

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

INSTITUTO DE FÍSICA GLEB WATAGHIN

**TRANSPORTE EM SISTEMAS
UNIDIMENSIONAIS ORDENADOS**

Dissertação de Mestrado

RODRIGO GONÇALVES PEREIRA

Orientador: Eduardo Miranda

Campinas, 2004

Para meus pais

Agradecimentos

- Ao Prof. Eduardo Miranda, que, por saber sempre a hora de apoiar, de propor desafios e de atribuir responsabilidades, foi para mim o orientador ideal.
- Aos meus professores dos cursos de Pós-Graduação: Amir Caldeira, Guillermo Cabrera, Antonio Mansanares e Mário Foglio, que foram essenciais para minha formação.
- A todos os amigos que fiz na Unicamp e espero conservar pela vida afora; em especial, a André, Carlos Henrique, Chico, Daniela, Gustavo e Wendel.
- Aos meus irmãos, Bruno e Renata.
- Ao Manaus, pelas discussões proveitosas sobre Física.
- Ao Thiago, por disponibilizar a casa para muitos churrascos, inclusive o da minha defesa.
- À Fapesp e ao FAEP, pelo suporte financeiro.

Epígrafe

Toda a nossa ciência, comparada com a realidade, é primitiva e infantil – e, no entanto, é a coisa mais preciosa que temos.

Albert Einstein

Resumo

O objetivo deste trabalho é calcular propriedades de transporte de fios quânticos com ordenamento magnético ou forte interação spin-órbita. A motivação é combinar o transporte dependente do spin do elétron com as propriedades únicas dos sistemas unidimensionais, descritos pela classe de universalidade dos líquidos de Luttinger. Aplicamos as técnicas de teoria de resposta linear e grupo de renormalização para calcular a resistência associada a quatro mecanismos. No primeiro problema, construímos uma teoria de ondas de spin para flutuações em torno da configuração estática de uma parede de domínio magnético e analisamos o efeito de espalhamento inelástico por mágnons. A própria anisotropia que fixa a largura da parede é responsável por suprimir o espalhamento inelástico em baixas temperaturas. No segundo, investigamos o papel das interações eletrônicas no espalhamento elástico em paredes de domínio. Mostramos que esse sistema pode ser mapeado no problema de um líquido de Luttinger polarizado com um termo de impureza que inverte o spin do elétron. Em analogia com o problema de Kane-Fisher para uma impureza não magnética, obtemos um diagrama de fase em função dos parâmetros de interação. No terceiro problema, introduzimos um termo de acoplamento mágnon-fônon e analisamos o espalhamento entre elétrons e mágnons mediado por fônons de alta energia. Finalmente, no quarto problema, consideramos o espalhamento por impurezas não magnéticas na presença de interação spin-órbita. Para uma escolha especial do nível de Fermi, a resistência produzida pode ser controlada por um campo magnético externo.

Abstract

The purpose of this work is to calculate transport properties of quantum wires with magnetic order or strong spin-orbit interaction. The motivation is to combine electron spin-dependent transport with the unique properties of one-dimensional systems, which are described by the universality class of Luttinger liquids. We apply linear response theory and renormalization group techniques to calculate the resistance associated with four mechanisms. In the first problem, we construct a spin wave theory for fluctuations around the static configuration of a magnetic domain wall and analyze the effect of inelastic scattering off magnons. The very anisotropy that fixes the wall width is shown to suppress the inelastic scattering at low temperatures. In the second one, we investigate the role played by electronic interactions on the elastic scattering off domain walls. We show that the system can be mapped onto a polarized Luttinger liquid with an impurity term that flips the electron spin. Similarly to the Kane-Fisher problem for nonmagnetic impurities, we obtain a phase diagram as a function of the interaction parameters. In the third problem, we introduce a magnon-phonon coupling term and analyze the scattering between electrons and magnons mediated by high energy phonons. Finally, in the fourth problem, we consider the scattering off nonmagnetic impurities in the presence of spin-orbit interaction. For a special choice of the Fermi level, the resistance produced can be controlled by an external magnetic field.

Sumário

1	Introdução	1
2	Mágnons em paredes de domínio	11
2.1	Spins localizados: representação angular dos operadores	12
2.2	Configurações de equilíbrio da parede	16
2.3	Quantização dos modos normais	19
2.4	Espalhamento elástico e inelástico	24
2.5	Contribuição inelástica para a resistividade	28
3	Elétrons interagentes e paredes de domínio	39
3.1	Modelo de Luttinger	40
3.2	Bosonização do Hamiltoniano elétrons + parede	47
3.3	Diagonalização do Hamiltoniano livre	53
3.4	Grupo de Renormalização	56
3.4.1	Ação livre efetiva	57
3.4.2	Equações de fluxo e diagrama de fases	62
3.5	Cálculo perturbativo da resistividade	71
3.5.1	Frequência finita	71
3.5.2	Temperatura finita	77
4	Fônons e mágnons	83
4.1	Acoplamento elétron-fônon	84
4.2	Interação mágnon-fônon	87

<i>SUMÁRIO</i>	x
4.3 Interação efetiva elétron-mágnon	89
4.4 Cálculo perturbativo da resistividade	92
5 Impureza e interação spin-órbita	101
5.1 Esquema de bandas com interação spin-órbita	102
5.2 Potencial de uma impureza	105
5.3 Promoção do espalhamento com inversão de spin	111
6 Conclusões	119
A Autofunções dos mágnons na parede de Bloch	121
B Conservação de momento na parede de Bloch	125

Capítulo 1

Introdução

Sistemas unidimensionais oferecem um cenário interessante para o estudo de sistemas fortemente correlacionados. A razão mais imediata é de ordem pragmática: a simplicidade do espaço de fase faz com que alguns desses sistemas pertençam à rara categoria de problemas solúveis. Por exemplo, toda uma família de modelos unidimensionais com interação de curto alcance, incluindo o modelo de Heisenberg isotrópico e o modelo de Hubbard em 1D, pode ser tratada exatamente pelo ansatz de Bethe [1]. Embora a generalização dos resultados não seja trivial, o estudo desses modelos costuma apontar rumos para análises em dimensões superiores. Além disso, grande parte do interesse por sistemas unidimensionais é motivado por questões fundamentais. Esses sistemas exibem alguns dos fenômenos mais surpreendentes na área de sistemas fortemente correlacionados, como as excitações fracionárias em cadeias de spin $1/2$ e a separação spin-carga em sistemas de elétrons interagentes [2]. A bem da verdade, a Física em baixas dimensões é muito mais do que um protótipo do mundo tridimensional.

Em particular, o caso unidimensional é o caso extremo quando se considera o papel das flutuações quânticas. Em dimensões baixas, as flutuações quânticas são mais importantes e mesmo um número pequeno delas pode desfazer ordens de longo alcance. Isso é evidente, em especial, na teoria de

transições de fase. De maneira geral, a estabilidade de uma fase ordenada é ameaçada pela redução da dimensão do espaço [3]. No modelo de Ising, por exemplo, a magnetização espontânea a temperatura finita só acontece em dimensão $d > 1$; do mesmo modo, a condensação de Bose-Einstein só é possível em dimensão $d > 2$. Toda a drasticidade das flutuações em 1D é revelada pelo teorema de Landau [4] que proíbe a existência de ordem de longo alcance verdadeira a temperatura finita em sistemas unidimensionais com interação de curto alcance. A razão disso é que a estabilidade de uma fase depende da disputa entre ordem e desordem. Por um lado, a divisão do sistema em diferentes regiões, dentro das quais o parâmetro de ordem assume um valor fixo, é desfavorável do ponto de vista da energia por causa da formação de paredes de domínio. Por outro lado, a mesma divisão é favorável do ponto de vista da entropia porque aumenta o número de configurações microscópicas possíveis. No caso unidimensional, onde o custo energético de uma parede é a ligação entre poucos átomos, a tendência dominante de aumento da entropia obriga o sistema a se dividir em várias regiões com ordem de curto alcance.

A mesma simplicidade do espaço de fase que torna possíveis algumas soluções exatas exclui a aplicação de esquemas bem estabelecidos em dimensões superiores. Um exemplo é a teoria de líquidos de Fermi de Landau [5], em que o modelo de elétrons interagentes em 3D é construído perturbativamente a partir do gás de elétrons. Nessa teoria, as excitações de baixa energia correspondem a quase partículas fermiônicas com alguns parâmetros (como a massa) renormalizados em comparação com o elétron despido. A teoria de Landau descreve satisfatoriamente a maioria dos metais tridimensionais, mas o caso unidimensional parece rebelar-se contra esse esquema teórico. Os problemas se manifestam, entre outras formas, na ausência de um pólo de quase partícula devido à anulação do peso espectral [6]. Essa não é apenas uma dificuldade técnica, mas um sinal de que o gás de elétrons não é um bom ponto de partida e que as excitações no sistema de elétrons unidimensionais têm caráter essencialmente diferente. Na verdade, a ruptura da teoria

de líquidos de Fermi em 1D assinala a emergência de uma nova classe de universalidade.

A natureza das excitações de baixa energia em 1D foi revelada pela técnica de bosonização [6, 7, 8, 9, 10]. Essa técnica permite mapear os graus de liberdade dos elétrons em um modelo efetivo bosônico. O aspecto especial para essa identificação é a topologia da superfície de Fermi em 1D, definida por apenas dois pontos disjuntos (figura 1.1). Em baixas energias, é possível linearizar o espectro em torno dos pontos de Fermi e definir excitações coerentes com energia e momento bem definidos. Essas são as verdadeiras excitações do sistema de elétrons unidimensionais e estão ligadas às flutuações de densidade de carga e spin. No entanto, o que torna a bosonização uma técnica poderosa é a possibilidade de tratar exatamente interações eletrônicas do tipo “para a frente”. Isso porque o efeito da interação é apenas renormalizar as velocidades das flutuações de densidade de carga e spin, que permanecem não interagentes. O modelo em questão é chamado de modelo de Luttinger [11]. Embora seja deduzido para interações locais fracas, a conjectura de Haldane [12] estabelece que o modelo de Luttinger deve descrever o setor de baixas energias de todos os sistemas unidimensionais sem gap, definindo a classe de universalidade dos líquidos de Luttinger.

Com o advento da tecnologia de manufaturação de materiais em escala nanoscópica, os sistemas unidimensionais foram promovidos de problemas de interesse acadêmico para o status de sistemas fisicamente realizáveis. A tecnologia atual é capaz de fabricar estruturas em que uma ou mais dimensões são confinadas de tal maneira que os graus de liberdade transversais encontram-se congelados em temperaturas suficientemente baixas [13]. Em um gás de elétrons bidimensional formado em heteroestruturas semicondutoras, o movimento dos elétrons pode ser restrito a uma única dimensão por meio de constrições, dando origem aos chamados fios quânticos. Outros exemplos são os nanotubos de carbono [14] e materiais (principalmente compostos orgânicos) efetivamente unidimensionais devido à forte anisotropia e

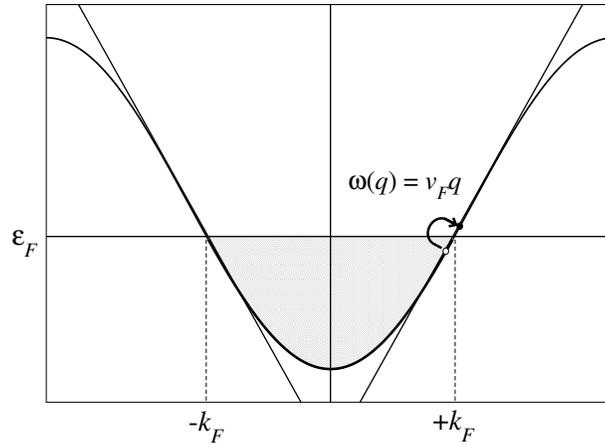


Figura 1.1: Estado fundamental do gás de elétrons em 1D e excitação partícula-buraco em torno da superfície de Fermi.

à fraca ligação entre as cadeias . Evidências de comportamento tipo líquido de Luttinger nesses sistemas têm sido apresentadas [15, 16, 17].

Uma fonte de interesse por esses sistemas é o estudo de propriedades de transporte. A crescente necessidade de miniaturização dos componentes eletrônicos tem motivado a incursão no universo de dispositivos de escala mesoscópica. Em sistemas cujo tamanho é menor do que o livre caminho médio dos elétrons, o caráter quântico dos últimos não pode ser ignorado e as leis de transporte macroscópico não são mais válidas. Um fenômeno característico do transporte mesoscópico é a quantização da condutância observada na transmissão balística através de nanocontatos e constrições em semicondutores [18]. O formalismo de Landauer-Büttiker demonstra que a condutância a temperatura zero é quantizada na forma $G = nG_0$, onde n é o número de canais de propagação e $G_0 = e^2/h \approx (25,6 \text{ k}\Omega)^{-1}$ é o quantum de condutância [19]. Para um sistema estritamente unidimensional, $n = 2$, o número de canais de spin. Além disso, segundo o modelo de Luttinger, o quantum de condutância de um sistema unidimensional deve ser modificado para $\tilde{G}_0 = Ke^2/h$, onde K é um parâmetro que depende da interação eletrônica ($K = 1$ no caso não interagente). No entanto, parece ser difícil verificar

essa previsão experimentalmente porque mostrou-se que a condutância em baixas frequências é dominada pelos contatos efetivamente não interagentes [20].

Fora do regime balístico, o espalhamento por impurezas ou possíveis excitações da rede diminui a probabilidade de transmissão e, conseqüentemente, a condutância do sistema. Também nesse caso os sistemas unidimensionais se distinguem dos análogos em dimensões superiores pelos efeitos peculiares das interações eletrônicas em 1D. Uma das assinaturas do comportamento de líquido de Luttinger é, inclusive, a dependência da condutância através de uma impureza com a temperatura. Kane e Fisher [21] mostraram que, ao contrário do que acontece com líquidos de Fermi, a condutância escala como uma lei de potência com um expoente não universal que depende dos parâmetros de interação. Para interação repulsiva entre os elétrons, o espalhamento na barreira diverge quando a temperatura diminui. A temperatura zero, mesmo uma barreira fraca é capaz de refletir os elétrons completamente e o sistema é um isolante ideal. Esse resultado pode ser interpretado em termos do espalhamento singular dos elétrons nas oscilações de densidade de carga induzidas pela presença da impureza [22]. Para interação atrativa, o fortalecimento das correlações supercondutoras dá origem à transmissão ideal em temperatura zero. A teoria também prevê leis de potência para o tunelamento de elétrons para um líquido de Luttinger e o expoente da curva de condutância pode ser usado para extrair o parâmetro de interação de um líquido de Luttinger (figura 1.2).

Paralelamente ao estudo de sistemas correlacionados em baixas dimensões, tem despontado o interesse por transporte eletrônico em estruturas magnéticas. Uma das grandes promessas tecnológicas atuais é o desenvolvimento da chamada Spintrônica, uma eletrônica que explora não só a carga mas também o spin do elétron [24]. Como exemplo, as estruturas de multicamadas magnéticas oferecem a possibilidade de controlar correntes polarizadas modificando a orientação relativa da magnetização nas camadas [25].

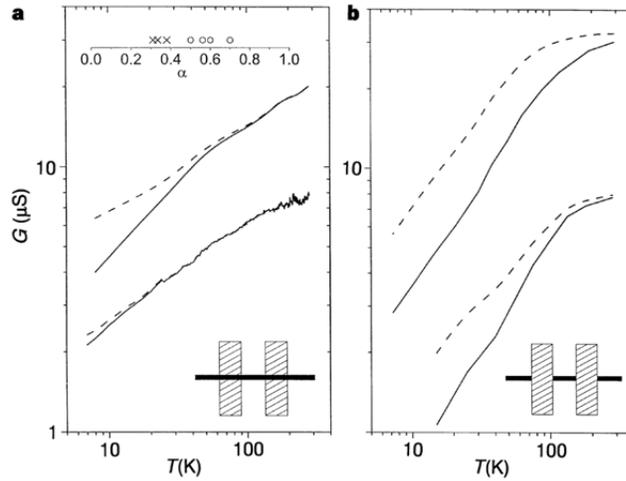


Figura 1.2: Condutância em função da temperatura para nanotubos metálicos, mostrando dependência de lei de potência característica de um líquido de Luttinger. As amostras dos gráficos **a** e **b** distinguem-se pela técnica de formação dos contatos. As curvas tracejadas representam os dados corrigidos considerando o efeito de “Coulomb blockade”. O ajuste das curvas fornece $G \propto T^\alpha$, com $\alpha \approx 0,33$ e $0,38$ para as duas amostras da esquerda (**a**) e $\alpha \approx 0,6$ para as duas amostras da direita (**b**). Figura extraída da referência [23].

Essas estruturas exibem magnetorresistência gigante (GMR), uma dependência acentuada da resistividade com o campo magnético aplicado, e têm aplicações potenciais em gravação magnética e tecnologia de sensores magnéticos. Um efeito ainda maior, a magnetorresistência colossal (CMR), foi medido em manganitas (compostos da forma $L_{1-x}A_x\text{MnO}_3$, onde L é um lantanídeo e A é um alcalino terroso) [26]. As manganitas são descritas pelo modelo da rede de Kondo com constante de troca ferromagnética, em que o mecanismo de dupla troca dá origem ao ferromagnetismo abaixo de uma temperatura crítica. Entretanto, sabe-se atualmente que a dupla troca não explica a CMR observada e é preciso considerar também o forte acoplamento com fônons na fase paramagnética [27].

Outra fonte de magnetorresistência é a presença de paredes de domí-

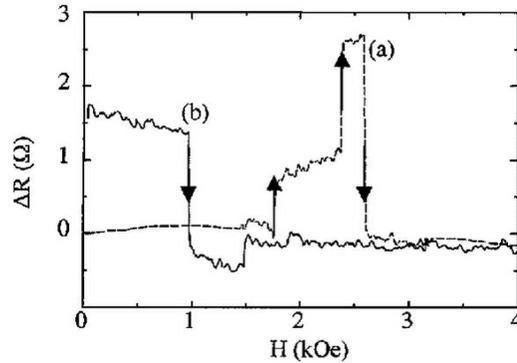


Figura 1.3: Saltos na resistência de um fio de Co de 35 nm de diâmetro em função do campo magnético aplicado. ΔR é medida a partir da resistência do monodomínio. Em (a), ocorre a nucleação sucessiva de duas paredes de domínio que são removidas para $H \approx 2,6$ kOe. Em (b), a parede de domínio presente em $H = 0$ é removida quando $H \approx 1$ kOe. Figura extraída da referência [28].

nio magnético. Experimentos de transporte em fios [28, 29] e nanocontatos [30, 31, 32] magnéticos mostram saltos na resistência do sistema quando ocorre nucleação ou remoção de paredes de domínio (figura 1.3). Cabrera e Falicov [33] foram os primeiros a calcular a contribuição de uma parede de domínio de Bloch para a resistência de um metal ferromagnético. Eles mostraram que as paredes estreitas, cuja largura λ é comparável com o comprimento de onda de de Broglie dos elétrons de condução, são capazes de espalhar significativamente os elétrons por causa da mudança brusca na direção da magnetização local. Como as paredes são removidas pela aplicação de campos magnéticos, isso explicaria a magnetorresistência negativa de alguns materiais. Embora as paredes de domínio no “bulk” sejam relativamente suaves ($\lambda \gtrsim 10$ nm), paredes de dimensões atômicas são possíveis em nanocontatos onde a largura é limitada pela geometria da constricção [34]. Também em nanocontatos, verificou-se que, embora a condutância em metais ferromagnéticos seja quantizada em múltiplos (inclusive os ímpares) de

e^2/h , a nucleação de uma parede de domínio restaura os platôs de condutância apenas em múltiplos de $2e^2/h$ [35]. Isso ocorre porque o espalhamento na parede produz um efeito aparente de recuperação da degenerescência dos canais de spin [36]. Quanto aos fios magnéticos, os resultados experimentais mostraram-se difíceis de interpretar devido ao desafio de isolar os vários mecanismos de magnetorresistência. Surgiram, inclusive, medidas de contribuições negativas para a magnetorresistência [37] e apontou-se que uma parede de domínio poderia diminuir a resistência ao destruir os efeitos de localização fraca [38]. Outra proposta foi a de que a parede produziria um aumento indireto da resistência porque mistura os canais de spin, reforçando assim o espalhamento por impurezas [39].

Uma questão pertinente é se o estudo de transporte em metais magnéticos pode ser estendido para estruturas unidimensionais, uma vez que existem teoremas que proíbem o ferromagnetismo (ordem magnética de longo alcance) em modelos unidimensionais [40, 41]. Em primeiro lugar, cada um desses teoremas baseia-se num conjunto de hipóteses específicas e não se aplica a todos os sistemas físicos. Sabe-se, por exemplo, que a rede de Kondo a $T = 0$ é uma exceção porque apresenta uma fase ferromagnética em 1D [42]. Em segundo lugar, a rede subjacente pode não ser rigorosamente unidimensional, de modo a viabilizar a ordem ferromagnética, e ainda assim o comportamento unidimensional dos elétrons será assegurado em baixas temperaturas se as dimensões transversais forem da ordem do comprimento de onda de Fermi. Por último, mesmo para sistemas estritamente unidimensionais com interação de curto alcance, mostrou-se que é possível produzir ordem de longo alcance como um estado fora do equilíbrio. Em cadeias monoatômicas de Fe ou Co depositadas sobre substrato não magnético [43, 44], a interação com o substrato induz uma forte barreira de anisotropia que, após a aplicação de um campo magnético, bloqueia os segmentos de spins numa mesma direção por um tempo de relaxação maior do que o tempo experimental. Durante esse tempo, o sistema exibe todas as propriedades de um legítimo material

ferromagnético. Nessas cadeias observaram-se ainda paredes de domínio de dimensões atômicas [45] e há evidências de comportamento de líquido de Luttinger em cadeias análogas com átomos não magnéticos [46].

Materiais magnéticos não são o único meio de explorar o spin do elétron em propriedades de transporte. Outro fenômeno a serviço da Spintrônica é o acoplamento spin-órbita que aparece em heteroestruturas semicondutoras em decorrência do campo elétrico que confina o gás de elétrons bidimensional. No limite unidimensional, o termo de acoplamento (chamado de acoplamento Rashba [47] no contexto de heteroestruturas) é equivalente a um campo magnético proporcional ao momento do elétron e dá origem a subbandas de spin separadas horizontalmente. Um aspecto interessante é que a magnitude do acoplamento Rashba pode ser controlada pelo campo elétrico (“gate”) aplicado [48]. Esse mecanismo constitui a base da proposta de um transistor de spin feita por Datta e Das [49]. Embora em geral a presença de impurezas comprometa o funcionamento de um transistor de spin, uma proposta de um transistor não balístico foi apresentada [50]. Efeitos de interação eletrônica em sistemas quase-unidimensionais com interação spin-órbita também têm sido estudados recentemente [51, 52].

O objetivo deste trabalho é combinar o transporte em fios magnéticos com as propriedades únicas dos sistemas unidimensionais. Os elementos incluídos nos modelos são vários (elétrons de condução, paredes de domínio, mágnons, fônons, impurezas) e combinados de diferentes maneiras. Em todos os problemas tratados, concentramo-nos em calcular a resistência (ou correção à condutância balística) associada a cada mecanismo de espalhamento dos elétrons usando teoria de resposta linear. A organização da tese é a seguinte. No capítulo 2, abordamos o espalhamento inelástico de elétrons pelas flutuações magnéticas quantizadas sobre a configuração de equilíbrio de uma parede de domínio magnético. No capítulo 3, estudamos os efeitos de interação eletrônica sobre o transporte através de uma parede de domínio. No capítulo 4, propomos um mecanismo de espalhamento entre elétrons de condução e

mágnons mediado por fônons de alta frequência quando os elétrons não estão acoplados diretamente à rede magnética. No capítulo 5, analisamos o espalhamento por uma impureza não magnética num fio quântico na presença de interação spin-órbita. Finalmente, o capítulo 6 apresenta as conclusões gerais do trabalho. Para os cálculos, adotamos o sistema natural $\hbar = k_B = 1$, mas recuperamos as constantes em alguns resultados importantes.

Capítulo 2

Mágnons em paredes de domínio

O espalhamento elástico dos elétrons de condução em paredes de domínio magnético é apontado como o mecanismo responsável pela magnetorresistência de fios e nanocontatos magnéticos. Esse efeito é especialmente relevante quando a magnetização *estática* da rede gira numa distância comparável com o comprimento de onda de Fermi [30, 33]. No entanto, o tratamento quântico apropriado dos spins localizados exige que se considerem também as flutuações sobre a configuração de equilíbrio da parede. Neste capítulo, quantizamos os spins localizados usando uma representação semiclássica de operadores angulares que reproduz as relações de comutação. Em seguida, consideramos em primeira ordem as flutuações e encontramos a dispersão dos mágnons. Finalmente, calculamos por teoria de perturbação a contribuição do espalhamento inelástico por esses mágnons para a resistência do sistema nos limites de parede longa e parede estreita.

2.1 Spins localizados: representação angular dos operadores

A interação entre elétrons de orbitais localizados de íons magnéticos (de spin S) pode ser descrita pelo modelo de Heisenberg

$$H_S = -J_H \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}, \quad (2.1)$$

onde \mathbf{S}_j é o operador de spin no sítio j da rede e J_H é a integral de troca que depende da superposição de orbitais em sítios vizinhos. Se $J_H > 0$, a interação favorece o alinhamento paralelo (ferromagnético) dos spins. Se $J_H < 0$, a interação favorece o alinhamento antiparalelo (antiferromagnético). Vamos tratar o caso de uma cadeia com acoplamento ferromagnético entre spins localizados.

A solução do modelo de Heisenberg isotrópico em 1D pelo Ansatz de Bethe [1] é bastante elaborada. Uma aproximação simples que permite acessar os aspectos essenciais do modelo mesmo em dimensões superiores é a teoria de ondas de spin [53, 54]. Essa teoria baseia-se em uma representação bosônica aproximada para os operadores de spin no limite de S grande. Os bósons da teoria são as flutuações de spin em torno do estado fundamental (ferromagnético), chamadas de mágnons. Entretanto, paredes de domínio podem ser formadas no estado ferromagnético clássico por minimização da energia magnetostática ou por condições de contorno da magnetização. Estamos interessados em construir uma teoria de ondas de spin sobre uma configuração estática em que a direção da magnetização gira descrevendo uma parede de domínio.

No limite clássico, a direção de magnetização do spin no sítio j é descrita por um vetor da forma

$$\mathbf{S}_j = S_c (\sin \theta_j \cos \phi_j, \sin \theta_j \sin \phi_j, \cos \theta_j),$$

onde $S_c = \sqrt{S(S+1)}$ e θ_j e ϕ_j são ângulos polares em relação a um eixo z fixo. Por analogia, escrevemos as componentes do operador de spin no sítio j como

$$S_j^x = \frac{S_c}{2} (\sin \theta_j \cos \phi_j + \cos \phi_j \sin \theta_j), \quad (2.2)$$

$$S_j^y = \frac{S_c}{2} (\sin \theta_j \sin \phi_j + \sin \phi_j \sin \theta_j), \quad (2.3)$$

$$S_j^z = S_c \cos \theta_j, \quad (2.4)$$

onde θ_j e ϕ_j devem agora ser entendidos como observáveis que não comutam entre si (daí a simetrização de S_j^x e S_j^y). Para quantizar θ_j e ϕ_j , devemos reproduzir as relações de comutação das componentes do operador \mathbf{S} , quais sejam

$$[S_j^x, S_l^y] = i\delta_{jl}S_j^z, \quad (2.5)$$

$$[S_j^y, S_l^z] = i\delta_{jl}S_j^x, \quad (2.6)$$

$$[S_j^z, S_l^x] = i\delta_{jl}S_j^y. \quad (2.7)$$

Vamos omitir por ora o índice j e calcular as relações de comutação para operadores no mesmo sítio. Temos, por exemplo,

$$[S^x, S^z] = \frac{S_c^2}{2} \{ \sin \theta [\cos \phi, \cos \theta] + [\cos \phi, \cos \theta] \sin \theta \}.$$

Se $[\phi, \cos \theta]$ for uma constante, teremos

$$[S^x, S^z] = -\frac{S_c^2}{2} \{ \sin \theta \sin \phi [\phi, \cos \theta] + \sin \phi [\phi, \cos \theta] \sin \theta \}.$$

Nesse ponto, notamos que é possível reproduzir a relação de comutação (2.7) impondo a relação fundamental

$$[\phi, \cos \theta] = \frac{i}{S_c}. \quad (2.8)$$

A Eq. (2.8) diz que ϕ e $\cos \theta$ são variáveis canonicamente conjugadas. Essa relação é compatível com o espaço de fase usado no formalismo de integrais de caminho para spin [55]. O limite clássico corresponde a $S \rightarrow \infty$. Essa mesma relação reproduz a Eq. (2.6), mas a Eq. (2.5) parece mais difícil de obter. Esta última é equivalente a

$$[S^+, S^-] = 2S^z, \quad (2.9)$$

onde, segundo as Eqs. (2.2) e (2.3),

$$S^\pm = S_x \pm iS_y = \frac{S_c}{2} (\sin \theta e^{\pm i\phi} + e^{\pm i\phi} \sin \theta) \quad (2.10)$$

são os operadores que levantam e abaixam a projeção do spin na direção z . Da Eq. (2.8), segue que $e^{-i\phi}$ é o operador que translada $\cos \theta$ de $1/S_c$ e daí

$$e^{i\phi} \cos \theta e^{-i\phi} = \cos \theta - \frac{1}{S_c}, \quad (2.11)$$

$$e^{i\phi} \sin \theta e^{-i\phi} = e^{i\phi} \sqrt{1 - \cos^2 \theta} e^{-i\phi} = \sqrt{1 - \left(\cos \theta - \frac{1}{S_c}\right)^2}. \quad (2.12)$$

Assim, obtemos

$$\begin{aligned} [S^+, S^-] &= S_c \cos \theta + \frac{S_c^2}{2} \sin \theta \\ &\times \left[\sqrt{1 - \left(\cos \theta - \frac{1}{S_c}\right)^2} - \sqrt{1 - \left(\cos \theta + \frac{1}{S_c}\right)^2} \right] \end{aligned} \quad (2.13)$$

A Eq. (2.13) pode ser expandida numa série em $1/S_c$, fornecendo

$$[S^+, S^-] = 2S_c \cos \theta \left\{ 1 + \left(\frac{1}{S_c}\right)^2 \frac{1}{4 \sin^4 \theta} + O\left(\frac{1}{S_c^4}\right) \right\}. \quad (2.14)$$

Como acontece na representação de Holstein-Primakoff [5], o comutador é

exato no limite $S \rightarrow \infty$. Note que no termo de ordem $1/S^2$ a quantização espacial implica $\langle \sin \theta \rangle \geq 1/\sqrt{S}$ e por isso a correção é sempre finita. É possível obter relações de comutação exatas usando uma representação um pouco modificada, a representação de Villain [56], mas a aproximação acima é suficiente para os nossos propósitos. Recuperando o índice de sítio, a relação de comutação fundamental é

$$[\phi_j, \cos \theta_l] = \frac{i}{S_c} \delta_{jl}. \quad (2.15)$$

Listamos a seguir outras relações úteis que podem ser demonstradas facilmente:

$$[\phi_j, \sin \theta_l] = -\frac{i}{S_c} \delta_{jl} \cot \theta_j, \quad (2.16)$$

$$[\phi_j, \sin^2 \theta_l] = -\frac{2i}{S_c} \delta_{jl} \cos \theta_j, \quad (2.17)$$

$$[\phi_j, \theta_l] = -\frac{i}{S_c} \delta_{jl} \frac{1}{\sin \theta_j}. \quad (2.18)$$

No limite contínuo, escrevemos $\theta = \theta(x)$ e $\phi = \phi(x)$. Nesse caso, as relações de comutação ficam

$$[\phi(x), \cos \theta(x')] = \frac{ia}{S_c} \delta(x - x'), \quad (2.19)$$

$$[\phi(x), \sin^2 \theta(x')] = -\frac{2ia}{S_c} \delta(x - x') \cos \theta(x), \quad (2.20)$$

$$[\phi(x), \theta(x')] = -\frac{ia}{S_c} \delta(x - x') \frac{1}{\sin \theta(x)}, \quad (2.21)$$

onde a é o parâmetro de rede da cadeia de spins.

2.2 Configurações de equilíbrio da parede

Para construir a teoria de ondas de spin, precisamos primeiro conhecer as configurações de equilíbrio de uma parede de domínio, ou seja, a magnetização não homogênea $\mathbf{S}(x)$ que minimiza a energia do sistema. Usando a definição dos ângulos polares, podemos escrever o acoplamento entre spins vizinhos como

$$\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} = S_c^2 [\sin \theta_j \sin \theta_{j+1} \cos(\phi_{j+1} - \phi_j) + \cos \theta_j \cos \theta_{j+1}]. \quad (2.22)$$

Se a magnetização gira lentamente de um sítio para outro, podemos tomar o limite contínuo $(\theta_j, \phi_j) \rightarrow (\theta(x), \phi(x))$ e expandir a Eq. (2.22) até segunda ordem em $\partial_x \theta$ e $\partial_x \phi$. Com isso, o Hamiltoniano de Heisenberg (2.1) pode ser reescrito na forma

$$H_S = -NJ_H S(S+1) + \frac{J_H S_c^2 a}{2} \int dx [(\partial_x \theta)^2 + \sin^2 \theta (\partial_x \phi)^2]. \quad (2.23)$$

O hamiltoniano clássico (2.23) não possui dinâmica. Para descrever as configurações de equilíbrio, precisamos promover θ e ϕ a operadores segundo a representação semiclássica. Além disso, usamos uma versão simetrizada do Hamiltoniano (2.23). Desse modo, a equação de movimento para θ é obtida calculando

$$i \frac{d}{dt} \cos \theta(x) = -i \sin \theta(x) \frac{d\theta(x)}{dt} = [\cos \theta(x), H_S]. \quad (2.24)$$

Usando a Eq. (2.23) e as relações de comutação (2.19), (2.20) e (2.21), encontramos

$$\frac{d\theta}{dt} = -J_H S_c a^2 (\sin \theta \partial_x^2 \phi + 2 \cos \theta \partial_x \theta \partial_x \phi). \quad (2.25)$$

A equação de movimento para ϕ é obtida diretamente de

$$\frac{d\phi(x)}{dt} = -i[\phi(x), H_S] = J_H S_c a^2 \left[\frac{\partial_x^2 \theta}{\sin \theta} - \cos \theta (\partial_x \phi)^2 \right]. \quad (2.26)$$

As soluções estáticas (com $\dot{\theta} = \dot{\phi} = 0$) satisfazem

$$\sin \theta \partial_x^2 \phi + 2 \cos \theta \partial_x \theta \partial_x \phi = 0, \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial_x^2 \theta}{\sin \theta} - \cos \theta (\partial_x \phi)^2 = 0. \quad (2.28)$$

Por simplicidade, vamos considerar apenas paredes em que a magnetização gira sobre um plano fixo. Nas paredes de Bloch, o spin gira no plano perpendicular ao plano de magnetização inicial, enquanto nas paredes de Néel o spin gira no plano da magnetização [57]. Em ambos os casos, $\partial_x \phi = 0$ e a Eq. (2.28) se reduz a $\partial_x^2 \theta = 0$. Se, por condições de contorno, a magnetização é oposta nas duas extremidades do sistema ($\theta(-L/2) = 0$, $\theta(L/2) = \pi$, nas chamadas paredes de 180°), a solução é

$$\theta_0(x) = \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{L}x. \quad (2.29)$$

Nesse caso, a direção de magnetização gira uniformemente e todo o sistema constitui uma parede de domínio. A energia magnética do sistema é

$$E_0 = -N J_H S(S+1) + \frac{\pi^2 J_H S(S+1)}{2} \left(\frac{a}{L} \right). \quad (2.30)$$

O resultado da Eq. (2.29) só faz sentido para sistemas finitos. É possível fixar uma parede de domínio no limite termodinâmico introduzindo no Hamiltoniano (2.1) o termo de anisotropia

$$H_A = -J_A \sum_j (S_j^z)^2. \quad (2.31)$$

Para $J_A > 0$, o termo H_A favorece o alinhamento na direção z , que é um

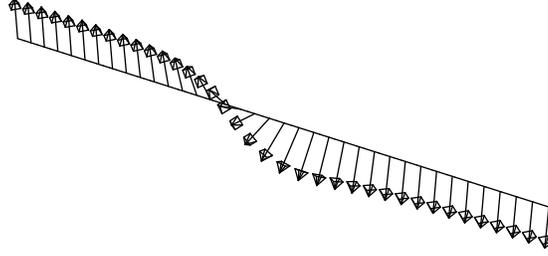


Figura 2.1: Parede de domínio de Bloch no sistema com anisotropia finita.

eixo fácil para a magnetização [57]. Em termos dos operadores angulares, o Hamiltoniano $H = H_S + H_A$ é

$$H = -NJ_H S_c^2 + \frac{J_H S_c^2 a}{2} \int dx \{ (\partial_x \theta)^2 + \sin^2 \theta (\partial_x \phi)^2 - 2\delta \cos^2 \theta \}, \quad (2.32)$$

onde $\delta \equiv J_A/J_H a^2$. A equação de movimento de θ não muda pela introdução de H_A . Já a equação de ϕ fica

$$\frac{d\phi}{dt} = J_H S_c a^2 \left[\frac{\partial_x^2 \theta}{\sin \theta} - \cos \theta (\partial_x \phi)^2 - 2\delta \cos \theta \right]. \quad (2.33)$$

A solução estática com $\partial_x \phi = 0$ satisfaz

$$\partial_x^2 \theta = \delta \sin 2\theta. \quad (2.34)$$

É fácil verificar que a solução da Eq. (2.34) com $\theta(-L/2) = 0$ e $\theta(L/2) = \pi$ é

$$\cos \theta_0(x) = -\tanh \frac{x - x_0}{\lambda}, \quad (2.35)$$

onde $\lambda = 1/\sqrt{2\delta}$ é a largura da parede centrada em x_0 . Por simplicidade, escolhe-se $x_0 = 0$. Vamos nos referir a essa parede como parede de domínio de Bloch (figura 2.1) [58]. Observe que, quanto maior a anisotropia J_A , menor

a largura da parede. A energia do sistema estático nesse caso é

$$E'_0 = -NJ_H S(S+1) - NJ_A S(S+1) + 2J_H S(S+1) \frac{a}{\lambda}. \quad (2.36)$$

Outra relação importante é

$$\partial_x \theta_0(x) = \frac{1}{\lambda} \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda} = \frac{1}{\lambda} \sin \theta_0(x), \quad (2.37)$$

que mostra que a derivada de $\theta_0(x)$ é uma função localizada de largura λ .

2.3 Quantização dos modos normais

Vamos considerar a seguir pequenas flutuações dos spins sobre a configuração de equilíbrio da parede. Expandimos

$$\theta = \theta_0 + \xi, \quad (2.38)$$

$$\phi = \phi_0 + \frac{\eta}{\sin \theta_0}, \quad (2.39)$$

onde $\phi_0 = cte$, $\theta_0(x)$ é a função definida pela Eq. (2.29) ou (2.35) e ξ e η são operadores. Da Eq. (2.21) obtemos a relação de comutação canônica

$$[\xi(x), \eta(x')] = \frac{ia}{S_c} \delta(x - x'). \quad (2.40)$$

Tratamos primeiro o caso sem anisotropia (rotação uniforme). O Hamiltoniano (2.23) fica

$$H_S = E_0 + \frac{J_H S^2 a}{2} \int dx \{ (\partial_x \xi)^2 + (\partial_x \eta)^2 - (\partial_x \theta_0)^2 \eta^2 \}. \quad (2.41)$$

É conveniente passar para o espaço de Fourier definindo

$$\xi(x) = \sqrt{\frac{a}{S_c L}} \sum_p \xi_p e^{ipx}, \quad (2.42)$$

$$\eta(x) = \sqrt{\frac{a}{S_c L}} \sum_p \eta_p^\dagger e^{ipx}, \quad (2.43)$$

onde ξ_p e η_p satisfazem

$$[\xi_k, \eta_p] = i\delta_{kp}. \quad (2.44)$$

As flutuações ξ_p e η_p atuam como coordenada e momento conjugados; além disso, o Hamiltoniano (2.41) é quadrático nessas variáveis

$$H_S = E_0 + \frac{J_H S a^2}{2} \sum_p (p^2 - \alpha^2) \left\{ \eta_p^\dagger \eta_p + \frac{p^2}{p^2 - \alpha^2} \xi_p^\dagger \xi_p \right\}, \quad (2.45)$$

onde $\alpha = \partial_x \theta_0 = \pi/L$. Por isso, definimos operadores de aniquilação para cada modo normal

$$a_p = \sqrt{\frac{w_p}{2}} \left(\xi_p + i \frac{\eta_p^\dagger}{w_p} \right), \quad (2.46)$$

onde $w_p \equiv |p|/\sqrt{p^2 - \alpha^2}$ e os operadores satisfazem as relações de comutação bosônicas

$$[a_k, a_p] = [a_k^\dagger, a_p^\dagger] = 0, \quad (2.47)$$

$$[a_k, a_p^\dagger] = \delta_{kp}. \quad (2.48)$$

Com isso, podemos escrever

$$H_S = E_0 + \sum_p \omega(p) \left(a_p^\dagger a_p + \frac{1}{2} \right), \quad (2.49)$$

onde $\omega(p)$ é a dispersão dos mágnons dada por

$$\omega(p) = J_H S_c a^2 |p| \sqrt{p^2 - \alpha^2}. \quad (2.50)$$

Impondo condições de contorno periódicas para $\xi(x)$ e $\zeta(x)$, os p 's permitidos são $p_n = 2n\pi/L$, com n inteiro. Como $|p| \geq \alpha = \pi/L$ (exceto o modo zero, que tem energia nula), garantimos que os mágnons têm energia não negativa. É interessante notar que as outras possíveis soluções com $\alpha = 3\pi/L, 5\pi/L, \dots$, que também satisfazem as condições de contorno, mas levam a mágnons com $\omega(p)$ imaginária, são instáveis porque decaem para a de energia E_0 mínima com $\alpha = \pi/L$. Além disso, se tomarmos $\alpha = 0$ no caso de magnetização uniforme (sem parede de domínio) ou se considerarmos apenas modos rápidos sobre a parede ($p \gg \alpha$), recuperamos a dispersão quadrática usual

$$\omega(p) = J_H S_c a^2 p^2. \quad (2.51)$$

Para o caso de anisotropia finita, usamos a mesma expansão das Eqs. (2.38) e (2.39) e encontramos

$$H_S + H_A = E'_0 + \frac{J_H S_c^2 a}{2} \int dx \{(\partial_x \xi)^2 + V(x)\xi^2 + (\partial_x \eta)^2 + V(x)\eta^2\}, \quad (2.52)$$

onde

$$V(x) = 2\delta \cos 2\theta_0 = \frac{1}{\lambda^2} \left[\tanh^2 \left(\frac{x}{\lambda} \right) - \operatorname{sech}^2 \left(\frac{x}{\lambda} \right) \right]. \quad (2.53)$$

Para diagonalizar $H_S + H_A$, devemos procurar pela solução do problema de autovalor

$$(-\partial_x^2 + V(x)) \varphi_p(x) = w'_p \varphi_p(x). \quad (2.54)$$

A Eq. (2.54) tem a forma de uma equação de Schrödinger para mágnons sujeitos ao potencial $V(x)$ (figura 2.2). As autofunções da Eq. (2.54) devem ser ortogonais

$$\int dx \varphi_k^*(x) \varphi_p(x) = \delta_{kp}. \quad (2.55)$$

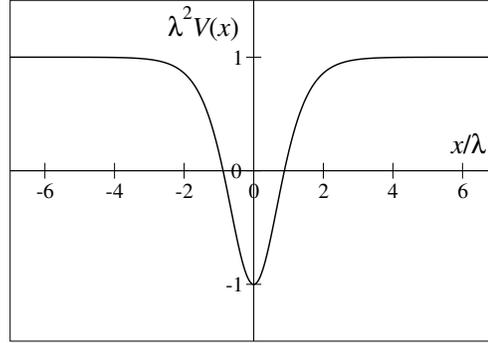


Figura 2.2: Potencial que atua sobre os mágnons na parede de domínio de Bloch.

Conhecendo as funções $\varphi_p(x)$, podemos expandir

$$\xi(x) = \sqrt{\frac{a}{S_c}} \sum_p \xi_p \varphi_p(x), \quad (2.56)$$

$$\eta(x) = \sqrt{\frac{a}{S_c}} \sum_p \eta_p^\dagger \varphi_p(x) \quad (2.57)$$

e reescrever o Hamiltoniano (2.52) em termos dos modos normais

$$H_S + H_A = E'_0 + \frac{J_H S_c a^2}{2} \sum_p w'_p \{ \xi_p^\dagger \xi_p + \eta_p^\dagger \eta_p \}. \quad (2.58)$$

Em seguida, definimos o operador de aniquilação

$$a_p = \frac{1}{\sqrt{2}} (\xi_p + i\eta_p^\dagger) \quad (2.59)$$

para obter

$$H_S + H_A = E'_0 + \sum_p \omega(p) \left(a_p^\dagger a_p + \frac{1}{2} \right), \quad (2.60)$$

onde a dispersão dos mágnons é

$$\omega(p) = J_H S_c a^2 w'_p. \quad (2.61)$$

As soluções da equação diferencial (2.54) são conhecidas (veja o apêndice A ou a Ref. [59]). Há um estado ligado com $w'_p = 0$ dado por

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \operatorname{sech}\left(\frac{x}{\lambda}\right), \quad (2.62)$$

que corresponde ao modo de translação livre da parede (conseqüência da invariância translacional). Há também autoestados de espalhamento para $w'_p > V(\pm\infty) = \lambda^{-2}$, cujas autofunções são dadas por

$$\varphi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{1 + i \tanh(x/\lambda)/p\lambda}{1 + i/p\lambda} e^{ipx}, \quad (2.63)$$

onde os p 's permitidos no sistema finito de comprimento L são as raízes da equação

$$p_n = \frac{2n\pi}{L} - \frac{1}{L} \tan^{-1}\left(\frac{2p_n/\lambda}{p_n^2 - 1/\lambda^2}\right). \quad (2.64)$$

Os autovalores são da forma $w'_p = \lambda^{-2} + p^2$, o que fornece a dispersão

$$\omega(p) = E_g + J_H S_c a^2 p^2, \quad (2.65)$$

onde E_g é o gap no espectro de mágnons decorrente da anisotropia

$$E_g = J_H S_c \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 = 2J_A S_c. \quad (2.66)$$

O espectro de mágnons sobre uma parede de domínio de Bloch foi descrito originalmente na Ref. [60], onde foi aplicado ao estudo da ressonância magnética nuclear na parede.

Podemos enfim expressar os operadores de spin em primeira ordem nas

flutuações. Para uma rotação no plano yz (perpendicular à direção x da cadeia), $\theta_0 = \theta_0(x)$ e $\phi_0 = \pi/2$. Obtemos

$$S^\pm = \pm iS_c \sin \theta_0 - S_c \eta \pm iS_c \cos \theta_0 \xi, \quad (2.67)$$

$$S^z = S_c \cos \theta_0 - S_c \sin \theta_0 \xi. \quad (2.68)$$

2.4 Espalhamento elástico e inelástico

A interação entre elétrons de condução e uma rede de spins ferromagnéticos é descrita pelo modelo

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - J_K \sum_{i\alpha\beta} \mathbf{S}_i \cdot c_{i\alpha}^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{i\beta} - J_H \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}, \quad (2.69)$$

onde $c_{k\sigma}$ é o operador de aniquilação dos elétrons de momento k e spin σ , $c_{i\alpha}$ é operador de aniquilação dos elétrons no sítio i com spin α , J_K é o acoplamento Kondo, $\vec{\sigma}$ é vetor cujas componentes são as matrizes de Pauli e $J_H > 0$ é o acoplamento de troca entre os spins localizados. Os operadores de criação e aniquilação dos elétrons satisfazem as relações de anticomutação

$$\{c_{k\sigma}, c_{p\sigma'}\} = \{c_{k\sigma}^\dagger, c_{p\sigma'}^\dagger\} = 0, \quad (2.70)$$

$$\{c_{k\sigma}, c_{p\sigma'}^\dagger\} = \delta_{kp} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (2.71)$$

e analogamente para $c_{i\alpha}$. Para elétrons na rede, $\epsilon_k = -2t \cos(ka)$, onde t é o parâmetro de “hopping”. O Hamiltoniano em questão é às vezes chamado de modelo de Kondo-Heisenberg. Vamos considerar elétrons livres e adotar a dispersão quadrática $\epsilon_k = k^2/2m$, onde m é a massa do elétron. Além disso, adotaremos a representação semi-clássica das Eqs. (2.67) e (2.68) para os operadores de spin. Queremos, com isso, obter um termo de espalhamento elétron-mágnon em primeira ordem nas flutuações. Como esse processo deve envolver a emissão ou absorção de um mágnon, ele não conserva a energia do

elétron e o espalhamento é dito inelástico. Para o caso da parede de Bloch, fica implícito que adicionamos ao Hamiltoniano (2.69) o termo de anisotropia (2.31).

O sistema de elétrons e mágnons sem interação mútua é descrito pelo Hamiltoniano

$$H_0 = \sum_k \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_p \omega(p) a_p^\dagger a_p. \quad (2.72)$$

A interação entre os dois subsistemas vem do acoplamento Kondo na Eq. (2.69), que no limite contínuo pode ser escrito como

$$H_K = -J_K \int dx \mathbf{S}(x) \cdot \psi^\dagger(x) \vec{\sigma} \psi(x), \quad (2.73)$$

onde $\psi_\sigma(x)$ é operador de campo dos elétrons e $\psi^\dagger \vec{\sigma} \psi \equiv \sum_{\alpha\beta} \psi_\alpha^\dagger \vec{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_\beta$.

Seguindo a Ref. [30], aplicamos uma transformação de calibre que alinha o spin dos elétrons de condução com a direção da magnetização local $\mathbf{S}(x)$ definida pelo ângulo polar $\theta(x)$. Essa transformação equivale a uma rotação de $\theta(x)$ em torno do eixo x e é realizada pelo operador unitário

$$U = \exp \left\{ i \int dx \theta(x) s^x(x) \right\} = \exp \left\{ \frac{i}{2} \int dx \theta(x) \left[\psi_\uparrow^\dagger \psi_\downarrow + \psi_\downarrow^\dagger \psi_\uparrow \right] \right\}, \quad (2.74)$$

onde denotamos por $\mathbf{s}(x) = \frac{1}{2} \psi^\dagger(x) \vec{\sigma} \psi(x)$ o operador densidade de spin dos elétrons de condução. As componentes do operador de spin transformado $\tilde{\mathbf{s}} = U^\dagger \mathbf{s} U$ são

$$\begin{aligned} \tilde{s}^x &= s^x, \\ \tilde{s}^y &= \cos \theta s^y + \sin \theta s^z, \\ \tilde{s}^z &= -\sin \theta s^y + \cos \theta s^z. \end{aligned}$$

Usando (2.67) e (2.68), temos que a transformação do Hamiltoniano (2.69)

conduz a

$$\tilde{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + H_w + \sum_p \omega(p) a_p^\dagger a_p + H_{inel} + cte, \quad (2.75)$$

onde $\epsilon_{k\sigma} = \epsilon_k - \sigma J_K S_c$ é a nova dispersão das bandas de spin não degeneradas. O índice de spin $\sigma = +$ ou \uparrow ($\sigma = -$ ou \downarrow) refere-se a elétrons com spin paralelo (antiparalelo) à direção da magnetização local. Com a separação das bandas, a superfície de Fermi define dois vetores de onda: $k_{F\uparrow}$ para a banda $\sigma = +$ e $k_{F\downarrow}$ para a banda $\sigma = -$, tais que

$$\epsilon_F = \frac{k_{F\uparrow}^2}{2m} - \Delta = \frac{k_{F\downarrow}^2}{2m} + \Delta, \quad (2.76)$$

onde $\Delta \equiv J_K S$. H_w é o termo de espalhamento elástico na parede, dado por

$$H_w = \frac{1}{2m} \frac{1}{L} \sum_{kq} \left[\left(k + \frac{q}{2} \right) A_q c_{k+q}^\dagger \sigma_x c_k + \frac{1}{4L} \sum_p A_p A_{-p+q} c_{k+q}^\dagger c_k \right], \quad (2.77)$$

onde

$$A_q = \int dx e^{-iqx} \partial_x \theta_0(x) \quad (2.78)$$

é o parâmetro pequeno do espalhamento. Para a parede de Bloch (Eq. (2.37)), $A_q = \pi / \cosh(\pi q \lambda / 2)$. Observe que A_q diminui com o aumento da largura λ da parede. Um cálculo de resposta linear (perturbação em torno do limite adiabático) fornece a resistência devida ao espalhamento elástico numa parede de domínio de Bloch [30]

$$R_{el} = \frac{h}{e^2} \frac{\pi^2}{4} \frac{\zeta^2}{1 - \zeta^2} F(\zeta, \lambda), \quad (2.79)$$

onde

$$\zeta = \frac{k_{F\uparrow} - k_{F\downarrow}}{k_{F\uparrow} + k_{F\downarrow}} \quad (2.80)$$

é uma medida da diferença na densidade de estados entre spins majoritários

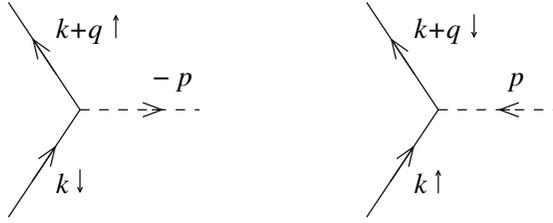


Figura 2.3: Espalhamento elétron-mágnon.

e minoritários e

$$F(\zeta, \lambda) = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\cosh^2 \pi k_F \lambda} + \frac{1}{\cosh^2 \pi \zeta k_F \lambda} \right], \quad (2.81)$$

com $k_F = (k_{F\uparrow} + k_{F\downarrow})/2$. Por causa da função $F(\zeta, \lambda)$, R_{el} cai rapidamente para $k_F \lambda \gtrsim 1$.

O termo de espalhamento inelástico (primeira ordem nas flutuações) é dado por

$$H_{inel} = -iJ_K \sqrt{\frac{2aS_c}{L}} \sum_{kpq} M_{pq} \left(c_{k+q\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} a_p - c_{k+q\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} a_{-p}^\dagger \right), \quad (2.82)$$

onde definimos o fator

$$M_{pq} \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \int dx e^{-iqx} \varphi_p(x). \quad (2.83)$$

Os processos elementares descritos por (2.82) são mostrados na figura 2.3. No primeiro processo, um elétron que entra com momento k e spin “down” emite um mágnon de momento $-p$ e sai com momento $k+q$ e spin “up”. No segundo, um elétron de momento k e spin “up” absorve um mágnon de momento p e sai com momento $k+q$ e spin “down”. Como o mágnon carrega spin -1 (diminui de 1 a projeção do spin localizado), o spin total é conservado. Note que o momento total só é conservado se $M_{pq} \propto \delta_{pq}$, mas essa condição depende das autofunções φ_p dos mágnons e não é verdade em geral. Para o

caso da parede com rotação uniforme, as autofunções são ondas planas (veja as Eqs. (2.42) e (2.43)) e por isso $M_{pq} = \delta_{pq}$. Curiosamente, o momento também é conservado no caso da parede de Bloch, em que os mágnons estão sujeitos ao potencial da Eq. (2.53). Neste caso podemos provar (veja o apêndice B) que no limite termodinâmico

$$M_{pq} = \frac{\delta_{pq}}{1 + i/p\lambda}. \quad (2.84)$$

2.5 Contribuição inelástica para a resistividade

Além do espalhamento elástico na parede de domínio, encontramos outra fonte de resistência elétrica para o sistema, que é o termo de espalhamento inelástico da Eq. (2.82). A correção da condutividade devida a este termo pode ser calculada usando teoria de resposta linear. O procedimento tradicional é aplicar a fórmula de Kubo [61]

$$\sigma(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{i}{\omega} \langle\langle J; J \rangle\rangle_{\omega+i\eta}, \quad (2.85)$$

que expressa a condutividade elétrica $\sigma(\omega)$ em termos da função de correlação retardada corrente-corrente

$$\langle\langle J; J \rangle\rangle_{\omega+i\eta} = -\frac{i}{L} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)t} \theta(t) \langle [J(t), J(0)] \rangle, \quad (2.86)$$

onde $\eta \rightarrow 0^+$ e $J(t) = e^{iHt} J(0) e^{-iHt}$ é o operador corrente total na versão de Heisenberg

$$J(t) = \frac{e}{m} \sum_{k\sigma} k c_{k\sigma}^\dagger(t) c_{k\sigma}(t). \quad (2.87)$$

Entretanto, quando o sistema não perturbado é um condutor perfeito (com condutividade infinita), o cálculo dos diagramas de ordem mais baixa na perturbação costuma apresentar divergências indesejadas. Para contornar esse

problema, faz-se necessário ressomar os diagramas introduzindo as chamadas correções de vértice. Ao invés de adotar esse procedimento, preferimos aplicar o formalismo de função memória ou fórmula de Mori, que é análogo a transferir o cálculo dos propagadores para o cálculo da auto-energia. Esse formalismo fornece uma fórmula para a *resistividade* em termos da correlação força-força

$$\rho(\omega) = - \left(\frac{m}{ne^2} \right)^2 \frac{1}{\omega} \text{Im} \left[\langle \langle \dot{J}; \dot{J} \rangle \rangle_{\omega+i\eta} - \langle \langle \dot{J}; \dot{J} \rangle \rangle_0 \right], \quad (2.88)$$

onde $n = 2k_F/\pi$ é a densidade eletrônica média e $\dot{J} = -i[J, H]$ é a derivada temporal do operador corrente. Para uma dedução completa da Eq. (2.88), consulte a Ref. [62]. Um teste imediato dessa fórmula é que, no caso do sistema não perturbado, a corrente total é uma constante de movimento ($[J, H] = 0$) e, conseqüentemente, a resistividade é nula.

Vamos calcular a resistividade devida ao espalhamento inelástico de mágnons a temperatura finita. Um fato importante é que a função de correlação retardada na Eq. (2.88) pode ser obtida da função de correlação térmica

$$\langle \langle \dot{J}; \dot{J} \rangle \rangle_{i\omega_l} = -\frac{1}{L} \int_0^\beta dt e^{i\omega_l \tau} \langle T_\tau \dot{J}(\tau) \dot{J}(0) \rangle, \quad (2.89)$$

onde $\beta = T^{-1}$ é o inverso da temperatura, $\omega_l = 2l\pi/\beta$, $l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, são as frequências de Matsubara bosônicas e T_τ denota o ordenamento temporal com relação ao tempo imaginário τ . Conhecendo-se a correlação térmica, a correlação retardada é obtida pela continuação analítica $i\omega_l \rightarrow \omega + i\eta$.

Como o Hamiltoniano (2.75) foi transformado pela transformação de gauge (2.74), devemos usar da mesma forma a versão transformada do operador corrente, dada por

$$\tilde{J} = \frac{e}{m} \sum_k \left(k c_k^\dagger c_k + \frac{1}{2L} \sum_q A_q c_{k+q}^\dagger \sigma_x c_q \right). \quad (2.90)$$

Entretanto, já que queremos apenas a resistividade devida ao espalhamento inelástico, desprezamos termos em A_q e calculamos

$$\dot{J} = -i [J, H_{inel}] = -\frac{e\Delta}{m} \sqrt{\frac{2a}{S_c L}} \sum_{kpq} q M_{pq} \left(c_{k+q\downarrow}^\dagger c_{k\uparrow} a_p - c_{k+q\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow} a_{-p}^\dagger \right). \quad (2.91)$$

Substituindo a Eq. (2.91) na Eq. (2.89), obtemos

$$\begin{aligned} \langle\langle J; J \rangle\rangle_{i\omega_l} &= \frac{2a}{S_c L^2} \left(\frac{e\Delta}{m} \right)^2 \sum_{kpq} q^2 |M_{pq}|^2 \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} \\ &\times \{ \mathcal{G}_{k+q\downarrow}(\tau) \mathcal{G}_{k\uparrow}(-\tau) \mathcal{D}_p(-\tau) + \\ &\quad \mathcal{G}_{k+q\uparrow}(\tau) \mathcal{G}_{k\downarrow}(-\tau) \mathcal{D}_{-p}(\tau) \}, \end{aligned} \quad (2.92)$$

onde $\mathcal{G}_{k\sigma}(\tau) = -\langle T_\tau c_{k\sigma}(\tau) c_{k\sigma}^\dagger(0) \rangle$ é a função de Green térmica dos elétrons não interagentes (Ref. [5]) e $\mathcal{D}_p(\tau) \equiv -\langle T_\tau a_p(\tau) a_p^\dagger(0) \rangle$ é a função de Green dos mágnons, que pode também ser escrita como

$$\mathcal{D}_p(\tau) = -\theta(\tau) [n_B(\omega_p) + 1] e^{-\omega_p \tau} - \theta(-\tau) n_B(\omega_p) e^{-\omega(p)\tau}, \quad (2.93)$$

onde $\omega_p = \omega(p)$ e

$$n_B(\omega) = \langle a_p^\dagger a_p \rangle = \frac{1}{e^{\beta\omega} - 1} \quad (2.94)$$

é a distribuição de Bose-Einstein. As integrais da Eq. (2.92) correspondem aos diagramas de Feynman da figura 2.4. Há um diagrama de emissão de um mágnon (mágnon emitido em $t = 0$ que se propaga para o futuro) e um diagrama de absorção de um mágnon (emitido em $t = \tau$ e propagando-se para o passado).

A transformada de Fourier em frequência é definida por

$$\mathcal{D}_p(\tau) = T \sum_m \mathcal{D}_{pm} e^{-i\omega_m \tau}, \quad (2.95)$$

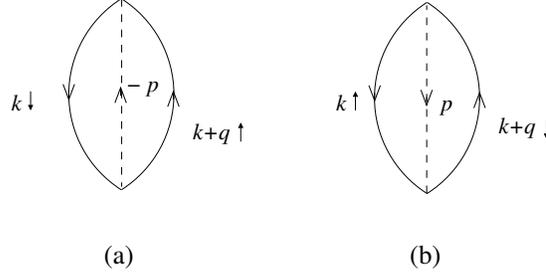


Figura 2.4: Diagramas para cálculo da resposta linear. (a) Emissão de mágnon. (b) Absorção de mágnon.

onde as ω_m são freqüências bosônicas. Invertendo a Eq. (2.95), temos

$$\mathcal{D}_{pm} = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{+\beta} d\tau e^{i\omega_m \tau} \mathcal{D}_p(\tau) = \frac{1}{i\omega_m - \omega_p}. \quad (2.96)$$

Do mesmo modo, para os elétrons, temos

$$\mathcal{G}_{kj\sigma} = \frac{1}{i\omega_j - \epsilon_{k\sigma}}, \quad (2.97)$$

onde $\omega_j = (2j + 1)\pi/\beta$, $j = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, são freqüências de Matsubara fermiônicas e as energias $\epsilon_{k\sigma}$ são medidas a partir do potencial químico.

Integrando sobre τ na Eq. (2.92), obtemos

$$\begin{aligned} \langle\langle j; j \rangle\rangle_{i\omega_l} &= \frac{2a}{S_c L^2} \left(\frac{e\Delta}{m} \right)^2 \sum_{kpq} q^2 |M_{pq}|^2 T^2 \times \\ &\times \sum_{jm} (\mathcal{G}_{k+q, j+l-m, \downarrow} \mathcal{G}_{kj\uparrow} \mathcal{D}_{pm}^* \quad (2.98) \\ &+ \mathcal{G}_{k+q, j+l-m, \uparrow} \mathcal{G}_{kj\downarrow} \mathcal{D}_{pm}). \quad (2.99) \end{aligned}$$

Para calcular as somas de Matsubara, usamos (Ref. [5])

$$T \sum_j F(i\omega_j) = \sum_{z_i} \frac{\text{Res}(z_i)}{e^{\beta z_i} + 1}, \quad \text{para } \omega_j = \frac{(2j + 1)\pi}{\beta}, \quad (2.100)$$

$$T \sum_m F(i\omega_m) = - \sum_{z_i} \frac{\text{Res}(z_i)}{e^{\beta z_i} - 1}, \quad \text{para } \omega_m = \frac{2m\pi}{\beta}, \quad (2.101)$$

onde z_i são os polos de $F(z)$. Obtemos assim

$$\begin{aligned} \langle\langle J; J \rangle\rangle_{i\omega_l} &= \frac{2\pi a}{S_c L^2} \left(\frac{e\Delta}{m} \right)^2 \sum_{kpq} q^2 |M_{pq}|^2 \{ [n_F(\epsilon_{k\uparrow}) - n_F(\epsilon_{k+q\downarrow})] \\ &\times \frac{n_B(-\omega(p)) - n_B(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k+q\downarrow})}{\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k+q\downarrow} + \omega_p + i\omega_l} \\ &+ [n_F(\epsilon_{k\downarrow}) - n_F(\epsilon_{k+q\uparrow})] \\ &\times \frac{n_B(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k+q\uparrow}) - n_B(\omega_p)}{\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k+q\uparrow} - \omega_p + i\omega_l} \}, \end{aligned} \quad (2.102)$$

onde

$$n_F(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta\epsilon} + 1} \quad (2.103)$$

é a distribuição de Fermi-Dirac. Nesse ponto, usamos a continuação analítica para a função de correlação retardada $i\omega_l \rightarrow \omega + i\eta$ e obtemos para $C = \text{Im} \langle\langle J; J \rangle\rangle_{\omega+i\eta}$

$$\begin{aligned} C &= - \frac{2\pi a}{S_c L^2} \left(\frac{e\Delta}{m} \right)^2 \sum_{kpq} q^2 |M_{pq}|^2 \{ [n_F(\epsilon_{k\uparrow}) - n_F(\epsilon_{k+q\downarrow})] \\ &\times [n_B(-\omega_p) - n_B(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k+q\downarrow})] \delta(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k+q\downarrow} + \omega_p + \omega) \\ &+ [n_F(\epsilon_{k\downarrow}) - n_F(\epsilon_{k+q\uparrow})] [n_B(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k+q\uparrow}) - n_B(\omega_p)] \\ &\times \delta(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k+q\uparrow} - \omega_p + \omega) \}. \end{aligned} \quad (2.104)$$

Usando a Eq. (2.88), obtemos no limite $\omega \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \rho(T) &= \frac{2\pi a}{S_c L^2} \left(\frac{\Delta}{ne} \right)^2 \sum_{kpq} q^2 |M_{pq}|^2 \left[- \frac{\partial n_B}{\partial \omega} \Big|_{\omega_p} \right] \\ &\times \{ \delta(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k+q\downarrow} + \omega(p)) [n_F(\epsilon_{k\uparrow}) - n_F(\epsilon_{k+q\downarrow})] \\ &- \delta(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k+q\uparrow} - \omega(p)) [n_F(\epsilon_{k\downarrow}) - n_F(\epsilon_{k+q\uparrow})] \}, \end{aligned} \quad (2.105)$$

onde

$$-\left. \frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right|_{\omega_p} = \frac{\beta e^{\beta \omega_p}}{[e^{\beta \omega_p} - 1]^2}, \quad (2.106)$$

que é $\sim \beta e^{-\beta \omega_p}$ e cai rapidamente para $\omega_p > T$. Usando a condição de conservação de momento $M_{pq} = M_{pp} \delta_{pq}$ e tomando o limite termodinâmico, reescrevemos a Eq. (2.105) como

$$\begin{aligned} \rho(T) = & \frac{a}{2\pi S_c} \left(\frac{\Delta}{ne} \right)^2 \int dk \int dp p^2 |M_{pp}|^2 \left[-\left. \frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right|_{\omega_p} \right] \\ & \times \{ \delta(\epsilon_{k\uparrow} - \epsilon_{k+p\downarrow} + \omega_p) [n_F(\epsilon_{k\uparrow}) - n_F(\epsilon_{k+p\downarrow})] \\ & - \delta(\epsilon_{k\downarrow} - \epsilon_{k+p\uparrow} - \omega_p) [n_F(\epsilon_{k\downarrow}) - n_F(\epsilon_{k+p\uparrow})] \}. \end{aligned} \quad (2.107)$$

Os fatores da forma $n_F(\epsilon_i) - n_F(\epsilon_f)$ na Eq. (2.107) podem ser escritos como

$$n_F(\epsilon_i) [1 - n_F(\epsilon_f)] - n_F(\epsilon_f) [1 - n_F(\epsilon_i)],$$

que reconhecemos como a diferença entre a taxa de transição de i para f e a taxa de transição no sentido contrário, cada uma delas proporcional à ocupação do estado inicial e à desocupação do estado final. Note também que as funções delta de Dirac expressam a conservação de energia total no espalhamento. Podemos usá-las para eliminar a integração no momento eletrônico k . Obtemos

$$\begin{aligned} \rho(T) = & \frac{ma}{2\pi S_c} \left(\frac{\Delta}{ne} \right)^2 \int dp |p| \left(-\left. \frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right) \right|_{\omega_p} \\ & \times [n_F(\epsilon_{k_1\uparrow}) - n_F(\epsilon_{k_1+p\downarrow}) - n_F(\epsilon_{k_2\downarrow}) + n_F(\epsilon_{k_2+p\uparrow})], \end{aligned} \quad (2.108)$$

onde definimos

$$k_1(p) = -\frac{p}{2} (1 - 2ma^2 J_H S_c) - \frac{m(2\Delta - E_g)}{p}, \quad (2.109)$$

$$k_2(p) = -\frac{p}{2} (1 + 2ma^2 J_H S_c) + \frac{m(2\Delta - E_g)}{p}. \quad (2.110)$$

Aproximando para o limite de baixas temperaturas para os elétrons ($T \ll \epsilon_F$), substituímos $n_F(\epsilon) \rightarrow \theta(-\epsilon)$. Mudando a variável de integração de p para $\omega \equiv \omega_p = E_g + J_H S_c a^2 p^2$ (Eq. (2.65)), temos

$$\begin{aligned} \rho(T) &= \frac{m}{2\pi a J_H S_c^2} \left(\frac{\Delta}{ne} \right)^2 \int_{E_g}^{+\infty} d\omega |M(\omega)|^2 \left(-\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right) \\ &\quad \times [\theta(\omega - \omega_1^-) \theta(\omega_2^- - \omega) + \theta(\omega - \omega_2^+) \theta(\omega_1^+ - \omega)] \end{aligned} \quad (2.111)$$

onde, segundo a Eq. (2.84),

$$M(\omega) = \left[1 + i \frac{a}{\lambda} \sqrt{\frac{J_H S_c}{\omega - E_g}} \right]^{-1}. \quad (2.112)$$

As quatro frequências que limitam os intervalos de integração são $\omega_1^\pm = \omega(p_1^\pm)$ e $\omega_2^\pm = \omega(p_2^\pm)$ com

$$\begin{aligned} (p_1^\pm)^2 &= \frac{2m}{(1 - 2ma^2 J_H S_c)^2} \left[2\epsilon_F + E_g + 2ma^2 J_H S_c (2\Delta - E_g) \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{k_{F\uparrow} k_{F\downarrow}}{m} \sqrt{1 + \frac{4m^2 a^2 J_H S_c (2\Delta - E_g) + 2mE_g}{k_{F\downarrow}^2}} \right], \end{aligned} \quad (2.113)$$

$$\begin{aligned} (p_2^\pm)^2 &= \frac{2m}{(1 + 2ma^2 J_H S_c)^2} \left[2\epsilon_F - E_g + 2ma^2 J_H S_c (2\Delta - E_g) \right. \\ &\quad \left. \pm \frac{k_{F\uparrow} k_{F\downarrow}}{2m} \sqrt{1 + \frac{4m^2 a^2 J_H S_c (2\Delta - E_g) - 2mE_g}{k_{F\uparrow}^2}} \right]. \end{aligned} \quad (2.114)$$

Obviamente, o resultado perturbativo só é válido no limite de acoplamento fraco entre elétrons e mágnons, ou seja, $\Delta \ll \epsilon_F, J_H$. Vamos supor também que $E_g \ll \epsilon_F$. Nesse limite,

$$p_1^- \approx p_2^- \approx \sqrt{\frac{m}{2\epsilon_F}} |2\Delta - E_g| + O(\Delta^2) = \frac{|2\Delta - E_g|}{v_F} + O(\Delta^2), \quad (2.115)$$

onde $v_F = k_F/m$ é a velocidade de Fermi média. Definimos a partir daí a escala de energia

$$\omega_0 = \omega \left(p_0 \equiv \frac{|2\Delta - E_g|}{v_F} \right). \quad (2.116)$$

Também no limite $\Delta \ll \epsilon_F, J_H$, os outros dois momentos são

$$\begin{aligned} p_1^+ &\approx \frac{2\sqrt{2m\epsilon_F}}{1 - 2ma^2 J_H S_c} + O(\Delta), \\ p_2^+ &\approx \frac{2\sqrt{2m\epsilon_F}}{1 + 2ma^2 J_H S_c} + O(\Delta). \end{aligned}$$

Se $2ma^2 J_H S_c \ll 1$, temos que $p_1^+ \approx p_2^+ \approx 2k_F + O(\Delta)$. Esses são os mágnons envolvidos nos processos de “backscattering” entre bandas de spins opostos.

A integral (2.111) pode ser resolvida prontamente no limite descrito e fornece

$$\begin{aligned} \rho(T) &\approx \frac{m}{\pi a J_H S_c^2} \left(\frac{\Delta}{ne} \right)^2 \{ |M(\omega_0)|^2 [n_B(\omega_1^-) - n_B(\omega_2^-)] \\ &\quad + |M(\omega(2k_F))|^2 [n_B(\omega_2^+) - n_B(\omega_1^+)] \}. \end{aligned} \quad (2.117)$$

No limite de baixas temperaturas, podemos desprezar o espalhamento por mágnons de momento grande ($\sim 2k_F$) em comparação com os de momento pequeno $p_0 \ll 2k_F$. Por isso, vamos omitir os termos em ω_1^+ e ω_2^+ . Além disso, temos

$$\omega_2^- - \omega_1^- = \frac{(2ma^2 J_H S_c)^2 \Delta^4}{\epsilon_F^3} + O(\Delta^5). \quad (2.118)$$

Então, a Eq. (2.117) pode ser reescrita como

$$\rho(T) \approx \frac{2\pi}{e^2} \frac{1}{a} \frac{m}{16k_F^2 J_H S_c^2} \frac{(2ma^2 J_H S_c)^2 \Delta^6}{\epsilon_F^3} \left(-\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right) \Big|_{\omega_0}. \quad (2.119)$$

Podemos identificar dois limites na Eq. (2.119).

(i) anisotropia baixa, parede de domínio longa

No limite $E_g \rightarrow 0$ ($\lambda \rightarrow \infty$), temos $p_0 \approx 2\Delta/v_F$. Esse momento equivale ao momento transferido para o elétron no espalhamento de $\pm k_{F\uparrow}$ para $\pm k_{F\downarrow}$ na superfície de Fermi, pois segundo a Eq. (2.76)

$$k_{F\uparrow} - k_{F\downarrow} \approx \frac{2\Delta}{v_F} = p_0. \quad (2.120)$$

Além disso, a energia do mágnon fica

$$\omega_0 = J_H S_c a^2 \left(\frac{2\Delta}{v_F} \right)^2 \sim \left(\frac{\Delta}{\epsilon_F} \right)^2 J_H, \quad (2.121)$$

que é uma escala de energia muito baixa. Assim, podemos considerar o limite $\omega_0 \ll T \ll \epsilon_F$. Dessa forma, encontramos que a resistividade cresce linearmente com a temperatura

$$\rho(T) \approx \frac{2\pi}{e^2} \frac{1}{a} [1 + (p_0\lambda)^{-2}]^{-1} \left(\frac{J_K}{\epsilon_F} \right)^2 \frac{T}{32J_H}. \quad (2.122)$$

Finalmente, a resistência devida ao espalhamento inelástico pode ser escrita como (recuperando as constantes para a dimensão correta)

$$R_{inel} \approx \frac{h}{e^2} \frac{L}{a} \left[1 + \left(\frac{p_0\lambda}{\hbar} \right)^{-2} \right]^{-1} \zeta^2 \frac{k_B T}{8J_H S_c^2}. \quad (2.123)$$

Observe que R_{inel} é uma grandeza extensiva, porque a probabilidade de espalhamento é proporcional ao número de spins localizados. Comparando com a resistência devida ao espalhamento elástico da Eq. (2.79) para $\zeta \ll 1$ e $F(\zeta, \lambda) \approx 1/2$, teremos $R_{inel} \gtrsim R_{el}$ se

$$k_B T \gtrsim \frac{\pi^2 a}{L} J_H S(S+1). \quad (2.124)$$

Portanto, no regime de paredes longas o espalhamento inelástico pode tornar-se relevante para temperaturas altas e fios longos.

(ii) anisotropia alta, parede de domínio estreita

No caso de gap $E_g \lesssim J_H$ ($\lambda \gtrsim a$), $p_0 \neq 2\Delta/v_F$ porque parte da energia do elétron espalhado vai para o mágnon emitido e o espalhamento não ocorre exatamente sobre a superfície de Fermi. No limite de baixas temperaturas $\Delta \ll T \ll E_g$, obtemos

$$R_{inel} \approx \frac{\hbar L}{e^2 a} \left[1 + \left(\frac{p_0 \lambda}{\hbar} \right)^{-2} \right]^{-1} \frac{(k_F a)^4 J_H}{2k_B T} \zeta^6 \exp\left(-\frac{E_g}{k_B T}\right). \quad (2.125)$$

Portanto, o gap no espectro de mágnons associado à anisotropia (a mesma que fixa a largura da parede de domínio) suprime o espalhamento inelástico em baixas temperaturas. Isso mostra que, no limite de paredes de Bloch estreitas, o espalhamento elástico predomina na determinação da resistência do sistema e a aproximação de parede estática é razoável.

Capítulo 3

Elétrons interagentes e paredes de domínio

No capítulo anterior, vimos que existe uma resistência finita associada à presença de uma parede de domínio magnético. A origem dessa resistência é o espalhamento dos elétrons de condução quando há uma mudança brusca na direção da magnetização local. Esse efeito é observado em medidas de magnetorresistência de fios magnéticos, onde a nucleação de paredes de domínio é acompanhada por saltos na resistência. Embora nenhum dos experimentos realizados até o momento tenha atingido o limite estritamente unidimensional, seria interessante procurar por efeitos relacionados com as propriedades de transporte únicas dos sistemas unidimensionais.

O modelo de Luttinger prevê que a interação eletrônica tem efeitos cruciais sobre as propriedades de transporte de sistemas unidimensionais. Um exemplo disso é o transporte de um líquido de Luttinger através de uma impureza não magnética, conhecido como problema de Kane-Fisher [21]. A temperatura zero, a transmissão através da impureza é perfeita se houver interação atrativa entre os elétrons e nula se houver interação repulsiva, por menor que seja a amplitude de espalhamento.

Assim como uma impureza, uma parede de domínio quebra a invariância

translacional de um líquido de Luttinger. Por isso, é pertinente perguntar como a interação eletrônica em 1D altera o transporte através da parede. Neste capítulo, mostramos que a parede de domínio é o análogo magnético do problema de Kane-Fisher. Primeiro, discutimos sucintamente a técnica de bosonização e o modelo de Luttinger. Em seguida, escrevemos a versão bosonizada do Hamiltoniano de elétrons interagentes acoplados a uma parede de domínio estática. A teoria de campo efetiva é o modelo de Luttinger com velocidades diferentes para excitações com spin “up” ou “down”. Uma análise de grupo de renormalização para o termo de espalhamento na parede conduz a um diagrama de fases para a condutância de carga e spin em função dos parâmetros de interação. Como o termo de espalhamento é dado por um operador que inverte o spin do elétron, o diagrama de fases encontrado difere do problema de Kane-Fisher usual. Por fim, calculamos por teoria de perturbação a resistividade a frequência e temperatura finitas. Encontramos leis de potência cujos expoentes confirmam a dependência prevista pelo grupo de renormalização. Os resultados apresentados neste capítulo estão publicados na Ref. [64].

3.1 Modelo de Luttinger

As interações eletrônicas do tipo “para a frente” podem ser tratadas de maneira exata (não perturbativa) em 1D através da técnica de bosonização. Essa técnica mapeia o problema fermiônico interagente num problema de bósons livres. Daremos a seguir apenas um breve resumo dos principais resultados. Uma exposição mais detalhada pode ser encontrada nas Refs. [10, 63]. Considere o modelo “tight-binding” para elétrons numa rede com N sítios

$$H_0 = -t \sum_{j\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} + H.c.. \quad (3.1)$$

O Hamiltoniano H_0 é diagonalizado no espaço de momento e assume a forma

$$H_0 = -2t \sum_{k\sigma} \cos(ka) c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (3.2)$$

onde

$$c_{k\sigma} = \sum_j \frac{e^{-ikja}}{\sqrt{N}} c_{j\sigma}. \quad (3.3)$$

Da Eq. (3.2), vemos que os estados eletrônicos são autoestados de momento com energia $\epsilon_k = -2t \cos(ka)$. O estado fundamental do sistema é gerado preenchendo os estados eletrônicos até a energia de Fermi $\epsilon_F = -2t \cos k_F a$, como ilustra a figura 1.1.

O ponto de partida para a bosonização é argumentar que, no limite de baixas energias ($T \ll \epsilon_F$), podemos restringir o espaço de Hilbert aos estados próximos da superfície de Fermi, mantendo apenas as excitações de comprimentos de onda longos ($\gg k_F^{-1}$). Nesse limite, podemos trocar o modelo na rede por uma teoria de campo que emprega o operador de campo fermiônico

$$\psi_\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} c_{k\sigma}, \quad (3.4)$$

o qual satisfaz as relações de anticomutação

$$\{\psi_\sigma(x), \psi_{\sigma'}(y)\} = \{\psi_\sigma^\dagger(x), \psi_{\sigma'}^\dagger(y)\} = 0, \quad (3.5)$$

$$\{\psi_\sigma(x), \psi_{\sigma'}^\dagger(y)\} = \delta_{\sigma\sigma'} \delta(x-y). \quad (3.6)$$

Para isso, linearizamos a dispersão ϵ_k em torno de $k = \pm k_F$, definindo dois ramos:

$$\epsilon_k \approx \begin{cases} \epsilon_F + v_F(k - k_F) & \text{se } k \approx k_F \text{ (ramo } R) \\ \epsilon_F - v_F(k + k_F) & \text{se } k \approx -k_F \text{ (ramo } L) \end{cases} \quad (3.7)$$

onde

$$v_F \equiv \left. \frac{\partial \epsilon_k}{\partial k} \right|_{k_F} \quad (3.8)$$

é a velocidade de Fermi. Definimos os momentos medidos a partir da superfície de Fermi como $p = k - k_F$ no ramo R e $p = -(k + k_F)$ no ramo L . Com isso, a energia do sistema não interagente medida a partir do nível de Fermi é descrita pelo Hamiltoniano

$$H_0 = \sum_{r p \sigma} v_F p : c_{pr\sigma}^\dagger c_{pr\sigma} :, \quad (3.9)$$

onde $::$ denota o ordenamento normal dos operadores com relação ao estado fundamental (operadores de aniquilação à direita dos de criação), $r = \pm$ ou R, L é o índice de ramo e $c_{pr\sigma}$ é operador de aniquilação de elétrons de momento p e spin σ no ramo r . Observe que assumimos que p se estende de $-\infty$ a $+\infty$ (mar de Dirac), o que não altera a Física de baixas energias. Expandindo a Eq. (3.4) em torno de $\pm k_F$, podemos escrever

$$\psi_\sigma(x) = e^{ik_F x} \psi_{+,\sigma}(x) + e^{-ik_F x} \psi_{-,\sigma}(x), \quad (3.10)$$

onde

$$\psi_{r\sigma}(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{irkx} c_{kr\sigma}. \quad (3.11)$$

A dispersão linear da Eq. (3.9) em termos desses novos operadores de campo fica

$$H_0 = -iv_F \sum_{r\sigma} \int dx r : \psi_{r\sigma}^\dagger(x) \partial_x \psi_{r\sigma}(x) : . \quad (3.12)$$

A bosonização baseia-se numa identidade entre o operador de campo fermiônico e a exponencial de um campo bosônico auxiliar, cujos modos normais são as excitações partícula-buraco do sistema. O operador bosônico que aniquila a excitação de momento $q > 0$ no ramo r da banda de spin σ é definido como

$$d_{qr\sigma} = \sum_k \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}} c_{k-q,r\sigma}^\dagger c_{kr\sigma}. \quad (3.13)$$

Pode-se demonstrar, com o devido cuidado de tomar o ordenamento nor-

mal dos operadores, que esses operadores satisfazem relações de comutação bosônicas

$$[d_{qr\sigma}, d_{q'r'\sigma'}] = [d_{qr\sigma}^\dagger, d_{q'r'\sigma'}^\dagger] = 0, \quad (3.14)$$

$$[d_{qr\sigma}, d_{q'r'\sigma'}^\dagger] = \delta_{qq'} \delta_{rr'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (3.15)$$

O operador de campo bosônico correspondente é definido como

$$\phi_{r\sigma}(x) = \sum_{q>0} \frac{i}{\sqrt{Lq}} e^{-\alpha q/2} [d_{qr\sigma} e^{irqx} - d_{qr\sigma}^\dagger e^{-irqx}], \quad (3.16)$$

onde $\alpha^{-1} \sim k_F$ é um “cutoff” de momento que regulariza o ultravioleta. É conveniente definir também os campos duais

$$\phi_\sigma = \frac{\phi_{-, \sigma} - \phi_{+, \sigma}}{\sqrt{2}}, \quad (3.17)$$

$$\theta_\sigma = \frac{\phi_{-, \sigma} + \phi_{+, \sigma}}{\sqrt{2}}, \quad (3.18)$$

que são tais que

$$[\phi_\sigma(x), \partial_y \theta_{\sigma'}(y)] = i \delta_{\sigma\sigma'} \delta(x - y). \quad (3.19)$$

Observe que $\Pi_\sigma \equiv \partial_x \theta_\sigma$ é momento canonicamente conjugado a ϕ_σ . O campo ϕ_σ está associado às flutuações de densidade de elétrons com spin σ na forma

$$\rho_\sigma(x) \equiv : \psi_\sigma^\dagger(x) \psi_\sigma(x) : = n_\sigma + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_x \phi_\sigma(x), \quad (3.20)$$

onde n_σ é a densidade média de elétrons com spin σ ($n_\sigma = k_F/\pi$ no gás de elétrons não polarizado).

A fórmula de Mandelstam [9] expressa o operadores de campo fermiônico como função dos campos bosônicos

$$\psi_{r\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\alpha}} F_{r\sigma} \exp \left[ir \frac{2\pi}{L} N_{r\sigma} x - i\sqrt{\pi} (\theta_\sigma(x) - r\phi_\sigma(x)) \right], \quad (3.21)$$

onde $F_{r\sigma}$ é o fator de Klein que retira um elétron do mar de Fermi [10] e $N_{r\sigma}$ é o operador número de elétrons no ramo r com spin σ . Em termos dos operadores bosônicos, o Hamiltoniano não interagente (3.9) pode ser escrito como

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\sigma} \frac{v_F}{2} \int dx [: (\partial_x \theta_{\sigma}(x))^2 : + : (\partial_x \phi_{\sigma}(x))^2 :] \\ &= \sum_{q>0, r, \sigma} v_F |q| d_{qr\sigma}^{\dagger} d_{qr\sigma} + cte, \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde $::$ denota o ordenamento normal em relação ao vácuo bosônico. Isso mostra que o espectro de baixas energias do sistema de elétrons é equivalente ao de um sistema de bósons livres com dispersão linear $\omega(q) = v_F |q|$. Coleman [9] sintetizou a estranheza desse resultado afirmando que

“That *these* theories are equivalent in any sense seems too preposterous to believe. Is there no way of telling fermions from bosons? The answer is no, there is not – if one can measure only a restricted set of local fields, *and* if the particles are massless, *and* if the world is two-dimensional.”

De fato, no mundo “bidimensional” (uma dimensão espacial e uma temporal), todas as correlações de operadores fermiônicos, que determinam as respostas mensuráveis do sistema, podem ser reproduzidas calculando correlações de exponenciais bosônicas, segundo a identidade (3.21). Isso só acontece porque as excitações partícula-buraco, que são bósons que se propagam coerentemente com velocidade v_F , esgotam o espectro do sistema unidimensional.

A energia de interação entre os elétrons pode ser incluída por meio do operador de dois corpos

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int dx dy \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma'}^{\dagger}(y) V(x-y) \psi_{\sigma'}(y) \psi_{\sigma}(x), \quad (3.23)$$

onde $V(x - y)$ é o potencial de interação. Uma simplificação é adotar a interação localizada $V(x - y) = g \delta(x - y)$, obtendo

$$H_{int} = \sum_{\sigma} \int dx \left\{ \frac{g_{\parallel}}{2} \rho_{\sigma}^2 + \frac{g_{\perp}}{2} \rho_{\sigma} \rho_{-\sigma} \right\}, \quad (3.24)$$

onde distinguimos as constantes de acoplamento entre elétrons com mesmo spin (\parallel) e spins opostos (\perp). De todos os termos gerados pela expansão da Eq. (3.23) nos ramos R e L segundo a Eq. (3.10), tomamos apenas as interações do tipo “para a frente” (com pequena transferência de momento)

$$H_{int} = H_2 + H_4, \quad (3.25)$$

$$H_2 = \sum_{\sigma} \int dx \left\{ g_{2\parallel} \rho_{+,\sigma} \rho_{-,\sigma} + g_{2\perp} \rho_{+,\sigma} \rho_{-,-\sigma} \right\}, \quad (3.26)$$

$$H_4 = \sum_{r\sigma} \int dx \left\{ \frac{g_{4\parallel}}{2} (\rho_{r\sigma})^2 + \frac{g_{4\perp}}{2} \rho_{r\sigma} \rho_{r,-\sigma} \right\}, \quad (3.27)$$

onde $\rho_{r\sigma}(x) =: \psi_{r\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{r\sigma}(x)$: e os g 's medem a intensidade das interações. É conveniente definir os campos bosônicos de carga e spin

$$\phi_{c,s} = \frac{\phi_{\uparrow} \pm \phi_{\downarrow}}{\sqrt{2}}, \quad (3.28)$$

$$\theta_{c,s} = \frac{\theta_{\uparrow} \pm \theta_{\downarrow}}{\sqrt{2}}, \quad (3.29)$$

que também satisfazem relações de comutação bosônicas

$$[\phi_{\nu}(x), \partial_y \theta_{\nu'}(y)] = i \delta_{\nu\nu'} \delta(x - y), \quad (3.30)$$

onde $\nu = c, s$. Os campos ϕ_c e ϕ_s estão associados às flutuações de densidade

de carga e spin na forma

$$\rho_c = \rho_\uparrow + \rho_\downarrow = n_c + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \partial_x \phi_c, \quad (3.31)$$

$$\rho_s = \rho_\uparrow - \rho_\downarrow = n_s + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \partial_x \phi_s, \quad (3.32)$$

onde $n_{c,s} = n_\uparrow \pm n_\downarrow$. Definindo ainda as constantes

$$g_{ic} = g_{i\parallel} + g_{i\perp}, \quad (3.33)$$

$$g_{is} = g_{i\parallel} - g_{i\perp}, \quad (3.34)$$

para $i = 2, 4$, encontramos que o Hamiltoniano interagente $H = H_0 + H_2 + H_4$ é diagonal nos operadores bosônicos de carga e spin

$$H = \sum_{\nu=c,s} \frac{v_\nu}{2} \int dx \left[K_\nu : (\partial_x \theta_\nu(x))^2 : + \frac{1}{K_\nu} : (\partial_x \phi_\nu(x))^2 : \right]. \quad (3.35)$$

Os bósons de carga e spin que diagonalizam H propagam-se com velocidades

$$v_\nu = \sqrt{\left[v_F + \frac{g_{4\nu}}{\pi} \right]^2 - \left[\frac{g_{2\nu}}{\pi} \right]^2}, \quad (3.36)$$

Além das velocidades, o modelo da Eq. (3.35) – que recebe o nome de *modelo de Luttinger* – depende dos parâmetros de interação

$$K_\nu = \sqrt{\frac{2\pi v_F + g_{4\nu} - g_{2\nu}}{2\pi v_F + g_{4\nu} + g_{2\nu}}}. \quad (3.37)$$

Portanto, na linguagem bosônica a inclusão da interação elétron-elétron apenas renormaliza as energias dos bósons de carga e spin, que são as excitações naturais do sistema. Observe que o Hamiltoniano (3.35) é separável nos graus de liberdade de carga e spin, que por isso têm dinâmica independente. Esse fenômeno é conhecido como separação spin-carga. Os valores dos pa-

râmetros K_c e K_s dependem do tipo de interação. O ponto não interagente ($g_{i\parallel} = g_{i\perp} = 0$) corresponde a $K_c = K_s = 1$. Se o sistema possui simetria $SU(2)$ (simetria de rotação do spin), as constantes de acoplamento independem do spin ($g_{i\parallel} = g_{i\perp} \Rightarrow g_{is} = 0$). Nesse caso, $K_s = 1$ sempre e o setor de spin é não interagente. Se a interação é repulsiva ($g_{i\sigma} > 0$), temos da Eq. (3.37) que $K_c < 1$. Caso contrário, se a interação é atrativa ($g_{i\sigma} < 0$), temos $K_c > 1$.

3.2 Bosonização do Hamiltoniano elétrons + parede

O problema de elétrons interagentes acoplados a uma parede de domínio magnético é descrito pelo Hamiltoniano

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} - J_K \sum_i \mathbf{S}_i \cdot c_i^\dagger \vec{\sigma} c_i + H_{int}, \quad (3.38)$$

onde usamos $\epsilon_k = k^2/2m$ para dispersão quadrática. No limite contínuo, descrevemos uma parede de domínio estática em que a magnetização gira no plano yz por $\mathbf{S}(x) = S \cos \theta(x) \hat{\mathbf{z}} - S \sin \theta(x) \hat{\mathbf{y}}$. Para uma parede de domínio de Bloch centrada em $x = 0$, adotamos $\cos \theta(x) = -\tanh(x/\lambda)$ e $\sin \theta(x) = \text{sech}(x/\lambda)$. H_{int} é o termo de interação eletrônica dado, a princípio, pela Eq. (3.24). Entretanto, em um sistema magnetizado a polarização do spin exige que se considerem constantes diferentes para as interações entre elétrons com mesmo spin “up” ou “down”. Por isso, g_{\parallel} deve ser substituído pelas constantes g_{\uparrow} e g_{\downarrow} para as duas direções definidas pelo campo magnético [65]. Num sistema que contém uma parede de domínio, a aproximação de ordem zero é assumir que as constantes de interação são diferentes para as densidades de

spin na direção fixada pela magnetização local

$$H_{int} = \int dx \left\{ \frac{g_{\uparrow}}{2} \rho_{\wedge}^2 + \frac{g_{\downarrow}}{2} \rho_{\vee}^2 + g_{\perp} \rho_{\wedge} \rho_{\vee} \right\}, \quad (3.39)$$

onde

$$\rho_{\wedge, \vee}(x) = \psi^{\dagger}(x) \frac{1 \pm \vec{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{e}}(x)}{2} \psi(x) \quad (3.40)$$

e $\hat{\mathbf{e}}(x) = \cos \theta(x) \hat{\mathbf{z}} + \sin \theta(x) \hat{\mathbf{y}}$ é o vetor unitário na direção de $\mathbf{S}(x)$. Essa definição deve ser exata no limite de paredes muito longas.

Como fizemos na seção 2.4, efetuamos a transformação de gauge que alinha os spins dos elétrons de condução com o campo magnético dos spins localizados. Transformando o Hamiltoniano (3.38) pelo operador unitário da Eq. (2.74), obtemos

$$\tilde{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \tilde{H}_{int} + H_w, \quad (3.41)$$

onde $\epsilon_{k\sigma} = \epsilon_k - \sigma \Delta$ ($\sigma = \pm$ ou \uparrow, \downarrow) expressa a quebra da degenerescência de spin para elétrons polarizados em $\pm \hat{\mathbf{e}}$, H_w é o termo de espalhamento na parede de domínio da Eq. (2.77) e \tilde{H}_{int} é o termo de interação transformado

$$\tilde{H}_{int} = \int dx \left\{ \frac{g_{\uparrow}}{2} \rho_{\uparrow}^2 + \frac{g_{\downarrow}}{2} \rho_{\downarrow}^2 + g_{\perp} \rho_{\uparrow} \rho_{\downarrow} \right\}. \quad (3.42)$$

Observe que as densidades de spin se transformam pela transformação de gauge na forma

$$\rho_{\wedge, \vee} \rightarrow \tilde{\rho}_{\wedge, \vee} = U^{\dagger} \rho_{\wedge, \vee} U = \rho_{\uparrow, \downarrow}. \quad (3.43)$$

A estratégia é bosonizar a parte livre do Hamiltoniano (3.41) e tratar H_w como uma perturbação do modelo de Luttinger. Para isso, procedemos como descrito na seção anterior. A diferença é que, por causa da polarização do spin dos elétrons, temos $k_{F\uparrow} \neq k_{F\downarrow}$ e é preciso linearizar a dispersão na Eq. (3.41) com duas velocidades de Fermi $v_{F\uparrow}$ e $v_{F\downarrow}$ (figura 3.1)

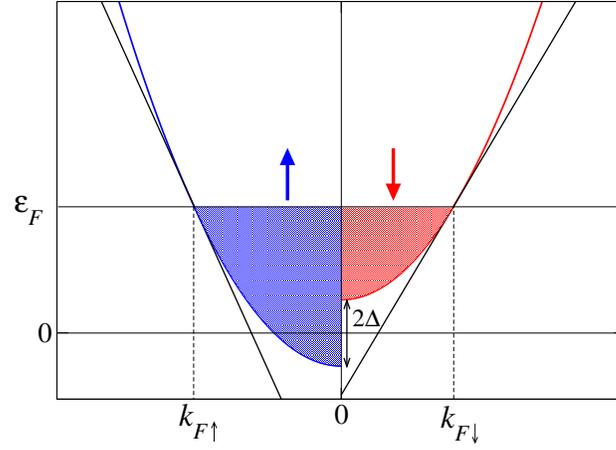


Figura 3.1: Linearização da dispersão com velocidades de Fermi diferentes para spin up (esquerda) e down (direita).

$$\epsilon_{k\sigma} = v_{F\sigma} (k \mp k_{F\sigma}). \quad (3.44)$$

Bosonizando a parte não interagente de \tilde{H} , obtemos

$$\tilde{H}_0 = \sum_{k\sigma} \epsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} = \sum_{\sigma} \frac{v_{F\sigma}}{2} \int dx \{ : (\partial_x \theta_{\sigma})^2 : + : (\partial_x \phi_{\sigma})^2 : \}. \quad (3.45)$$

Definimos a velocidade de Fermi média e a diferença de velocidades ζ como

$$v_F = \frac{v_{F\uparrow} + v_{F\downarrow}}{2}, \quad (3.46)$$

$$\zeta = \frac{v_{F\uparrow} - v_{F\downarrow}}{v_{F\uparrow} + v_{F\downarrow}}. \quad (3.47)$$

Observe que essa definição de ζ coincide com a da Eq. (2.80) no caso de dispersão quadrática. Temos então que

$$v_{F\sigma} = v_F (1 + \sigma\zeta). \quad (3.48)$$

Escrevendo em termos dos campos de carga e spin, obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{H}_0 = & \sum_{\nu=c,s} \frac{v_F}{2} \int dx \{ : (\partial_x \theta_\nu)^2 : + : (\partial_x \phi_\nu)^2 : \} \\ & + \zeta v_F \int dx \{ \partial_x \theta_c \partial_x \theta_s + \partial_x \phi_c \partial_x \phi_s \}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Podemos da mesma forma separar a parte interagente H_{int} nos ramos R e L considerando acoplamentos diferentes $g_{i\uparrow}$ e $g_{i\downarrow}$ como na Eq. (3.42)

$$H_2 = \int dx \{ g_{2\uparrow} \rho_{+\uparrow} \rho_{-\uparrow} + g_{2\downarrow} \rho_{+\downarrow} \rho_{-\downarrow} + g_{2\perp} (\rho_{+\uparrow} \rho_{-\downarrow} + \rho_{-\uparrow} \rho_{+\downarrow}) \}, \quad (3.50)$$

$$H_4 = \frac{1}{2} \sum_r \int dx \{ g_{4\uparrow} (\rho_{r\uparrow})^2 + g_{4\downarrow} (\rho_{r\downarrow})^2 + g_{4\perp} \rho_{r\uparrow} \rho_{r\downarrow} \}. \quad (3.51)$$

Bosonizando os termos das Eqs. (3.50) e (3.51) e agrupando com a parte não interagente H_0 , obtemos o modelo de Luttinger para elétrons polarizados

$$\begin{aligned} H_{LL} = & \sum_{\nu=c,s} \frac{v_\nu}{2} \int dx \left\{ K_\nu (\partial_x \theta_\nu)^2 + \frac{1}{K_\nu} (\partial_x \phi_\nu)^2 \right\} \\ & + \int dx \{ \zeta v_1 \partial_x \theta_c \partial_x \theta_s + \zeta v_2 \partial_x \phi_c \partial_x \phi_s \}, \end{aligned} \quad (3.52)$$

onde as velocidades $v_{c,s}$ e os parâmetros de interação $K_{c,s}$ são dados pelas Eqs. (3.36) e (3.37) tomando $g_{i\parallel} = (g_{i\uparrow} + g_{i\downarrow})/2$ e as velocidades v_1 e v_2 são definidas por

$$v_1 = v_F + \frac{g_{4\uparrow} - g_{4\downarrow} + g_{2\uparrow} - g_{2\downarrow}}{2\pi\zeta}, \quad (3.53)$$

$$v_2 = v_F + \frac{g_{4\uparrow} - g_{4\downarrow} - g_{2\uparrow} + g_{2\downarrow}}{2\pi\zeta}. \quad (3.54)$$

Para polarizações não muito altas, podemos tomar $g_{i\uparrow} - g_{i\downarrow} \propto \zeta$ (Ref. [65]), de modo que v_1 e v_2 são aproximadamente independentes de ζ .

O Hamiltoniano (3.52) mostra que o campo magnético dos spins localiza-

dos introduz espalhamento entre as excitações de carga e spin, que não são mais os modos normais do sistema. Em outras palavras, o termo de ordem ζ quebra a simetria de separação spin-carga do líquido de Luttinger. Entretanto, H_{LL} ainda é quadrático nos campos bosônicos e pode ser diagonalizado por uma transformação canônica, como faremos na seção 3.3.

Para bosonizar H_w , reescrevemos a Eq. (2.77) em termos do operador de campo fermiônico

$$H_w = -\frac{i}{4m} \int dx \partial_x \theta_0 \psi^\dagger \sigma_x \partial_x \psi + H.c. + O(A_q^2), \quad (3.55)$$

onde pretendemos considerar apenas o espalhamento em primeira ordem na parede. Para separar os operadores nos ramos R e L usamos

$$\psi_\sigma(x) = e^{ik_F \sigma x} \psi_{+,\sigma}(x) + e^{-ik_F \sigma x} \psi_{-,\sigma}(x). \quad (3.56)$$

Mantemos somente os termos de espalhamento que não envolvem derivadas dos campos (os quais são proporcionais às flutuações e por isso irrelevantes para a nossa análise). Com isso, obtemos $H_w = H_w^{(f)} + H_w^{(b)}$ com

$$H_w^{(f)} = \sum_{r\sigma} \frac{rk_{F-\sigma}}{4m} \int dx \partial_x \theta_0 e^{-ir\sigma 2\zeta k_F x} \psi_{r,\sigma}^\dagger \psi_{r,-\sigma} + H.c., \quad (3.57)$$

$$H_w^{(b)} = -\sum_{r\sigma} \frac{rk_{F-\sigma}}{4m} \int dx \partial_x \theta_0 e^{-ir2k_F x} \psi_{r,\sigma}^\dagger \psi_{-r,-\sigma} + H.c.. \quad (3.58)$$

A função $\partial_x \theta_0(x)$ localiza o termo de espalhamento na vizinhança do centro da parede ($x = 0$) e pode ser decomposta em modos normais invertendo a Eq. (2.78)

$$\partial_x \theta_0(x) = \frac{1}{L} \sum_q A_q e^{iqx}. \quad (3.59)$$

Os termos mais relevantes para o espalhamento originam-se dos modos A_q da parede que cancelam a oscilação nos integrandos das Eqs. (3.57) e (3.58). Por isso, vamos manter somente os modos $A_{2\zeta k_F}$ na Eq. (3.57) e A_{2k_F} na Eq.

(3.58). Esse procedimento corresponde a desprezar a variação dos campos na escala de comprimento da parede e é exato para o caso de uma parede localizada $\partial_x \theta_0(x) = \pi \delta(x)$. Assim, os termos de espalhamento se simplificam para

$$H_w^{(f)} = \sum_{r\sigma} \frac{r k_{F-\sigma} A_{2\zeta k_F}}{4m} [\psi_{r\sigma}^\dagger(0) \psi_{r,-\sigma}(0) + H.c.], \quad (3.60)$$

$$H_w^{(b)} = - \sum_{r\sigma} \frac{r k_{F-\sigma} A_{2k_F}}{4m} [\psi_{r\sigma}^\dagger(0) \psi_{-r,-\sigma}(0) + H.c.], \quad (3.61)$$

onde supusemos, por simplicidade, que $A_q = A_{-q} = A_q^*$, o que é verdade para $\partial_x \theta_0$ simétrica, como na parede de Bloch. Usando então a fórmula de Mandelstam (Eq. (3.21), omitindo os fatores de Klein), obtemos as formas bosonizadas dos termos de espalhamento

$$H_w^{(f)} = \frac{k_F A_{2\zeta k_F}}{m\pi\alpha} \sin[\sqrt{2\pi}\theta_s(0)] \sin[\sqrt{2\pi}\phi_s(0)], \quad (3.62)$$

$$H_w^{(b)} = \frac{\zeta k_F A_{2k_F}}{m\pi\alpha} \sin[\sqrt{2\pi}\theta_s(0)] \sin[\sqrt{2\pi}\phi_c(0)]. \quad (3.63)$$

Observe que os termos de espalhamento $H_w^{(f)}$ e $H_w^{(b)}$ dependem somente dos campos bosônicos na origem. A amplitude de espalhamento diminui com o aumento da largura da parede por causa do fator A_q . O termo $H_w^{(f)}$ corresponde aos processos de espalhamento para a frente, com pequena transferência de momento $|q| \sim 2\zeta k_F$ e com inversão do spin do elétron. O segundo termo refere-se a processos de espalhamento para trás (“backscattering”) com transferência de momento $|q| \sim 2k_F$ e também com inversão do spin. Deve-se esperar que este último contribua mais para a resistência da parede de domínio, pois faz com que elétrons que se propagam num sentido sejam refletidos no sentido contrário quando colidem com a parede de domínio.

3.3 Diagonalização do Hamiltoniano livre

Antes de analisar o efeito dos termos de espalhamento na parede de domínio, vamos encontrar os modos normais do líquido de Luttinger polarizado descrito pelo Hamiltoniano (3.52). Esse Hamiltoniano é quadrático nos campos bosônicos e pode ser diagonalizado por uma transformação canônica para novos campos $\phi'_{c,s}$ e $\theta'_{c,s}$. Definindo os vetores dos campos bosônicos

$$\theta = \begin{pmatrix} \theta_c \\ \theta_s \end{pmatrix}, \quad \phi = \begin{pmatrix} \phi_c \\ \phi_s \end{pmatrix}.$$

podemos escrever o Hamiltoniano (3.52) como

$$H_{LL} = \frac{1}{2} \int dx \{ \partial_x \theta A \partial_x \theta + \partial_x \phi B \partial_x \phi \}, \quad (3.64)$$

onde definimos as matrizes

$$A = \begin{pmatrix} v_c K_c & \zeta v_1 \\ \zeta v_1 & v_s K_s \end{pmatrix}, \quad (3.65)$$

$$B = \begin{pmatrix} v_c / K_c & \zeta v_2 \\ \zeta v_2 & v_s / K_s \end{pmatrix}. \quad (3.66)$$

Nosso objetivo é diagonalizar as matrizes A e B simultaneamente. Os autovalores obtidos devem corresponder às velocidades das excitações naturais do sistema. O líquido de Luttinger só é estável se essas velocidades forem positivas. Isso conduz à condição

$$\frac{\zeta^2 v_1^2}{v_c v_s} < K_c K_s < \frac{v_c v_s}{\zeta^2 v_2^2}. \quad (3.67)$$

Essa condição limita a região no espaço de parâmetros (K_c, K_s) em que nossa análise é aplicável. Fora dessa região, a polarização do gás de elétrons é forte o suficiente para que uma das velocidades se anule e se forme um gap na

excitação do tipo spin.

As transformações efetuadas para diagonalizar a Eq. (3.64) devem preservar uma relação de comutação canônica como a da Eq. (3.30) entre os campos θ e ϕ . As transformações mais simples que satisfazem essa condição são combinações de rotações que não misturam θ com ϕ (grupo $SO(2)$) e reescalamentos (canônicos) dos campos. Começamos executando a rotação das matrizes A e B por um ângulo φ por meio da matriz

$$R = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (3.68)$$

A rotação R deve ser tal que, seguida do reescalamto

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \sqrt{\kappa} & 0 \\ 0 & \sqrt{\mu} \end{pmatrix}, \quad (3.69)$$

tenhamos

$$\Lambda^{-1} R^t A R \Lambda^{-1} = \Lambda R^t B R \Lambda. \quad (3.70)$$

Isso conduz às relações

$$\kappa = \sqrt{\frac{v_c K_c \cos^2 \varphi - \zeta v_1 \sin 2\varphi + v_s K_s \sin^2 \varphi}{\frac{v_c}{K_c} \cos^2 \varphi - \zeta v_2 \sin 2\varphi + \frac{v_s}{K_s} \sin^2 \varphi}}, \quad (3.71)$$

$$\mu = \sqrt{\frac{v_s K_s \cos^2 \varphi + \zeta v_1 \sin 2\varphi + v_c K_c \sin^2 \varphi}{\frac{v_s}{K_s} \cos^2 \varphi + \zeta v_2 \sin 2\varphi + \frac{v_c}{K_c} \sin^2 \varphi}}, \quad (3.72)$$

$$\kappa\mu = \frac{2\zeta v_1 \cos 2\varphi + (v_c K_c - v_s K_s) \sin 2\varphi}{2\zeta v_2 \cos 2\varphi + \left(\frac{v_c}{K_c} - \frac{v_s}{K_s}\right) \sin 2\varphi}. \quad (3.73)$$

A condição (3.67) garante que κ e μ são ambos reais. Como $\kappa\mu$ é periódico de período $\pi/2$, podemos determinar φ no intervalo $[-\pi/4, \pi/4]$ impondo que as três equações são satisfeitas simultaneamente. Encontrando φ , obtemos κ e μ imediatamente das Eqs. (3.71) e (3.72).

Podemos finalmente diagonalizar A e B por uma segunda rotação S , obtendo

$$\tilde{A} = S^t \Lambda^{-1} R^t A R \Lambda^{-1} S = S^t \Lambda R^t B R \Lambda S. \quad (3.74)$$

O Hamiltoniano (3.64) assume a forma

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \int dx \left\{ \partial_x \theta' \tilde{A} \partial_x \theta' + \partial_x \phi' \tilde{A} \partial_x \phi' \right\} \\ &= \sum_{\nu=c,s} \frac{v'_\nu}{2} \int dx \left\{ (\partial_x \theta'_\nu)^2 + (\partial_x \phi'_\nu)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (3.75)$$

onde as velocidades v'_ν são os autovalores de \tilde{A} e os velhos vetores de campos bosônicos são expressos em termos dos novos como

$$\theta = T^\theta \theta', \quad (3.76)$$

$$\phi = T^\phi \phi', \quad (3.77)$$

onde $T^\theta = R \Lambda^{-1} S$ e $T^\phi = R \Lambda S = [(T^\theta)^{-1}]^t$.

É interessante notar que há uma curva especial no espaço de parâmetros (K_c, K_s) , definida pela equação $K_c K_s = v_1/v_2$. Sobre essa curva o Hamiltoniano (3.52) possui a simetria extra $\sqrt{v_1} \theta_c \rightarrow \sqrt{v_2} \phi_s$, $\sqrt{v_2} \phi_c \rightarrow -\sqrt{v_1} \theta_s$ e pode ser diagonalizado efetuando apenas um reescalamento dos campos bosônicos. Basta verificar que as Eqs. (3.71), (3.72) e (3.73) são satisfeitas para $\varphi = 0$, $\kappa = K_c$ e $\mu = K_s = v_1/v_2 K_c$. Neste caso, as transformações T^ϕ e T^θ são dadas simplesmente por

$$T^\phi = \begin{pmatrix} \sqrt{K_c} & 0 \\ 0 & \sqrt{K_s} \end{pmatrix} = (T^\theta)^{-1} \quad (3.78)$$

e as velocidades das excitações naturais são

$$v'_{c,s} = \frac{v_c + v_s}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{v_c - v_s}{2}\right)^2 + \zeta^2 v_1 v_2}. \quad (3.79)$$

Observe que essa curva inclui o ponto não interagente $K_c = K_s = 1$ e $v_1 = v_2 = v_F$.

3.4 Grupo de Renormalização

Queremos calcular as propriedades de transporte de carga e spin do modelo de Luttinger (3.52) perturbado pelos termos de espalhamento na parede de domínio $H_w^{(f)}$ e $H_w^{(b)}$ (Eqs. (3.62) e (3.63)). Infelizmente, o fato de que esses termos não são quadráticos nos campos bosônicos torna difícil encontrar uma solução exata como a que emergiu na inclusão do termo de interação eletrônica H_{int} .

Por outro lado, embora soluções exatas sejam sempre atraentes, o que mais interessa do ponto de vista de uma teoria de campo em Matéria Condensada é descrever as propriedades do sistema em baixas temperaturas. Em outras palavras, as propriedades físicas de interesse dependem apenas do setor de baixas energias da teoria. Quando restringimos o modelo a esse setor, pode acontecer que o espalhamento de elétrons na parede de domínio encerrado em $H_w^{(b)}$ e $H_w^{(f)}$ se torne bastante expressivo. Do mesmo modo, é possível que essas perturbações dependam essencialmente de excitações de altas energias e seus efeitos não se façam sentir em baixas energias.

O grupo de renormalização (RG) busca descrever como se alteram os parâmetros de um modelo físico quando se efetuam transformações que removem os graus de liberdade de altas energias [66, 67]. A trajetória do modelo no espaço de parâmetros sob uma seqüência dessas transformações define o chamado fluxo do grupo de renormalização e converge no sentido de um modelo efetivo que contém apenas as flutuações de longos comprimentos de onda. Para alguns valores específicos dos parâmetros, as transformações do grupo de renormalização deixam o modelo invariante; nesse caso, o modelo é chamado de ponto fixo.

No problema do líquido de Luttinger acoplado a uma parede de domínio,

os parâmetros de interesse são as amplitudes de espalhamento dos termos $H_w^{(f)}$ e $H_w^{(b)}$. Se uma dessas amplitudes cresce sob ação do grupo de renormalização, o termo correspondente torna-se mais importante e afasta o modelo do comportamento de líquido de Luttinger com condutância ideal. Nesse caso, o operador é dito *relevante*. Se a amplitude vai a zero, o operador é dito *irrelevante* e pode ser ignorado na teoria efetiva para baixas energias. Há ainda a possibilidade de que o operador não mude sob a ação do grupo de renormalização; esse é o caso dos operadores *marginais*. Esse caso exige que se leve a análise até ordens mais altas e apresenta comportamento intermediário entre os modelos com perturbação relevante e irrelevante.

Vamos aplicar o método do grupo de renormalização para analisar o Hamiltoniano $H = H_{LL} + H_w^{(f)} + H_w^{(b)}$. Como os termos de espalhamento são localizados na posição da parede, começamos escrevendo uma ação efetiva que depende somente dos campos bosônicos em $x = 0$. Em seguida, integramos os graus de liberdade de alta energia para obter as equações de fluxo do grupo de renormalização. Vamos encontrar que a relevância dos operadores é determinada principalmente pelos parâmetros de interação K_c e K_s , com uma correção de ordem ζ^2 devido à mistura dos modos de carga e spin.

3.4.1 Ação livre efetiva

As mesmas transformações T^θ e T^ϕ que diagonalizam o Hamiltoniano livre H_{LL} misturam os campos θ e ϕ nos termos de espalhamento. O termo $H_w^{(b)}$ da Eq. (3.63), por exemplo, fica

$$H_w^{(b)} = \gamma \sin \left[\sqrt{2\pi} (T_{21}^\theta \theta'_c + T_{22}^\theta \theta'_s) \right] \sin \left[\sqrt{2\pi} (T_{11}^\phi \phi'_c + T_{12}^\phi \phi'_s) \right], \quad (3.80)$$

onde $\gamma = \zeta k_F A_{2k_F} / m\pi\alpha$. Por isso, precisamos de uma ação efetiva para o modelo de Luttinger (3.75) em função dos *dois* campos conjugados θ e ϕ para cada setor $\nu = c, s$.

Vamos usar o formalismo de integrais de caminho [2] para integrar os

graus de liberdade de $x \neq 0$ e obter a ação efetiva desejada. O propagador para um campo escalar ϕ (a generalização para dois campos é imediata) é dado por

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi \int \mathcal{D}\Pi \exp \left\{ i \int dx dt \left[\dot{\phi}\Pi - \mathcal{H}(\phi, \Pi) \right] \right\}, \quad (3.81)$$

onde $\Pi = \partial_x \theta$ é o momento conjugado a ϕ , \mathcal{H} é a densidade do Hamiltoniano e a integração é tomada sobre todas as configurações possíveis dos campos. Em tempo imaginário $\tau = it$, $0 < \tau < \beta$, podemos escrever a função de partição

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi \int \mathcal{D}\theta \exp \left\{ \int dx d\tau \left[i\partial_\tau \phi \partial_x \theta - \mathcal{H}(\phi, \theta) \right] \right\}. \quad (3.82)$$

O Hamiltoniano livre (3.75) para cada par de campos duais tem a forma

$$\mathcal{H}(\phi, \theta) = \frac{v}{2} \left[(\partial_x \theta)^2 + (\partial_x \phi)^2 \right]. \quad (3.83)$$

Para integrar $\phi(x, \tau)$ e $\theta(x, \tau)$ para $x \neq 0$, introduzimos os campos auxiliares $\lambda^{(1)}(\tau)$ e $\lambda^{(2)}(\tau)$ de tal modo que

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi_0 \int \mathcal{D}\lambda^{(1)} \int \mathcal{D}\theta_0 \int \mathcal{D}\lambda^{(2)} \int \mathcal{D}\phi \int \mathcal{D}\theta \exp(S), \quad (3.84)$$

onde

$$S = \int dx d\tau \left[i\partial_\tau \phi \partial_x \theta - \mathcal{H}(\phi, \theta) - i\lambda^{(1)}(\phi - \phi_0) - i\lambda^{(2)}(\theta - \theta_0) \right], \quad (3.85)$$

com $\phi_0(\tau) = \phi(x=0, \tau)$ e $\theta_0(\tau) = \theta(x=0, \tau)$. Em seguida, tomamos as transformadas de Fourier dos campos

$$\phi(x, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} e^{-i\omega_n \tau} \phi_{qn}, \quad (3.86)$$

$$\theta(x, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{dq}{2\pi} e^{iqx} e^{-i\omega_n \tau} \theta_{qn}, \quad (3.87)$$

$$\lambda^{(1)}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \lambda_n^{(1)}, \quad (3.88)$$

$$\lambda^{(2)}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} \lambda_n^{(2)}, \quad (3.89)$$

onde ω_n são as freqüências de Matsubara bosônicas, e reescrevemos a Eq. (3.85) no espaço de Fourier

$$\begin{aligned} S = & -\frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{dq}{2\pi} \left\{ \frac{vq^2}{2} [\phi_{qn} \phi_{-q,-n} + \theta_{qn} \theta_{-q,-n}] \right. \\ & + \frac{iq\omega_n}{2} [\phi_{qn} \theta_{-q,-n} + \theta_{qn} \phi_{-q,-n}] \\ & + \left. i\lambda_n^{(1)} \phi_{-q,-n} + i\lambda_n^{(2)} \theta_{-q,-n} \right\} \\ & + \frac{1}{\beta} \sum_n \left\{ i\lambda_n^{(1)} \phi_{0,-n} + i\lambda_n^{(2)} \theta_{0,-n} \right\}. \end{aligned} \quad (3.90)$$

Para diagonalizar a parte quadrática nos campos duais, é conveniente fazer a mudança de variável para os campos ξ e η definidos por

$$\phi = \frac{\xi + \eta}{\sqrt{2}}, \quad (3.91)$$

$$\theta = \frac{\xi - \eta}{\sqrt{2}}. \quad (3.92)$$

Obtemos

$$\begin{aligned} S = & -\frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{dq}{2\pi} \left\{ \frac{q}{2} (vq + i\omega_n) \xi_{qn} \xi_{-q,-n} \right. \\ & + \frac{q}{2} (vq - i\omega_n) \eta_{qn} \eta_{-q,-n} \\ & + \left. i \left(\frac{\lambda_n^{(1)} + \lambda_n^{(2)}}{\sqrt{2}} \right) \xi_{-q,-n} + i \left(\frac{\lambda_n^{(1)} - \lambda_n^{(2)}}{\sqrt{2}} \right) \eta_{-q,-n} \right\} \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{\beta} \sum_n \{ i\lambda_n^{(1)} \phi_{0,-n} + i\lambda_n^{(2)} \theta_{0,-n} \}. \quad (3.93)$$

Podemos eliminar o acoplamento de ξ e η com os campos auxiliares na Eq. (3.93) trasladando para os novos campos $\tilde{\xi}$ e $\tilde{\eta}$ definidos por

$$\tilde{\xi}_{qn} = \xi_{qn} + i \frac{\lambda_n^{(1)} + \lambda_n^{(2)}}{\sqrt{2}} \frac{1}{vq^2 + i\omega_n q}, \quad (3.94)$$

$$\tilde{\eta}_{qn} = \eta_{qn} + i \frac{\lambda_n^{(1)} - \lambda_n^{(2)}}{\sqrt{2}} \frac{1}{vq^2 - i\omega_n q}, \quad (3.95)$$

$$\begin{aligned} S = & -\frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{dq}{2\pi} \left\{ \frac{q}{2} (vq + i\omega_n) \tilde{\xi}_{qn} \tilde{\xi}_{-q,-n} \right. \\ & + \frac{q}{2} (vq - i\omega_n) \tilde{\eta}_{qn} \tilde{\eta}_{-q,-n} \\ & + \frac{(\lambda_n^{(1)} + \lambda_n^{(2)})(\lambda_{-n}^{(1)} + \lambda_{-n}^{(2)})}{4q(vq + i\omega_n)} \\ & \left. + \frac{(\lambda_n^{(1)} - \lambda_n^{(2)})(\lambda_{-n}^{(1)} - \lambda_{-n}^{(2)})}{4q(vq - i\omega_n)} \right\} \\ & + \frac{1}{\beta} \sum_n \{ i\lambda_n^{(1)} \phi_{0,-n} + i\lambda_n^{(2)} \theta_{0,-n} \}. \end{aligned} \quad (3.96)$$

Integramos então os campos $\tilde{\xi}$ e $\tilde{\eta}$ e obtemos

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi_0 \int \mathcal{D}\lambda^{(1)} \int \mathcal{D}\theta_0 \int \mathcal{D}\lambda^{(2)} \exp \{ S' \}, \quad (3.97)$$

$$\begin{aligned} S' = & -\frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{dq}{2\pi} \left\{ \frac{(\lambda_n^{(1)} + \lambda_n^{(2)})(\lambda_{-n}^{(1)} + \lambda_{-n}^{(2)})}{4q(vq + i\omega_n)} \right. \\ & \left. + \frac{(\lambda_n^{(1)} - \lambda_n^{(2)})(\lambda_{-n}^{(1)} - \lambda_{-n}^{(2)})}{4q(vq - i\omega_n)} \right\} \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{\beta} \sum_n \{i\lambda_n^{(1)}\phi_{0,-n} + i\lambda_n^{(2)}\theta_{0,-n}\}. \quad (3.98)$$

Integramos o momento q na Eq. (3.98) calculando o resíduo nos polos $q = 0$ e $q = \pm i\omega_n/v$; obtemos

$$S' = -\frac{1}{\beta} \sum_n \left\{ \frac{1}{4|\omega_n|} \left[\lambda_n^{(1)}\lambda_{-n}^{(1)} + \lambda_n^{(2)}\lambda_{-n}^{(2)} \right] + \left[-i\lambda_n^{(1)}\phi_{0,-n} - i\lambda_n^{(2)}\theta_{0,-n} \right] \right\}. \quad (3.99)$$

Mudamos agora para as variáveis $\tilde{\lambda}^{(1)}$ e $\tilde{\lambda}^{(2)}$

$$\tilde{\lambda}_n^{(1)} = \lambda_n^{(1)} - 2i|\omega_n|\phi_{0n}, \quad (3.100)$$

$$\tilde{\lambda}_n^{(2)} = \lambda_n^{(2)} - 2i|\omega_n|\theta_{0n}, \quad (3.101)$$

$$S' = -\frac{1}{\beta} \sum_n \left\{ \frac{1}{4|\omega_n|} \left[\tilde{\lambda}_n^{(1)}\tilde{\lambda}_{-n}^{(1)} + \tilde{\lambda}_n^{(2)}\tilde{\lambda}_{-n}^{(2)} \right] + |\omega_n| [\phi_{0n}\phi_{0,-n} + \theta_{0n}\theta_{0,-n}] \right\}. \quad (3.102)$$

Finalmente, integrando também os campos auxiliares $\tilde{\lambda}^{(1)}$ e $\tilde{\lambda}^{(2)}$, encontramos

$$Z_0 = \int \mathcal{D}\phi_0 \int \mathcal{D}\theta_0 \exp \left\{ -S_0^{eff} [\phi_0, \theta_0] \right\}, \quad (3.103)$$

onde a ação efetiva em função dos campos na origem é

$$S_0^{eff} [\phi_0, \theta_0] = \frac{1}{\beta} \sum_n |\omega_n| (\phi_{0n}\phi_{0,-n} + \theta_{0n}\theta_{0,-n}). \quad (3.104)$$

A ação (3.104) pode ser escrita como $S_0^{eff} [\phi_0, \theta_0] = S_0^{eff} [\phi_0] + S_0^{eff} [\theta_0]$; é simplesmente a soma das ações escritas em termos de ϕ_0 ou de θ_0 como usadas na Ref. [21].

3.4.2 Equações de fluxo e diagrama de fases

O propagador associado ao Hamiltoniano livre (3.75), mais as perturbações devido ao espalhamento na parede de domínio, é

$$Z = \int \prod_{\nu=c,s} \mathcal{D}\phi'_{0\nu} \mathcal{D}\theta'_{0\nu} \exp \{-S_0 - S_1\}, \quad (3.105)$$

onde a ação livre S_0 é diagonal nos campos conjugados $\phi'_{0\nu}$ e $\theta'_{0\nu}$ e, analogamente à Eq. (3.104), assume a forma

$$S_0[\phi, \theta] = \frac{1}{\beta} \sum_{\nu n} |\omega_n| [\phi'_{0\nu}(\omega_n) \phi'_{0\nu}(-\omega_n) + \theta'_{0\nu}(\omega_n) \theta'_{0\nu}(-\omega_n)]. \quad (3.106)$$

Vamos analisar primeiro o termo de “backscattering” da Eq. (3.80) porque, como vamos descobrir, este é o termo mais relevante. A ação S_1 associada é

$$S_1 = \gamma \int d\tau \sin \left[\sqrt{2\pi} \theta_{0s} \right] \sin \left[\sqrt{2\pi} \phi_{0c} \right], \quad (3.107)$$

onde θ_{0s} e ϕ_{0c} são combinações lineares dos modos normais $\theta'_{0\nu}$ como escrevemos na Eq. (3.80).

Suponhamos uma perturbação fraca ($\gamma \ll \epsilon_F$) para obter o fluxo de γ quando se removem graus de liberdade do sistema. Para deixar claro o que significa baixa energia, precisamos definir um “cutoff” Λ tal que o modelo inclui somente frequências ω menores do que Λ . Assim, o setor de baixas energias de interesse é aquele restrito às excitações com energia $|\omega| \ll \Lambda$. No caso de excitações partícula-buraco em torno da superfície de Fermi, uma escolha natural para Λ é $\Lambda \sim \epsilon_F$. Uma transformação infinitesimal do grupo de renormalização deve remover os graus de liberdade com $\Lambda' < |\omega| < \Lambda$, onde $\Lambda' = \Lambda - d\Lambda$ faz o papel de um novo “cutoff” menor do que “cutoff” original Λ (figura 3.2).

A decomposição em modos de Fourier de $\phi'_\nu(\tau)$ permite separar as partes “lentas” (frequência baixa $|\omega| < \Lambda'$) e “rápidas” (frequência alta $\Lambda' < |\omega| <$

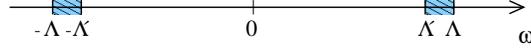


Figura 3.2: Esquema do grupo de renormalização. Os modos de frequência ω , $\Lambda' < |\omega| < \Lambda$, são integrados para definir um novo “cutoff” $\Lambda' = \Lambda - d\Lambda$.

Λ). No limite contínuo de frequências ($\beta \rightarrow \infty$),

$$\begin{aligned} \phi_{0\nu}(\tau) &= \int_{|\omega| < \Lambda'} \frac{d\omega}{2\pi} \phi'_{0\nu}(\omega) e^{i\omega\tau} + \int_{\Delta} \frac{d\omega}{2\pi} \phi_{0\nu}(\omega) e^{i\omega\tau} \\ &= \phi'_{0\nu}{}^{<}(\tau) + \phi'_{0\nu}{}^{>}(\tau), \end{aligned} \quad (3.108)$$

onde Δ denota a integração no intervalo $\Lambda' < |\omega| < \Lambda$. A separação em modos lentos e rápidos também é possível na ação livre (3.106)

$$S_0[\phi, \theta] = S_0[\phi] + S_0[\theta] = S_0^{<}[\phi] + S_0^{<}[\theta] + S_0^{>}[\phi] + S_0^{>}[\theta]. \quad (3.109)$$

Conseqüentemente, podemos integrar os modos rápidos na Eq. (3.105) fazendo

$$Z = \int \prod_{\nu} \mathcal{D}\phi'_{0\nu}{}^{<} \mathcal{D}\theta'_{0\nu}{}^{<} e^{-S_0^{<}[\phi] - S_0^{<}[\theta]} \langle e^{-S_1[\phi, \theta]} \rangle_{>}, \quad (3.110)$$

onde

$$\langle e^{-S_1[\phi, \theta]} \rangle_{>} = \int \prod_{\nu} \mathcal{D}\phi'_{0\nu}{}^{>} \mathcal{D}\theta'_{0\nu}{}^{>} e^{-S_0^{>}[\phi] - S_0^{>}[\theta]} e^{-S_1[\phi, \theta]}. \quad (3.111)$$

Em primeira ordem de γ , podemos aproximar

$$\langle e^{-S_1[\phi, \theta]} \rangle_{>} \approx 1 - \langle S_1[\phi, \theta] \rangle_{>}. \quad (3.112)$$

Calculamos então a média de S_1 sobre os modos rápidos. Primeiro separamos a dependência na parte rápida

$$\langle S_1[\phi, \theta] \rangle_{>} = \gamma \int d\tau \left\langle \sin \left[\sqrt{2\pi} \theta_{0s} \right] \sin \left[\sqrt{2\pi} \phi_{0c} \right] \right\rangle_{>}$$

$$= -\frac{\gamma}{4} \int d\tau \sum_{n,n'=\pm} nn' e^{ni\sqrt{2\pi}\theta_{0s}^<} e^{n'i\sqrt{2\pi}\phi_{0c}^<} \times C, \quad (3.113)$$

onde

$$\begin{aligned} C &= \left\langle e^{ni\sqrt{2\pi}\theta_{0s}^>} e^{n'i\sqrt{2\pi}\phi_{0c}^>} \right\rangle_> \\ &= \int \mathcal{D}\theta_{0c}^> \mathcal{D}\theta_{0s}^> e^{-S_0^>[\theta] + ni\sqrt{2\pi}(T_{21}^\theta \theta_{0c}^> + T_{22}^\theta \theta_{0s}^>)} \\ &\quad \times \int \mathcal{D}\phi_{0c}^> \mathcal{D}\phi_{0s}^> e^{-S_0^>[\theta] + n'i\sqrt{2\pi}(T_{11}^\phi \phi_{0c}^> + T_{12}^\phi \phi_{0s}^>)}. \end{aligned} \quad (3.114)$$

As integrais de caminho na Eq. (3.114) podem ser calculadas pelo método de integrais gaussianas. Para $\theta_{0c}^>$, por exemplo, temos

$$\begin{aligned} S_0^>[\theta'_c] - ni\sqrt{2\pi}T_{21}^\theta \theta_{0c}^> &= \int_{\Delta} \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ |\omega| \theta_{0c}^>(-\omega) \theta_{0c}^>(\omega) + \right. \\ &\quad \left. -ni\sqrt{2\pi}T_{21}^\theta e^{-i\omega\tau} \theta_{0c}^>(\omega) \right\}. \end{aligned} \quad (3.115)$$

Fazendo a translação

$$\tilde{\theta}_{0c}^>(\omega) = \theta_{0c}^>(\omega) - \frac{ni}{|\omega|} \sqrt{\frac{\pi}{2}} T_{21}^\theta e^{i\omega\tau}, \quad (3.116)$$

obtemos

$$\begin{aligned} S_0^>[\theta'_c] - ni\sqrt{2\pi}T_{21}^\theta \theta_{0c}^> &= \int_{\Delta} \frac{d\omega}{2\pi} \left\{ |\omega| \tilde{\theta}_{0c}^>(\omega) \tilde{\theta}_{0c}^>(-\omega) + \frac{\pi(T_{21}^\theta)^2}{2|\omega|} \right\} \\ &= S_0^>[\tilde{\theta}'_c] + \frac{1}{2} (T_{21}^\theta)^2 \frac{d\Lambda}{\Lambda}. \end{aligned} \quad (3.117)$$

Integrando o campo $\tilde{\theta}_{0c}^>$ e fazendo o mesmo para os demais campos, obtemos

$$C = \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left[(T_{21}^\theta)^2 + (T_{22}^\theta)^2 + (T_{11}^\phi)^2 + (T_{12}^\phi)^2 \right] \frac{d\Lambda}{\Lambda} \right\}. \quad (3.118)$$

Podemos assim reescrever (3.113) como

$$\langle S_1 [\Phi, \Theta] \rangle_{>} = \gamma \int d\tau \sin \left[\sqrt{2\pi} \theta_s^< \right] \sin \left[\sqrt{2\pi} \phi_c^< \right] e^{-Dd\ell}, \quad (3.119)$$

onde $d\ell = d\Lambda/\Lambda = d \ln \Lambda$ é um parâmetro adimensional e

$$D = \frac{1}{2} \left[(T_{21}^\theta)^2 + (T_{22}^\theta)^2 + (T_{11}^\phi)^2 + (T_{12}^\phi)^2 \right] \quad (3.120)$$

é a chamada dimensão do operador.

A ação S_1 da Eq. (3.119) contém agora apenas frequências ω com $|\omega| < \Lambda'$. Para obter um modelo equivalente ao da Eq. (3.105), mas com amplitude γ renormalizada, precisamos recuperar o “cutoff” original fazendo $\Lambda' \rightarrow \Lambda$. Isso equivale a reescalar o tempo imaginário para $\tau' = \tau(1 - d\ell)$, o que fornece

$$Z = \int \prod_{\nu} \mathcal{D}\phi'_{0\nu}^< \mathcal{D}\theta'_{0\nu}^< e^{-S_0^<[\phi] - S_0^<[\theta]} e^{-S_1^{eff}[\phi, \theta]}, \quad (3.121)$$

com a ação efetiva

$$\langle S_1 [\phi, \theta] \rangle_{>} = \gamma' \int d\tau' \sin \left[\sqrt{2\pi} \theta_{0s}^< \right] \sin \left[\sqrt{2\pi} \phi_{0c}^< \right], \quad (3.122)$$

onde

$$\gamma' = \frac{e^{-Dd\ell}}{1 - d\ell} \gamma. \quad (3.123)$$

Logo, a equação que descreve o fluxo do grupo de renormalização de γ é

$$\frac{d\gamma}{d\ell} = (1 - D) \gamma. \quad (3.124)$$

Queremos expressar a dimensão D em função dos parâmetros do modelo de Luttinger (3.52). Notamos primeiro que a expressão (3.120) pode ser escrita na forma

$$D = \frac{1}{2} [T^\phi (T^\phi)^t]_{11} + \frac{1}{2} [T^\theta (T^\theta)^t]_{22}. \quad (3.125)$$

Usando a definição de T^θ e T^ϕ segundo as Eqs. (3.76) e (3.77), vemos que D não depende da segunda rotação S e se reduz a

$$D = \frac{1}{2} \left[\kappa \cos^2 \varphi + \frac{1}{\kappa} \sin^2 \varphi + \frac{1}{\mu} \cos^2 \varphi + \mu \sin^2 \varphi \right]. \quad (3.126)$$

A dimensão D depende implicitamente da diferença de velocidades ζ através do ângulo de rotação φ . Considere primeiro o limite $\zeta \rightarrow 0$. Nesse limite, as excitações de carga e spin são os modos normais do Hamiltoniano. Não há necessidade da rotação R (pois temos $\varphi = 0$) e as transformações T^θ e T^ϕ são dadas por

$$T^\phi = \begin{pmatrix} \sqrt{K_c} & 0 \\ 0 & \sqrt{K_s} \end{pmatrix} = (T^\theta)^{-1}. \quad (3.127)$$

Nesse caso, obtemos

$$D = \frac{1}{2} \left(K_c + \frac{1}{K_s} \right). \quad (3.128)$$

Para $\zeta \neq 0$, devemos encontrar D resolvendo as Eqs. (3.71), (3.72) e (3.73). Para ζ pequeno, podemos pensar em expandir a Eq. (3.126) em torno de $\varphi = 0$. Encontramos

$$\varphi(\zeta) = \frac{(K_c K_s v_2 - v_1) \zeta}{(K_c - K_s)(v_c + v_s)}. \quad (3.129)$$

Essa expressão só é válida para $K_c \neq K_s$. Para $K_c = K_s$ e $\zeta \rightarrow 0$, há uma descontinuidade no ângulo de rotação φ : as Eqs. (3.71), (3.72) e (3.73) são satisfeitas para $\varphi = \pm\pi/4$. A correção de ordem mais baixa em ζ é

$$\varphi = \pm \frac{\pi}{4} + \frac{(K_s^2 v_2 + v_1)(v_c - v_s) \zeta}{8K_s v_c v_s}. \quad (3.130)$$

A correção em D para ζ pequeno é de ordem ζ^2 , na forma

$$D = \frac{1}{2} \left(K_c + \frac{1}{K_s} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 D}{\partial \zeta^2} \right) \Big|_{\zeta=0} \zeta^2 + O(\zeta^4). \quad (3.131)$$

Calculando $(\partial^2 D / \partial \zeta^2)_0$ pela Eq. (3.126), obtemos

$$\begin{aligned}
 D = & \frac{K_c + K_s^{-1}}{2} + \frac{(K_c K_s v_2 - v_1)}{4K_c K_s^2 v_c v_s (v_c + v_s)^2} \\
 & \times [K_c K_s (K_c K_s v_2 + v_1) v_s^2 + 2(K_c^2 K_s^2 v_2 - v_1) v_c v_s \\
 & - (K_c K_s v_2 + v_1) v_c^2] \zeta^2. \tag{3.132}
 \end{aligned}$$

A Eq. (3.132) aplica-se a φ dado tanto pela Eq. (3.129) quanto pela Eq. (3.130). Isso porque, apesar da descontinuidade de φ em $K_c = K_s$, a dimensão D , que é a grandeza com significado físico, é bem comportada. Observe que a correção de ordem ζ^2 anula-se para $K_c K_s = v_1 / v_2$. De fato, o cancelamento acontece em todas as ordens de ζ porque essa é a condição que define a curva especial em que H_{LL} é diagonalizado pelo reescalamento simples da Eq. (3.78). Logo, sobre a curva $K_c K_s = v_1 / v_2$ a dimensão do operador de espalhamento independe de ζ e é dada por $D = (K_c + K_s^{-1}) / 2$.

A Eq. (3.132) no limite $\zeta \rightarrow 0$ difere da dimensão encontrada no caso de uma impureza não magnética [21], para a qual $D_{imp} = (K_c + K_s) / 2$. Essa diferença deve ser atribuída ao espalhamento com inversão do spin, evidenciado na Eq. (3.55). Em contraste, uma impureza não magnética acopla-se com a densidade de carga dos elétrons através da perturbação

$$H_{imp} = \sum_{\sigma} \int dx V(x) \psi_{\sigma}^{\dagger}(x) \psi_{\sigma}(x). \tag{3.133}$$

Em termos dos campos bosônicos,

$$H_{imp} = \frac{2V_{2k_F}}{\pi\alpha} \cos[\sqrt{2\pi}\phi_s(0)] \cos[\sqrt{2\pi}\phi_c(0)], \tag{3.134}$$

onde V_{2k_F} é o modo $2k_F$ do potencial localizado $V(x)$. Comparando com o termo $H_w^{(b)}$ da Eq. (3.63), vemos que este difere de H_{imp} porque depende do campo dual θ_s e não de ϕ_s . Por isso, a dimensão D é obtida de D_{imp} trocando $K_s \rightarrow 1/K_s$.

Voltamos à Eq. (3.124) para determinar o diagrama de fases do sistema em função dos parâmetros de interação. Essa equação diz como renormalizar a amplitude de espalhamento γ quando se removem os modos rápidos do problema. Se $D > 1$ (ou $K_c + K_s^{-1} > 2$ no limite $\zeta \rightarrow 0$), γ flui para zero à medida que se reduz o “cutoff” Λ . Nesse caso, o operador (3.80) é irrelevante. O ponto fixo é o modelo de Luttinger da Eq. (3.75) com $\gamma = 0$ e transmissão total de carga e spin através da parede de domínio. Esse comportamento é favorecido para interações atrativas, pois, quanto mais atrativa a interação, maior o parâmetro K_c . Se $D < 1$ (ou $K_c + K_s^{-1} < 2$ no limite $\zeta \rightarrow 0$), situação favorecida no caso de interações repulsivas (menor K_c), γ cresce sob o fluxo do RG. Nesse caso, o operador (3.80) é relevante e o fluxo do RG leva o modelo para o limite de acoplamento forte ($\gamma = \infty$). O ponto fixo em questão corresponde a dois líquidos de Luttinger semi-infinitos com spins polarizados em direções opostas: spin “up” para $x < 0$ e spin “down” para $x > 0$. A parede de domínio pode ser tratada nesse limite como um termo de “hopping” perturbativo que inverte o spin do elétron no processo de tunelamento

$$H_w^{eff} = -t\psi_1^\dagger(0^-)\sigma_x\psi_2(0^+) + H.c., \quad (3.135)$$

onde ψ_1 (ψ_2) é o operador de campo dos elétrons situados no lado esquerdo (direito) da parede. Esse termo aparece no problema de uma impureza magnética num líquido de Luttinger [68]. A dimensão do operador (3.135) é obtida fazendo $K_c \rightarrow 1/K_c$ e $K_s \rightarrow 1/K_s$ no resultado de espalhamento fraco. A equação de fluxo para o parâmetro de “hopping” desprezando a polarização do líquido de Luttinger (limite $\zeta \rightarrow 0$) é

$$\frac{dt}{d\ell} = \left[1 - \frac{1}{2} \left(\frac{1}{K_c} + K_s \right) \right] t. \quad (3.136)$$

Conseqüentemente, o termo de “hopping” (3.135) tende a ser irrelevante para interações repulsivas ($K_c < 1$). Logo, o espalhamento na parede cresce para

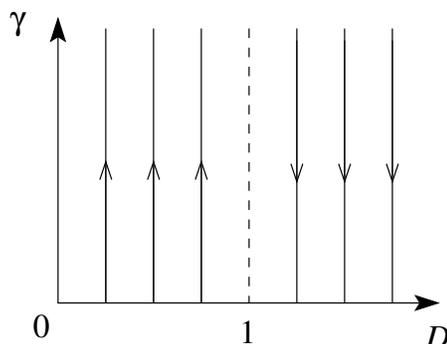


Figura 3.3: Fluxo do grupo de renormalização. A amplitude de espalhamento γ cresce se $D < 1$ e vai a zero se $D > 1$.

interações repulsivas também no limite de acoplamento forte e o ponto fixo com $\gamma = \infty$ é um isolante perfeito de carga e spin (figura 3.3). Separando as fases de líquido de Luttinger e isolante perfeito, existe uma curva marginal definida pela condição $D = 1$. Essa curva inclui o ponto não interagente $(1, 1)$, em que o espalhamento pela parede de domínio produz uma resistência finita, como vimos na Eq. (2.79). A linha contínua na figura 3.4 representa a curva marginal no limite $\zeta \rightarrow 0$ (dada por $K_c + K_s^{-1} = 2$). A linha tracejada é a curva marginal calculada numericamente (via Eq. (3.126)) para $\zeta = 0, 4$ e $v_c = v_s = v_1 = v_2 = v_F$. Vemos que a correção para ζ finito é pequena na vizinhança do ponto não interagente, mas cresce rapidamente perto das curvas que limitam a estabilidade das excitações, definidas pela Eq. (3.67) (curva pontilhada na figura 3.4). Na fronteira inferior ($K_c K_s = \zeta^2 v_1^2 / v_c v_s$), $K_c K_s \sim \zeta^2 \ll 1$; o coeficiente de ζ^2 na Eq. (3.132) fica $\sim (K_c K_s)^{-1}$ e é sempre positivo. Na fronteira superior ($K_c K_s = v_c v_s / \zeta^2 v_2^2$), $K_c K_s \sim 1 / \zeta^2 \gg 1$; o coeficiente de ζ^2 fica $\sim (K_c K_s)^2$ e também é sempre positivo. Assim, o efeito do campo magnético é “espremer” a curva marginal entre as fronteiras de estabilidade do líquido de Luttinger.

Por fim, vamos analisar o termo de espalhamento $H_w^{(f)}$ da Eq. (3.62). A equação de fluxo pode ser obtida de maneira análoga ao procedimento aplicado para $H_w^{(b)}$. Definindo $\delta = k_F A_{2\zeta k_F} / m\pi\alpha$ como a amplitude de espa-

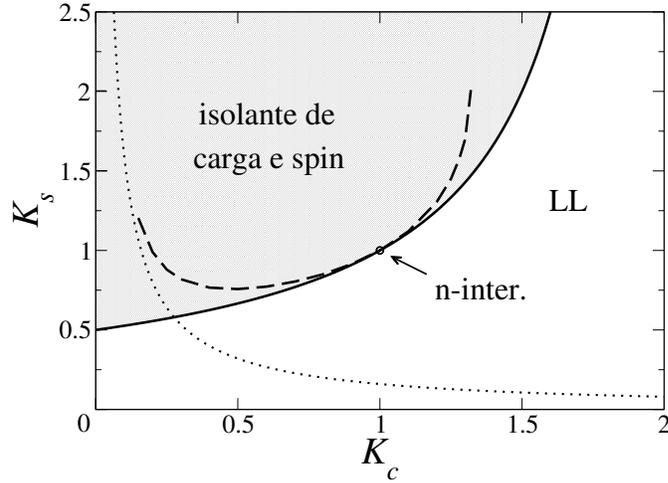


Figura 3.4: Diagrama de fases de um líquido de Luttinger acoplado a uma parede de domínio, mostrando as curvas marginais ($D = 1$) para $\zeta = 0$ (linha contínua) e $\zeta = 0,4$ com todas as velocidades iguais (linha tracejada). À esquerda e acima da curva marginal, o sistema é um isolante perfeito de carga e spin. A linha pontilhada é a fronteira inferior de estabilidade do líquido de Luttinger para $\zeta = 0,4$.

lhamento correspondente, uma simples inspeção da dependência do termo da Eq. (3.62) com os campos bosônicos leva à equação de fluxo no limite $\zeta \rightarrow 0$

$$\frac{d\delta}{dl} = \left[1 - \frac{1}{2} \left(K_s + \frac{1}{K_s} \right) \right] \delta. \quad (3.137)$$

Observe que $H_w^{(f)}$ é marginal para $K_s = 1$. Este caso inclui o ponto não interagente, em que o espalhamento por esse termo é finito. No entanto, como o campo magnético $\zeta \neq 0$ quebra a simetria $SU(2)$, o caso interagente mais geral é $K_s \neq 1$, em que o operador $H_w^{(f)}$ é irrelevante. De fato, para a correspondência com o modelo de Hubbard com campo magnético, devemos tomar $K_s \approx 1 + [2 \ln(\zeta^{-1})]^{-1}$ (Ref. [65]). Note, aliás, que essa correção devida à dependência implícita de K_s com ζ domina sobre a correção quadrática da Eq. (3.132). Embora a dimensão que aparece na Eq. (3.137) também

tenha uma correção de ordem ζ^2 , a correção é pequena na vizinhança do ponto não interagente e não deve modificar a irrelevância de $H_w^{(f)}$. Portanto, o termo de “backscattering” $H_w^{(b)}$ permanece como o único termo relevante para determinar o diagrama de fases da figura 3.4.

3.5 Cálculo perturbativo da resistividade

A análise do grupo de renormalização permitiu determinar o diagrama de fases da condutância do estado fundamental do sistema de elétrons interagentes acoplados a uma parede de domínio. A $T = 0$, há uma fase de isolante perfeito com condutância nula e uma fase com condutância perfeita $G = 2K_c e^2/h$ (igual à condutância de carga do líquido de Luttinger). Entretanto, para confirmar experimentalmente o comportamento de líquido de Luttinger, é importante obter a dependência da resistência elétrica com a frequência da perturbação ou com a temperatura. O objetivo desta seção é calcular a resistividade para frequência e temperatura finitas, usando a fórmula de Mori da Eq. (2.88). Encontramos que a resistividade varia como uma lei de potência com expoente $\nu = 2(D - 1)$, onde D é a dimensão calculada na seção anterior.

3.5.1 Frequência finita

Queremos obter uma expressão para a resistividade devida ao espalhamento na parede de domínio associada ao termo $H_w^{(b)}$ da Eq. (3.80), que é o termo mais relevante, em função da frequência.

O operador corrente para o líquido de Luttinger da Eq. (3.52) pode ser obtido a partir da equação de continuidade da carga. A densidade de carga é

$$\rho_c(x) = e[\rho_\uparrow(x) + \rho_\downarrow(x)] = n_c e + e\sqrt{\frac{2}{\pi}}\partial_x\phi_c. \quad (3.138)$$

A equação de movimento

$$\dot{\rho}_c(x) = -i [\rho_c(x), H_{LL}]$$

pode ser reescrita na forma de uma equação de continuidade para a densidade de carga

$$\frac{\partial \rho_c}{\partial t} + \frac{\partial j_c}{\partial x} = 0, \quad (3.139)$$

onde $j_c(x)$ é a densidade de corrente de carga ¹

$$j_c(x) = -e \sqrt{\frac{2}{\pi}} [v_c K_c \partial_x \theta_c(x) + \zeta v_F \partial_x \theta_s(x)]. \quad (3.140)$$

Por causa da diferença de velocidade entre as excitações de spin “up” e “down”, a corrente de carga depende não só do campo dual de carga θ_c , como acontece normalmente, mas também do campo de spin θ_s . Calculamos então $\dot{j}_c(x) = -i [j_c(x), H]$ para $H = H_{LL} + H_w^{(b)}$ e integramos sobre x para obter o operador $\dot{J}_c = \int dx \dot{j}_c(x)$. Omitindo os termos integráveis (que são constantes), temos

$$\dot{J}_c = -2ev_c K_c \frac{\zeta k_F A_{2k_F}}{m\pi\alpha} \sin [\sqrt{2\pi}\theta_s(0)] \cos [\sqrt{2\pi}\phi_c(0)]. \quad (3.141)$$

Para calcular a resistividade pela fórmula de Mori, precisamos do valor esperado

$$\begin{aligned} \langle \dot{J}_c(t) \dot{J}_c(0) \rangle &= 4e^2 v_c^2 K_c^2 \left(\frac{\zeta k_F A_{2k_F}}{m\pi\alpha} \right)^2 \\ &\times \langle \sin [\sqrt{2\pi}\theta_s(0, t)] \cos [\sqrt{2\pi}\phi_c(0, t)] \\ &\times \sin [\sqrt{2\pi}\theta_s(0, 0)] \cos [\sqrt{2\pi}\phi_c(0, 0)] \rangle. \end{aligned} \quad (3.142)$$

Como θ_s e ϕ_c devem ser escritos em termos de $\theta'_{c,s}$ e $\phi'_{c,s}$, calculamos pri-

¹Note que esta representação bosonizada foi construída sobre o Hamiltoniano já transformado pela transformação de gauge (2.74). Por isso, não é preciso transformar de novo o operador corrente como fizemos na Eq. (2.90).

meiro as correlações de exponenciais bosônicas $\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(x,t)} e^{\pm i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(0,0)} \right\rangle$ e $\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(x,t)} e^{\pm i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(0,0)} \right\rangle$ com $a = T_{ij}^\theta$ e $b = T_{ij}^\phi$. A decomposição do campo dual θ'_ν em modos normais, analogamente às Eqs. (3.16) e (3.18), é

$$\theta'_\nu(x, t) = i \sum_{r, q > 0} \frac{e^{-\alpha q/2}}{\sqrt{2qL}} \left[d_{qr\nu} e^{i(rqx - \omega_\nu(q)t)} - d_{qr\nu}^\dagger e^{-i(rqx - \omega_\nu(q)t)} \right], \quad (3.143)$$

onde $d_{qr\nu}$ são os operadores de aniquilação das excitações mistas carga-spin com frequência $\omega_\nu(q) = v'_\nu q$. As correlações de exponenciais bosônicas no estado fundamental são calculadas facilmente tomando o ordenamento normal dos operadores [10]. Podemos separar a parte de criação da parte de aniquilação

$$\theta'_\nu = \theta'^+_\nu + \theta'^-_\nu, \quad (3.144)$$

onde

$$\theta'^+_\nu(x, t) = -i \sum_{r, q > 0} \frac{e^{-\alpha q/2}}{\sqrt{2qL}} d_{qr\nu}^\dagger e^{-i(rqx - \omega_\nu(q)t)}, \quad (3.145)$$

$$\theta'^-_\nu(x, t) = i \sum_{r, q > 0} \frac{e^{-\alpha q/2}}{\sqrt{2qL}} d_{qr\nu} e^{i(rqx - \omega_\nu(q)t)}. \quad (3.146)$$

O comutador dessas partes é constante

$$[\theta'^+_\nu(x, t), \theta'^-_\nu(0, 0)] = \frac{1}{2\pi} \ln \left[\frac{2\pi}{L} \sqrt{x^2 + (\alpha - iv'_\nu t)^2} \right]. \quad (3.147)$$

Usando então a relação conhecida

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{[A,B]/2} \quad (3.148)$$

se $[[A, B], A] = [[A, B], B] = 0$, podemos escrever

$$e^{i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(x,t)} e^{\pm i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(0,0)} = \frac{(2\pi\alpha/L)^{a^2}}{\left[\frac{2\pi}{L}\sqrt{(\alpha + iv'_\nu t)^2 + x^2}\right]^{\mp a^2}} \times : e^{i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(x,t)} e^{\pm i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(0,0)} :, \quad (3.149)$$

onde $::$ denota o ordenamento normal bosônico. Tomando a média no estado fundamental, obtemos

$$\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(x,t)} e^{\pm i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(0,0)} \right\rangle = \frac{(2\pi\alpha/L)^{a^2}}{\left[\frac{2\pi}{L}\sqrt{(\alpha + iv'_\nu t)^2 + x^2}\right]^{\mp a^2}}. \quad (3.150)$$

Notamos porém que, para o sinal $-$ na Eq. (3.150),

$$\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(x,t)} e^{i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(0,0)} \right\rangle \sim L^{-2a^2} \rightarrow 0$$

no limite termodinâmico. Por isso, a única correlação que vamos manter é

$$\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(x,t)} e^{-i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(0,0)} \right\rangle = \left[\frac{\alpha}{\sqrt{(\alpha + iv'_\nu t)^2 + x^2}} \right]^{a^2}. \quad (3.151)$$

Em particular, para campos no mesmo ponto $x = 0$ temos

$$\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(t)} e^{-i\sqrt{2\pi}a\theta'_\nu(0)} \right\rangle = \left(\frac{\alpha}{\alpha + iv'_\nu t} \right)^{a^2}. \quad (3.152)$$

Da mesma maneira, encontramos para os campos ϕ'_ν

$$\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(t)} e^{-i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(0)} \right\rangle = \left(\frac{\alpha}{\alpha + iv'_\nu t} \right)^{b^2}. \quad (3.153)$$

Além disso, as correlações entre θ'_ν e ϕ'_ν no mesmo ponto são nulas. Aplicando

as Eqs. (3.152) e (3.153) na Eq. (3.142), obtemos

$$\begin{aligned} \langle \dot{J}_c(t) \dot{J}_c(0) \rangle &= e^2 v_c^2 K_c^2 \left(\frac{\zeta k_F A_{2k_F}}{m\pi\alpha} \right)^2 \left[\frac{\alpha}{\alpha + iv'_c t} \right]^{(T_{11}^\phi)^2 + (T_{21}^\theta)^2} \\ &\quad \times \left[\frac{\alpha}{\alpha + iv'_s t} \right]^{(T_{12}^\phi)^2 + (T_{22}^\theta)^2}. \end{aligned} \quad (3.154)$$

Como é permitido tomar $\alpha \rightarrow 0$ no denominador das correlações ($\alpha > 0$ apenas indica a posição do pólo em relação ao eixo real na integração em t), reescalamos $\alpha \rightarrow v'_{c,s} \alpha$ separadamente em cada termo e escrevemos

$$\langle \dot{J}_c(t) \dot{J}_c(0) \rangle = \left(\frac{ev_c K_c \zeta A_{2k_F}}{\pi} \right)^2 \left(\frac{\alpha}{v} \right)^{2(D-1)} (\alpha + it)^{-2D}, \quad (3.155)$$

onde

$$v^{2(D-1)} = \frac{(v'_c)^{(T_{11}^\phi)^2 + (T_{21}^\theta)^2} (v'_s)^{(T_{12}^\phi)^2 + (T_{22}^\theta)^2}}{v_F^2}. \quad (3.156)$$

Substituindo a Eq. (3.155) na Eq. (4.48), obtemos

$$\langle \langle \dot{J}; \dot{J} \rangle \rangle_{\omega+i\eta} = -\frac{i}{L} \left(\frac{ev_c K_c \zeta A_{2k_F}}{\pi} \right)^2 \left(\frac{\alpha}{v} \right)^{2(D-1)} \times I,$$

onde I é a integral

$$I = \int_0^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)t} \left\{ \frac{1}{(\alpha + it)^{2D}} - \frac{1}{(\alpha - it)^{2D}} \right\}. \quad (3.157)$$

Definimos o expoente

$$\nu = 2(D - 1) \quad (3.158)$$

e integramos a Eq. (3.157) por partes para obter

$$I = \frac{\omega}{1 + \nu} \int_0^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\eta)t} \{ (\alpha + it)^{-1-\nu} + (\alpha - it)^{-1-\nu} \}. \quad (3.159)$$

Segundo a Ref. [69], a integral acima pode ser escrita no limite $\alpha \rightarrow 0$ como

$$I = \frac{\omega}{1 + \nu} \Gamma(1 - \nu) \frac{1 - e^{-i\pi\nu}}{i\nu}. \quad (3.160)$$

Com isso, a função de correlação retardada fica

$$\begin{aligned} \langle\langle J; J \rangle\rangle_{\omega+i\eta} &= -\frac{i}{L} \omega \left(\frac{ev_c K_c \zeta A_{2k_F}}{\pi} \right)^2 \left(\frac{\alpha}{v} \right)^\nu \\ &\times \frac{\Gamma(1 - \nu)}{1 + \nu} e^{-i\pi\nu/2} \frac{\sin(\pi\nu/2)}{\nu/2}. \end{aligned} \quad (3.161)$$

Substituindo na fórmula de Mori (Eq. (2.88)), encontramos

$$\rho = \frac{2\pi}{e^2} \frac{1}{L} \left(\frac{mv_c K_c \zeta A_{2k_F}}{\pi n} \right)^2 \frac{\Gamma(1 - \nu)}{1 + \nu} \cos\left(\frac{\pi\nu}{2}\right) \frac{\sin(\pi\nu/2)}{\pi\nu} \left(\frac{\omega\alpha}{v} \right)^\nu. \quad (3.162)$$

No limite não interagente $\nu \rightarrow 0$, recuperamos o primeiro termo da resistência da Ref. [30] para $\zeta \ll 1$ (veja a Eq. (2.79))

$$R_{el} = L\rho(\nu = 0) = \frac{h}{e^2} \frac{\pi^2}{4} \frac{\zeta^2}{2 \cosh^2(\pi k_F \lambda)}. \quad (3.163)$$

O outro termo da Eq. (2.79) corresponde ao espalhamento por $H_w^{(f)}$ da Eq. (3.62), que é marginal se $K_s = 1$, mas irrelevante se $K_s \neq 1$.

A Eq. (3.162) concorda com a análise de RG da seção 3.4. Para $\nu > 0$ ($D > 1$), a resistência $R = \rho L$ vai a zero quando $\omega \rightarrow 0$. Isso significa que, para $\omega = 0$, o sistema é um condutor perfeito: os elétrons não são espalhados na parede de domínio, *mesmo em paredes bem estreitas*. Para $\nu < 0$ ($D < 1$), a resistência diverge quando $\omega \rightarrow 0$ e o sistema comporta-se como um isolante. Na verdade, esperamos que esse comportamento seja válido até frequências da ordem de $\omega^* = v_F/L$, porque abaixo dessa frequência a condutância passa a ser dominada pelos contatos não interagentes [20]. No

limite $\zeta \rightarrow 0$, podemos escrever simplesmente

$$\rho \propto \omega^{K_c + K_s^{-1} - 2}. \quad (3.164)$$

Assim, para $K_s \approx 1$, $D < 1$ é verificado para $K_c < 1$. Como discutimos antes, interações repulsivas tendem a promover o comportamento isolante de maneira análoga ao que acontece no espalhamento por uma impureza não magnética.

Esse resultado pode ser interpretado em termos do espalhamento singular dos elétrons, em analogia com o cálculo da Ref. [22] para uma impureza não magnética. Uma parede de domínio é uma inomogeneidade (um gradiente de magnetização localizado) que se acopla com o spin dos elétrons de condução. Conseqüentemente, ela induz oscilações de Friedel com frequência $2k_F$ na densidade de spin [70], que têm alcance bastante longo em 1D (decaem como x^{-1}). Como os elétrons interagem entre si, o espalhamento efetivo é dado pelo espalhamento na parede “vestida” com o potencial Hartree-Fock das oscilações de densidade de spin (figura 3.5). De maneira análoga ao que acontece no espalhamento por uma impureza não magnética, a correção no coeficiente de reflexão diverge para elétrons que incidem com momento k_F . Como resultado, os elétrons são totalmente refletidos pela parede e o sistema é um isolante perfeito.

3.5.2 Temperatura finita

A Eq. (3.162) diz que a resistividade ρ depende da escala de energia da perturbação (no caso, a frequência ω) como uma lei de potência de expoente $\nu = 2(D - 1)$. Se o problema de frequência finita for trocado pelo de frequência zero a temperatura finita, as excitações do sistema serão exploradas dentro da escala de energia fixada pela temperatura T . Por isso, deve-se esperar uma dependência semelhante para a resistividade em função da temperatura.

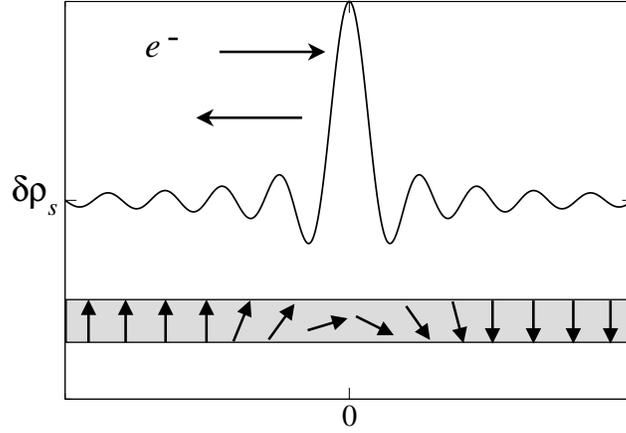


Figura 3.5: Espalhamento singular dos elétrons pelas ondas de densidade de spin induzidas por uma parede de domínio.

Para calcular a resistividade $\rho(T)$, precisamos das correlações das exponenciais bosônicas (3.152) e (3.153) a temperatura finita. Usamos a formulação de integral de caminho em tempo imaginário $\tau = it$ para escrever

$$\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(\tau)} e^{-i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(0)} \right\rangle = \int \mathcal{D}\phi'_\nu e^{-S_0[\phi'_\nu]} e^{i\sqrt{2\pi}b[\phi'_\nu(\tau) - \phi'_\nu(0)]}, \quad (3.165)$$

onde, segundo a Eq. (3.106),

$$S_0[\phi'_\nu] = \frac{1}{\beta} \sum_n |\omega_n| \phi'_\nu(\omega_n) \phi'_\nu(-\omega_n). \quad (3.166)$$

É conveniente reescrever a ação em termos do campo Φ_ν dado pela translação

$$\Phi_\nu(\omega_n) = \phi'_\nu(\omega_n) - i\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{b}{|\omega_n|} (e^{-i\omega_n\tau} - 1). \quad (3.167)$$

O argumento da exponencial na Eq. (3.165) fica

$$S_0[\phi'_\nu] - i\sqrt{2\pi}b[\phi'_\nu(\tau) - \phi'_\nu(0)] = S_0[\Phi_\nu] + \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{\pi b^2}{|\omega_n|} (1 - \cos \omega_n \tau). \quad (3.168)$$

Podemos então integrar o campo Φ_ν na Eq. (3.165) para obter

$$\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(\tau)} e^{-i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(0)} \right\rangle = \exp \left\{ -\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{\pi b^2}{|\omega_n|} (1 - \cos \omega_n \tau) \right\}. \quad (3.169)$$

Precisamos calcular a soma

$$-\frac{\pi b^2}{\beta} \sum_n \frac{1 - \cos \omega_n \tau}{|\omega_n|} = -b^2 \operatorname{Re} \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\varepsilon n}}{n} [1 - e^{-i2\pi n/\beta}] \right\}, \quad (3.170)$$

onde $\varepsilon \rightarrow 0^+$ é um parâmetro de regularização adimensional. Para conectar com a correlação a $T = 0$ na Eq. (3.153), devemos fixar

$$\varepsilon = \frac{2\pi\alpha}{\beta v'_\nu}. \quad (3.171)$$

Com isso, temos

$$-\frac{\pi b^2}{\beta} \sum_n \frac{1 - \cos \omega_n \tau}{|\omega_n|} = b^2 \ln \left\{ \left| \frac{\sinh \frac{\pi\alpha}{\beta v'_\nu}}{\sinh \frac{\pi}{\beta v'_\nu} (\alpha + i v'_\nu \tau)} \right| \right\}. \quad (3.172)$$

Substituindo a Eq. (3.172) na Eq. (3.169) e tomando $\pi\alpha/\beta v'_\nu \ll 1$, encontramos

$$\left\langle e^{i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(\tau)} e^{-i\sqrt{2\pi}b\phi'_\nu(0)} \right\rangle = \left(\frac{\pi\alpha}{\beta v'_\nu} \right)^{b^2} \left| \sinh \frac{\pi}{\beta v'_\nu} (\alpha + i v'_\nu \tau) \right|^{-b^2}. \quad (3.173)$$

Podemos agora calcular a função de correlação térmica da Eq. (2.89).

Substituindo a Eq. (3.173) na Eq. (2.89) e reescalando $\alpha \rightarrow v'_{c,s}\alpha$, obtemos

$$\begin{aligned} \langle\langle \dot{J}; \dot{J} \rangle\rangle_{i\omega_l} &= -\frac{1}{L} \left(\frac{ev_c K_c \zeta A_{2k_F}}{\pi} \right)^2 \left(\frac{\pi}{\beta} \right)^{2D} \left(\frac{\alpha}{v} \right)^{2(D-1)} \\ &\quad \times \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} \left| \sinh \frac{\pi}{\beta} (\alpha + i\tau) \right|^{-2D}. \end{aligned} \quad (3.174)$$

Integrando por partes, obtemos

$$\begin{aligned} \langle\langle \dot{J}; \dot{J} \rangle\rangle_{i\omega_l} &= \frac{1}{L} \left(\frac{ev_c K_c \zeta A_{2k_F}}{\pi} \right)^2 \left(\frac{\pi}{\beta} \right)^{2D} \left(\frac{\alpha}{v} \right)^{2(D-1)} i\beta\omega_l \\ &\quad \times \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} F(\tau/\beta), \end{aligned} \quad (3.175)$$

onde definimos a função

$$F(x) = \int_0^x dx' |\sinh(\varepsilon + i\pi x')|^{-2D}, \quad (3.176)$$

com $\varepsilon \rightarrow 0^+$. Observe que o termo $e^{i\omega_l \tau} F(\tau/\beta)|_0^\beta$ que aparece na integração por partes cancela exatamente o termo de ordem zero em $\omega \langle\langle \dot{J}; \dot{J} \rangle\rangle_0$ na Eq. (2.88) e por isso foi omitido. Em seguida, fazemos a mudança de variável $u = \tau/\beta$ e substituímos na Eq. (2.88). Tomando o limite $\omega \rightarrow 0$, obtemos finalmente

$$\rho = \frac{2\pi}{e^2} \frac{1}{L} \left(\frac{mv_c K_c \zeta A_{2k_F}}{\pi n} \right)^2 \left(\frac{\pi\alpha}{\beta v} \right)^{2(D-1)} \frac{\pi}{2} \int_0^1 du F(u). \quad (3.177)$$

Logo, a dependência de ρ com a temperatura é dada por

$$\rho(T) \propto T^{2(D-1)} = T^\nu, \quad (3.178)$$

que é uma lei de potência com o mesmo expoente da Eq. (3.162). Portanto, num sistema unidimensional, a interação eletrônica leva a uma *magnetorre-*

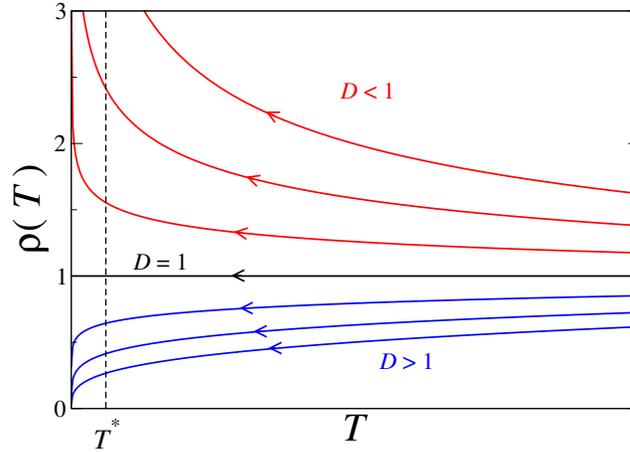


Figura 3.6: Magnetorresistência de parede de domínio em função da temperatura. Para $T \rightarrow 0$, a resistência vai a zero se $D > 1$ (favorecido por interações atrativas) e diverge se $D < 1$ (favorecido por interações repulsivas).

sistência de parede de domínio *dependente da temperatura*. Para $D > 1$, a resistência é uma função crescente da temperatura e anula-se para $T \rightarrow 0$. A temperatura zero o sistema é um condutor perfeito. Para $D < 1$, a resistência é uma função decrescente da temperatura e diverge para $T \rightarrow 0$ (figura 3.6). No limite $\zeta \rightarrow 0$, temos

$$\rho(T) \propto T^{K_c + K_s^{-1} - 2}.$$

Novamente, o comportamento isolante é favorecido para interações repulsivas. Nesse caso, espera-se que a resistência cresça com a redução da temperatura até a temperatura de corte $T^* = \hbar v_F / k_B L$. Esse resultado é relevante tendo em vista a busca por materiais que exibam uma magnetorresistência elevada. Em princípio, a aplicação de campos magnéticos possibilita inserir ou remover uma parede de domínio do sistema e, assim, alternar entre um isolante perfeito e um líquido de Luttinger com condutância ideal.

Capítulo 4

Fônons e mágnons

Uma das fontes mais importantes de resistência elétrica num metal é o espalhamento dos elétrons de condução por vibrações da rede. Em três dimensões, a fórmula de Bloch [71] prevê uma dependência em T^5 para a resistividade devida a fônons em baixas temperaturas. Em metais unidimensionais, onde a superfície de Fermi é constituída simplesmente por dois pontos disjuntos, os únicos fônons capazes de alterar a corrente eletrônica em baixas temperaturas são os de momento $q \approx 2k_F$. Esse processo de espalhamento inelástico depende da ocupação de fônons de momento grande. Por isso, a resistividade resultante segue uma lei de Arrhenius $\rho \sim e^{-T_A/T}$, onde a temperatura de ativação é $T_A = \omega(2k_F)$, a energia do fônon de momento $2k_F$. Para fônons acústicos, com dispersão linear $\omega_{ac}(k) = vk$, a energia de ativação pode ser menor do que 10 K para densidades eletrônicas suficientemente baixas [72]. Para fônons ópticos, no entanto, a energia típica $\omega_{op}(k) = \Omega = cte$ costuma suprimir o espalhamento em baixas temperaturas. Por exemplo, uma estimativa para a energia de um fônon ótico num nanotubo de carbono metálico é $\hbar\Omega \approx 0.2 \text{ eV} \sim 2400 \text{ K}$ [73].

Um acoplamento forte com fônons tem sido apontado como peça fundamental para entender a magnetorresistência colossal observada em mangânitas. Desde que se verificou que o modelo de dupla troca não podia, por

si só, explicar os resultados experimentais [27], o efeito é entendido como uma transição entre uma fase metálica ferromagnética e uma fase isolante desordenada com forte acoplamento Jahn-Teller. A existência de uma transição magnética associada à ativação da interação elétron-fônon sugere uma importante conjunção entre modos magnéticos e fônons nesses compostos.

Inspirados por esse fato, analisamos um modelo em que os fônons assumem o papel de mediadores da interação entre elétrons de condução e mágnons num fio magnético. No modelo em questão, tomamos $J_K = 0$, desprezando o acoplamento Kondo entre elétrons de condução e spins localizados. Em contrapartida, introduzimos um termo de interação entre mágnons e fônons ópticos através da dependência da constante de troca na separação interatômica. Integramos os graus de liberdade dos fônons para obter um modelo efetivo em baixas energias contendo um termo de espalhamento elétron-mágnon. Por fim, calculamos perturbativamente o efeito desse termo sobre a resistividade do sistema. Encontramos que o processo é ativado numa escala de energia definida pelo mágnon de momento k_F .

4.1 Acoplamento elétron-fônon

Queremos incluir no modelo a vibração dos íons da rede em torno de suas posições de equilíbrio. Para isso, considere que cada íon move-se como um oscilador harmônico independente devido ao potencial criado por seus vizinhos. Esse sistema é descrito pelo modelo de Einstein

$$H_{ph} = \sum_j \left(\frac{P_j^2}{2M} + \frac{1}{2} M \Omega^2 Q_j^2 \right), \quad (4.1)$$

onde Ω é a frequência da oscilação, M é a massa do íon e Q_j e P_j são, respectivamente, a coordenada e o momento do íon no sítio j , com

$$[Q_i, P_j] = i\delta_{ij}. \quad (4.2)$$

Definimos o operador de aniquilação

$$b_j = \sqrt{\frac{M\Omega}{2}} \left(Q_j + i \frac{P_j}{M\Omega} \right), \quad (4.3)$$

que destrói um fônon óptico (não dispersivo) de frequência Ω no sítio j . Podemos definir também o operador de aniquilação no espaço de momento b_q por

$$b_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqja} b_q. \quad (4.4)$$

Tanto b_j como b_q satisfazem relações de comutação bosônicas como as das Eqs. (2.47) e (2.48). O Hamiltoniano (4.1) pode ser escrito na forma

$$H_{ph} = \Omega \sum_q \left(b_q^\dagger b_q + \frac{1}{2} \right), \quad (4.5)$$

ou ainda

$$H_{ph} = \sum_q \left[\frac{P_q P_{-q}}{2M} + \frac{M\Omega^2}{2} Q_q Q_{-q} \right], \quad (4.6)$$

onde definimos

$$Q_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-iqx_i} Q_i = \frac{b_q + b_{-q}^\dagger}{\sqrt{2M\Omega}}, \quad (4.7)$$

$$P_{-q} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-iqx_i} P_i = i \sqrt{\frac{M\Omega}{2}} (b_{-q} - b_q^\dagger). \quad (4.8)$$

Os íons de uma rede cristalina criam um potencial periódico que age sobre os elétrons itinerantes. Por isso, as vibrações da rede afetam a dinâmica eletrônica através da chamada interação elétron-fônon [5]. Considere o potencial unidimensional que atua sobre um elétron no sítio i

$$V(x_i) = \sum_j V(x_i - X_j), \quad (4.9)$$

onde $X_j = ja + Q_j$ é a posição do íon. Para pequenas vibrações, podemos tratar a Eq. (4.9) como uma expansão em Q_j . O termo de ordem zero dá origem à teoria de bandas eletrônicas [54]. O termo de primeira ordem nas oscilações é da forma

$$V^{(1)}(x_i) = \sum_j Q_j \nabla V(x_i - ja), \quad (4.10)$$

ou em segunda quantização

$$V = \sum_{i\sigma} \sum_j Q_j c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \langle i | \nabla V(x - ja) | i \rangle. \quad (4.11)$$

Uma simplificação extra é tomar a interação apenas entre o elétron e o íon no mesmo sítio, adotando

$$\langle i | \nabla V(x - ja) | i \rangle = g\delta_{ij}, \quad (4.12)$$

onde g é uma constante de acoplamento. Isso dá origem ao acoplamento Holstein [74] da coordenada do íon com a densidade eletrônica

$$H_{e-ph} = g \sum_{j\sigma} c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma} Q_j. \quad (4.13)$$

Em termos dos operadores de criação e aniquilação, temos

$$H_{e-ph} = \frac{\tilde{g}}{\sqrt{N}} \sum_{kq\sigma} c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k\sigma} (b_q + b_{-q}^\dagger), \quad (4.14)$$

onde $\tilde{g} = g/\sqrt{2M\Omega}$. O Hamiltoniano na forma (4.14) mostra que os processos lineares da interação elétron-fônon são absorção de um fônon de momento q e emissão de um fônon de momento $-q$. Em ambos os casos, o elétron que entra com momento k é espalhado com momento $k+q$. Na troca de momento entre elétron e rede, o momento total é conservado.

4.2 Interação mágnon-fônon

A magnitude da interação de troca entre spins localizados depende da sobreposição de orbitais situados em sítios vizinhos e por isso é uma função da separação entre os íons. Essa dependência dá origem ao termo de interação mágnon-fônon [75]. Considere o modelo de Heisenberg ferromagnético

$$H_S = - \sum_j J_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}, \quad (4.15)$$

onde $J_j = J(|X_{j+1} - X_j|) > 0$. Para pequenos deslocamentos $Q_j = X_j - ja$ a partir do equilíbrio, podemos expandir

$$J_j \approx J_H + \Upsilon (Q_{j+1} - Q_j), \quad (4.16)$$

onde $\Upsilon = [dJ/du]_{Q_j=0}$. O termo de ordem zero nos deslocamentos dá origem ao Hamiltoniano de Heisenberg da Eq. (2.1). O termo Υ acopla os deslocamentos dos íons aos spins localizados

$$H_{mag-ph} = -\Upsilon \sum_j (Q_{j+1} - Q_j) \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}. \quad (4.17)$$

No limite contínuo (comprimentos de onda longos), podemos aproximar

$$Q_{j+1} - Q_j \approx a \frac{\partial Q}{\partial x}, \quad (4.18)$$

$$\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1} \approx S_c^2 \left\{ 1 - \frac{a^2}{2} \left[(\partial_x \theta)^2 + \sin^2 \theta (\partial_x \phi)^2 \right] \right\}, \quad (4.19)$$

onde θ e ϕ são os ângulos polares usados no capítulo 2 para descrever a configuração de equilíbrio dos spins. Quantizando os modos magnéticos como

anteriormente e omitindo os termos contantes, escrevemos

$$H_{mag-ph} = \frac{\Upsilon S_c^2 a^2}{2} \int dx \frac{\partial Q}{\partial x} [(\partial_x \xi)^2 + V(x) \xi^2 + (\partial_x \zeta)^2 + V(x) \zeta^2], \quad (4.20)$$

onde ξ e ζ são as flutuações magnéticas definidas nas Eqs. (2.38) e (2.39) e $V(x) = 0$ para magnetização uniforme ou $V(x) = 2\delta \cos 2\theta_0(x)$ (Eq. (2.53)) para a parede de domínio de Bloch.

Para reescrever H_{mag-ph} no espaço de momentos, usamos a expansão

$$Q(x) = \frac{1}{\sqrt{2M\Omega}} \sum_q \frac{e^{iqx}}{\sqrt{N}} (b_q + b_{-q}^\dagger). \quad (4.21)$$

Do mesmo modo, as flutuações magnéticas podem ser decompostas de acordo com as Eqs. (2.56) e (2.57)

$$\xi(x) = \sqrt{\frac{a}{2S_c}} \sum_p \varphi_p(x) (a_p + a_{-p}^\dagger), \quad (4.22)$$

$$\zeta(x) = -i \sqrt{\frac{a}{2S_c}} \sum_p \varphi_p(x) (a_p - a_{-p}^\dagger), \quad (4.23)$$

onde lembramos que $\varphi_p(x)$ são as funções de onda ortonormais dos mágnons (ondas planas no caso de magnetização uniforme). Com isso, obtemos

$$H_{mag-ph} = i \frac{\Upsilon S_c a^3}{\sqrt{2M\Omega N}} \sum_{pq} pq(p+q) a_{p+q}^\dagger a_p (b_q + b_{-q}^\dagger). \quad (4.24)$$

O termo H_{mag-ph} descreve os processos de absorção e emissão de um fônon por um mágnon. Observe que, como o número de mágnons é conservado, o espalhamento mágnon-fônon conserva tanto spin quanto momento.

4.3 Interação efetiva elétron-mágnon

Estamos interessados no modelo

$$H = H_{el} + H_{mag} + H_{ph} + H_{el-ph} + H_{mag-ph}. \quad (4.25)$$

Os três primeiros descrevem a dinâmica livre de elétrons, mágnons e fônons, respectivamente, e são dados por

$$H_{el} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}, \quad (4.26)$$

$$H_{mag} = \sum_p \omega_p a_p^\dagger a_p, \quad (4.27)$$

$$H_{ph} = \sum_q \Omega b_q^\dagger b_q. \quad (4.28)$$

Os dois últimos termos da Eq. (4.25) referem-se às interações dos fônons com os elétrons e com os mágnons, que escrevemos como

$$H_{e-ph} = \frac{g}{\sqrt{N}} \sum_{kq\sigma} c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k\sigma} Q_q, \quad (4.29)$$

$$H_{mag-ph} = i \frac{\Upsilon S_c a^3}{\sqrt{N}} \sum_{pq} pq (p+q) a_{p+q}^\dagger a_p Q_q. \quad (4.30)$$

No limite de acoplamento fraco e frequência Ω alta, podemos eliminar os graus de liberdade dos fônons e ficar com uma teoria efetiva que inclui interação elétron-mágnon mediada pelos fônons. Isso é feito naturalmente através do formalismo de integrais de caminho de Feynman. Consideramos a função de partição

$$Z = \int \mathcal{D}c \mathcal{D}c^* \mathcal{D}a \mathcal{D}a^* \mathcal{D}Q e^{-S_0[c, c^*] - S_0[a, a^*] - S_0[Q] - S_{int}}, \quad (4.31)$$

onde $S_0[c, c^*]$ e $S_0[a, a^*]$ são as ações livres para elétrons e mágnons, respec-

tivamente, com a integração tomada sobre os estados coerentes (fermiônicos ou bosônicos, conforme o caso) e $S_0 [Q]$ é a ação livre para fônons, dada em tempo imaginário por

$$S_0 [Q] = \sum_q \int_0^\beta d\tau \left[\frac{M}{2} \partial_\tau Q_q(\tau) \partial_\tau Q_{-q}(\tau) + \frac{M\Omega^2}{2} Q_q(\tau) Q_{-q}(\tau) \right]. \quad (4.32)$$

A interação entre os subsistemas é descrita pela parte interagente

$$S_{int} = \sum_q \int_0^\beta d\tau A_{-q}(\tau) Q_q(\tau), \quad (4.33)$$

onde definimos

$$A_{-q}(\tau) = g \sum_{k\sigma} c_{k+q,\sigma}^*(\tau) c_{k\sigma}(\tau) + \frac{i\Upsilon S_c a^3}{\sqrt{N}} \sum_p qp(p+q) a_{p+q}^*(\tau) a_p(\tau). \quad (4.34)$$

Notamos que S_{int} é linear em Q_q , o que significa que pode ser absorvida na ação quadrática $S_0 [Q]$ por uma translação conveniente do campo Q_q . Para isso, usamos a transformada de Fourier dos campos

$$Q_q(\tau) = T \sum_n Q_{qn} e^{-i\omega_n \tau}, \quad (4.35)$$

$$A_q(\tau) = T \sum_n A_{qn} e^{-i\omega_n \tau}, \quad (4.36)$$

onde $\omega_n = 2n\pi/\beta$ são frequências de Matsubara bosônicas e

$$A_{qn} = g \sum_{k\sigma} T \sum_j c_{k+q,j}^* c_{k,j+n} + \frac{\Upsilon S_c a^3}{\sqrt{N}} \sum_p T \sum_m qp(p+q) a_{p+q,m}^* a_{p,m+n}, \quad (4.37)$$

com $\omega_j = (2j+1)\pi/\beta$ e $\omega_m = 2m\pi/\beta$ frequências fermiônicas e bosônicas,

respectivamente. Desse modo, obtemos

$$S_0[Q] + S_{int} = \sum_q T \sum_n \left\{ \frac{M}{2} (\omega_n^2 + \Omega^2) \left[Q_{qn} + \frac{A_{qn}}{M(\omega_n^2 + \Omega^2)} \right] \times \right. \\ \left. \times \left[Q_{-q,-n} + \frac{A_{-q,-n}}{M(\omega_n^2 + \Omega^2)} \right] - \frac{A_{qn}A_{-q,-n}}{2M(\omega_n^2 + \Omega^2)} \right\}. \quad (4.38)$$

Podemos então transladar a integração em Q_q , definindo

$$\tilde{Q}_{qn} = Q_{qn} + \frac{A_{qn}}{M(\omega_n^2 + \Omega^2)}, \quad (4.39)$$

e integrar os fônons para obter a ação efetiva

$$\delta S = - \sum_q T \sum_n \frac{A(q, \omega_n) A(-q, -\omega_n)}{2M(\omega_n^2 + \Omega^2)}. \quad (4.40)$$

A ação δS é uma perturbação à ação livre de elétrons e mágnons. Podemos distinguir três termos na expansão da Eq. (4.40). O termo de ordem g^2 representa a interação elétron-elétron mediada por fônons, que se torna atrativa no limite $\omega \rightarrow 0$ e é responsável pela instabilidade supercondutora em dimensões superiores. Em 1D, onde não existe ordem de longo alcance verdadeira para interações de curto alcance e simetria contínua (no caso, U(1)), vamos assumir que essa interação é irrelevante e apenas renormaliza algumas quantidades. De fato, o problema de elétrons interagindo com fônons de momento pequeno pode ser diagonalizado exatamente na representação bosônica; verifica-se nesse caso que a interação elétron-fônon apenas modifica a dispersão para excitações mistas carga-fônon com energia da ordem de Ω [76]. O efeito de fônons de momento $2k_F$, por outro lado, foi tratado por Voit e Schulz na Ref. [77], onde se mostrou que no limite de acoplamento fraco o único efeito é a renormalização dos parâmetros do líquido de Luttinger. Já o termo de ordem Υ^2 representa uma interação entre mágnons. Como aqui o interesse maior é no transporte eletrônico, vamos desprezar esse termo como

correções de ordem superior no propagador do mágnon. Queremos nos concentrar no termo de ordem Υg , que é justamente a interação elétron-mágnon mediada por fônons e é dado por

$$\begin{aligned} \delta S_{el-mag} &= -\frac{i\Upsilon S_c g a^3}{2MN} \sum_{kpq\sigma} T^3 \sum_{jmn} \frac{pq(p+q)}{\omega_n^2 + \Omega^2} \\ &\times c_{k-q,j,\sigma}^* c_{k,j-n,\sigma} a_{p+q,m}^* a_{p,m+n}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Desprezando o efeito de interação retardada, aproximamos para o limite estático $\omega_n \approx 0$ ($\omega_n \ll \Omega$) e reescrevemos

$$\begin{aligned} \delta S_{el-mag} &= -\frac{i\Upsilon S_c g a^3}{2M\Omega^2 N} \int_0^\beta d\tau \sum_{kpq\sigma} pq(p+q) \\ &\times c_{k-q,\sigma}^*(\tau) c_{k,\sigma}(\tau) a_{p+q}^*(\tau) a_p(\tau). \end{aligned} \quad (4.42)$$

Voltando para o formalismo Hamiltoniano, essa ação corresponde ao operador

$$V = -i \frac{\lambda}{L} \sum_{kpq\sigma} pq(p+q) a^4 c_{k-q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} a_{p+q}^\dagger a_p, \quad (4.43)$$

onde

$$\lambda = \frac{\Upsilon S_c g}{2M\Omega^2}. \quad (4.44)$$

O processo elementar de espalhamento descrito por V é ilustrado na figura 4.1.

4.4 Cálculo perturbativo da resistividade

Vamos tratar o termo V na Eq. (4.43) como uma perturbação e calcular o efeito sobre a resistividade do sistema usando a fórmula de Mori da Eq.

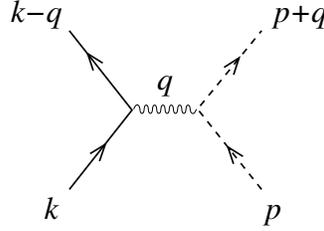


Figura 4.1: Espalhamento entre elétron (linha contínua) e mágnon (linha tracejada) mediado por fônon óptico (linha ondulada).

(2.88). Usando a Eq. (4.43), obtemos

$$\dot{J} = -i [J, V] = \frac{\lambda e}{mL} \sum_{kpq\sigma} W(p, q) c_{k-q, \sigma}^\dagger c_{k\sigma} a_{p+q}^\dagger a_p, \quad (4.45)$$

onde $W(p, q) = pq^2(p+q)a^4$ é a amplitude de espalhamento. Vamos calcular a função de correlação a temperatura finita da Eq. (2.89). Temos

$$\begin{aligned} \langle T_\tau \dot{J}(\tau) \dot{J}(0) \rangle &= \left(\frac{\lambda e}{mL} \right)^2 \sum_{kpq\sigma} |W(p, q)|^2 \\ &\times \langle T_\tau c_{k-q, \sigma}^\dagger(\tau) c_{k\sigma}(\tau) c_{k\sigma}^\dagger(0) c_{k-q, \sigma}(0) \rangle \\ &\times \langle T_\tau a_{p+q}^\dagger(\tau) a_p(\tau) a_p^\dagger(0) a_{p+q}(0) \rangle. \end{aligned} \quad (4.46)$$

Os valores esperados podem ser decompostos como produtos de funções de Green na forma

$$\begin{aligned} \langle T_\tau \dot{J}(\tau) \dot{J}(0) \rangle &= 2 \left(\frac{\lambda e}{mL} \right)^2 \sum_{kpq} |W(p, q)|^2 \times \\ &\times \mathcal{G}_k(\tau) \mathcal{G}_{k-q}(-\tau) \mathcal{D}_p(\tau) \mathcal{D}_{p+q}(-\tau), \end{aligned} \quad (4.47)$$

onde $\mathcal{G}_k(\tau) = \langle T_\tau c_{k\sigma}^\dagger(\tau) c_{k\sigma}(0) \rangle$ e $\mathcal{D}_p(\tau) = \langle T_\tau c_{k\sigma}^\dagger(\tau) c_{k\sigma}(0) \rangle$ são as funções de Green térmicas de elétrons e mágnons, respectivamente. Em resposta linear, isso equivale a calcular o diagrama da figura 4.2. Passando para o es-

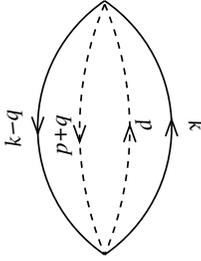


Figura 4.2: Diagrama para cálculo de resposta linear.

paço de frequências e integrando sobre o tempo imaginário, obtemos

$$\begin{aligned} \langle\langle \hat{J}; \hat{J} \rangle\rangle_{i\omega_l} &= -\frac{2}{L^3} \left(\frac{\lambda e}{m}\right)^2 \sum_{kpq} |W(p, q)|^2 \times \\ &\times T^3 \sum_{jmn} \mathcal{G}_{kj} \mathcal{G}_{k-q, j-n-l} \mathcal{D}_{pm} \mathcal{D}_{p+q, m+n}, \end{aligned} \quad (4.48)$$

com

$$\mathcal{G}_{kj} = \frac{1}{i\omega_j - \epsilon_k}, \quad (4.49)$$

$$\mathcal{D}_{pm} = \frac{1}{i\omega_n - \omega_p}. \quad (4.50)$$

Em seguida, efetuamos as somas sobre as frequências de Matsubara usando as relações (2.100) e (2.101). Obtemos

$$\begin{aligned} \langle\langle \hat{J}; \hat{J} \rangle\rangle_{i\omega_l} &= -\frac{2}{L^3} \left(\frac{\lambda e}{m}\right)^2 \sum_{kpq} \frac{|W(p, q)|^2}{\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \omega_{p+q} + \omega_p + i\omega_l} \\ &\times [n_F(\epsilon_k) - n_F(\epsilon_{k-q})] [n_B(\omega_p) - n_B(\omega_{p+q})] \\ &\times [n_B(\omega_{p+q} - \omega_p) - n_B(\epsilon_k - \epsilon_{k-q})]. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Para obter a correlação retardada, fazemos $i\omega_l \rightarrow \omega + i\eta$, com $\eta \rightarrow 0^+$. A parte imaginária fica

$$\begin{aligned} \text{Im} \left\langle \left\langle \hat{j}; \hat{j} \right\rangle \right\rangle_{\omega+i\eta} &= \frac{2\pi}{L^3} \left(\frac{\lambda e}{m} \right)^2 \sum_{kpq} |W(p, q)|^2 \\ &\quad \times [n_F(\epsilon_k) - n_F(\epsilon_{k-q})] [n_B(\omega_p) - n_B(\omega_{p+q})] \\ &\quad \times [n_B(\omega_{p+q} - \omega_p) - n_B(\epsilon_k - \epsilon_{k-q})] \\ &\quad \times \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \omega_{p+q} + \omega_p + \omega). \end{aligned} \quad (4.52)$$

No limite $\omega \rightarrow 0$, temos da Eq. (2.88)

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{2\pi}{L^3} \left(\frac{\lambda}{ne} \right)^2 \sum_{kpq} |W(p, q)|^2 [n_F(\epsilon_k) - n_F(\epsilon_{k-q})] \\ &\quad \times [n_B(\omega_p) - n_B(\omega_{p+q})] \left[\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right]_{\omega_{p+q}-\omega_p} \\ &\quad \times \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \omega_{p+q} + \omega_p). \end{aligned} \quad (4.53)$$

Em baixas energias ($T \ll T_F$), a diferença entre as ocupações $n_F(\epsilon_k) - n_F(\epsilon_{k-q})$ restringe os estados eletrônicos àqueles situados sobre a superfície de Fermi

$$\begin{aligned} n_F(\epsilon_k) - n_F(\epsilon_{k-q}) &\approx (\epsilon_{k-q} - \epsilon_k) \delta(\epsilon_k - \epsilon_F) \\ &= \frac{m}{k_F} (\epsilon_{k-q} - \epsilon_k) [\delta(k - k_F) + \delta(k + k_F)] \end{aligned} \quad (4.54)$$

e com isso

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{2\pi m}{k_F L^3} \left(\frac{\lambda e}{m} \right)^2 \sum_{kpq} |W(p, q)|^2 [\delta(k - k_F) + \delta(k + k_F)] \\ &\quad \times \left[-\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right]_{\omega_p} (\omega_p - \omega_{p+q})^2 \left[-\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right]_{\omega_p - \omega_{p+q}} \\ &\quad \times \delta(\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \omega_{p+q} + \omega_p). \end{aligned} \quad (4.55)$$

A última função delta de Dirac na Eq. (4.55) expressa a conservação de energia no espalhamento e permite determinar o momento $\bar{p}(k, q)$

$$\epsilon_k - \epsilon_{k-q} = \omega_{p+q} - \omega_p \Rightarrow \bar{p} = \frac{\mu}{m} \left[k - \frac{q}{2} \left(1 + \frac{m}{\mu} \right) \right], \quad (4.56)$$

onde usamos que $\epsilon_k = k^2/2m$ e $\omega_p = p^2/2\mu$, com $\mu^{-1} \equiv 2J_H S_c a^2$. Podemos então definir

$$W(k, q) = q^2 \left[\frac{\mu}{m} \left(k - \frac{q}{2} \right) - \frac{q}{2} \right] \left[\frac{\mu}{m} \left(k - \frac{q}{2} \right) + \frac{q}{2} \right] a^4, \quad (4.57)$$

tal que $W(k, q) = W(-k, -q)$. Usando ainda que

$$\delta(\epsilon_k - \epsilon_{k-q} - \omega_{p+q} + \omega_p) = \frac{\mu}{|q|} \delta(p - \bar{p}), \quad (4.58)$$

temos

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{m\mu}{4\pi^2 k_F} \left(\frac{\lambda}{ne} \right)^2 \int dk dq \frac{|W(k, q)|^2}{|q|} \left[-\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right]_{\omega_{\bar{p}}} \\ &\times (\omega_{\bar{p}} - \omega_{\bar{p}+q})^2 \left[-\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right]_{\omega_{\bar{p}} - \omega_{\bar{p}+q}} [\delta(k - k_F) + \delta(k + k_F)]. \end{aligned} \quad (4.59)$$

Integrando sobre k , podemos escrever

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{m\mu}{2\pi^2 k_F} \left(\frac{\lambda}{ne} \right)^2 \int_0^{+\infty} dq \frac{|W(q)|^2}{q} \\ &\times \left[-\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right]_{\omega_{\bar{p}}} (\omega_{\bar{p}} - \omega_{\bar{p}+q})^2 \left[-\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right]_{\omega_{\bar{p}} - \omega_{\bar{p}+q}}, \end{aligned} \quad (4.60)$$

onde agora $W(q) = W(k_F, q)$ e $\bar{p} = \frac{\mu}{m} \left[k_F - \frac{q}{2} \left(1 + \frac{m}{\mu} \right) \right]$.

Em baixas temperaturas, a função $(-\partial n_B / \partial \omega)$ decai rapidamente com ω . Por isso, o integrando da Eq. (4.60) só é finito quando

$$\omega_{\bar{p}} - \omega_{\bar{p}+q} \approx 0 \Rightarrow q(q - 2k_F) \approx 0. \quad (4.61)$$

Notamos porém que a amplitude de espalhamento é nula para $q = 0$. Logo, para $T \ll \omega(k_F)$ podemos aproximar o integrando na vizinhança de $q = 2k_F$ e $\bar{p} = -k_F$. Definimos a variável de integração

$$z \equiv \omega_{\bar{p}} - \omega_{\bar{p}+q} \approx \frac{k_F}{m} (q - 2k_F) \quad (4.62)$$

e a Eq. (4.60) se reduz a

$$\rho \approx \frac{m^2 \mu}{2\pi^2 k_F^2} \left(\frac{\lambda}{ne} \right)^2 \frac{|W(2k_F)|^2}{2k_F} \left[-\frac{\partial n_B}{\partial \omega} \right]_{\omega(k_F)} \int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 \left[-\frac{\partial n_B}{\partial z} \right]. \quad (4.63)$$

A integral em z pode ser calculada facilmente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz z^2 \left[-\frac{\partial n_B}{\partial z} \right] = 4\beta^{-2} \int_0^{+\infty} dx \frac{x}{e^x - 1} = \frac{2\pi^2}{3} \beta^{-2}. \quad (4.64)$$

Substituindo λ dado pela Eq. (4.44), $|W(2k_F)| = 4(k_F a)^4$ e $n = 2k_F/\pi$, obtemos

$$\rho = \frac{\pi}{e^2} \frac{1}{a} \left(\frac{\Upsilon S_c g a^2}{\Omega^2} \right)^2 \frac{\pi m \mu (k_F a)^5}{12M^2} \frac{T}{\epsilon_F} \exp \left[-\frac{\omega(k_F)}{T} \right]. \quad (4.65)$$

Finalmente, a resistência $\delta R = L\rho$ é dada por

$$\delta R = \frac{\pi}{e^2} \frac{L}{a} \left(\frac{\Upsilon S_c g a^2}{\Omega^2} \right)^2 \frac{\pi m \mu (k_F a)^5}{12M^2} \frac{T}{\epsilon_F} \exp \left[-\frac{\omega(k_F)}{T} \right]. \quad (4.66)$$

Podemos ainda expressar esse resultado como correção à condutância do fio. No caso unidimensional, há apenas dois canais de propagação para o elétron (dois canais de spin) e a condutância é

$$G_0 = \frac{2e^2}{h} \Rightarrow R_0 = \frac{h}{2e^2}, \quad (4.67)$$

ou $R_0 = \pi/e^2$ no sistema natural em que $\hbar = 1$. Somando a correção δR

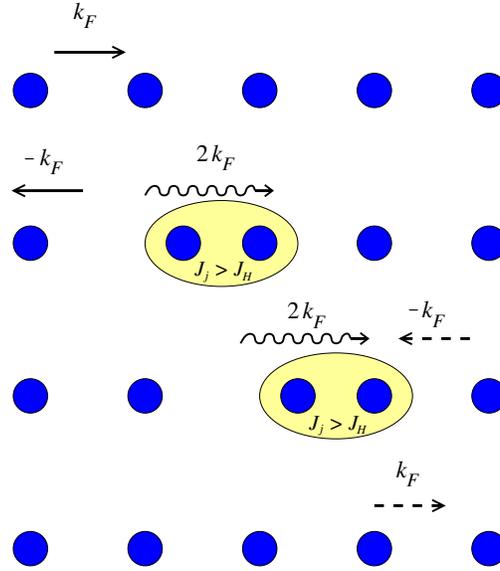


Figura 4.3: Espalhamento indireto entre um elétron de momento k_F e um magnon de momento $-k_F$. O magnon é repellido pela região com maior densidade de íons e maior J_H .

devida ao espalhamento elétron-magnon mediado por fônons, obtemos a correção equivalente na condutância na forma $G = G_0 + \delta G$ com

$$\delta G = -\frac{2e^2}{h} \frac{L}{a} \left(\frac{\Upsilon S_c g a^2}{\hbar^2 \Omega^2} \right)^2 \frac{\pi m \mu (k_F a)^5}{6M^2} \frac{k_B T}{\epsilon_F} \exp \left[-\frac{\hbar \omega(k_F)}{k_B T} \right]. \quad (4.68)$$

Há alguns comentários a fazer sobre o resultado da Eq. (4.68). Primeiro, notamos que a correção δG é extensiva e portanto cresce com o tamanho do fio magnético. Segundo, como este é um cálculo perturbativo, o resultado é válido no limite de acoplamento fraco ($|\Upsilon| S_c a)(ga) \ll \hbar \Omega$, o que é compatível com a hipótese de fônons ópticos de frequência alta. Por último, a dependência de δG com a temperatura é típica de um processo com gap de energia igual a $\hbar \omega(k_F) = J_H S_c (k_F a)^2$. Essa é a energia necessária para criar um magnon de momento $p = -k_F$, que colide um elétron de momento $k = k_F$ situado na superfície de Fermi. O elétron é então espalhado para trás,

com uma transferência de momento $q = 2k_F$. Uma interpretação física dessa interação é ilustrada na figura 4.3. Ao interagir com a rede, o elétron emite o fônon de momento $2k_F$, que provoca a aproximação dos íons. Na região de maior densidade de íons, a sobreposição dos orbitais atômicos é maior e o acoplamento de troca J_H aumenta (para $\Upsilon < 0$). Conseqüentemente, a energia dos mágnons é maior nessa região e o gradiente de J_H atua como um potencial que repele os mágnons incidentes.

Em geral, $J_H \ll \hbar\Omega$ e o espalhamento elétron-mágnon é ativado em temperaturas bem mais baixas do que o espalhamento linear nos fônons. No caso de haver um gap no espectro de mágnons, o resultado da Eq. (4.68) ainda é válido se usarmos $\hbar\omega(k_F) = \Delta + J_H S_c (k_F a)^2$. Notamos, porém, que esse processo é mascarado se existe um acoplamento de troca entre elétrons e spins localizados (interação Kondo $J_K \neq 0$), porque este implica em um espalhamento linear nos mágnons que é ativado na escala de energia $\omega_0 = \omega(2J_K S/v_F)$, que é tipicamente mais baixa.

Capítulo 5

Impureza e interação spin-órbita

O termo de interação spin-órbita surge da expansão da equação de Dirac em torno do limite não relativístico. Apesar de sua origem relativística, esse termo é relevante para vários cálculos de bandas em Estado Sólido. Recentemente, a interação spin-órbita tem suscitado grande interesse devido ao forte acoplamento observado em heteroestruturas – nome genérico dado às estruturas formadas pela justaposição de semicondutores com gaps e potenciais químicos distintos. O tipo mais simples de heteroestrutura é a heterojunção, que consiste na interface entre duas camadas de semicondutores. Para que as camadas entrem em equilíbrio, ocorre uma transferência de elétrons da região com energia de Fermi mais alta para aquela com energia mais baixa. O acúmulo de cargas opostas nos dois lados da junção cria um campo elétrico intrínseco que curva as bandas e confina elétrons da banda de condução à interface, formando um gás de elétrons bidimensional [19]. O mesmo campo elétrico originado da assimetria da junção é responsável pelo forte acoplamento spin-órbita, que nesse contexto é chamado de acoplamento Rashba [47].

Neste capítulo investigamos alguns efeitos da interação spin-órbita nas propriedades de transporte eletrônico num sistema unidimensional. A característica mais marcante da interação spin-órbita é a separação “horizontal”

das bandas de spin na ausência de campos magnéticos. A direção de polarização do spin nessas bandas é perpendicular à direção de movimento do elétron. As bandas são degeneradas na vizinhança de $k = 0$, mas a aplicação de um campo magnético externo levanta essa degenerescência e abre um gap de energia nessa região. É nesse cenário que analisamos o espalhamento dos elétrons por uma impureza não magnética. Em campo magnético nulo, não há surpresas: a impureza espalha elétrons apenas entre estados da mesma banda (mesmo spin) com transferência de momento $2k_F$. Para $B \neq 0$, as bandas deixam de ter direção de polarização de spin bem definida e surge a possibilidade de espalhamento com inversão de spin. Mostramos que, se o nível de Fermi é ajustado de forma a coincidir com a região do gap em $k = 0$, esse último mecanismo de espalhamento pode dominar e fazer com que a resistência do sistema seja controlada pelo campo magnético.

5.1 Esquema de bandas com interação spin-órbita

O Hamiltoniano de um elétron que se move no plano xy sujeito à interação spin-órbita é

$$H_0 = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{e}{2m^2 c^2} (\vec{\sigma} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{E} + V(x), \quad (5.1)$$

onde m é a massa efetiva do elétron, c é a velocidade da luz, \mathbf{E} é o campo elétrico externo ou intrínseco e o potencial $V(x)$ representa uma barreira que confina o movimento do elétron à direção y , a fim de atingir o regime unidimensional (fio quântico). Em heteroestruturas, o campo elétrico resultante da assimetria entre o potencial químico das camadas é normal à superfície da interface. Substituindo $\mathbf{E} = E\hat{\mathbf{z}}$, obtemos

$$H_0 = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \alpha (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) + V(x), \quad (5.2)$$

onde $\alpha = eE/2m^2c^2$ é o parâmetro de acoplamento Rashba. Costuma-se descrever $V(x)$ como o potencial de um oscilador harmônico

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2. \quad (5.3)$$

Para fios quânticos suficientemente estreitos, podemos desprezar o termo de acoplamento do spin com o momento transversal $H_{mix} = -\alpha\sigma_y p_x$. Nesse caso, os autoestados de H possuem spin polarizado na direção x e energia $\epsilon_{n\sigma}(k_y) = (n + 1/2)\omega_0 + k_y^2/2m + \sigma\alpha k_y$, com $\sigma = \pm$. Para fios de largura finita, o termo H_{mix} pode ser tratado perturbativamente. Seu efeito é acoplar subbandas de n diferentes e desviar ligeiramente a direção de quantização do spin do eixo x [78]. O efeito de mistura das subbandas será pequeno se a separação entre elas for suficientemente grande. Estima-se que isso acontece para largura de confinamento $w \ll 1/m\alpha \sim 150$ nm para os parâmetros do InAs $\alpha = 2,2 \times 10^{-11}$ eVm e $m = 0,023 m_0$, onde m_0 é a massa do elétron livre [48]. Para densidades baixas ($\epsilon_F \ll \omega_0$), apenas a subbanda mais baixa é ocupada e podemos desprezar as subbandas superiores. Definindo $p_y \equiv p$, podemos escrever

$$H \approx \frac{p^2}{2m} + \alpha\sigma_x p, \quad (5.4)$$

a menos da constante $\omega_0/2$. As autofunções de H são da forma $\psi_\sigma(y) = L^{-1/2}e^{iky}\chi_\sigma$, com os spinores correspondentes aos estados de spin na direção $\pm x$

$$\chi_{\rightarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad ; \quad \chi_{\leftarrow} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

onde \rightarrow representa spin polarizado em $+x$ ($\sigma = +$) e \leftarrow representa spin polarizado em $-x$ ($\sigma = -$).

É interessante analisar o efeito de um campo magnético B aplicado na direção z . Consideramos o Hamiltoniano

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \alpha\sigma_x p - B\sigma_z = \frac{(p + m\alpha\sigma_x)^2}{2m} - B\sigma_z - \frac{m\alpha^2}{2}, \quad (5.6)$$

onde absorvemos em B o fator $(g/2)\mu_B = ge/4mc$ correspondente ao momento magnético do elétron (g é o fator de Landé dependente do material). Para $B \neq 0$, os spinores dos autoestados passam a depender do momento

$$\chi_+(k) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta(k)}{2} \\ -\sin \frac{\theta(k)}{2} \end{pmatrix}, \quad \chi_-(k) = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta(k)}{2} \\ \cos \frac{\theta(k)}{2} \end{pmatrix}, \quad (5.7)$$

onde o ângulo $\theta(k)$ é dado por

$$\theta(k) = \tan^{-1} \frac{\alpha k}{B}. \quad (5.8)$$

Observe que $\theta(-k) = -\theta(k)$. As energias dos autoestados são

$$\epsilon_{\pm}(k) = \frac{k^2}{2m} \pm \sqrt{(\alpha k)^2 + B^2}. \quad (5.9)$$

A figura 5.1 mostra a dispersão das bandas de spin na presença de acoplamento Rashba forte e campo magnético perpendicular. Para $B = 0$, o efeito do acoplamento Rashba é separar as duas bandas de spin, deslocando o fundo da banda de $k = 0$ para $k = \pm m\alpha$, como evidencia o Hamiltoniano (5.6). As duas bandas possuem direção de polarização do spin bem definida: $-x$ para a banda da direita e $+x$ para a banda da esquerda. Assim, para estados completamente preenchidos até o nível de Fermi, há mais elétrons com spin $+x$ ($-x$) se movendo para a esquerda (direita) do que para a direita (esquerda). Isso cria uma corrente de spin persistente $\langle J_s \rangle = \langle J_{\rightarrow} - J_{\leftarrow} \rangle \neq 0$ mesmo para campo $B = 0$. A diferença na precessão de spin entre elétrons polarizados em $+x$ e $-x$ na superfície de Fermi é também a base do transistor de spin proposto por Datta e Das [49]. No entanto, ao contrário da polarização induzida por um campo externo (efeito Zeeman), o estado fundamental do sistema tem magnetização nula porque o acoplamento spin-órbita preserva a simetria de inversão temporal, de modo que $\epsilon_{\sigma}(k) = \epsilon_{-\sigma}(-k)$.

Quando o campo externo B é ligado, o termo em σ_z mistura os auto-

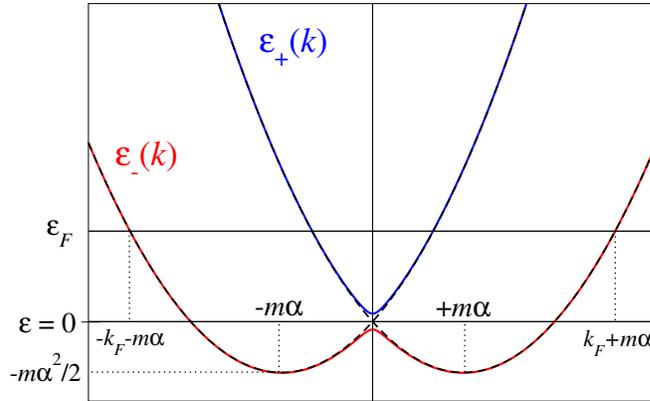


Figura 5.1: Bandas com acoplamento Rashba forte e campo magnético externo $B = 0$ (linha tracejada) ou $B \neq 0$ (linha contínua).

estados de spin χ_{\rightarrow} e χ_{\leftarrow} na região em que eles são degenerados. Por isso, as bandas se repelem e aparece um gap em torno de $k = 0$. As duas novas bandas são rotuladas pelo número quântico $\lambda = \pm$ e as dispersões são dadas pela Eq. (5.9). A direção de polarização deixa de ser bem definida e depende do momento k segundo a Eq. (5.7). A banda inferior $\lambda = -$ é aproximadamente polarizada na direção $-x$ para $k > 0$ e $k \gg B/\alpha$ e na direção $+x$ para $k < 0$ e $|k| \gg B/\alpha$. O oposto vale para a banda superior $\lambda = +$. Na região $|k| \ll B/\alpha$, o campo magnético aplicado supera o acoplamento spin-órbita e os spins são polarizados na direção $\pm z$.

5.2 Potencial de uma impureza

Queremos investigar como o acoplamento spin-órbita modifica o espalhamento dos elétrons de condução por uma impureza não magnética. Discutiremos também o efeito de interações eletrônicas em uma dimensão. Para isso, reescrevemos o Hamiltoniano (5.6) em linguagem de segunda quantização

$$H_0 = \sum_{k,\lambda=\pm} \epsilon_{\lambda}(k) c_{k\lambda}^{\dagger} c_{k\lambda}, \quad (5.10)$$

onde as dispersões $\epsilon_\lambda(k)$ são dadas pela Eq. (5.9) e os operadores de aniquilação $c_{k\lambda}$ são escritos em termos dos operadores $c_{k\uparrow,\downarrow}$ (relativos à direção z) como

$$c_{k+} = \cos \frac{\theta(k)}{2} c_{k\uparrow} - \sin \frac{\theta(k)}{2} c_{k\downarrow}, \quad (5.11)$$

$$c_{k-} = \sin \frac{\theta(k)}{2} c_{k\uparrow} + \cos \frac{\theta(k)}{2} c_{k\downarrow}. \quad (5.12)$$

O potencial de uma impureza localizada é representado por um potencial $V(x)$, que em termos dos autoestados $|k\lambda\rangle$ de H_0 fica

$$V = \sum_{kp\lambda\mu} \langle k\lambda | V | p\mu \rangle c_{k\lambda}^\dagger c_{p\mu}. \quad (5.13)$$

O elemento de matriz que aparece na Eq. (5.13) é

$$\begin{aligned} \langle k\lambda | V | p\mu \rangle &= \sum_{\sigma} \int dx \langle k\lambda | x\sigma \rangle V(x) \langle x\sigma | p\mu \rangle \\ &= \int dx V(x) \frac{e^{i(p-k)x}}{L} \langle k\lambda | p\mu \rangle \\ &= \frac{V_{k-p}}{N} \chi_{\lambda}^\dagger(k) \chi_{\mu}(p), \end{aligned} \quad (5.14)$$

onde usamos que

$$V(x) = \frac{1}{N} \sum_k V_k e^{ikx}. \quad (5.15)$$

Para $B = 0$, $\chi_{\lambda}^\dagger(k) \chi_{\mu}(p) = \delta_{\lambda\mu}$ e a impureza não magnética não pode espalhar elétrons entre estados de spins diferentes. Entretanto, um campo $B \neq 0$ introduz uma mistura entre esses estados e nesse caso temos (usando a Eq. (5.7))

$$\chi_{\lambda}^\dagger(k) \chi_{\mu}(p) = \delta_{\lambda\mu} \cos \left[\frac{\theta(k) - \theta(p)}{2} \right] - \lambda \delta_{\lambda,-\mu} \sin \left[\frac{\theta(k) - \theta(p)}{2} \right]. \quad (5.16)$$

Substituindo na Eq. (5.13), obtemos

$$V = \sum_{kp\lambda} \frac{V_{k-p}}{N} \cos \left[\frac{\theta(k) - \theta(p)}{2} \right] c_{k\lambda}^\dagger c_{p\lambda} - \sum_{kp\lambda} \lambda \frac{V_{k-p}}{N} \sin \left[\frac{\theta(k) - \theta(p)}{2} \right] c_{k\lambda}^\dagger c_{p,-\lambda}. \quad (5.17)$$

Há dois termos de espalhamento associados à impureza. O primeiro deles espalha somente entre estados da mesma banda e o segundo, apenas entre estados de bandas diferentes. A existência dos dois termos está intimamente ligada ao fato de que os spinores χ_λ dependem do momento e, em geral, $\theta(k) \neq \theta(p)$ se $k \neq p$. Essa é uma particularidade do acoplamento spin-órbita.

Tomamos a seguir o limite de baixas energias e consideramos apenas os estados eletrônicos em torno da superfície de Fermi ($\epsilon_{k\lambda} \approx \epsilon_F$ na figura 5.1). Para valores realistas de campo magnético aplicado, $B \ll \alpha k_F$, onde $k_F = \frac{\pi}{2}n$ é o momento de Fermi quando $\alpha = 0$. Por isso, vamos expandir V até primeira ordem em B . Da Eq. (5.8), temos

$$\theta(k) \approx \text{sgn}(k) \frac{\pi}{2} - \frac{B}{\alpha k} \quad (5.18)$$

e então

$$\cos \left[\frac{\theta_k - \theta_p}{2} \right] \approx \frac{1 + \text{sgn}(kp)}{2} + \frac{\text{sgn}(k) - \text{sgn}(p)}{2} \frac{B}{2\alpha} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{p} \right), \quad (5.19)$$

$$\sin \left[\frac{\theta_k - \theta_p}{2} \right] \approx \frac{\text{sgn}(k) - \text{sgn}(p)}{2} - \frac{1 + \text{sgn}(kp)}{2} \frac{B}{2\alpha} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{p} \right). \quad (5.20)$$

Os termos de espalhamento em ordem zero de B são

$$V \approx \sum_{kp\lambda} \frac{V_{k-p}}{N} \frac{1 + \text{sgn}(kp)}{2} c_{k\lambda}^\dagger c_{p\lambda}$$

$$- \sum_{kp\lambda} \lambda \frac{V_{k-p}}{N} \frac{\text{sgn}(k) - \text{sgn}(p)}{2} c_{k\lambda}^\dagger c_{p,-\lambda}. \quad (5.21)$$

É fácil verificar que a Eq. (5.21) recupera o limite $B = 0$ em que só há espalhamento sem inversão de spin. O primeiro termo da Eq. (5.21) diz que só é possível espalhar entre estados da mesma banda se k e p tiverem o mesmo sinal. Por sua vez, o segundo termo só permite espalhamento entre bandas diferentes para momentos com sinais opostos. Considere por exemplo a energia de Fermi $\epsilon_F > 0$ como mostrada na figura 5.1. Nesse caso os momentos em pontos opostos da superfície de Fermi para uma mesma banda sempre têm sinal oposto. Conseqüentemente, o espalhamento descrito pelo primeiro termo não pode acontecer. O único espalhamento possível é de $k = \pm(k_F + m\alpha)$ para $k = \mp(k_F - m\alpha)$, com $\Delta k = 2k_F$ e aproximadamente sem inversão do spin (embora seja entre bandas de λ diferentes). Se diminuirmos ϵ_F até que $\epsilon_F < 0$, apenas a banda mais baixa ($\lambda = -$) fica ocupada e surgem quatro pontos de Fermi na mesma banda, dois com $k > 0$ e dois com $k < 0$. Nesse caso é possível espalhar somente pelo processo do primeiro termo, mas mesmo assim o espalhamento ocorre sem inversão do spin.

Os termos de primeira ordem em B são

$$V_1^f = \frac{B}{2\alpha} \sum_{kp\lambda} \frac{V_{k-p}}{N} \frac{\text{sgn}(k) - \text{sgn}(p)}{2} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{p} \right) c_{k\lambda}^\dagger c_{p\lambda}, \quad (5.22)$$

$$V_2^f = -\frac{B}{2\alpha} \sum_{kp\lambda} \frac{\lambda V_{k-p}}{N} \frac{1 + \text{sgn}(kp)}{2} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{p} \right) c_{k\lambda}^\dagger c_{p,-\lambda}. \quad (5.23)$$

O termo V_1^f espalha entre estados da mesma banda e com momentos de sinais opostos. Analisando a figura 5.1, verificamos que esse é um legítimo termo de inversão de spin, pois espalha elétrons de $k = k_F \pm m\alpha$ para $k = -k_F \mp m\alpha$ e vice-versa. A transferência de momento correspondente é $\Delta k = 2(k_F \pm m\alpha)$. Já o termo V_2^f espalha entre estados de bandas diferentes com momentos de mesmo sinal, o que também é um processo com inversão de spin. A figura

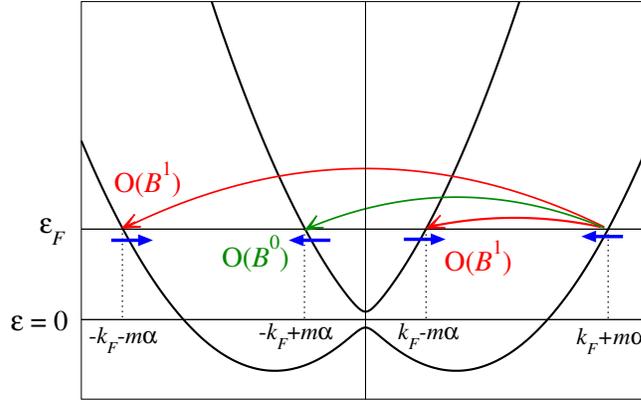


Figura 5.2: Espalhamento na superfície de Fermi devido a uma impureza não magnética a partir de $k = k_F + m\alpha$. O processo usual ($\Delta k = 2k_F$) é de ordem zero no campo magnético B . Os processos com “spin flip” ($\Delta k = 2k_F + 2m\alpha$ e $\Delta k = 2m\alpha$) são de primeira ordem em B .

5.2 mostra os espalhamentos possíveis a partir de $k = k_F + m\alpha$ classificados segundo a ordem de B .

Podemos linearizar a dispersão em torno da superfície de Fermi na figura 5.1 e construir um modelo bosônico efetivo que inclui interações eletrônicas. Devido à simetria das bandas, a velocidade de Fermi v_F é a mesma para todos os pontos. Às flutuações de densidade de elétrons de número quântico $\lambda = \pm$ associamos um campo bosônico $\phi_\lambda(x)$ tal que $\rho_\lambda(x) = \frac{n}{2} + \frac{1}{\sqrt{\pi}}\partial_x\phi_\lambda(x)$. Evitando índices de spin, definimos as combinações simétrica e anti-simétrica dos campos

$$\phi_{S,A} = \frac{\phi_+ \pm \phi_-}{\sqrt{2}}. \quad (5.24)$$

Em termos de $\phi_{S,A}$ e dos campos conjugados $\theta_{S,A}$, o primeiro termo da Eq. (5.21) e o termo V_1^f da Eq. (5.22) são da forma

$$V \sim V_{2k_F} \sin \left[\sqrt{2\pi}\theta_A(0) \right] \sin \left[\sqrt{2\pi}\phi_S(0) \right], \quad (5.25)$$

$$V_1^f \sim \frac{B V_{2(k_F \pm m\alpha)}}{\alpha(k_F \pm m\alpha)} \cos \left[\sqrt{2\pi}\phi_A(0) \right] \cos \left[\sqrt{2\pi}\phi_S(0) \right]. \quad (5.26)$$

Note que o termo de espalhamento usual V depende de θ_A e não de ϕ_A . À primeira vista, esse fato parece estar em desacordo com o problema de Kane-Fisher sobre uma impureza não magnética num líquido de Luttinger [21]. Na verdade, isso acontece porque as bandas não tem spin bem definido. Se aproximarmos para o limite $B \rightarrow 0$, podemos identificar θ_A com o campo ϕ_s associado à densidade de spin polarizado no eixo x . Basta notar que os operadores de aniquilação dos bósons são tais que

$$d_{q,r=+,\lambda=+} \approx d_{q+\leftarrow} \quad , \quad d_{q,r=-,\lambda=+} \approx d_{q-\rightarrow} \quad , \quad (5.27)$$

$$d_{q,r=+,\lambda=-} \approx d_{q+\rightarrow} \quad , \quad d_{q,r=-,\lambda=-} \approx d_{q-\leftarrow} \quad . \quad (5.28)$$

Desse modo, θ_A pode ser decomposto como

$$\begin{aligned} \theta_A(x) &= i \sum_{r,\lambda,q>0} \frac{\lambda}{2\sqrt{Lq}} e^{-\alpha q/2} d_{qr\lambda} e^{irqx} + H.c. \\ &\approx -i \sum_{r,\sigma,q>0} r\sigma \frac{e^{-\alpha q/2}}{2\sqrt{Lq}} d_{qr\sigma} e^{irqx} + H.c. = \phi_s(x). \end{aligned} \quad (5.29)$$

Além disso, reconhecemos que $\phi_S(x) = \phi_c(x)$ (campo associado à densidade de carga). Portanto, no limite $B \rightarrow 0$, recuperamos o termo de Kane-Fisher usual. Se incluímos interações entre as densidades de spin polarizadas no eixo x , a dimensão do operador V na Eq. (5.25) será $D = (K_c + K_s)/2$. Já o termo V^f é análogo ao termo de espalhamento com “spin-flip” em uma parede de domínio que encontramos no capítulo 3. Sua dimensão é $D = (K_c + K_s^{-1})/2$ (obtida trocando $\phi_A \rightarrow \theta_s$). Esses termos geram resistividades que dependem como leis de potência da temperatura, mas os expoentes $\nu = 2D - 2$ são diferentes nos dois casos se $K_s \neq 1$. Pela regra de Mathiessen, a resistividade total é soma das duas resistividades. Em geral, deve-se esperar que a diferença nos expoentes seja pequena ($K_s \approx 1$) e que o espalhamento usual de uma impureza não magnética domine sobre o espalhamento com “spin flip”, já que a amplitude deste é menor por um

fator de ordem $B/\alpha k_F \ll 1$. Na próxima seção discutiremos um caso em que é possível suprimir o espalhamento usual em baixas temperaturas, fazendo com que o espalhamento com inversão de spin se torne o mais relevante.

5.3 Promoção do espalhamento com inversão de spin

Uma possibilidade interessante que ainda não analisamos diz respeito ao que acontece com o espalhamento pela impureza quando o nível de Fermi cai exatamente sobre o gap aberto pelo campo magnético B ($\epsilon = 0$ na figura 5.2). Obviamente, esse é um caso que depende de ajuste fino do acoplamento Rashba e da densidade eletrônica. A relação a ser satisfeita é

$$\frac{m\alpha^2}{2} = \frac{k_F^2}{2m} \Rightarrow \alpha = v_F. \quad (5.30)$$

A viabilidade desse caso em termos dos parâmetros experimentais será discutida no final da seção. Por ora, notamos que a presença do gap $\Delta = 2B$ em $k = 0$ suprime o mecanismo dominante descrito por V na Eq. (5.21) porque não há estados na superfície de Fermi para onde espalhar elétrons a partir de $k = \pm(k_F + m\alpha) \equiv \pm 2k_F$. Em decorrência disso, o espalhamento com inversão de spin descrito pela Eq. (5.22) deve dominar em temperaturas muito menores do que B .

Vamos calcular perturbativamente a resistência devido a cada um dos termos e comparar as dependências com a temperatura e com o campo magnético aplicado. Considere primeiro o espalhamento de estados com $k \approx \pm 2k_F$ para $k \approx 0$. Observe que a amplitude desse espalhamento deve ser de ordem zero em B (porque sobrevive no limite $B \rightarrow 0$), mas o espalhamento para $B \neq 0$ ocorre entre estados com spin polarizado em $\pm x$ (em $k \approx \pm 2k_F$) para

estados polarizados em $\pm z$ (em $k \approx 0$). Para $p \approx 0$, temos da Eq. (5.8)

$$\theta(p) \approx \frac{\alpha p}{B}. \quad (5.31)$$

Por isso, retornamos à Eq. (5.17) para calcular a resistência devido a esse processo. Temos que

$$\begin{aligned} j &= \frac{ea}{mL} \sum_{kp\lambda} V_{k-p} (k-p) \cos \left[\frac{\theta(k) - \theta(p)}{2} \right] c_{k\lambda}^\dagger c_{p\lambda} \\ &\quad - \frac{ea}{mL} \sum_{kp\lambda} \lambda V_{k-p} (k-p) \sin \left[\frac{\theta(k) - \theta(p)}{2} \right] c_{k\lambda}^\dagger c_{p,-\lambda}. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Usando a fórmula de Mori (2.88), obtemos a expressão da resistividade para frequência $\omega \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{\pi a^2}{(ne)^2} \frac{1}{L^3} \sum_{kp\lambda} |V_{k-p}|^2 (k-p)^2 \left[-\frac{\partial n_F}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon_{k\lambda}} \\ &\quad \times \left\{ \cos^2 \left[\frac{\theta(k) - \theta(p)}{2} \right] \delta(\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{p\lambda}) \right. \\ &\quad \left. + \sin^2 \left[\frac{\theta(k) - \theta(p)}{2} \right] \delta(\epsilon_{k\lambda} - \epsilon_{p,-\lambda}) \right\}. \end{aligned} \quad (5.33)$$

Podemos tomar $k \approx \pm 2k_F$ ($\lambda = -$) e $p \approx 0$, incluindo o fator de 2 pelo termo em que trocamos $k \rightarrow p$. Nesse caso, segue da Eq. (5.18) que $\theta(k) \gg \theta(p)$ e $\cos^2(\theta_k/2) \approx \sin^2(\theta_k/2) \approx 1/2$. Obtemos

$$\begin{aligned} \rho &\approx \frac{a^2}{4\pi (ne)^2} \frac{1}{L} \int dk \int dp |V_k|^2 k^2 \left[-\frac{\partial n_F}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon_{k-}} \\ &\quad \times [\delta(\epsilon_{k-} - \epsilon_{p-}) + \delta(\epsilon_{k-} - \epsilon_{p+})]. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Usamos a função delta de Dirac para eliminar a integração em k . Como

$k \gg B/\alpha$, aproximamos a dispersão (5.9)

$$\epsilon_{k-} \approx \frac{k^2}{2m} - \alpha |k|. \quad (5.35)$$

Além disso, em baixas energias ($T \ll B$) podemos adotar a aproximação quadrática

$$\epsilon_{p\pm} \approx \pm \left(B + \frac{p^2}{2m^*} \right), \quad (5.36)$$

onde m^* é a massa efetiva da banda, definida por

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{\alpha^2}{B}, \quad (5.37)$$

de modo que $m^* \approx B/\alpha^2 \ll m$ para $B \ll m\alpha^2$. A conservação de energia fornece então

$$\epsilon_{k-} = \epsilon_{p\pm} \Rightarrow k \approx \pm 2m\alpha = \pm 2k_F, \quad (5.38)$$

$$\delta(\epsilon_{k-} - \epsilon_{p\pm}) = \frac{m}{k_F} [\delta(k - 2k_F) + \delta(k + 2k_F)]. \quad (5.39)$$

Integrando sobre k , ficamos com

$$\rho \approx \frac{4ma^2k_F}{\pi L (ne)^2} |V_{2k_F}|^2 \int dp \left[-\frac{\partial n_F}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon_{p+}}. \quad (5.40)$$

Usando a aproximação de baixas energias $-\partial n_F/\partial \epsilon \approx \beta e^{-\beta|\epsilon|}$, temos

$$\begin{aligned} \rho &\approx \frac{4ma^2k_F}{\pi L (ne)^2} |V_{2k_F}|^2 \beta e^{-\beta B} \int_0^{+\infty} dp e^{-\beta p^2/2m^*}, \\ &= \frac{4ma^2k_F}{\pi L (ne)^2} |V_{2k_F}|^2 \sqrt{\frac{\pi\beta m^*}{2}} e^{-\beta B}. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Portanto, a resistência devido ao espalhamento para $p \approx 0$ fica

$$R_1 = \frac{h}{e^2} |V_{2k_F}|^2 \left(\frac{ma}{\pi\hbar^2 n} \right)^2 \sqrt{\frac{\pi g \mu_B B}{k_B T}} \exp\left(-\frac{g \mu_B B}{2k_B T} \right). \quad (5.42)$$

A resistência devido ao espalhamento com inversão de spin da Eq. (5.22) também pode ser calculada usando a fórmula de Mori. O cálculo é imediato e fornece

$$R_2 = \frac{h}{e^2} |V_{2k_F^*}|^2 \left(\frac{ma}{\pi \hbar^2 n} \right)^2 \left(\frac{g\mu_B B}{4\alpha k_F} \right)^2. \quad (5.43)$$

As Eqs. (5.42) e (5.43) confirmam o que havíamos antecipado sobre os dois mecanismos de espalhamento. Por causa do gap em $k = 0$, o espalhamento usual decai exponencialmente com a redução da temperatura ou com o aumento do campo magnético. Em compensação, à medida que se aumenta o campo magnético, o espalhamento com inversão de spin cresce com B^2 . Em temperaturas muito baixas devemos ser capazes de observar o “crossover” entre dois regimes aumentando o campo magnético (figura 5.3). Quando $B = 0$, o espalhamento é dominado por V_{2k_F} . Quando aplicamos um campo $B \neq 0$, o gap começa a suprimir o espalhamento de V_{2k_F} e a resistência cai (magnetorresistência negativa). Para $B \gg T$, a contribuição R_1 decai exponencialmente até ser superada por R_2 (espalhamento de $V_{2k_F^*}$). Nesse ponto, a resistência começa a crescer novamente (magnetorresistência positiva). Portanto, deve existir um mínimo de resistência total $R_T = R_1 + R_2$ para o campo B_0 ($T \ll B_0 \ll \alpha k_F$) dado pela equação

$$\frac{dR_T}{dB} = 0 \Rightarrow \frac{x}{2} + \left(\sqrt{\frac{\pi A}{2x}} - \sqrt{2\pi A^3 x} \right) e^{-Ax} = 0, \quad (5.44)$$

onde definimos $x = g\mu_B B / 2\alpha k_F \ll 1$ e $A = \alpha k_F / k_B T \gg 1$ e aproximamos $V_{2k_F} \approx V_{2k_F^*}$. Para $T = 1$ K, $k_F = 2 \times 10^{-6}$ cm e $m = 0,036 m_0$ (valores extraídos da Ref. [48]), temos $A \approx 980$. A solução numérica da Eq. (5.44) fornece $x_0 \approx 0,014$ e daí $g\mu_B B_0 \approx 1,2$ meV. Para $g = 13$ (Ref. [79]), encontramos $B_0 \approx 3,2$ T. A resistência mínima R_T^{min} é dada por

$$\frac{R_T^{min}}{R_T^0} \approx 3 \times 10^{-5}, \quad (5.45)$$

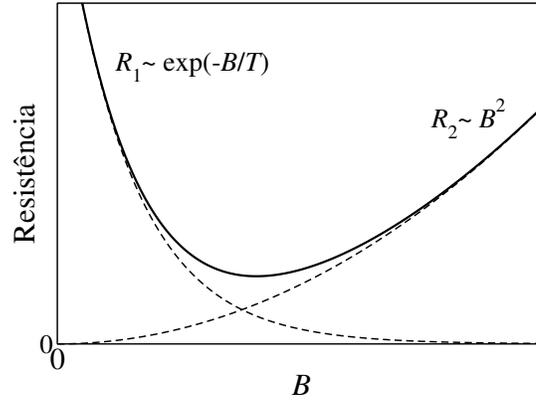


Figura 5.3: Resistência associada ao espalhamento por impureza em função do campo magnético aplicado quando $\epsilon_F = m\alpha^2/2$ acima do fundo da banda (ou $\epsilon_F = 0$ na figura 5.1). R_1 é a contribuição do espalhamento usual e R_2 é a contribuição do espalhamento com inversão de spin.

onde

$$R_T^0 = \frac{2h}{e^2} |V_{2k_F}|^2 \left(\frac{ma}{\pi\hbar^2 n} \right)^2 \quad (5.46)$$

é a resistência associada ao espalhamento pela impureza a campo $B = 0$. Isso mostra que o campo magnético pode suprimir quase completamente a resistência associada ao espalhamento pela impureza não magnética. Considerando a condutância finita do fio quântico, podemos calcular a magnetorresistência

$$\frac{\Delta R}{R} = \frac{(h/e^2 + R_T^{min}) - (h/2e^2 + R_T^0)}{h/e^2 + R_T^{min}} \approx \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{ma |V_{2k_F}|}{\hbar^2 k_F} \right)^2. \quad (5.47)$$

Observe que para $|V_{2k_F}| \rightarrow 0$ a magnetorresistência é, na verdade, positiva porque a abertura do gap quando $B \neq 0$ reduz o número de canais de propagação dos elétrons e, conseqüentemente, aumenta a resistência de contato de $(2e^2/h)^{-1}$ para $(e^2/h)^{-1}$. A situação é revertida se o espalhamento pela impureza é muito grande ($R_T^0 \gg h/e^2$). Nesse caso, a condutância a $B = 0$ é praticamente nula e o efeito do campo magnético é praticamente “remover” a impureza e restaurar o platô de condutância em e^2/h .

A resistência R_2 na Eq. (5.43) é independente da temperatura, mas passa a depender de T como uma lei de potência se incluímos efeitos de interação eletrônica. Para $T \ll B$, podemos ignorar a presença da banda $\lambda = +$ e linearizar a banda $\lambda = -$ em torno de $k = \pm k_F^*$. O procedimento é equivalente à bosonização do modelo de férmions sem spin, com a diferença de que, no nosso caso, os elétrons com $k \approx +k_F^*$ (ramo R) têm aproximadamente spin polarizado em $-x$ (\leftarrow) e os elétrons com $k \approx -k_F^*$ (ramo L) têm spin polarizado em $+x$ (\rightarrow). Definimos os campos $\phi_{R\leftarrow}$ e $\phi_{L\rightarrow}$ nos ramos direito e esquerdo, respectivamente, e a partir deles os campos duais

$$\phi = \frac{\phi_{L\rightarrow} - \phi_{R\leftarrow}}{\sqrt{2}} \quad , \quad \theta = \frac{\phi_{L\rightarrow} + \phi_{R\leftarrow}}{\sqrt{2}} \quad , \quad (5.48)$$

tais que $[\phi(x), \partial_{x'}\theta(x')] = i\delta(x - x')$. Em termos dos campos bosônicos, o potencial V_1^f da impureza fica

$$V_1^f \sim \cos \left[\sqrt{4\pi} \phi(0) \right].$$

Assim, a resistência R_2 é alterada por um fator $\sim (T/T_F)^{2K-2}$, onde K é o parâmetro de interação do líquido de Luttinger

$$K = \sqrt{\frac{2\pi v_F + g_4 - g_2}{2\pi v_F + g_4 + g_2}}. \quad (5.49)$$

Para interações repulsivas, $K < 1$ e R_2 cresce quando $T \rightarrow 0$. Por isso, a amplitude $|V_{2k_F}|$ que aparece na Eq. (5.47) deve ser renormalizada no caso interagente para uma amplitude efetiva $\sim |V_{2k_F}|(T/T_F)^{K-1}$. Como resultado, a magnetorresistência líquida pode ser negativa e bastante grande.

Finalmente, devemos considerar a possibilidade de observar o efeito de espalhamento com inversão de spin dentro dos parâmetros experimentais. A grande dificuldade é o ajuste do nível de Fermi de maneira que se tenha $\alpha = v_F$. Um valor típico de α é $\alpha = 0,22 \text{ eV\AA} \Rightarrow \alpha/\hbar \approx 3,3 \times 10^4 \text{ m/s}$. Para os compostos semicondutores usados atualmente, $\alpha/v_F < 0,2$ [52], que está

abaixo do que precisamos. Mesmo assim, talvez seja possível atingir $\alpha = v_F$ amplificando o acoplamento Rashba (com potenciais mais assimétricos, por exemplo) ou diminuindo a densidade eletrônica (menor v_F). Nesse mesmo sentido, o resultado da Ref. [52] mostra que α deve aumentar com a diminuição da densidade devido a efeitos de interação eletrônica. O ajuste fino de $\alpha = v_F$ (necessariamente com erro menor do que o gap $(g/2)\mu_B B$) pode ser conseguido controlando a densidade e o parâmetro α independentemente por meio dos campos elétricos aplicados sobre o fio quântico [48].

Capítulo 6

Conclusões

Neste trabalho, estudamos propriedades de transporte de elétrons unidimensionais acoplados a uma rede de spins localizados ou na presença de interação spin-órbita.

No problema de mágnons sobre uma parede de domínio, mostramos como quantizar as flutuações magnéticas sobre uma configuração de equilíbrio não homogênea usando uma representação angular semiclássica para os spins localizados. Mostramos que no caso da parede de Bloch, cuja largura é fixada pela anisotropia, aparece um gap no espectro de mágnons que é tanto maior quanto mais estreita a parede. Esse gap suprime o espalhamento inelástico no limite de paredes estreitas e dá sustentação à aproximação de magnetização estática no cálculo do transporte eletrônico através de uma parede de domínio.

O estudo do espalhamento de elétrons interagentes em paredes de domínio magnético revelou que as interações repulsivas podem amplificar a magnetorresistência da parede de domínio. O comportamento isolante é previsto tanto pela análise de grupo de renormalização quanto pelos cálculos de resposta linear a frequência e temperatura finitas. Esse resultado aponta os sistemas unidimensionais como candidatos a exibirem uma magnetorresistência expressiva. Além disso, coloca as paredes de domínio magnético na mesma

categoria das impurezas (magnéticas ou não) como fontes de espalhamento singular de um líquido de Luttinger.

O espalhamento entre elétrons e mágnons mediado por fônons virtuais que propusemos é ativado em temperaturas menores do que o espalhamento por fônons. A observação experimental desse mecanismo depende de se encontrar um material com forte acoplamento elétron-fônon (possivelmente com uma fase supercondutora em baixas temperaturas) e forte dependência do acoplamento de troca com a separação entre os íons, mas sem acoplamento direto entre os elétrons de condução e a rede magnética.

Num sistema unidimensional com interação spin-órbita e campo magnético perpendicular, a direção de polarização das bandas de spin é dependente do momento. Analisamos um caso especial de espalhamento dos elétrons por uma impureza não magnética que depende do ajuste fino entre o acoplamento Rashba e a velocidade de Fermi. Vimos que nesse caso é possível suprimir o espalhamento usual e controlar a resistência do fio quântico aplicando um campo magnético. A magnetoresistência prevista pode ser bastante grande no caso de elétrons interagentes, pois as interações repulsivas reforçam o espalhamento pela impureza em baixas temperaturas.

Apêndice A

Autofunções dos mágnons na parede de Bloch

Queremos encontrar as autofunções da equação diferencial

$$(-\partial_x^2 + V(x)) \varphi(x) = w\varphi(x), \quad (\text{A.1})$$

onde

$$V(x) = \frac{1}{\lambda^2} \left[\tanh^2 \left(\frac{x}{\lambda} \right) - \operatorname{sech}^2 \left(\frac{x}{\lambda} \right) \right] = \frac{2}{\lambda^2} \tanh^2 \left(\frac{x}{\lambda} \right) - \frac{1}{\lambda^2}.$$

Seguimos a referência [59]. Tomando $z = x/\lambda$, obtemos

$$(-\partial_z^2 + v \tanh^2 z) \varphi(z) = \epsilon \varphi(z),$$

onde $v = 2$ e $\epsilon = 1 + \lambda^2 w$. Fazemos

$$\varphi(z) = e^{-az} \operatorname{sech}^b z F(z), \quad (\text{A.2})$$

com a e b tais que

$$a^2 + b^2 = -\epsilon + v,$$

$$2ab = 0,$$

e ficamos com

$$F'' - 2[a + b \tanh z] F' + [v - b(b + 1)] \operatorname{sech}^2 z F = 0.$$

Passando para a variável $u = (1 + \tanh z)/2$, obtemos

$$u(1-u) \frac{d^2 F}{du^2} + [a + b + 1 - 2(b+1)u] \frac{dF}{du} + [v - b(b+1)] F = 0, \quad (\text{A.3})$$

que é a equação diferencial da função hipergeométrica

$$F = F \left(b + \frac{1}{2} - \sqrt{v + \frac{1}{4}}, b + \frac{1}{2} + \sqrt{v + \frac{1}{4}} \mid a + b + 1 \mid u \right),$$

$$F(a, b \mid c \mid z) = 1 + \frac{ab}{c} z + \frac{a(a+1)b(b+1)}{2!c(c+1)} z^2 + \dots$$

Vamos encontrar os possíveis estados ligados ($\epsilon < v$). Tomamos

$$\begin{aligned} a &= 0, \\ b &= \sqrt{v - \epsilon}. \end{aligned}$$

A autofunção $\varphi(z)$ será de quadrado integrável se a série de F for finita, o que acontece se

$$b_n + \frac{1}{2} - \sqrt{v + \frac{1}{4}} = -n,$$

onde $n = 0, 1, 2, \dots$, mas tal que $b_n > 0$. Com $v = 2$,

$$b_n = 1 - n$$

e só há um estado ligado: $n = 0$, $b = 1$, $F(0, 3 \mid 2 \mid u) = 1$. A autofunção

normalizada é então

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \operatorname{sech} \frac{x}{\lambda}. \quad (\text{A.4})$$

Vejamos agora os autoestados de espalhamento ($\epsilon > v$). Nesse caso, escolhemos

$$a = \sqrt{v - \epsilon} \equiv -i\kappa, \quad (\text{A.5})$$

$$b = 0. \quad (\text{A.6})$$

Então

$$\varphi(z) = e^{i\kappa z} F \left(\frac{1}{2} - \sqrt{v + \frac{1}{4}}, \frac{1}{2} + \sqrt{v + \frac{1}{4}} \mid 1 - i\kappa \mid u \right).$$

Com $v = 2$,

$$\varphi(z) = e^{i\kappa z} F(-1, 2 \mid 1 - i\kappa \mid u) = e^{i\kappa z} \left\{ 1 - \frac{2}{1 - i\kappa} u \right\} = \frac{\kappa + i \tanh z}{\kappa + i} e^{i\kappa z}.$$

Definindo $k = \kappa/\lambda$, obtemos

$$\varphi_k(x) = \mathcal{N} \frac{1 + i \tanh(x/\lambda) / k\lambda}{1 + i/k\lambda} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}}. \quad (\text{A.7})$$

O fator de normalização \mathcal{N} deve ser tal que

$$\begin{aligned} \delta_{kp} &= \mathcal{N}^2 \int dx \varphi_k^*(x) \varphi_p(x) \\ &= \mathcal{N}^2 \left\{ \frac{1 + \frac{1}{(k\lambda)^2}}{\left(1 - \frac{i}{k\lambda}\right) \left(1 + \frac{i}{p\lambda}\right)} \frac{1}{L} \int dx e^{i(p-k)x} + O\left(\frac{\lambda}{L}\right) \right\}. \end{aligned}$$

Então, no limite $L \rightarrow \infty$, $(1/L) \int dx e^{i(p-k)x} = \delta(k - p)$

$$\mathcal{N} = 1,$$

$$\varphi_k(x) = \frac{1 + i \tanh(x/\lambda) / k\lambda}{1 + i/k\lambda} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{L}}. \quad (\text{A.8})$$

Os autovalores correspondentes são, segundo a Eq. (A.5)

$$w = \frac{\epsilon - 1}{\lambda^2} = \frac{v + \kappa^2 - 1}{\lambda^2} = \frac{1}{\lambda^2} + k^2. \quad (\text{A.9})$$

Os k 's permitidos são determinados pela condição de contorno

$$\begin{aligned} \varphi_k(-L/2) &= \varphi_k(L/2), \\ \frac{1 - i/k\lambda}{1 + i/k\lambda} &= e^{ikL}, \\ k_n &= \frac{2n\pi}{L} - \frac{1}{L} \tan^{-1} \left(\frac{2k_n\lambda}{k_n^2\lambda^2 - 1} \right). \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Apêndice B

Conservação de momento na parede de Bloch

No caso da cadeia de spins com anisotropia finita, espera-se que o momento dos mágnons não seja conservado porque o potencial $V(x)$ quebra a invariância translacional e as autofunções não são ondas planas. Entretanto, vamos mostrar que, no limite $L \rightarrow \infty$, $M_{pq} \propto \delta_{pq}$. Usando as autofunções (2.63), temos

$$M_{pq} = \frac{1}{1 + i/p\lambda} \left\{ \delta_{pq} + \frac{1}{L} \frac{i}{p\lambda} \int dx e^{i(p-q)x} \tanh(x/\lambda) \right\}. \quad (\text{B.1})$$

Calculamos a integral $I \equiv \int_{-R}^{+R} dx e^{ikx} \tanh(x/\lambda)$ usando o contorno da figura B.1. A integral sobre C_3 é

$$\int_{C_3} dz e^{ikz} \tanh \frac{z}{\lambda} = \int_{+R}^{-R} dx e^{-\pi k\lambda} e^{ikx} \frac{e^{i\pi+x/\lambda} - e^{-i\pi-x/\lambda}}{e^{i\pi+x/\lambda} + e^{-i\pi-x/\lambda}} = -e^{-\pi k\lambda} I.$$

Sobre C_2 e C_4 ,

$$\int_{C_2} dz e^{ikz} \tanh \frac{z}{\lambda} \rightarrow i \frac{e^{ikR}}{k} (1 - e^{-\pi k\lambda}),$$

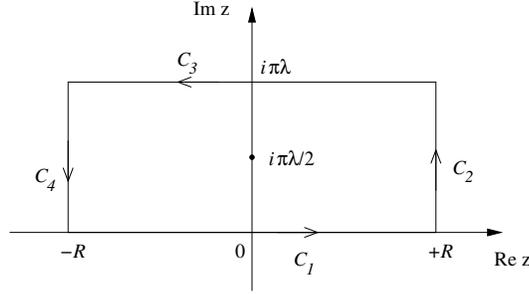


Figura B.1: Contorno de integração.

$$\int_{C_4} dz e^{ikz} \tanh \frac{z}{\lambda} \rightarrow i \frac{e^{-ikR}}{k} (1 - e^{-\pi k \lambda}).$$

O pólo em $z = i\pi\lambda/2$ tem resíduo

$$\text{Res}(i\pi\lambda/2) = \lambda e^{-\pi k \lambda/2}.$$

Então

$$\oint dz e^{ikz} \tanh \frac{z}{\lambda} = (1 - e^{-\pi k \lambda}) I + 2i \frac{\cos kR}{k} (1 - e^{-\pi k \lambda}) = 2\pi i \lambda e^{-\pi k \lambda/2},$$

$$I = i\pi \lambda \text{csch} \frac{\pi k \lambda}{2} - 2i \frac{\cos kR}{k}.$$

Substituindo em (B.1), obtemos

$$M_{pq} = \frac{1}{1 + i/p\lambda} \left\{ \delta_{pq} + \frac{1}{pL} \left[\frac{\cos(p-q)L/2}{(p-q)\lambda/2} - \pi \text{csch} \frac{\pi(p-q)\lambda}{2} \right] \right\}. \quad (\text{B.2})$$

A expressão acima é convergente para $p \rightarrow q$

$$M_{qq} = \frac{1}{1 + i/q\lambda}.$$

Note que (B.2) se reduz a δ_{pq} no limite $p\lambda \gg 1$, em que o comprimento de onda do mágnon é muito menor do que a escala de variação do potencial, e

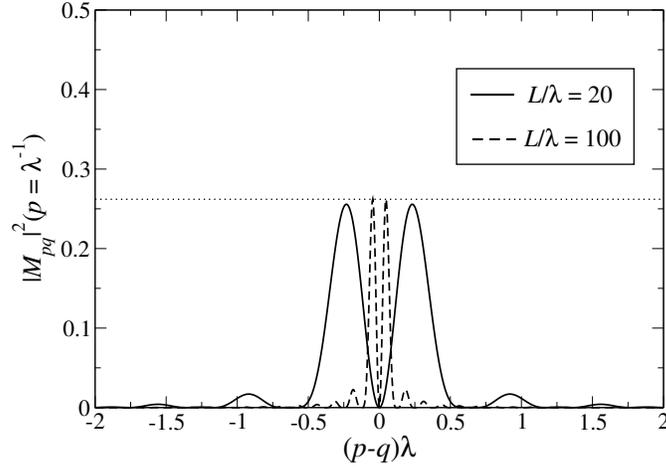


Figura B.2: Fator de não conservação de momento $|M_{pq}|^2$ ($p \neq q$) para $p = 1/\lambda$ e dois valores de L/λ . A linha pontilhada indica o valor máximo da função no limite termodinâmico.

vai a zero no limit $q \rightarrow 0$.

Lembramos que $p > 1/\lambda$ e daí $1/2 < |M_{qq}|^2 < 1$. Para $p \neq q$, a expressão

$$|M_{pq}|^2 = \frac{1}{1 + (p\lambda)^2} \left[\frac{\cos(p-q)L/2}{(p-q)L/2} - \frac{\pi\lambda}{L} \operatorname{csch} \frac{\pi(p-q)\lambda}{2} \right]^2 \quad (\text{B.3})$$

apresenta um máximo global na vizinhança de $|p-q| \sim 1/L$. Vamos calcular a posição desse pico. No limite $\lambda \ll L$ a condição de máximo conduz à equação

$$u \sin u + \cos u = 1,$$

onde $u \equiv (p-q)L/2$. A solução numérica que procuramos é $u \approx 2,33$. Portanto, o pico ocorre para $|p-q| \approx 4,66/L$. O valor de $|M_{pq}|^2$ nesse ponto é $|M_{pq}^{max}|^2 \approx 0,525 [1 + (p\lambda)^2]^{-1} \leq 0,262$. Além disso, a figura B.2 mostra que $|M_{pq}|^2$ é apreciável apenas para $|p-q| \lesssim 10/L$. No limite $\lambda/L \rightarrow 0$,

pode-se aproximar a Eq. (B.3) nessa região e obter

$$\begin{aligned}
 |M_{pq}|^2 &\approx \frac{1}{1 + (p\lambda)^2} \left[\frac{1 - \cos(p - q)L/2}{(p - q)L/2} \right]^2 \\
 &= \frac{16\pi}{1 + (p\lambda)^2} \frac{\sin^2(p - q)L}{L} \left[\frac{1}{\pi L} \frac{\sin^2(p - q)L}{(p - q)^2} \right] \\
 &\rightarrow \frac{16\pi}{1 + (p\lambda)^2} \frac{\sin^2(p - q)L}{L} \delta(p - q),
 \end{aligned}$$

que se anula. Portanto, no limite termodinâmico $L \rightarrow \infty$, a conservação de momento é recuperada

$$|M_{pq}|^2 = \frac{\delta_{pq}}{1 + 1/(p\lambda)^2}. \quad (\text{B.4})$$

Esse fato é, porém, uma peculiaridade do potencial (2.53), que tem coeficiente de transmissão igual a 1, como se pode verificar pelas autofunções da Eq. (2.63). Um mágnon incidente em $x \rightarrow -\infty$ com função de onda

$$\varphi_p(x) \approx \frac{1 - i/p\lambda}{1 + i/p\lambda} \frac{e^{ipx}}{\sqrt{L}}$$

é espalhado para a frente ($x \rightarrow +\infty$) com função de onda

$$\varphi_p(x) \approx \frac{e^{ipx}}{\sqrt{L}},$$

diferindo apenas por uma fase da onda incidente. Para $p \rightarrow 0$, a diferença de fase é exatamente π . As duas funções de onda são autoestados de momento, daí a conservação revelada na Eq. (B.4).

Referências Bibliográficas

- [1] D. C. Mattis, *The Many-body Problem: an Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension* (World Scientific, 1993); Z. N. C. Ha, *Quantum Many-Body Systems in One Dimension*, World Scientific, Singapore, 1996.
- [2] A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik, *Bosonization and strongly correlated systems* (Cambridge, 1998).
- [3] K. Huang, *Statistical Mechanics* (Wiley, New York, 1987).
- [4] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon, London, 1959). Página 482.
- [5] G. D. Mahan, *Many Particle Physics*. Second Edition. (Plenum, New York, 1990).
- [6] J. Voit, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995).
- [7] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **5**, 544 (1950).
- [8] D. C. Mattis and E. H. Lieb, J. Math. Phys. **6**, 375 (1965).
- [9] S. Coleman, Phys. Rev. D **11**, 2088 (1975).
- [10] J. von Delft and H. Schoeller, Ann. Phys. (Leipzig) **7**, 225 (1998).
- [11] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).

- [12] F. D. M. Haldane, *J. Phys. C* **14**, 2585 (1981).
- [13] D. K. Ferry and S. M. Goodnick, *Transport in Nanostructures* (Cambridge, New York, 1997).
- [14] T. W. Ebbesen, *Carbon Nanotubes* (CRC Pres, Boca Raton, Florida, 1997).
- [15] O. M. Auslaender, A. Yacoby, R. de Picciotto, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1764 (2000)
- [16] H. Ishii *et al.*, *Nature* **426**, 540 (2003).
- [17] T. Lorenz *et al.*, *Nature* **418**, 614 (2002).
- [18] H. van Houten and C. Beenaker, *Phys. Today* **49**, 22 (1996).
- [19] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems* (Cambridge, New York, 1997).
- [20] D. L. Maslov and M. Stone, *Phys. Rev. B* **52**, R5539 (1995).
- [21] C. L. Kane and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1220 (1992); C. L. Kane and M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B* **46**, 15233 (1992).
- [22] K. A. Matveev, Dongxiao Yue, and L. I. Glazman, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3351 (1993); M. P. A. Fisher and L. I. Glazman, cond-mat/9610037.
- [23] M. Bockrath, D. H. Cobden, J. Lu, A. G. Rinzler, R. E. Smalley, L. Balents, and P. L. McEuen, *Nature* **397**, 598 (1999).
- [24] D. D. Awschalom and J. M. Kikkawa, *Phys. Today* **52**, 33 (1999).
- [25] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).

- [26] S. Jin, T. H. Tiefel, M. McCormack, R. A. Fastnacht, R. Ramesh, L. H. Chen, *Science* **264**, 413 (1994).
- [27] A. J. Millis, P. B. Littlewood, and B. I. Shraiman, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 175 (1996).
- [28] U. Ebels, A. Radulescu, Y. Henry, L. Piraux, and K. Ounadjela, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 983 (2000).
- [29] G. Dumpich, T. P. Krome, B. Hausmanns, *J. Magn. Magn. Mater.* **248**, 241 (2002).
- [30] G. Tatara, Y.-W. Zhao, M. Muñoz, and N. García, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2030 (1999).
- [31] N. García, M. Muñoz, and Y.-W. Zhao, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2923 (1999).
- [32] S. H. Chung, M. Muñoz, N. García, W. F. Egelhoff, and R. D. Gomez, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 287203 (2002).
- [33] G. G. Cabrera and L. M. Falicov, *Phys. Status Solidi B* **61**, 539 (1974).
- [34] P. Bruno, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2425 (1999).
- [35] T. Ono, Y. Ooka, H. Miyajima, and Y. Otani, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 1622 (1999).
- [36] K. Nakanishi and Y. O. Nakamura, *Phys. Rev. B* **61**, 11 278 (2000).
- [37] U. Ruediger, J. Yu, S. Zhang, A. D. Kent, S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 5639 (1998).
- [38] G. Tatara and H. Fukuyama, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 3773 (1997).
- [39] P. M. Levy and S. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 5110 (1997).

- [40] E. Lieb and D. Mattis, *Phys. Rev.* **125**, 164 (1962).
- [41] N. D. Mermin and H. Wagner, *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1133 (1966).
- [42] H. Tsunetsugu, M. Sigrist, and K. Ueda, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 809 (1997).
- [43] J. Shen, R. Skomski, M. Klaua, H. Jenniches, S. Sundar Manoharan, and J. Kirschner, *Phys. Rev. B* **56**, 2340 (1997).
- [44] P. Gambardella, A. Dallmeyer, K. Maiti, M. C. Malagoli, W. Eberhardt, K. Kern, and C. Carbone, *Nature* **416**, 301 (2002).
- [45] M. Pratzner, H. J. Elmers, M. Bode, O. Pietzsch, A. Kubetzka, and R. Wiesendanger, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 127201 (2001).
- [46] P. Segovia, D. Purdie, M. Hengsberger, and Y. Baer, *Nature* **402**, 504 (1999).
- [47] E. I. Rashba, *Fiz. Tverd. Tela (Leningrad)* **2** 1224 (1960), [*Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960)].
- [48] D. Grundler, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 6074 (2000).
- [49] B. Datta and S. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
- [50] J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146801 (2003).
- [51] A. V. Moroz, K. V. Samokhin, and C. H. W. Barnes, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4164 (2000).
- [52] W. Häusler, *Phys. Rev. B* **63**, 121310 (2001).
- [53] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **86**, 694 (1952).

- [54] J. M. Ziman, *Principles of the Theory of Solids*, second edition (Cambridge, 1972).
- [55] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics* (Plenum, New York, 1994). Capítulo 21.
- [56] J. Villain, *J. Physique* **35**, 27 (1974).
- [57] S. Chikazumi, *Physics of Magnetism* (Wiley, 1964).
- [58] E. M. Lifshitz, L. D. Landau and L. P. Pitaevskii, *Electrodynamics of Continuous Media* (Butterworth-Heinemann, Oxford, 1995).
- [59] P. M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics*, Part II (McGraw-Hill, New York, 1953). Páginas 1650-1659.
- [60] J. M. Winter, *Phys. Rev.* **124**, 452 (1961).
- [61] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many Particle Physics* (McGraw-Hill, San Francisco, 1971).
- [62] W. Götze and P. Wölfe, *Phys. Rev. B* **6**, 1226 (1972).
- [63] E. Miranda. *Braz. J. Phys.* **33**, 3 (2003).
- [64] R. G. Pereira and E. Miranda, *Phys. Rev. B* **69**, 140402(R) (2004).
- [65] K. Penc and J. Sólyom, *Phys. Rev. B* **47**, 6273 (1993).
- [66] K. G. Wilson and J. Kogut, *Phys. Rept.* **12C** 75-200 (1974).
- [67] R. Shankar, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 129 (1994).
- [68] M. Fabrizio and A. O. Gogolin, *Phys. Rev. B* **51**, 17827 (1995).
- [69] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of integrals, series, and products* (Academic Press, 1980). Integral 3.382 (4).

- [70] V. K. Dugaev, J. Berakdar, and J. Barnas, Phys. Rev. B **68**, 104434 (2003).
- [71] J. M. Ziman, *Electrons and Phonons* (Clarendon, Oxford, 1966).
- [72] G. Seelig and K. A. Matveev, Phys. Rev. Lett. **90**, 176804 (2003).
- [73] J-Y. Park, S. Rosenblatt, Y. Yaish, V. Sazonova, H. Ustunel, S. Braig, T. A. Arias, P. W. Brouwer, and P. L. McEuen, cond-mat/0309641.
- [74] T. Holstein, Ann. Phys. (NY) **8**, 325 (1959).
- [75] F. Keffer, *Handbuch der Physik*, vol. XVIII/2 (Springer, 1966).
- [76] S. Engelsberg and B. B. Varga, Phys. Rev. **136**, A1582 (1964).
- [77] J. Voit and H. J. Schulz, Phys. Rev. B. **37**, 10068 (1988).
- [78] M. Governale and U. Zülicke, Phys. Rev. B. **66**, 073311 (2002).
- [79] S. Brosig, K. Ensslin, A. G. Jansen, C. Nguyen, B. Brar, M. Thomas, and H. Kroemer, Phys. Rev. B **61**, 13045 (2000).