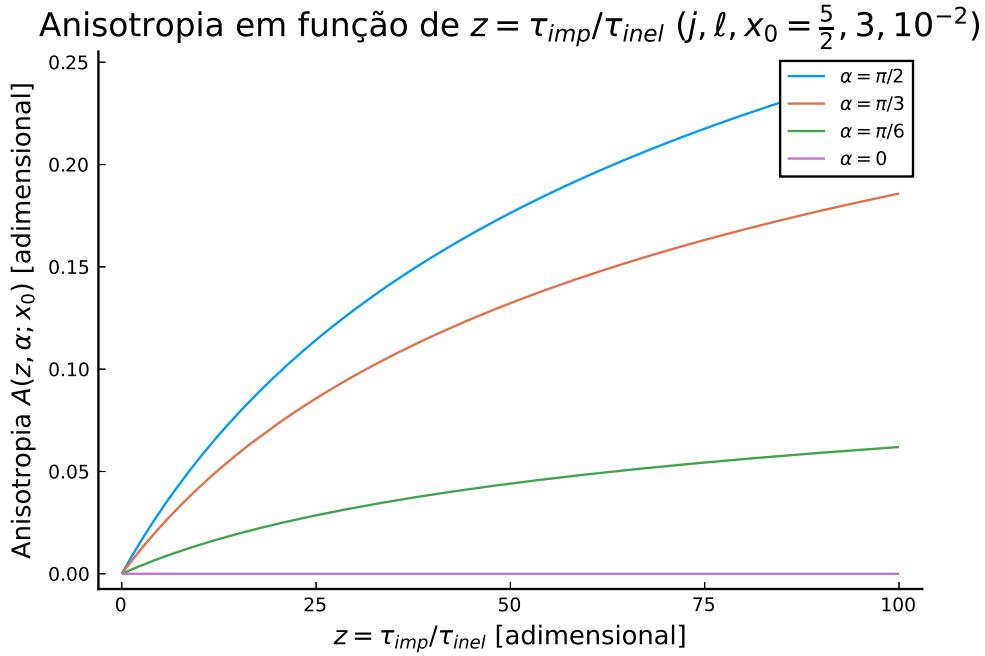


Figura 6.9: Resultados para $A(z, \alpha; x_0)$ para $j = 5/2$ e $\ell = 3$ em função de z com $\alpha \in \{0, \frac{\pi}{6}, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}\}$ e $x_0 = 10^{-2}$. A variável z toma valores no intervalo $[0, 100]$, com passo de 0,1. O erro absoluto é menor ou igual a 10^{-6} .

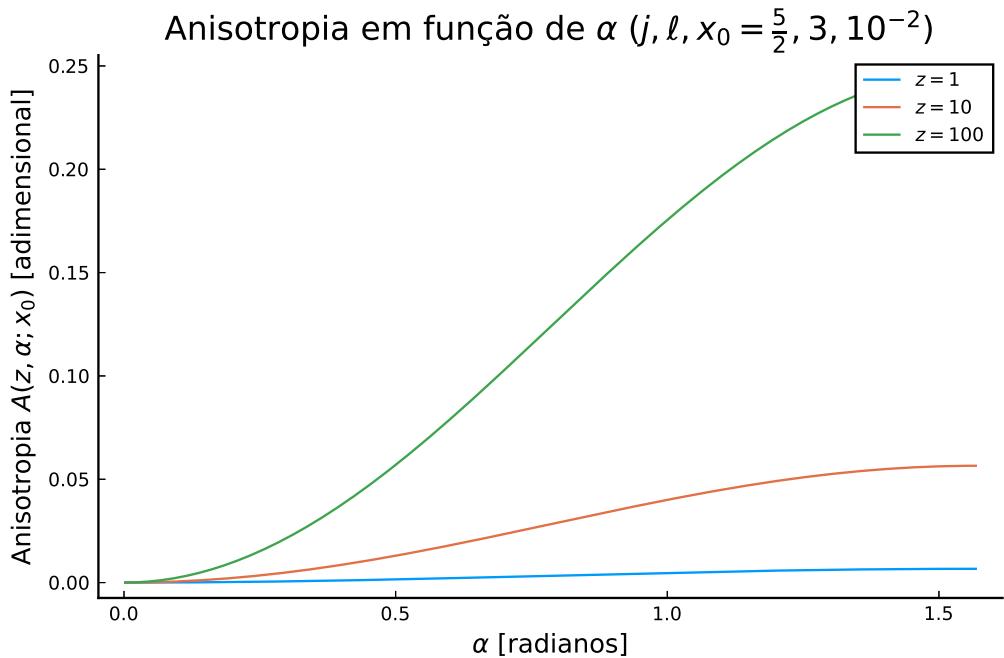


Figura 6.10: Resultados para $A(z, \alpha; x_0)$ para $j = 5/2$ e $\ell = 3$ em função do ângulo α com $z \in \{1, 10, 100\}$ e $x_0 = 10^{-2}$. A variável α toma valores no intervalo $[0, \frac{\pi}{2}]$, com passo de 0,001. O erro absoluto é menor ou igual a 10^{-6} .

Capítulo **7**

Conclusão e Perspectivas Futuras

Nesta dissertação, investigamos se as anisotropias observadas nas propriedades de transporte de sistemas de férmiões pesados, como o CeRhIn₅, em sua fase antiferromagnética, poderiam ser explicadas sem a necessidade de invocar uma ordem nemática. Conforme apresentado no capítulo 1, investigações recentes conjecturam que essas anisotropias teriam origem em flutuações de um parâmetro de ordem nemático. Por outro lado, o ordenamento dos spins dos íons de Ce nos planos de Ce e In, aliado à forte interação spin–órbita presente nesses compostos, nos fornece razões para investigar se esses fatores, por si só, não seriam capazes de explicar as anisotropias observadas. A hipótese inicial deste trabalho é que eles são suficientes para tal explicação.

Através de nossas investigações, conseguimos mostrar o surgimento de anisotropias na condutividade elétrica por meio de um modelo com interação spin–órbita que descreve espalhamento de troca de spin e momento angular orbital de elétrons itinerantes por meio de magnons, quando o estado fundamental dos momentos magnéticos localizados possui um ordenamento ferromagnético. Investigamos o modelo efetivo obtido para os casos de momento angular orbital ℓ e total j iguais a $(\ell, j) = (1, \frac{3}{2})$ e $(\ell, j) = (3, \frac{5}{2})$. Observamos o surgimento de anisotropias quando há um ângulo entre as direções do campo elétrico aplicado e da magnetização do sistema, e que a anisotropia se torna mais pronunciada com o aumento de j , o que acreditamos estar relacionado com um aumento do termo de interação spin–órbita.

Por outro lado, como apontado no capítulo 6, o valor máximo da anisotropia encontrado em nossos resultados é da ordem de 25% para $j = 5/2$, o que não é suficiente para explicar explicar as grandes anisotropias observadas nos sistemas de férmiões pesados, acima do campo crítico (veja Fig. 1.4). No entanto, logo abaixo do campo crítico, observa-se uma leve anisotropia, comparável àquela que identificamos, a qual acreditamos que possa estar relacionada com resultados que obtivemos.

A despeito dos achados deste trabalho, este estudo possui diversas limitações. O modelo empregado apresenta uma estrutura simplista com relação à estrutura de bandas dos elétrons de condução, consistindo de uma única superfície de Fermi esférica, e considera a presença de uma magnetização do sistema, mas desconsidera a ação de um campo magnético externo, como ocorre nas investigações experimentais da referência [23]. Além disso, as dificuldades inerentes do problema nos levaram a considerar um ordenamento ferromagnético, ao invés do

antiferromagnético, e a aproximação de tempo de relaxação. Porém, mesmo com essas limitações, acreditamos que os resultados encontrados demonstram a capacidade dos ingredientes básicos do modelo em proverem um mecanismo para a explicação das anisotropias observadas, suportando, assim, nossas hipóteses.

Acreditamos que este estudo motive investigações futuras do papel deste mecanismo de anisotropia nas propriedades de transporte. Das limitações mencionadas anteriormente, fica claro que investigações futuras são de fundamental importância para poder quantificar a contribuição deste mecanismo para a compreensão deste fenômeno. Gostaríamos de destacar as investigações futuras em aberto que enxergamos, a saber:

1. Estudar o caso antiferromagnético;
2. Considerar modelos mais realistas, que levem em conta a estrutura da rede dos compostos 1-1-5 e sua estrutura de bandas;
3. Considerar a presença de um campo magnético, para contrastar com os resultados da referência [23];
4. Ir além da aproximação de tempo de relaxação no estudo da equação de Boltzmann;
5. Abordagens variacionais para o estudo da condutividade, uma vez que essas permitem ir além da aproximação de tempo de relaxação.

Em conclusão, este trabalho demonstrou a capacidade dos mecanismos de ordenamento magnético e forte interação spin-órbita em fornecer uma explicação para as anisotropias nas propriedades de transporte, sem a necessidade de invocar ordem nemática. Os resultados encontrados proveem motivação para futuras investigações do papel destes ingredientes na explicação dos fenômenos observados em sistemas de férmions pesados. Um entendimento completo da relevância desses mecanismos ainda requer investigações mais aprofundadas sobre o tema.

Referências Bibliográficas

- [1] Coleman, P. Heavy fermions: Electrons at the edge of magnetism. In *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials* (John Wiley & Sons, Ltd, 2007).
- [2] Edelstein, A. S. An overview of strongly correlated electron systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **256**, 430–448 (2003).
- [3] de Haas, W., de Boer, J. & van den Berg, G. The electrical resistance of gold, copper and lead at low temperatures. *Physica* **1**, 1115–1124 (1934).
- [4] Clogston, A. M. *et al.* Local magnetic moment associated with an iron atom dissolved in various transition metal alloys. *Phys. Rev.* **125**, 541–552 (1962).
- [5] Sarachik, M. P., Corenzwit, E. & Longinotti, L. D. Resistivity of Mo-Nb and Mo-Re alloys containing 1% Fe. *Phys. Rev.* **135**, A1041–A1045 (1964).
- [6] Kondo, J. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys. *Progress of Theoretical Physics* **32**, 37–49 (1964).
- [7] Ashcroft, N. & Mermin, N. *Solid State Physics*. HRW international editions (Holt, Rinehart and Winston, 1976).
- [8] Anderson, P. W. Localized magnetic states in metals. *Phys. Rev.* **124**, 41–53 (1961).
- [9] Schrieffer, J. R. & Wolff, P. A. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians. *Phys. Rev.* **149**, 491–492 (1966).
- [10] Coqblin, B. & Schrieffer, J. R. Exchange interaction in alloys with cerium impurities. *Phys. Rev.* **185**, 847–853 (1969).
- [11] Anderson, P. W. A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem. *Journal of Physics C: Solid State Physics* **3**, 2436 (1970).
- [12] Anderson, P. W., Yuval, G. & Hamann, D. R. Exact Results in the Kondo Problem. II. Scaling Theory, Qualitatively Correct Solution, and Some New Results on One-Dimensional Classical Statistical Models. *Phys. Rev. B* **1**, 4464–4473 (1970).
- [13] Wilson, K. G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.* **47**, 773–840 (1975).

- [14] Nozières, P. A “fermi-liquid” description of the Kondo problem at low temperatures. *Journal of Low Temperature Physics* **17**, 31–42 (1974).
- [15] Andrei, N. Diagonalization of the Kondo Hamiltonian. *Phys. Rev. Lett.* **45**, 379–382 (1980).
- [16] Andrei, N., Furuya, K. & Lowenstein, J. H. Solution of the Kondo problem. *Rev. Mod. Phys.* **55**, 331–402 (1983).
- [17] Wiegmann, P. B. Exact solution of the s-d exchange model at $T = 0$. *JETP Letters* **31**, 364 (1980).
- [18] Hewson, A. *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge Studies in Magnetism (Cambridge University Press, 1997).
- [19] Stewart, G. R. Heavy-fermion systems. *Rev. Mod. Phys.* **56**, 755–787 (1984).
- [20] Gunnarsson, O. & Schönhammer, K. Chapter 64 many-body formulation of spectra of mixed valence systems. In *High Energy Spectroscopy*, vol. 10 of *Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths*, 103–163 (Elsevier, 1987).
- [21] Doniach, S. The Kondo lattice and weak antiferromagnetism. *Physica B+C* **91**, 231–234 (1977).
- [22] Steglich, F. *et al.* Superconductivity in the presence of strong Pauli paramagnetism: CeCu_2Si_2 . *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1892–1896 (1979).
- [23] Ronning, F. *et al.* Electronic in-plane symmetry breaking at field-tuned quantum criticality in CeRhIn_5 . *Nature* **548**, 313–317 (2017).
- [24] Bloch, F. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik* **61**, 206–219 (1930).
- [25] Heller, G. & Kramers, H. Ein klassisches modell des ferromagnetikums und seine nachträgliche quantisierung im gebiete tiefer temperaturen, ver. k. *Ned. Akad. Wetensc.(Amsterdam)* **37**, 378–385 (1934).
- [26] Klein, M. J. & Smith, R. S. A Note on the Classical Spin-Wave Theory of Heller and Kramers. *Phys. Rev.* **80**, 1111–1111 (1950).
- [27] Holstein, T. & Primakoff, H. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. *Phys. Rev.* **58**, 1098–1113 (1940).
- [28] Anderson, P. W. An approximate quantum theory of the antiferromagnetic ground state. *Phys. Rev.* **86**, 694–701 (1952).
- [29] Bethe, H. A. Zur Theorie der Metalle. i. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. *Zeit. für Physik* **71**, 205 (1931).
- [30] Sandvik, A. W. Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional heisenberg model. *Phys. Rev. B* **56**, 11678–11690 (1997).

- [31] Mills, D. *Spin Waves: History and a Summary of Recent Developments* (John Wiley & Sons, Ltd, 2007).
- [32] Chumak, A. V., Vasyuchka, V. I., Serga, A. A. & Hillebrands, B. Magnon spintronics. *Nature Physics* **11**, 453–461 (2015).
- [33] Yuan, H., Cao, Y., Kamra, A., Duine, R. A. & Yan, P. Quantum magnonics: When magnon spintronics meets quantum information science. *Physics Reports* **965**, 1–74 (2022).
- [34] McClarty, P. A. Topological magnons: A review. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **13**, 171–190 (2022).
- [35] Mannari, I. Electrical Resistance of Ferromagnetic Metals. *Progress of Theoretical Physics* **22**, 335–343 (1959).
- [36] Woolsey, R. B. & White, R. M. Electron-magnon interaction in ferromagnetic semiconductors. *Phys. Rev. B* **1**, 4474–4486 (1970).
- [37] Andersen, N. H. & Smith, H. Electron-magnon interaction and the electrical resistivity of tb. *Phys. Rev. B* **19**, 384–387 (1979).
- [38] Raquet, B., Viret, M., Sondergard, E., Cespedes, O. & Mamy, R. Electron-magnon scattering and magnetic resistivity in 3d ferromagnets. *Phys. Rev. B* **66**, 024433 (2002).
- [39] Haag, M., Illg, C. & Fähnle, M. Role of electron-magnon scatterings in ultrafast demagnetization. *Phys. Rev. B* **90**, 014417 (2014).
- [40] Tveten, E. G., Brataas, A. & Tserkovnyak, Y. Electron-magnon scattering in magnetic heterostructures far out of equilibrium. *Phys. Rev. B* **92**, 180412 (2015).
- [41] Edwards, D. M. & Hertz, J. A. Electron-magnon interactions in itinerant ferromagnetism. II. Strong ferromagnetism. *Journal of Physics F: Metal Physics* **3**, 2191 (1973).
- [42] Davis, L. C. & Liu, S. H. Electron-magnon interaction in ferromagnetic transition metals. *Phys. Rev.* **163**, 503–505 (1967).
- [43] Maehira, T., Hotta, T., Ueda, K. & Hasegawa, A. Relativistic Band-Structure Calculations for CeTIn₅ (T = Ir and Co) and Analysis of the Energy Bands by Using Tight-Binding Method. *Journal of the Physical Society of Japan* **72**, 854–864 (2003).
- [44] Fradkin, E., Kivelson, S. A., Lawler, M. J., Eisenstein, J. P. & Mackenzie, A. P. Nematic Fermi Fluids in Condensed Matter Physics. *Annual Review of Condensed Matter Physics* **1**, 153–178 (2010).
- [45] Hinkov, V. *et al.* Electronic liquid crystal state in the high-temperature superconductor $YBa_2Cu_3O_{6.45}$. *Science* **319**, 597–600 (2008).
- [46] Chu, J.-H. *et al.* In-plane resistivity anisotropy in an underdoped iron arsenide superconductor. *Science* **329**, 824–826 (2010).

- [47] Fernandes, R. M., Chubukov, A. V., Knolle, J., Eremin, I. & Schmalian, J. Preemptive nematic order, pseudogap, and orbital order in the iron pnictides. *Phys. Rev. B* **85**, 024534 (2012).
- [48] Stanev, V. & Littlewood, P. B. Nematicity driven by hybridization in iron-based superconductors. *Phys. Rev. B* **87**, 161122 (2013).
- [49] Fobes, D. M. *et al.* Tunable emergent heterostructures in a prototypical correlated metal. *Nature Physics* **14**, 456–460 (2018).
- [50] Helm, T. *et al.* Non-monotonic pressure dependence of high-field nematicity and magnetism in CeRhIn₅. *Nature Communications* **11**, 3482 (2020).
- [51] Rosa, P. F. S. *et al.* Enhanced hybridization sets the stage for electronic nematicity in CeRhIn₅. *Phys. Rev. Lett.* **122**, 016402 (2019).
- [52] Lesseux, G. G. *et al.* Orbitally defined field-induced electronic state in a Kondo lattice. *Phys. Rev. B* **101**, 165111 (2020).
- [53] Kurihara, R., Miyake, A., Tokunaga, M., Hirose, Y. & Settai, R. High-field ultrasonic study of quadrupole ordering and crystal symmetry breaking in CeRhIn₅. *Phys. Rev. B* **101**, 155125 (2020).
- [54] Mishra, S., Demuer, A., Aoki, D. & Sheikin, I. Specific heat of CeRhIn₅ in high magnetic fields: Magnetic phase diagram revisited. *Phys. Rev. B* **103**, 045110 (2021).
- [55] Mishra, S. *et al.* Robust Fermi-Surface Morphology of CeRhIn₅ across the putative field-induced quantum critical point. *Phys. Rev. Lett.* **126**, 016403 (2021).
- [56] Bao, W. *et al.* Incommensurate magnetic structure of CeRhIn₅. *Phys. Rev. B* **62**, R14621–R14624 (2000).
- [57] Bovenzi, N. & Diez, M. Semiclassical theory of anisotropic transport at LaAlO₃/SrTiO₃ interfaces under an in-plane magnetic field. *Phys. Rev. B* **95**, 205430 (2017).
- [58] Auerbach, A. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Graduate Texts in Contemporary Physics (Springer New York, 2012).
- [59] Sólyom, J. & Piróth, A. *Fundamentals of the Physics of Solids: Volume I: Structure and Dynamic*. Fundamentals of the Physics of Solids (Springer Berlin Heidelberg, 2007).
- [60] Stancil, D. & Prabhakar, A. *Spin Waves: Theory and Applications* (Springer US, 2009).
- [61] Goldstone, J. Field theories with « Superconductor » solutions. *Il Nuovo Cimento (1955-1965)* **19**, 154–164 (1961).
- [62] Goldstone, J., Salam, A. & Weinberg, S. Broken Symmetries. *Phys. Rev.* **127**, 965–970 (1962).
- [63] Okubo, S. Algebraic identities among $U(n)$ infinitesimal generators. *Journal of Mathematical Physics* **16**, 528–535 (1975).

- [64] Phillips, P. *Advanced Solid State Physics*. Advanced Solid State Physics (Cambridge University Press, 2012).
- [65] Rössler, U. *Solid State Theory: An Introduction*. Advanced Texts in Physics (Springer Berlin Heidelberg, 2004).
- [66] Abrikosov, A. *Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*. Dover books on advanced mathematics (Prentice-Hall, 1963).
- [67] Mahan, G. *Many-particle Physics*. Physics of solids and liquids (Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000).
- [68] Sólyom, J. & Piróth, A. *Fundamentals of the Physics of Solids: Volume II: Electronic Properties*. Fundamentals of the Physics of Solids (Springer Berlin Heidelberg, 2008).
- [69] Bellac, M., Mortessagne, F. & Batrouni, G. *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics* (Cambridge University Press, 2004).
- [70] Ballentine, L. *Quantum Mechanics: A Modern Development*. G - Reference, Information and Interdisciplinary Subjects Series (World Scientific, 1998).
- [71] Ziman, J. *Electrons and Phonons: The Theory of Transport Phenomena in Solids*. International series of monographs on physics (OUP Oxford, 1960).
- [72] Bezanson, J., Edelman, A., Karpinski, S. & Shah, V. B. Julia: A fresh approach to numerical computing. *SIAM Review* **59**, 65–98 (2017).
- [73] Kluyver, T. *et al.* Jupyter Notebooks – a publishing format for reproducible computational workflows. In Loizides, F. & Schmidt, B. (eds.) *Positioning and Power in Academic Publishing: Players, Agents and Agendas*, 87 – 90 (IOS Press, 2016).
- [74] Johnson, S. G. Multi-dimensional adaptive integration in C: The Cubature package. <https://github.com/stevengj/cubature> (2005).
- [75] Christ, S., Schwabeneder, D., Rackauckas, C., Borregaard, M. K. & Breloff, T. Plots.jl – a user extendable plotting API for the julia programming language (2023).
- [76] Hunter, J. D. Matplotlib: A 2D graphics environment. *Computing in Science & Engineering* **9**, 90–95 (2007).
- [77] Bouchet-Valat, M. & Kamiński, B. Dataframes.jl: Flexible and fast tabular data in julia. *Journal of Statistical Software* **107**, 1–32 (2023).
- [78] Hipp, R. D. SQLite. <https://www.sqlite.org/index.html> (2020).
- [79] Abrikosov, A. A. Electron scattering on magnetic impurities in metals and anomalous resistivity effects. *Physics Physique Fizika* **2**, 5–20 (1965).

Apêndice **A**

Derivação da Transformação de Holstein–Primakoff

Para estudar os estados excitados de sistema magnéticos em sua fase ordenada, em lugar da base $|s_{iz}\rangle = |S, s_{iz}\rangle$ de spin, vamos introduzir uma nova base $|n_i\rangle$ onde n_i é o desvio da componente s_{iz} spin do sítio i com relação ao seu valor no estado fundamental. Aumentar n_i de 1 é equivalente a decrescer s_{iz} de 1. Também introduzimos operadores de criação e destruição bosônicos que operam sobre a base $|n_i\rangle$ criando/destruindo desvios de s_{iz} , isto é, definimos operadores a_i^\dagger, a_i tais que

$$[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [a_i, a_j] = 0, \quad (\text{A.1})$$

que, atuando na base $|n_i\rangle$, se comportam como operadores bosônicos,

$$a_i |n_i\rangle = \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle, \quad (\text{A.2})$$

$$a_i^\dagger |n_i\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle, \quad (\text{A.3})$$

$$a_i^\dagger a_i |n_i\rangle = n_i |n_i\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Uma vez que um spin *flip* reduz a componente z do spin naquele sítio, temos

$$S_i^z |n_i\rangle = (S - n_i) |n_i\rangle. \quad (\text{A.5})$$

A relação anterior sugere tomarmos

$$S_i^z = S - a_i^\dagger a_i. \quad (\text{A.6})$$

Antes de analisarmos esta escolha, vamos continuar nossa análise com os operadores S^\pm e volta-remos a este tópico mais adiante. O operador S_i^+ tem a ação de levantar o spin de uma unidade, portanto, sua ação na base $|n_i\rangle$ é de reduzir n_i de uma unidade, o que nos sugere que S_i^+ está

relacionado com o operador a_i . Aplicando S_i^+ ao estado $|n_i\rangle$, temos

$$S_i^+ |n_i\rangle = [S(S+1) - (S-n_i)(S-n_i+1)]^{1/2} |n_i-1\rangle, \quad (\text{A.7})$$

$$= [2Sn_i - n_i^2 + n_i]^{1/2} |n_i-1\rangle, \quad (\text{A.8})$$

$$= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{(n_i-1)}{2S}\right)^{1/2} \sqrt{n_i} |n_i-1\rangle, \quad (\text{A.9})$$

$$= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2} a_i |n_i\rangle. \quad (\text{A.10})$$

O último resultado nos sugere definir

$$S_i^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2} a_i, \quad (\text{A.11})$$

relacionado ao operador a_i , como esperado. De maneira similar, encontramos

$$S_i^- = \sqrt{2S} a_i^\dagger \left(1 - \frac{a_i^\dagger a_i}{2S}\right)^{1/2}, \quad (\text{A.12})$$

de modo que a relação $(S_i^+)^{\dagger} = S_i^-$ é obedecida. As Eqs. (A.6), (A.11) e (A.12) são conhecidas como *transformação de Holstein–Primakoff* (HP) [27, 58].

Note que, para que haja um isomorfismo entre os espaços de Hilbert gerados pelas bases $|S, s_{iz}\rangle$ e $|n_i\rangle$, um vínculo deve ser imposto aos números n_i . Como $s_{iz} = S - n_i$, o vínculo sobre o valor de n_i deve ser

$$a_i^\dagger a_i = n_i \leq 2S. \quad (\text{A.13})$$

Com essa restrição, o espaço de Fock dos bôsons a é isomórfico ao espaço de momento angular S .

Podemos verificar que, se os operadores a_i , a_i^\dagger satisfazem as relações de comutação de operadores de criação e destruição, as relações de comutação entre os operadores de momento angular é preservada. Aplicando S^+S^- e S^-S^+ a um estado genérico $|n\rangle$, temos

$$S^+S^- |n\rangle = (2S-n)(n+1) |n\rangle, \quad (\text{A.14})$$

$$S^-S^+ |n\rangle = (2S-(n-1))n |n\rangle, \quad (\text{A.15})$$

Assim,

$$\begin{aligned} [S^+, S^-] |n\rangle &= [(2S-n)(n+1) - (2S-(n-1))n] |n\rangle, \\ &= [2S + 2Sn - n^2 - n - (2Sn - n^2 + n)] |n\rangle, \\ &= 2(S-n) |n\rangle, \\ &= 2S^z |n\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

resultando em $[S^+, S^-] = 2S^z$. Similarmente, calculamos o comutador $[S^z, S^+]$:

$$\begin{aligned}
 [S^z, S^+] |n\rangle &= (S^z S^+ - S^+ S^z) |n\rangle, \\
 &= \sqrt{2S} \left\{ \left[\sqrt{n} \left(1 - \frac{n-1}{2S}\right)^{1/2} (S - (n-1)) \right] - \left[(S - n) \sqrt{n} \left(1 - \frac{n-1}{2S}\right)^{1/2} \right] \right\} |n-1\rangle, \\
 &= \sqrt{2S} \sqrt{n} \left(1 - \frac{n-1}{2S}\right)^{1/2} \{S - n + 1 - S + n\} |n-1\rangle, \\
 &= +S^+ |n\rangle.
 \end{aligned} \tag{A.17}$$

Por fim, para o comutador $[S^z, S^-]$, temos

$$\begin{aligned}
 S^z S^- |n\rangle &= \sqrt{2S} \left(1 - \frac{n}{2S}\right) \sqrt{n+1} (S - (n+1)) |n+1\rangle, \\
 S^- S^z |n\rangle &= (S - n) \sqrt{2S} \left(1 - \frac{n}{2S}\right) \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \\
 [S^z, S^-] |n\rangle &= -S^- |n\rangle.
 \end{aligned} \tag{A.18}$$

Portanto, a transformação de HP preserva as regras de comutação dos operadores de momento angular.

Apêndice **B**

Cálculo dos elementos de matriz da interação elétron–magnon

B.1 Alinhamento na direção \hat{z}

Para calcular os elementos de matriz $\mathcal{J}_{\mathbf{k}'\sigma',\hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm}$, partimos da equação

$$\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}\sigma',\hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} = J \langle \mathbf{k}\sigma | km \rangle \langle k'm' | \mathbf{k}'\sigma' \rangle. \quad (\text{B.1})$$

Com isso, decomponemos o estado $|km\rangle = |k, j, \ell, s, m\rangle$ em ondas parciais, $|k, \ell, s, m_\ell, m_s\rangle$. Por hora, vamos considerar que o estado $|j, m\rangle$ diagonaliza \mathbf{J}^2 e J_z simultaneamente (*i.e.* $\hat{\mathbf{m}} = \hat{\mathbf{z}}$). A decomposição pode ser feita diretamente através da soma de momentos angulares, utilizando os coeficientes de Clebsch–Gordan:

$$|k, j, \ell, s, m\rangle = \sum_{m_s=-s}^s (jm | \ell, m - m_s; s, m_s) |k, \ell, s, m_\ell, m_s\rangle. \quad (\text{B.2})$$

O estado $|k, \ell, s, m_\ell, m_s\rangle$ corresponde a uma onda parcial, dado por

$$\langle r, \theta, \phi | k, \ell, s, m_\ell, m_s \rangle = \sqrt{4\pi} j_\ell (kr) Y_\ell^{m_\ell} (\theta, \phi) |s, m_s\rangle. \quad (\text{B.3})$$

Para calcular o produto interno $\langle km | \mathbf{k}\sigma \rangle$, decomponemos o estado $|\mathbf{k}\sigma\rangle$ de ondas planas em ondas parciais, $|k, \ell, s, m_\ell, m_s\rangle$,

$$|\mathbf{k}\sigma\rangle = \sqrt{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_\ell=-\ell}^{\ell} i^\ell Y_\ell^{m_\ell*} (\hat{\mathbf{k}}) \left| k, \ell, s = \frac{1}{2}, m_\ell, \sigma \right\rangle. \quad (\text{B.4})$$

Com isso,

$$\langle km | \mathbf{k}\sigma \rangle = \sqrt{4\pi} \left(jm \left| \ell, m - \sigma; \frac{1}{2}, \sigma \right. \right) i^\ell Y_\ell^{m-\sigma*} (\hat{\mathbf{k}}). \quad (\text{B.5})$$

Por conveniência, utilizamos uma notação simplificada para a projeção do spin $s = 1/2$, onde $m-\uparrow$ significa $m - \frac{1}{2}$ e $m-\downarrow$ representa $m - (-\frac{1}{2})$. Assim, obtemos o resultado

$$\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma',\hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} = 4\pi J \left(jm \left| \ell, m - \sigma; \frac{1}{2}, \sigma \right. \right) \left(jm' \left| \ell, m' - \sigma'; \frac{1}{2}, \sigma' \right. \right) Y_{\ell}^{m-\sigma*}(\hat{\mathbf{k}}) Y_{\ell}^{m'-\sigma'}(\hat{\mathbf{k}}'). \quad (\text{B.6})$$

B.2 Alinhamento em uma direção $\hat{\mathbf{m}}$ genérica

Quando o estado $|jm\rangle$ diagonaliza \mathbf{J}^2 e $\hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{J}$ simultaneamente, com $\hat{\mathbf{m}}$ genérico, a equação se mantém a mesma se todos os momentos angulares são quantizados na direção $\hat{\mathbf{m}}$, isto é, se os estados $|\ell, m_{\ell}\rangle$, $|s, m_s\rangle$ diagonalizam simultaneamente $(\mathbf{L}^2, \hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{L})$ e $(\mathbf{S}^2, \hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{S})$, respectivamente. Os coeficientes de Clebsch–Gordan ficam inalterados sob a transformação das bases quantizadas na direção $\hat{\mathbf{z}}$ para $\hat{\mathbf{m}}$. Os harmônicos esféricos, por outro lado, são trocados por $Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$ onde

$$\mathbf{L}^2 Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) = \ell(\ell+1) Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) \quad (\text{B.7})$$

$$(\hat{\mathbf{m}} \cdot \mathbf{L}) Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) = m_{\ell} Y_{\ell}^{m_{\ell}}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}). \quad (\text{B.8})$$

Para verificar este fato, vamos calcular $|\mathbf{k}\sigma_{\hat{\mathbf{m}}}\rangle$, com o spin projetado na direção $\hat{\mathbf{m}}$. Vamos denotar as projeções de \mathbf{J} , \mathbf{L} e \mathbf{S} por $m_{j\hat{\mathbf{m}}}$, $m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}$ e $m_{s\hat{\mathbf{m}}}$ (ou $\sigma_{\hat{\mathbf{m}}}$), quando quantizarmos os operadores na direção $\hat{\mathbf{m}}$. Começamos decompondo $|\mathbf{k}\sigma_{\hat{\mathbf{m}}}\rangle$ em termos de ondas parciais. Podemos utilizar a base que diagonaliza \mathbf{L}^2, L_z , assim, a expressão fica análoga a Eq. (B.4), trocando σ por $\sigma_{\hat{\mathbf{m}}}$:

$$|\mathbf{k}\sigma_{\hat{\mathbf{m}}}\rangle = \sqrt{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}=-\ell}^{\ell} i^{\ell} Y_{\ell}^{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}*}}(\hat{\mathbf{k}}) \left| k, \ell, s = \frac{1}{2}, m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}, \sigma_{\hat{\mathbf{m}}} \right\rangle. \quad (\text{B.9})$$

Por outro lado, podemos escrever a mesma expressão trocando $m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}$ por $m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}$,

$$|\mathbf{k}\sigma_{\hat{\mathbf{m}}}\rangle = \sqrt{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}=-\ell}^{\ell} i^{\ell} Y_{\ell}^{m_{\ell\hat{\mathbf{m}}*}}(\hat{\mathbf{k}}) \left| k, \ell, s = \frac{1}{2}, m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}, \sigma_{\hat{\mathbf{m}}} \right\rangle$$

Sendo

$$|k, \ell, s, m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}, \sigma_{\hat{\mathbf{m}}}\rangle = \sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}=-\ell}^{\ell} U_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}, m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}}^{\ell} |k, \ell, s, m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}, \sigma_{\hat{\mathbf{m}}}\rangle, \quad (\text{B.10})$$

$$\Leftrightarrow U_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}, m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}}^{\ell} = \langle k, \ell, s, m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}, \sigma_{\hat{\mathbf{m}}} | k, \ell, s, m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}, \sigma_{\hat{\mathbf{m}}} \rangle = \langle \ell m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}, | \ell m_{\ell\hat{\mathbf{z}}} \rangle \quad (\text{B.11})$$

podemos escrever

$$|\mathbf{k}\sigma_{\hat{\mathbf{m}}}\rangle = \sqrt{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}=-\ell}^{\ell} i^{\ell} Y_{\ell}^{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}*}}(\hat{\mathbf{k}}) \left| k, \ell, s = \frac{1}{2}, m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}, \sigma_{\hat{\mathbf{m}}} \right\rangle, \quad (\text{B.12})$$

$$= \sqrt{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}=-\ell}^{\ell} i^{\ell} \left[\sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}*}}(\hat{\mathbf{k}}) U_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}, m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}}^{\ell} \right] |k, \ell, s, m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}, \sigma_{\hat{\mathbf{m}}}\rangle, \quad (\text{B.13})$$

$$= \sqrt{4\pi} \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}=-\ell}^{\ell} i^{\ell} Y_{\ell}^{m_{\ell\hat{\mathbf{m}}*}}(\hat{\mathbf{k}}) \left| k, \ell, s = \frac{1}{2}, m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}, \sigma_{\hat{\mathbf{m}}} \right\rangle, \quad (\text{B.14})$$

de onde identificamos que

$$Y_{\ell}^{m_{\ell\hat{\mathbf{m}}*}}(\hat{\mathbf{k}}) = \sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}*}}(\hat{\mathbf{k}}) U_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}, m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}}^{\ell}. \quad (\text{B.15})$$

Utilizando a Eq. (B.11) e escrevendo $Y_{\ell}^{m_{\ell\hat{\mathbf{m}}*}}(\hat{\mathbf{k}})$ como $\langle \ell m_{\ell\hat{\mathbf{m}}} | \hat{\mathbf{k}} \rangle$, a equação acima pode ser verificada com o uso da propriedade de fechamento, $\sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}} |\ell m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}\rangle \langle \ell m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}| = I$:

$$\langle \ell m_{\ell\hat{\mathbf{m}}} | \hat{\mathbf{k}} \rangle = \sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}=-\ell}^{\ell} \langle \ell m_{\ell\hat{\mathbf{m}}}, | \ell m_{\ell\hat{\mathbf{z}}} \rangle \langle \ell m_{\ell\hat{\mathbf{z}}} | \hat{\mathbf{k}} \rangle, \quad (\text{B.16})$$

$$\left\langle \ell m_{\ell\hat{\mathbf{m}}} \left| \underbrace{\sum_{m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}=-\ell}^{\ell} |\ell m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}\rangle \langle \ell m_{\ell\hat{\mathbf{z}}}|}_I \right| \hat{\mathbf{k}} \right\rangle. \quad (\text{B.17})$$

Portanto, fazendo a troca de m e σ por $m_{\hat{\mathbf{m}}}$ e $\sigma_{\hat{\mathbf{m}}}$ na Eq. (B.6) e utilizando a invariância dos Clebsch–Gordan sob rotação, vemos que o resultado geral para $\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm}$ quando os momentos angulares estão quantizados na direção $\hat{\mathbf{m}}$ é

$$\mathcal{J}_{\hat{\mathbf{k}}'\sigma', \hat{\mathbf{k}}\sigma}^{m'm} = 4\pi J \left(jm \left| \ell, m - \sigma; \frac{1}{2}, \sigma \right. \right) \left(jm' \left| \ell, m' - \sigma'; \frac{1}{2}, \sigma' \right. \right) Y_{\ell}^{m-\sigma*}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) Y_{\ell}^{m'-\sigma'}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}'), \quad (\text{B.18})$$

com

$$Y_{\ell}^{m*}(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} Y_{\ell}^{m'*}(\hat{\mathbf{k}}) U_{m'm}^{\ell}, \quad (\text{B.19})$$

e $Y_{\ell}^{m'*}(\hat{\mathbf{k}})$ representando os harmônicos esféricos usuais.

B.3 Cálculo de $Y_{\ell}^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$

Nos cálculos anteriores, definimos a matriz $U_{mm'}^{\ell}$ de forma genérica. Para obtermos as expressões finais de $Y_{\ell}^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$, é conveniente relacionarmos a matriz U^{ℓ} com as matrizes de Wigner. Utilizando a convenção zyz para os ângulos de Euler (α, β, γ) que descreve a rotação

que leva o vetor $\hat{\mathbf{z}}$ em $\hat{\mathbf{m}}$ [70], podemos escrever

$$D^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma) | \ell m_{\ell \hat{\mathbf{z}}} \rangle = | \ell m_{\ell \hat{\mathbf{m}}} \rangle. \quad (\text{B.20})$$

Com isso,

$$\langle \hat{\mathbf{k}} | \ell m_{\ell \hat{\mathbf{m}}} \rangle = \langle \hat{\mathbf{k}} | D^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma) | \ell m_{\ell \hat{\mathbf{z}}} \rangle, \quad (\text{B.21})$$

$$= \sum_{m'_{\ell \hat{\mathbf{z}}}} \langle \hat{\mathbf{k}} | \ell m'_{\ell \hat{\mathbf{z}}} \rangle \langle \ell m'_{\ell \hat{\mathbf{z}}} | D^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma) | \ell m_{\ell \hat{\mathbf{z}}} \rangle, \quad (\text{B.22})$$

$$Y_{\ell}^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}}) = \sum_{m'} Y_{\ell}^{m'}(\hat{\mathbf{k}}) D_{m', m}^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma), \quad (\text{B.23})$$

de onde vemos que $U^{\ell\dagger} = D^{\ell}(\alpha, \beta, \gamma)$. Partindo da expressão final, podemos calcular $Y_{\ell}^m(\hat{\mathbf{m}}, \hat{\mathbf{k}})$ para qualquer direção $\hat{\mathbf{m}}$ utilizando os harmônicos esféricos e a matriz de Wigner $D^{(\ell)}(\alpha, \beta, \gamma)$.

Em particular, para $\hat{\mathbf{m}}(\alpha) = \sin \alpha \hat{\mathbf{x}} + \cos \alpha \hat{\mathbf{z}}$ (veja o capítulo 6), temos um vetor no plano xz que pode ser descrito por uma rotação de α em torno do eixo y , no sentido positivo. Neste caso, a matriz $D^{(\ell)}(0, \alpha, 0)$ se reduz à chamada pequena matriz de Wigner, $d^{(\ell)}(\alpha)$.

Apêndice **C**

O Grupo $SU(N)$ e Algumas de suas Representações

Neste apêndice, apresentaremos o grupo $SU(N)$ juntamente com algumas representações que são relevantes para esta dissertação. O objetivo deste apêndice é apresentar em mais detalhes as representações do grupo em termos de operadores bosônicos e fermiônicos e a representação fundamental, utilizada nas representações presentes nos capítulos 2 a 4. Ao final, discutiremos em um pouco mais de detalhes o motivo de trabalharmos na representação fundamental do grupo.

A não ser que o contrário seja dito, utilizaremos a notação de Einstein, onde índices repetidos denotam uma soma implícita.

C.1 O Grupo $SU(N)$ e Representações

C.1.1 O Grupo

O grupo $U(N)$, chamado de grupo unitário de grau N é formado pelas matrizes complexas $N \times N$ unitárias. De modo geral o determinante de uma matriz unitária é $e^{i\phi}$, para alguma fase ϕ . Um caso especial, corresponde às matrizes cujo determinante é igual a 1. Este caso forma o subgrupo conhecido como $SU(N)$, chamado de grupo especial unitário de grau N . Então, para uma matriz U pertencer ao grupo $SU(N)$, essa deve satisfazer

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I, \quad \det U = 1, \quad (\text{C.1})$$

onde I denota a matriz identidade. Como uma matriz do grupo $U(N)$ pode ser escrita como uma matriz de $SU(N)$ multiplicada por um fator de fase, estes grupos estão relacionados por $U(N) = U(1) \times SU(N)$, onde o grupo $U(1)$ corresponde simplesmente ao grupo dos números complexos de módulo igual a 1. Restringir-nos-emos ao grupo $SU(N)$ no que segue, nos referindo a $U(N)$ quando conveniente.

Uma vez que qualquer matriz unitária U pode ser escrita na forma $U = \exp iS$, onde S é uma matriz hermitiana. A condição de determinante igual a 1 se traduz para $\text{Tr}S = 0$. O conjunto das matrizes hermitianas $N \times N$ de traço nulo forma um espaço vetorial \mathfrak{g} de dimensão $N^2 - 1$, de modo que qualquer matriz S pode ser escrita como a combinação linear de $N^2 - 1$

matrizes T^a , com coeficientes reais. Definida a base de matrizes T^a que geram o espaço vetorial \mathfrak{g} , qualquer elemento do grupo $SU(N)$ pode então ser escrito como

$$U = \exp(i\theta_a T^a) \quad (a = 1, 2, \dots, N^2 - 1), \quad (\text{C.2})$$

onde θ_a são coeficientes reais. Assim, as matrizes T^a recebem o nome de geradores do grupo.

C.1.2 Álgebra de Lie

As matrizes T^a do espaço vetorial \mathfrak{g} , satisfazem a relação de comutação

$$[T^a, T^b] = if^{abc}T^c, \quad (\text{C.3})$$

onde f^{abc} são as chamadas constantes de estrutura e são características da álgebra de Lie em questão. O comutador $[\bullet, \bullet]$ representa um mapa bilinear alternado $\mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$. Em particular, o comutador satisfaz a identidade de Jacobi,

$$[T^a, [T^b, T^c]] + [T^b, [T^c, T^a]] + [T^c, [T^a, T^b]] = 0, \quad (\text{C.4})$$

de modo que o espaço vetorial \mathfrak{g} sobre o corpo \mathbb{R} juntamente com o comutador constituem uma álgebra de Lie. A álgebra de Lie associada ao grupo $SU(N)$ é denotada por $\mathfrak{su}(N)$. Neste contexto, as matrizes T^a são chamadas de geradores da álgebra $\mathfrak{su}(N)$ e é dito que as T^a satisfazem a álgebra de Lie em questão.

C.1.3 Representações

Uma representação ρ de um grupo G em um espaço vetorial V é um mapa da forma

$$\rho: G \rightarrow \text{GL}(V), \quad (\text{C.5})$$

onde cada elemento $g \in G$ é mapeado em um elemento $\rho(g) \in \text{GL}(V)$, com $\text{GL}(V)$ sendo o grupo das transformações lineares invertíveis que atuam em V , que satisfaz:

1. $\rho(g_1g_2) = \rho(g_1)\rho(g_2)$, para todo $g_1, g_2 \in G$;
2. $\rho(e) = I_V$, onde e é o elemento neutro de G e I_V a transformação de identidade em V ;
3. $\rho(g^{-1}) = (\rho(g))^{-1}$, para todo $g \in G$.

Em outras palavras, uma representação é uma realização do grupo por operadores lineares, ou matrizes, sobre um espaço vetorial, satisfazendo as propriedades acima.

Uma representação de uma álgebra de Lie \mathfrak{g} sobre um espaço vetorial V é definida de maneira similar, associando a cada gerador $T^a \in \mathfrak{g}$ um operador $\rho(T^a)$ que atua em V , de tal forma que as relações de comutação da álgebra de Lie sejam preservadas na representação, ou seja,

$$[\rho(T^a), \rho(T^b)] = if^{abc}\rho(T^c). \quad (\text{C.6})$$

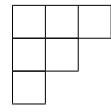
Nesse caso, dizemos que a estrutura da álgebra é preservada.

Uma vez que temos uma representação da álgebra de Lie, podemos construir uma representação do grupo a partir dela, definindo ρ sobre os elementos do grupo tais que

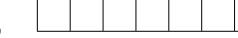
$$\rho(g) = \exp(i\theta_a \rho(T^a)). \quad (\text{C.7})$$

Um caso particular importante são as chamadas representações irreduzíveis (RI). Uma RI é definida como uma representação sobre um espaço V para a qual não existe um sub-espaco vetorial W que seja invariante sob as transformações g do grupo G , onde W é dito ser invariante se para todo vetor $|w\rangle \in W$ e para todo $g \in G$, temos $\rho(g)|w\rangle \in W$ (usualmente escrito como $\rho(g)W \subset W$). Uma representação é chamada de redutível se não for irreduzível.

Para o grupo $SU(N)$, as RIs podem ser rotuladas por N inteiros q_μ satisfazendo $q_1 \geq q_2 \geq \dots \geq q_N \geq 0$. A estes inteiros estão associados diagramas conhecidos como *diagramas (ou Tableaus) de Young*. Um exemplo de diagrama de Young correspondente a $q_1 = 3, q_2 = 2, q_3 = 1$ e $q_\mu = 0$, para $\mu > 3$ no caso de $N > 3$, é apresentado abaixo.


(C.8)

Alguns casos interessantes de diagramas, correspondem a $q_1 = q \leq N - 1, q_\mu = 0$, para $\mu > 1$ e $q_1 = q_2 = \dots = q_\nu = 1, q_\mu = 0$ para $\mu > \nu$. O primeiro destes casos corresponde a representações completamente simétricas do grupo e é denotado por uma linha horizontal de q caixas,

RIs completamente simétricas:    (C.9)

O segundo caso corresponde a representações completamente anti-simétricas do grupo e corresponde a ν caixas empilhadas verticalmente,




(C.10)

Um caso particular ocorre quando $q_1 = q = 1$, e os demais q_μ são nulos, que em termos de diagramas de Young corresponde a uma única caixa: \square . Essa representação é conhecida como a representação fundamental do grupo $SU(N)$ e pode ser entendida tanto como uma representação simétrica quanto anti-simétrica. A representação fundamental será nosso caso de interesse daqui por diante.

C.2 Representação fundamental

Uma forma de se realizar a representação fundamental é a partir de um espaço de Hilbert N dimensional, que iremos denotar por \mathcal{H} . Sendo $\mathcal{B} = \{|\mu\rangle\}_{\mu=1}^N$ uma base de vetores or-

tonormais neste espaço, definimos N^2 operadores $A_\nu^\mu = |\nu\rangle\langle\mu|$. Os geradores T^a do grupo $U(N)$, que corresponde ao grupo das matrizes unitárias $N \times N$, podem ser escritos como combinações lineares dos operadores A_ν^μ ,

$$(T^a)_\nu^\mu = c_{\mu\lambda}^a A_\nu^\lambda, \quad (\text{C.11})$$

onde $c_{\mu\lambda}^a$ são coeficientes complexos. Assim, os operadores A_ν^μ são também chamados de geradores do grupo $U(N)$. Os geradores B_ν^μ do grupo $SU(N)$ podem ser construídos com a imposição de traço nulo, resultando em

$$B_\nu^\mu = A_\nu^\mu - \frac{1}{N} \delta_\nu^\mu A_\lambda^\lambda. \quad (\text{C.12})$$

A álgebra $\mathfrak{su}(N)$ em termos dos operadores A_ν^μ satisfaz a relação de comutação [63]

$$[A_\nu^\mu, A_\beta^\alpha] = \delta_\beta^\mu A_\nu^\alpha - \delta_\nu^\alpha A_\beta^\mu, \quad (\text{C.13})$$

que é obtida de maneira direta da representação adotada para os operadores A_ν^μ . Uma condição necessária para fixar a representação do grupo como a representação fundamental é que [63]

$$A_\lambda^\lambda = 1, \quad (\text{C.14})$$

que corresponde exatamente à relação de fechamento da base \mathcal{B} escolhida para o espaço de Hilbert.

C.3 Representações em Termos de Bósons e Férmons

As representações totalmente simétricas e totalmente anti-simétricas pode ser obtidas utilizando-se operadores de criação e destruição bosônicos e fermiônicos, respectivamente. Definindo-se N sabores de bósons b_μ ou N sabores de férmons f_μ , os geradores do grupo $U(N)$ pode ser escritos como

$$A_\nu^\mu = b_\nu^\dagger b_\mu, \quad A_\nu^\mu = f_\nu^\dagger f_\mu. \quad (\text{C.15})$$

Pode-se mostrar que os operadores acima satisfazem as relações de comutação de $\mathfrak{su}(N)$, Eq. (C.13). Isso nos mostra que podemos gerar representações para o grupo $SU(N)$ em termos de operadores bosônicos e fermiônicos. No entanto, a representação obtida é, em geral, redutível. Para obter RIs é necessário impôr um vínculo sobre o número total de férmons ou bósons. Ao impor

$$n_b = \sum_\mu b_\mu^\dagger b_\mu = q, \quad \text{ou} \quad n_f = \sum_\mu f_\mu^\dagger f_\mu = q, \quad (\text{C.16})$$

obtemos uma representação simétrica (anti-simétrica) correspondente a um diagram de Young de q caixas empilhadas horizontalmente (verticalmente) para bósons (férmons). Para entender este fato, vamos considerar o caso do grupo $SU(2)$ como um exemplo.

C.3.1 Geradores e Representações de $SU(2)$ em Termo de Férmons

Há inúmeras formas de se representar a álgebra do grupo $SU(2)$. Um caso particular é através de dois sabores de férmons.

Considere dois operadores fermiônicos, f_1 e f_2 . Os estados do espaço de Hilbert gerado são

$$|0\rangle, \quad f_1^\dagger |0\rangle, \quad f_2^\dagger |0\rangle, \quad f_1^\dagger f_2^\dagger |0\rangle, \quad (C.17)$$

onde $|0\rangle$ representa o estado de vácuo. Os operadores $A_\nu^\mu = c_\nu^\dagger c_\mu$ satisfazem a álgebra do grupo $U(2)$,

$$\begin{aligned} [A_\nu^\mu, A_\beta^\alpha] &= \left[f_\nu^\dagger f_\mu, f_\beta^\dagger f_\alpha \right], \\ &= f_\nu^\dagger \left[f_\mu, f_\beta^\dagger f_\alpha \right] + \left[f_\nu^\dagger, f_\beta^\dagger f_\alpha \right] f_\mu, \\ &= f_\nu^\dagger \left(\left\{ f_\mu, f_\beta^\dagger \right\} f_\alpha - f_\beta^\dagger \{ f_\mu, f_\alpha \} \right) + \left(\left\{ f_\nu^\dagger, f_\beta^\dagger \right\} f_\alpha - f_\beta^\dagger \{ f_\nu^\dagger, f_\alpha \} \right) f_\mu, \\ &= f_\nu^\dagger \left(\delta_\beta^\mu f_\alpha - 0 \right) + \left(0 - f_\beta^\dagger \delta_\nu^\alpha \right) f_\mu, \\ &= \delta_\beta^\mu A_\nu^\alpha - \delta_\nu^\alpha A_\beta^\mu, \end{aligned} \quad (C.18)$$

onde utilizamos as relações de comutação

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B, \quad (C.19)$$

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}. \quad (C.20)$$

Assim, A_ν^μ geram representações do grupo $U(2)$, e os operadores $B_\nu^\mu = A_\nu^\mu - \frac{1}{2}\delta_\nu^\mu \sum_\lambda A_\lambda^\lambda$ geram representações do $SU(2)$.

O próximo passo é analisar se os B_ν^μ geram representações irreduzíveis (IRs) do grupo $SU(2)$, ou uma representação redutível. Para isso, vamos considerar os operadores J_x , J_y e J_z , que também geram o grupo $SU(2)$. Em termos dos operadores f_μ , temos

$$J_\alpha = \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu} f_\mu^\dagger \sigma_{\mu\nu}^\alpha f_\nu, \quad (C.21)$$

onde $\alpha = x, y, z$ denotam cada componente dos operador de momento angular e σ^α são as matrizes de Pauli. Essa representação é conhecida como representação de pseudo-férmions de Abrikosov [79]. Explicitamente, os operadores J_α são dados por

$$J_x = \frac{1}{2} \left(f_1^\dagger f_2 + f_2^\dagger f_1 \right), \quad J_y = \frac{i}{2} \left(-f_1^\dagger f_2 + f_2^\dagger f_1 \right), \quad J_z = \frac{1}{2} \left(f_1^\dagger f_1 - f_2^\dagger f_2 \right). \quad (C.22)$$

Utilizando a representação acima, o operador de momento angular total, J^2 , que é o operador de Casimir quadrático dá álgebra de Lie associada, é dado por $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$. Os auto-valores deste operador determinam univocamente a representação do grupo, de modo que podemos usá-los para estudar a representação gerada pelos B_ν^μ . Vamos calcular cada termo J_α^2 em termos dos operadores fermiônicos. Por simplicidade, escreveremos $n_\mu = f_\mu^\dagger f_\mu$ para o

operador número de férmiôns de sabor μ . Com isso, temos

$$\begin{aligned} J_x^2 &= \frac{1}{4} \left[f_1^\dagger f_2 f_1^\dagger f_2 + f_2^\dagger f_1 f_2^\dagger f_1 + f_1^\dagger f_2 f_2^\dagger f_1 + f_2^\dagger f_1 f_1^\dagger f_2 \right], \\ &= \frac{1}{4} [0 + 0 + n_1 (1 - n_2) + n_2 (1 - n_1)], \\ &= \frac{1}{4} [n_1 + n_2 - 2n_1 n_2], \end{aligned} \quad (C.23)$$

$$\begin{aligned} J_y^2 &= -\frac{1}{4} \left[f_1^\dagger f_2 f_1^\dagger f_2 + f_2^\dagger f_1 f_2^\dagger f_1 - f_1^\dagger f_2 f_2^\dagger f_1 - f_2^\dagger f_1 f_1^\dagger f_2 \right], \\ &= +\frac{1}{4} [0 + 0 + n_1 (1 - n_2) + n_2 (1 - n_1)], \\ &= \frac{1}{4} [n_1 + n_2 - 2n_1 n_2], \end{aligned} \quad (C.24)$$

$$J_z^2 = \frac{1}{4} (n_1 - n_2)^2. \quad (C.25)$$

Assim, obtemos

$$\begin{aligned} J^2 &= \frac{1}{4} (n_1 - n_2)^2 + \frac{1}{2} (n_1 - n_2)^2, \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) (n_1 - n_2)^2. \end{aligned} \quad (C.26)$$

Para os quatro estados possíveis do espaço de Hilbert, temos $n_1 = n_2 = 0$, $n_1 = n_2 = 1$ e os estados com apenas um bóson, $n_1 = 1, n_2 = 0$ e $n_1 = 0, n_2 = 1$. Seja $n_f = n_1 + n_2$ o número total de férmiôns, os estados $n_f = 0$ e $n_f = 2$ resultam em $J^2 = 0$. Os estados para os quais $n_f = 1$ resultam em $J^2 = \frac{1}{2} (\frac{1}{2} + 1)$. Uma vez que $J^2 = j(j+1)$, onde j é o valor do momento angular, vemos que os sub-espacos $n_f = 0$ e $n_f = 2$ geram uma representação de momento angular $j = 0$ (singleto, ou representação trivial), enquanto que o sub-espaco $n_f = 1$ gera a representação de momento angular $j = 1/2$ (dubleto), que corresponde à representação fundamental do grupo $SU(2)$.

Com isso, podemos concluir que o vínculo $n_f = 1$ fixa a representação obtida pelos geradores $B_\nu^\mu = f_\nu^\dagger f_\mu - \frac{1}{2} f_\lambda^\dagger f_\lambda$ para a RI fundamental do grupo, enquanto que os demais casos geram a RI trivial. Em outras palavras, podemos dizer que o vínculo sobre n_f determina a representação do grupo na qual estamos trabalhando; os operadores A_ν^μ por si só, satisfazem a álgebra do grupo $SU(2)$, mas apenas quando fixamos o número de n_f é que estamos fixando a representação associada a esses geradores.

Em termos físicos, o vínculo $n_f = \text{constante}$ representa uma forte correlação entre os férmiôns presentes. Em geral, essa forte correlação introduz complexidades no problema envolvido.

C.4 Caso Geral

No caso geral do grupo $SU(N)$, podemos entender que o vínculo $n_b = 1$ ou $n_f = 1$ corresponde a utilizar a base $|\mu\rangle$ do espaço de Hilbert \mathcal{H} utilizado anteriormente para construir a RI fundamental. Neste caso, os estados $|\mu\rangle$ poderiam ser obtidos através da aplicação dos operadores de criação bosônicos ou fermiônicos no estado de vácuo $|0\rangle$, como $|\mu\rangle = b_\mu^\dagger |0\rangle$ ou

$|\mu\rangle = f_\mu^\dagger |0\rangle$. Em ambos os casos, o número total de bôsons/férmions é fixado para 1, para que haja um isomorfismo entre o espaço de Hilbert \mathcal{H} e os espaços de Fock de bôsons ou férmions.

As representações com q caixas empilhadas horizontal ou verticalmente pode ser construídas por estados de q partículas rotuladas por $|\mu_1, \dots, \mu_q\rangle$. De fato, esse estado se transforma como um tensor com relação ao grupo $SU(N)$, no sentido a transformação de um estado $|\nu_1, \dots, \nu_q\rangle$ para $|\mu_1, \dots, \mu_q\rangle$ é dada por

$$|\mu_1, \dots, \mu_q\rangle = U_{\mu_1 \nu_1} \cdots U_{\mu_q \nu_q} |\nu_1, \dots, \nu_q\rangle, \quad (\text{C.27})$$

onde U é uma matriz do grupo $SU(N)$. Sendo assim, os estados $|\mu_1, \dots, \mu_q\rangle$ completamente simetrizados ou anti-simetrizados são gerados por

$$|\mu_1, \dots, \mu_q\rangle = \prod_{j=1}^q f_{\mu_j}^\dagger |0\rangle \quad \text{ou} \quad |\mu_1, \dots, \mu_q\rangle = \prod_{j=1}^q b_{\mu_j}^\dagger |0\rangle, \quad (\text{C.28})$$

de modo que o vínculo $n_b = q$ ($n_f = q$) correspondem a escolha da RI de q caixas horizontais (verticais).

C.5 Por que Trabalhamos na Representação Fundamental?

Nas seções anteriores entendemos como representações em termos de operadores bosônicos e fermiônicos geram representações do grupo $SU(N)$ e entendemos como o vínculo $n_f = q$ ou $n_b = q$ fixa a escolha de uma única RI. Também vimos que o caso especial $q = 1$ pode ser igualmente representado por bôsons ou férmions, este último correspondendo à representação fundamental do grupo. Para finalizar este apêndice, gostaríamos de discutir, em mais detalhes, o motivo de trabalharmos na representação fundamental do grupo $SU(N = 2j + 1)$.

Talvez o ponto mais importante a ser destacado seja o fato de que a escolha da representação fundamental é um vínculo físico e não matemático. Este vínculo tem sua origem na imposição de que a ocupação de cada sítio da rede de momentos magnéticos localizados é igual a 1, apresentada nos capítulos 2 a 4 na forma da equação

$$n_{if} = \sum_m f_{im}^\dagger f_{im} = 1, \quad \text{para todo sítio } i \text{ da rede.} \quad (\text{C.29})$$

Este vínculo tem sua origem em duas hipóteses, a primeira sendo a hipótese de que a energia do orbital da impureza é negativa e suficientemente grande em módulo, de modo que a ocupação do sítio da impureza por 1 elétron reduz a energia do sistema, e a segunda sendo a forte interação coulombiana $U > 0$, presente no modelo de Anderson (Eqs. 3.1 e (3.20)), que está ligada ao fato de que as funções de onda radial dos orbitais $4f^1$ e $5f^1$ são altamente concentradas perto da origem (veja Fig. 1.2), o que resulta em um custo energético muito alto para ocupações $n_{if} > 1$. Com efeito, é nesse regime que Anderson mostrou que há a formação de momentos magnéticos localizados e Schrieffer e Wolff mostraram a equivalência entre os modelos de Anderson e Kondo (veja Eq. (3.16) e a discussão em seguida).

Ocorre de que o vínculo $n_{if} = 1$ fixa a representação do grupo $SU(N)$ para a representação fundamental e, como vimos, essa pode ser representada igualmente por férmions

de Abrikosov ou bósons de Schwinger. Quando a RI é descrita em termos de bósons, a condição equivalente $n_b = 1$ nos diz que a constante r , presente no operador $\theta(r)$ da transformação de Holstein–Primakoff generalizada, é igual a 1, como afirmamos no capítulo 2.

Esperamos que a discussão apresentada tenha resaltado a importância do vínculo $n_{if} = 1$ e esclarecido a condição $r = 1$.