UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

HUDSON PIMENTA SILVEIRA

**Dinâmica de Kondo em ferromagnetos itinerantes
unidimensionais**

São Carlos
2013

HUDSON PIMENTA SILVEIRA

Dinâmica de Kondo em ferromagnetos itinerantes
unidimensionais

*Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Física do Instituto de Física
de São Carlos da Universidade de São
Paulo, para obtenção do título de Mestre em
Ciências.*

Área de concentração: Física Básica

Orientador: Rodrigo Gonçalves Pereira

Versão Corrigida

(Versão original disponível na unidade que aloja o programa)

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTES-
TE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO,
PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação IFSC,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

Pimenta Silveira, Hudson

Dinâmica de Kondo em ferromagnetos itinerantes
unidimensionais / Hudson Pimenta Silveira;
orientador Rodrigo Gonçalves Pereira - versão
corrigida - São Carlos, 2013.

111 p.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-Graduação
em Física Básica) - Instituto de Física de São Carlos,
Universidade de São Paulo, 2013.

1. Ferromagnetismo. 2. Efeito Kondo. 3.
Impureza móvel. 4. Sistemas unidimensionais. I.
Gonçalves Pereira, Rodrigo, orient. II. Título.

AGRADECIMENTOS

O período do meu Mestrado me levou a muitas mudanças. Se, por um lado, elas levam a crescimento pessoal, por outro, o período de transição até que se concretizem é particularmente delicado e eu gostaria de prestar agradecimentos a algumas pessoas por terem catalisado essas transformações ou por terem me amparado em momentos de dificuldade.

Devo agradecer, primeiramente, meus pais, Roza Helena e Wagner, pelos investimentos afetivos e, inevitavelmente, financeiros feitos em mim. Sem isto, minha trajetória já teria acabado. A carreira de Física tem exigido que eu dependa mais deles do que eu gostaria, mas espero que isto mude com os próximos anos.

Em seguida, gostaria de agradecer ao meu orientador de Mestrado, Rodrigo. Com ele, passei a enxergar a Física com outros olhos, o que foi fundamental para estabelecer o meu interesse em matéria condensada e para compreender algo que professores em outro momento já haviam me alertado: que Física de baixas energias é muito similar a Física de altas energias.

Também agradeço ao meu orientador de iniciação científica, Luiz Nunes. Ele foi um dos meus primeiros professores na universidade e trabalhei com ele durante praticamente toda a graduação. Seus ensinamentos foram muito importantes para a minha formação como pesquisador de modo geral e não apenas em conhecimentos de Física.

Outros professores relevantes para minha formação como físico incluem Valter Líbero e Lidério Ioriatti. Valter, como Luiz Nunes, foi um dos meus primeiros professores e me viu nascer no meio da Física, além de um dos melhores professores de minha graduação. Já o professor Lidério foi um grande responsável por me contagiar com o entusiasmo pela ciência. Este entusiasmo certamente é compartilhado pelos outros professores que aqui cito, mas Lidério o demonstra de forma emblemática. Ele costumava me dizer que fazer ciência é sua maneira de fazer arte.

Gostaria também de homenagear também amigos aqui. Muitos deles foram importantes para que eu pudesse me manter firme durante o Mestrado. A Física é uma área frequentemente desgastante e exige que estejamos bem para que tenhamos a concentração necessária para produzir. O apoio psicológico para me manter de pé diante das dificulda-

des de natureza acadêmica ou ligadas à vida pessoal veio dessas pessoas.

De modo geral, gostaria de agradecer aos seguintes nomes: Aliel Kauchakje, Fernando Arruda, Petrônio Crisóstomo, Murillo Belezze, César Comin, Danilo Granato, Luiz Henrique, Felipe Penha, Aron Heleodoro, Rodrigo Soares, Paulo Eduardo, Anderson Roberto, Leonardo Andreta, Fernando César, Lucas Sala, Carlos Eduardo, Uilson Barbosa, Daniel Herculano, Jessica Dipold, Diogo Lima, Krissia Zawadzki, Giseli Gonçalves, José Francisco, Arthur Bertoldi, Cleverson Cherubim, Fellipy Ferreira, Matheus Teodoro, Maurício Alves. Várias dessas pessoas foram importantes para minha meu crescimento pessoal ou acadêmico em algum período.

Quero prestar meus agradecimentos a três pessoas em especial. São elas Emerson, André e Cora.

Conheci Emerson quando estava no segundo ano da graduação, que foi quando efetivamente ingressei (por transferência) na turma de Física. Eu não o conhecia, mas ele gentilmente perguntou se eu havia conseguido realizar a transferência. Não consigo me lembrar exatamente como ficamos amigos depois disto, mas conversamos até hoje e, apesar de não convivermos tanto quanto convivo, por exemplo, com pessoas que citei no parágrafo anterior, é uma das pessoas em quem mais confio.

Agradeço também pela amizade de André Orlandi. Principalmente porque ele passou a trabalhar fora do meio acadêmico durante o meu período de Mestrado, não convivemos tanto, mas também enxergo nele um amigo para toda a vida.

Cito agora a minha amiga Cora Castelo Branco. Já tive desentendimentos severos com ela, mas acredito que hoje temos uma amizade sólida. Em algumas épocas do Mestrado, passei por problemas sérios e Cora foi quem mais me ajudou a superá-los. Como nos casos anteriores, ela não é um dos meus amigos mais presentes, mas confio nela para os momentos de urgência.

Para finalizar, agradeço à FAPESP pelo apoio financeiro para a realização deste projeto.

O próximo passo de minha jornada na Física é o Doutorado na Universidade de Toronto. Eu gostaria de compartilhar o otimismo das pessoas, que encaram o aceite nesta

universidade como um sinal de que tenho sido bem sucedido na carreira. Na realidade, estou em dúvidas. Meu entusiasmo cede lugar a receios por saber que não compartilho da genialidade de meus orientadores. Além disto, sinto que sacrifiquei parte de meus relacionamentos pessoais em momentos anteriores e não gostaria que o Doutorado levasse ao mesmo rumo. Essas questões me atormentam, mas o fato é que, sempre que este tipo de pensamento passou por minha cabeça, uma oportunidade se abriu em minha frente e eu segui mesmo incerto. Estudar no exterior é uma grande oportunidade e eu decidi seguir em frente. A minha sensação, contudo, é de entrar em um túnel cujo final só enxergarei daqui a cinco anos.

“The greatest ideas are the simplest.”

William Golding, *Lord of the Flies*

RESUMO

PIMENTA, H. **Dinâmica de Kondo em ferromagnetos itinerantes unidimensionais**. 2013. 111 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

Ferromagnetismo itinerante permanece um problema elusivo em Física. O fenômeno resulta da competição entre interação eletrônica e efeitos de muitos corpos e não pode ser tratado perturbativamente. Particularmente em uma dimensão, teoremas proíbem fases ferromagnéticas em $T = 0$ para modelos de rede com hopping de primeiros vizinhos. Nos últimos vinte anos, entretanto, apareceram modelos na literatura que estendem o hopping para além de primeiros vizinhos e para os quais ordem ferromagnética foi rigorosamente estabelecida. Praticamente todas as demonstrações da existência de ferromagnetos unidimensionais são feitas em fase isolante (com exceção de casos patológicos, como repulsão infinita). Isto nos levou a investigar o acoplamento entre os setores de spin e carga no regime fortemente interagente quando se dopa o sistema, o que introduz pontos de Fermi p_F e $-p_F$. Encontramos, com teoria de perturbação, singularidades logarítmicas na auto-energia do mágnon quando seu momentum é p_F ou $-p_F$. Derivamos uma teoria de campo efetiva para o espalhamento em torno desses pontos entre os mágnons e férmions sem spin (que representam o setor de carga). O modelo efetivo é similar ao modelo Kondo, que consiste de uma impureza magnética localizada acoplada localmente com um mar fermiônico por uma interação de troca entre spins. Em nosso modelo, há, na realidade, um pseudospin que indica se o momentum de uma partícula é próximo de p_F ou de $-p_F$ e o mágnon se comporta como uma impureza móvel. A mobilidade da impureza leva a uma relação de dispersão para os férmions dependente do pseudospin da impureza.

Palavras-chave: Ferromagnetismo. Efeito Kondo. Impureza móvel. Sistemas unidimensionais.

ABSTRACT

PIMENTA, H. **Kondo dynamics in one-dimensional itinerant ferromagnets**. 2013. 111 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2013.

Itinerant ferromagnetism remains an elusive problem in Physics. The phenomenon arises from a competition between electronic interaction and many-body effects and cannot be treated perturbatively. Particularly in 1D, there are rigorous proofs that forbid ferromagnetic phase for lattice models with nearest-neighbours hopping only. In the last twenty years, however, models with hopping beyond nearest-neighbours were proposed in the literature and for which ferromagnetic phase was rigorously established. Virtually every proof of the existence of one-dimensional ferromagnets is done in an insulator phase (disregarding some pathological cases, such as infinite electronic repulsion). That motivated us to investigate the coupling between spin and charge sectors in the strongly interacting regime when we dope the system, introducing two Fermi points, p_F and $-p_F$. We found out, through perturbation theory, logarithmic singularities in the magnon self-energy when its momentum is p_F or $-p_F$. To understand them, we derived an effective field theory for the scattering between magnons and spinless fermions (which represent the charge sector) close to these points. The effective model resembles the Kondo model, which describes a magnetic impurity locally coupled to a fermionic sea through spin exchange interaction. In our model, there is actually a pseudospin that indicates if a particle momentum is closest to p_F or $-p_F$ and the magnon behaves as a mobile impurity. The impurity mobility leads to a fermionic dispersion relation that depends on the impurity pseudospin.

Keywords: Ferromagnetism. Kondo effect. Mobile impurity. One-dimensional systems.

SUMÁRIO

1	Introdução	15
2	Modelos com dois sítios por célula unitária	23
2.1	Um caso particular: o modelo de Tasaki	24
2.2	Bosonização de modelos com dois sítios por célula unitária	29
3	Setores de carga e spin no regime fortemente interagente	37
3.1	Refermionização do setor de cargas	37
3.2	Setor de spin no regime fortemente interagente: mágnons	40
3.3	Derivação do Hamiltoniano de interação spin-carga	43
3.4	Correções à auto-energia do mágnon	46
4	Acoplamento spin-carga em um isolante ferromagnético dopado	53
4.1	Derivação de um modelo efetivo para o acoplamento spin-carga	54
5	Conclusão	65
	REFERÊNCIAS	67
	Apêndice A O teorema de Lieb e Mattis para redes unidimensionais	73
	Apêndice B Bosonização	81
	Apêndice C Líquido de Luttinger para o modelo de Hubbard	91
	Apêndice D Espectro do mágnon para redes com dois sítios por célula unitária	97

Capítulo 1

Introdução

Ferromagnetismo é a propriedade das partículas de um sistema de alinharem espontaneamente seus spins. Isto significa que o Hamiltoniano que descreve o sistema é invariante por rotação (ou, de modo mais geral, por inversão de spin), mas, na configuração que minimiza a energia, os spins se alinham parcialmente ou completamente. Todas as direções de alinhamento se equivalem energeticamente, mas o sistema escolhe uma e quebra a simetria de rotação. O parâmetro de ordem associado a esta quebra de simetria é a magnetização em uma dada direção.

Este é um dos exemplos mais simples do fenômeno de quebra espontânea de simetria, pois o estado fundamental ainda é um autoestado do Hamiltoniano. Assim, por um lado, não surpreende que o sistema permaneça nesta configuração, uma vez que o estado correspondente é estacionário. Por outro, obscurece o real mecanismo por trás da quebra de simetria, pois, em sistemas em que o estado que quebra a simetria não é autoestado do Hamiltoniano, ainda assim o sistema permanece congelado em uma dada configuração. O que garante esta permanência é o tamanho do sistema ser infinito.

Isto porque, em princípio, se o estado de um sistema não é autoestado, a evolução temporal mistura este estado com estados equivalentes do ponto de vista de uma certa simetria. Uma estimativa do tempo para a amplitude do estado inicial diminuir apreciavelmente revela que aquele cresce com o tamanho do sistema e diverge no limite termodinâmico. Assim, um sistema macroscópico permanece essencialmente congelado em um estado que quebra uma simetria do Hamiltoniano.

No caso de um ferromagneto, este argumento, em primeira análise, parece dispensável, já que o estado é estacionário. No entanto, o mesmo argumento garante que o estado de simetria quebrada persiste diante de flutuações térmicas e perturbações. Por exemplo, um ímã é constantemente perturbado pelo campo magnético da Terra. A perturbação implicaria evolução temporal do estado inicial. Novamente, pelo mesmo argumento do parágrafo anterior, o tempo característico do processo diverge no limite termodinâmico. Por isso, o ímã permanece com um eixo de magnetização em geral distinto do eixo magnético da Terra.

Assim, ferromagnetismo é um exemplo de propriedade que emerge conforme se aumenta o tamanho do sistema. O ponto importante é que, no limite de tamanho infinito, uma direção (o eixo de magnetização do ferromagneto) passa a ser especial, ainda que as leis físicas descrevam um espaço isotrópico. Trata-se de um exemplo de que “mais é diferente” (1).

Recentemente, o interesse em ferromagnetismo se renovou quando um grupo experimental acreditou ter observado a transição prevista por Stoner (veja adiante) em sistema de átomos frios (2). Contudo, o mesmo grupo obteve novos resultados, sugerindo que a transição não ocorre (3). A seguir, fazemos um resumo dos principais resultados acerca do problema de ferromagnetismo (em particular, de ferromagnetismo itinerante). As discussões em toda esta dissertação são feitas no caso em que $T = 0$, isto é, discutimos as propriedades do estado fundamental do sistema.

As origens precisas do ferromagnetismo permanecem elusivas em Física. Foi Heisenberg quem primeiro identificou que o fenômeno resulta de uma competição entre interação Coulombiana e efeitos de muito corpos (4). Na abordagem de Heisenberg para o estudo do ferromagnetismo, parte-se de um modelo da forma $H = J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$, com $J < 0$, para explicá-lo. Esta abordagem não é muito esclarecedora, pois, escolhido $J < 0$, o modelo claramente favorece ferromagnetismo (mesmo mantendo a simetria de rotação), restando verificar se ordem ferromagnética se estabelece.

Uma questão mais fundamental é se um modelo de elétrons itinerantes seria capaz de originar ferromagnetismo. Este problema é interessante porque termos de hopping

ou termos de repulsão eletrônica isolados não favorecem ordem ferromagnética: é preciso combinar os dois. Quando dizemos que não se entende as origens do ferromagnetismo, é porque combinações suficientes para gerar ordem ferromagnética não são conhecidas, apesar de avanços terem sido feitos mais recentemente.

Aproximadamente na mesma época em que Heisenberg propôs seu modelo, Stoner, com um argumento de campo médio, obteve uma condição a ser satisfeita pela repulsão eletrônica e a densidade de estados de um sistema para haver fase ferromagnética (5). Entretanto, teorias de campo médio frequentemente levam a resultados errados, especialmente em sistemas unidimensionais. Para o modelo unidimensional de Hubbard original (6), por exemplo, a derivação de uma interação de troca efetiva sempre leva a antiferromagnetismo ($J > 0$) no regime fortemente interagente e no caso de preenchimento meio (7).

Além disso, um teorema devido a Lieb e Mattis invalida o critério de Stoner ao impor restrições consideráveis ao ferromagnetismo (8) em sistemas unidimensionais e alguns casos especiais de sistemas de dimensão superior. Uma das versões do teorema se aplica ao contínuo e é bastante geral. A segunda versão se aplica a redes, mas não pode ser generalizada para hopping além de primeiros vizinhos. Ambos os teoremas estabelecem que o estado fundamental de uma série de modelos tem $S = 0$, em que S é o número quântico de spin, o que parecia, na época, inviabilizar ferromagnetismo itinerante em sistemas unidimensionais.

Entretanto, poucos anos depois, Nagaoka encontrou ferromagnetismo para uma condição particular do modelo de Hubbard, em que há repulsão infinita e com um elétron a menos do que em preenchimento meio (9). Embora o resultado seja interessante por demonstrar a possibilidade de fase ferromagnética, tem como pontos fracos depender da condição patológica de repulsão infinita e de um tipo de preenchimento muito especial.

O primeiro resultado de ferromagnetismo itinerante em um modelo mais razoável foi estabelecido por Lieb, que considerou uma extensão do modelo de Hubbard ao acoplar duas subredes e estabelecer magnetização não nula para repulsão finita e em preenchimento meio (10). Pouco tempo depois, Mielke demonstrou a existência de fase ferromagnética em modelos de múltiplas bandas no caso em que uma delas é plana (11).

Em seguida, um modelo importante foi proposto por Tasaki (12). O modelo é mais uma extensão do modelo de Hubbard, com hopping de primeiros e segundos vizinhos. Para este modelo, em preenchimento quarto, ferromagnetismo é demonstrado para uma larga faixa de valores de hopping e para repulsão finita. Assim, o modelo é importante por estabelecer a estabilidade, e não apenas a existência do ferromagnetismo (ainda que a condição de preenchimento quarto seja necessária).

A partir de então, vários outros resultados relacionados a ferromagnetismo itinerante foram obtidos para variações do modelo de Hubbard (13–15). Esses resultados nos revelam alguns ingredientes que contribuem favoravelmente para o ferromagnetismo, mas condições exatas para a existência da fase ferromagnética permanecem desconhecidas.

Todos esses trabalhos citados até aqui, contudo, não examinam como ocorre a transição de fase. Um trabalho de Kun Yang discute a transição no contexto de sistemas unidimensionais (16). Seu ponto de partida é a fase líquido de Luttinger de sistemas unidimensionais, que tem como característica marcante a separação dos setores de spin e carga (17–20). Yang trata uma instabilidade no setor de spin do modelo de Luttinger provocada por uma mudança de sinal na velocidade dos spinons e deriva um Hamiltoniano diferente ao reter termos irrelevantes no ponto fixo do líquido de Luttinger, mas importantes para garantir a estabilidade do modelo após a transição.

A partir de agora, discutimos o trabalho apresentado nesta dissertação. Embora o ponto de partida do trabalho seja ferromagnetismo, nosso principal resultado se insere melhor em problemas de impurezas móveis, sendo um ferromagneto uma forma de realizar o modelo que obtivemos no final do trabalho. Este modelo pode ter implicações para a estabilidade de ferromagnetismo metálico (como veremos mais adiante), mas é mais geral por descrever sistemas unidimensionais com impurezas móveis em contextos mais amplos que o de nossa derivação.

Demos início ao trabalho com um estudo do modelo de Tasaki, para o qual fase ferromagnética foi rigorosamente estabelecida. Originalmente planejávamos aplicar o formalismo descrito por Kun Yang a este modelo, procurando por instabilidades no setor de spin associadas a spinons com velocidade negativa. Para isto, bosonizamos o modelo de

Tasaki e determinamos os parâmetros do modelo de Luttinger. Todavia, no regime fracamente interagente, em que são válidos os cálculos apresentados, a velocidade dos spinons permanece positiva e o setor de spin, por consequência, estável.

De fato, o modelo bosonizado é uma generalização do modelo proposto por Tasaki: trata-se de um modelo com dois sítios por célula unitária. Vários dos modelos examinados nas referências se encaixam nesta classe, inviabilizando a investigação do problema no regime fracamente interagente (quando se aplica a bosonização tradicional). Isto enfatiza o que já se sabe sobre um dos bons ingredientes para fases ferromagnéticas: a repulsão eletrônica deve ser forte.

Concomitantemente, verificamos que os modelos com dois sítios por célula unitária transicionam para um isolante de Mott logo que se liga a interação (por menor que seja) quando se está em preenchimento quarto, caso em que a densidade é comensurada com a rede. Essa condição é importante porque a maior parte dos exemplos de ferromagnetismo foi demonstrada nesta condição. Só encontramos exemplos de ferromagnetismo metálico em uma dimensão na Ref. (14), mas na condição patológica de repulsão infinita.

Estando clara a impossibilidade de uma transição no regime fracamente interagente, passamos para o regime fortemente interagente. Assumimos fase ferromagnética e também isolante por causa da transição mencionada no parágrafo anterior. A dificuldade de se investigar o problema neste regime é que não há métodos tão sistemáticos quanto a bosonização. Para tornar o problema tratável, fazemos uma hipótese: há separação spin-carga para repulsão suficientemente grande. Esta é uma hipótese válida em modelos em que retroespalhamento é um processo dominante (21). Assumindo a separação spin-carga para o isolante ferromagnético, descrevemos o setor de cargas por férmions sem spin e o setor de spin por mágnons, que são os modos de Goldstone correspondentes à fase ferromagnética. Dopamos o isolante e nos afastamos da condição de preenchimento quarto, passando para a fase metálica, e, a partir de propriedades de simetria, propomos um acoplamento entre mágnons e férmions (um tratamento similar foi feito para um mágnon e um gás de bósons (22)).

A ideia de dopar o isolante é motivada pelas demonstrações de fase ferromagnética

serem realizadas, em sua maioria, na fase isolante. A derivação do modelo resultante do acoplamento entre mágnons e férmions na fase metálica é a contribuição mais importante deste trabalho. Neste modelo, o mágnon pode ser encarado como uma impureza móvel que interage com os férmions. Devido à dopagem, são introduzidos dois pontos de Fermi, p_F e $-p_F$. Como consideramos apenas processos de baixas energias, as partículas que participam do espalhamento possuem momenta próximos a esses valores. Encarando esses momenta como pseudospins, em que p_F corresponde a pseudospin alto e $-p_F$ corresponde a pseudospin baixo, os processos de retroespalhamento e espalhamento frontal são representados pela interação do pseudospin da impureza (do mágnon) e de um férmion. Este tipo de modelo é conhecido na literatura como modelo de Kondo (23).

No contexto original, o modelo de Kondo foi proposto para explicar porque a resistividade de metais atinge um mínimo para uma temperatura diferente de 0 (a temperatura de Kondo) e então aumenta conforme se abaixa a temperatura. Um cálculo perturbativo da resistividade leva a uma divergência em função da temperatura, um indício de que o problema não pode ser tratado perturbativamente. O problema da divergência só foi resolvido com o grupo de renormalização numérico (24–26). Na configuração do estado fundamental, um férmion blinda o spin da impureza através da formação de um singleto; os outros férmions se desacoplam da impureza (27).

O modelo que obtivemos neste trabalho é similar ao modelo de Kondo, mas com uma diferença: a impureza (o mágnon) é móvel e, por isso, também tem dispersão. Se nos restringirmos ao espaço de um mágnon, contudo, é possível, a partir de uma transformação unitária, eliminar o grau de liberdade de posição do mágnon. O modelo resultante neste formato fica ainda mais similar ao modelo de Kondo, mas a velocidade dos férmions é uma função do pseudospin do mágnon.

Não sabemos, no presente momento, dizer qual é a implicação do efeito Kondo nesse sistema e, em particular, se possui alguma consequência para a estabilidade ferromagnética. Se o ferromagneto permanecer estável, o modelo sugere a possibilidade experimental de se observar assinaturas do efeito Kondo por geração de ondas de spin em ferromagnetos metálicos unidimensionais. No caso particular em que a velocidade do mágnon é baixa,

pode-se especular que o modelo se comporte da mesma forma que o modelo de Kondo, isto é, o mágnon formaria um singleto com um férmion, similar a um par de Cooper. Sendo a formação desses pares favorável energeticamente, ferromagnetos metálicos seriam instáveis (dentro das hipóteses utilizadas para derivar o acoplamento entre mágnons e férmions).

A seguir, discutimos como se divide esta dissertação. Na primeira parte do Capítulo 2, apresentamos o modelo de Tasaki como um caso particular de modelo de dois sítios por célula unitária e esboçamos a demonstração da existência de fase ferromagnética. Ainda no Capítulo 2, demonstramos a estabilidade do setor de spin do líquido de Luttinger deste tipo de modelo. No Capítulo 3, estudamos um ferromagneto isolante em altas energias na hipótese de separação spin-carga, descrevendo separadamente os setores de spin e de carga e então propondo um tipo de acoplamento após a dopagem eletrônica do ferromagneto. Esse acoplamento leva a singularidades logarítmicas no espectro das excitações do setor de spin, que é uma assinatura do efeito Kondo. No Capítulo 4, derivamos um modelo para investigar o mecanismo físico por trás das singularidades. O modelo resultante é, como dito, similar ao modelo de Kondo. Finalmente, o Capítulo 5 conclui o trabalho.

Capítulo 2

Modelos com dois sítios por célula unitária

Nesse capítulo, investigamos modelos com dois sítios por célula unitária no regime fracamente interagente. Nosso ponto de partida é o modelo de Tasaki (12), que é um modelo de rede unidimensional que apresenta fase ferromagnética para uma repulsão grande, porém finita, entre elétrons. Este é o principal mérito do modelo, pois já havia sido encontrado ferromagnetismo em outros modelos unidimensionais, mas apenas em condições não realísticas, como repulsão finita e modelos de bandas sem dispersão (11).

Assim, o modelo de Tasaki garante a estabilidade do ferromagnetismo com respeito à repulsão eletrônica. Entretanto, a fase ferromagnética só é rigorosamente estabelecida para uma determinada densidade de elétrons para o qual o sistema é um isolante, o que não garante, por exemplo, que sobreviva a um processo de dopagem.

Introduzido o modelo de Tasaki, investigamos as propriedades do modelo de Luttinger derivado a partir de modelos com dois sítios por célula unitária, dos quais o modelo de Tasaki é um exemplo particular. Nossos resultados mostram que o setor de spin permanece estável para repulsão fraca, mas o setor de carga transiciona para um isolante de Mott em preenchimento quarto, quando a densidade é comensurada com a rede.

Esses resultados servem como confirmação de que interação forte é um ingrediente importante para a existência de fase ferromagnética.

2.1 Um caso particular: o modelo de Tasaki

O modelo de Tasaki consiste no Hamiltoniano

$$H = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (2.1)$$

em que os coeficientes t_{ij} 's são definidos pelas seguintes relações:

$$t_{i,i+1} = t'; \quad (2.2)$$

$$t_{i,i+2} = t \quad \text{se } i \text{ é par}; \quad (2.3)$$

$$t_{i,i+2} = -s \quad \text{se } i \text{ é ímpar}; \quad (2.4)$$

$$t_{i,i} = V \quad \text{se } i \text{ é ímpar}; \quad (2.5)$$

$$t_{i,j} = 0 \quad \text{em qualquer outro caso.} \quad (2.6)$$

Isto significa que: a amplitude de hopping entre sítios rotulados por índices ímpares é $-s$; a amplitude de hopping entre sítios rotulados por índices pares é t ; e a amplitude de hopping entre primeiros vizinhos é t' . A Fig. 2.1 ilustra a rede do modelo. A fase ferromagnética é demonstrada no caso em que $t' = \sqrt{2}(s+t)$ e $V = 0$.

Figura 2.1 – Rede do modelo de Tasaki. O hopping entre sítios de índice par é t ; o hopping entre sítios de índice ímpar é $-s$; e o hopping de primeiros vizinhos é $t' = \sqrt{2}(s+t)$.

Considera-se uma rede de $2N$ sítios. A fase ferromagnética é estabelecida no caso em que há N elétrons. Como o número máximo de elétrons permitidos nesta rede é $4N$, chamamos essa condição de preenchimento quarto (em inglês, quarter filling).

Antes de discutir a demonstração da existência de fase ferromagnética, examinamos o caso não interagente, em que $U = 0$. O Hamiltoniano se reduz à energia cinética, dada

por

$$K = t \sum_{i \text{ par}, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+2,\sigma} - s \sum_{i \text{ ímpar}, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+2,\sigma} + t' \sum_{i,\sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + \text{H. c.} \right). \quad (2.7)$$

Expressando os operadores de sítio em termos de operadores de momentum a partir das relações

$$c_{2j,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik2j} c_{k,\sigma}^\dagger \quad (2.8)$$

e

$$c_{2j+1,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik(2j+1)} b_{k,\sigma}^\dagger, \quad (2.9)$$

a energia cinética se torna

$$K = \sum_{k,\sigma} \left[2t \cos(2k) c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} - 2s \cos(2k) b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} + 2t' \cos k \left(b_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \text{H. c.} \right) \right]. \quad (2.10)$$

Definimos

$$\epsilon_c(k) \equiv 2t \cos(2k); \quad (2.11)$$

$$\epsilon_b(k) \equiv -2s \cos(2k); \quad (2.12)$$

$$\alpha(k) \equiv 2t' \cos k. \quad (2.13)$$

A energia cinética se reescreve como

$$K = \sum_{k,\sigma} \left[\epsilon_c(k) c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \epsilon_b(k) b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} + \alpha(k) \left(b_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \text{H. c.} \right) \right]. \quad (2.14)$$

Diagonalizamos esse Hamiltoniano por uma rotação. As energias se dividem em duas bandas,

$$\epsilon_{1,2}(k) = \frac{\epsilon_c(k) + \epsilon_b(k)}{2} \pm \sqrt{\alpha(k)^2 + \left[\frac{\epsilon_c(k) - \epsilon_b(k)}{2} \right]^2}, \quad (2.15)$$

em que 1 rotula a banda com energias menores e 2 rotula a banda com energias maiores.

Os autovetores são

$$g_{1,k,\sigma}^\dagger = -\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_{k,\sigma}^\dagger + \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) b_{k,\sigma}^\dagger \quad (2.16)$$

e

$$g_{2,k,\sigma}^\dagger = \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) c_{k,\sigma}^\dagger + \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) b_{k,\sigma}^\dagger, \quad (2.17)$$

em que θ_k é definido pela relação

$$\tan \theta_k \equiv \frac{2\alpha(k)}{\epsilon_c(k) - \epsilon_b(k)}. \quad (2.18)$$

Para o caso particular em que $t' = \sqrt{2}(s+t)$, as energias assumem formas simples:

$$\epsilon_1(k) = -2s \cos(2k) - 2(s+t); \quad (2.19)$$

$$\epsilon_2(k) = 2t \cos(2k) + 2(s+t). \quad (2.20)$$

A Fig. 2.2 ilustra as bandas do modelo para $t = 1$ e $s = 1$. Para $U = 0$, o estado fundamental é paramagnético, de forma que, em preenchimento quarto, a banda inferior está preenchida até $k_F = \pi/4$.

Figura 2.2 – Bandas do modelo de Tasaki no caso em que os parâmetros são: $s = 1$, $t = 1$, $t' = \sqrt{2}(s+t)$. A relação de dispersão das duas bandas tem a forma de um cosseno. Há um gap entre as bandas, dado por $2(s+t)$.

Discutimos agora como se estabelece a fase ferromagnética. A ideia central é mostrar que a energia mínima permitida ao sistema coincide com a energia de um estado com

spin completamente polarizados, que é fácil de determinar porque, neste caso, não há interação entre os elétrons (uma vez que a interação é “on-site”). O estado completamente polarizado, no caso de preenchimento quarto, é $\prod_k g_{1,k,\uparrow}^\dagger |0\rangle$ e sua energia é $-2(s+t)N$, em que N é o número de elétrons do sistema no caso de preenchimento quarto. É simples determinar esta energia a partir da Eq. (2.19): o cosseno não contribui, devido à sua periodicidade, restando apenas $-2(s+t)$ por elétron.

Para estabelecer a fase ferromagnética, Tasaki define operadores

$$a_{j,\sigma} \equiv \sqrt{2}c_{j,\sigma} - (-1)^j(c_{j-1,\sigma} + c_{j+1,\sigma}) \quad (2.21)$$

e, no setor de N elétrons, escreve o Hamiltoniano em termos desses operadores:

$$H = -2(s+t)N - s \sum_{j,\sigma} a_{2j,\sigma}^\dagger a_{2j,\sigma} + t \sum_{j,\sigma} a_{2j+1,\sigma}^\dagger a_{2j+1,\sigma} + U \sum_j n_{j,\uparrow} n_{j,\downarrow}. \quad (2.22)$$

Os operadores $a_{j,\sigma}$ não são ortogonais entre si. O anticomutador $\{a_{j,\sigma}^\dagger, a_{j',\sigma}\}$ é: 4 se $j = j'$; 1 se $|j - j'| = 2$; e 0 em outros casos.

Ainda de acordo com Tasaki, pode-se reescrever o Hamiltoniano como

$$H = 2(s-t)N + \sum_j h_{2j}, \quad (2.23)$$

em que

$$h_{2j} \equiv -s \sum_\sigma a_{2j,\sigma}^\dagger a_{2j,\sigma} + U n_{2j,\uparrow} n_{2j,\downarrow} + \sum_{d=\pm 1} \left(\frac{t}{2} \sum_\sigma a_{2j+d,\sigma}^\dagger a_{2j+d,\sigma} + \frac{U}{2} n_{2j+d,\uparrow} n_{2j+d,\downarrow} \right). \quad (2.24)$$

Dada a Eq. (2.23), também é verdade que

$$\langle H \rangle = 2(s-t)N + \sum_j \langle h_{2j} \rangle. \quad (2.25)$$

Como todos os h_{2j} 's são idênticos a menos de uma translação espacial, possuem o mesmo conjunto de autovalores. Denotando o menor deles por ε_0 , temos que

$$\langle h_{2j} \rangle \geq \varepsilon_0. \quad (2.26)$$

Dessa desigualdade e da Eq. (2.25) decorre que

$$\langle H \rangle \geq 2(s-t)N + N\varepsilon_0. \quad (2.27)$$

O próximo passo é determinar ε_0 . Como h_{2j} é um Hamiltoniano de apenas cinco sítios, todos os seus autovalores podem ser determinados computacionalmente. Nos subespaços em que os elétrons estão completamente polarizados, podemos também determinar analiticamente os autovalores, já que, porque a interação é “on-site”, temos efetivamente um problema de um corpo.

No espaço de um elétron, o menor autovalor é $-4s$ (recordamos que $s > 0$). Pode-se verificar que todos os outros são positivos ou nulos, de forma que, ao adicionar mais elétrons com a mesma polarização do original, a energia permanece sendo $-4s$ ou aumenta. Isso mostra que o menor autovalor no subespaço de elétrons completamente polarizados é $-4s$. Assim, se, em uma diagonalização numérica, verificarmos que os estados não completamente polarizados possuem energia maior que $-4s$, podemos afirmar que $\varepsilon_0 = -4s$.

Essa condição de fato se verifica para uma faixa de valores dos parâmetros s, t e U , com U finito. Tomando $\varepsilon_0 = -4s$ na Eq. (2.27), obtemos

$$\langle H \rangle \geq -2(s + t)N. \quad (2.28)$$

Como o lado direito da desigualdade é justamente a energia do estado completamente polarizado em preenchimento quarto, isto garante, desde que não haja degenerescências, que o modelo apresenta ferromagnetismo. Mais detalhes da demonstração podem ser consultados na Ref. (12).

A demonstração de que o modelo apresenta fase ferromagnética não nos esclarece sobre a origem física do ferromagnetismo: a prova se baseia na coincidência de que a energia mínima permitida para o Hamiltoniano de Tasaki é a energia de um estado completamente polarizado. Buscando investigar as origens do ferromagnetismo, bosonizamos, na próxima seção, um tipo de Hamiltoniano do qual o de Tasaki é um caso particular. Como veremos, entretanto, não encontramos instabilidade no setor de spin, o que indica que a transição não ocorre no regime fracamente interagente. Contudo, devido à distinção de sítios pares e ímpares, encontramos uma instabilidade no setor de cargas, que leva a uma transição para um isolante de carga na condição de preenchimento quarto. Esses tópicos são discutidos

em maior detalhe na próxima seção.

2.2 Bosonização de modelos com dois sítios por célula unitária

Como vimos na seção anterior, é possível encontrar fase ferromagnética no modelo de Tasaki. Como é um modelo unidimensional, deve ter também uma fase líquido de Luttinger (17). Nesta seção, bosonizamos o modelo para determinar os parâmetros de Luttinger em busca de instabilidades no setor de spin.

Em vez de nos concentrar apenas no Hamiltoniano de Tasaki, estudamos o modelo mais geral

$$H = \sum_{k,\sigma} \left[\epsilon_c(k) c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \epsilon_b(k) b_{k,\sigma}^\dagger b_{k,\sigma} + \alpha(k) (b_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} + \text{H. c.}) \right] + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (2.29)$$

uma vez que detalhes das funções $\epsilon_c(k)$, $\epsilon_b(k)$ e $\alpha(k)$ só afetam o ângulo da rotação necessária para diagonalizar a parte cinética (veja a Eq. (2.18)) e, como veremos adiante, a expressão explícita do ângulo não será utilizada. Na representação de sítios, este é um modelo de dois sítios por célula unitária, com hopping de até segundos vizinhos.

Originalmente fomos motivados por Yang a bosonizar o modelo para procurar por instabilidades na fase de líquido de Luttinger do modelo (16). O modelo de Luttinger é da forma

$$H = \int dx \left\{ \frac{v_c}{2} \left[K_c \Pi_c^2 + \frac{1}{K_c} (\partial_x \phi_c)^2 \right] + \frac{v_s}{2} \left[K_s \Pi_s^2 + \frac{1}{K_s} (\partial_x \phi_s)^2 \right] \right\} \quad (2.30)$$

e descreve dois bósons não interagentes, holons e spinons, cujos campos correspondentes $\partial_x \phi_c$ e $\partial_x \phi_s$ dão a densidade de carga e a magnetização, respectivamente (para mais detalhes, pode-se consultar o Apêndice). Π_c e Π_s são os campos canonicamente conjugados a ϕ_c e ϕ_s . As constantes v_c e v_s são as respectivas velocidades dos holons e dos spinons. Já K_c e K_s são análogos à tensão (ao seu inverso, mais precisamente) em uma corda

e dependem de se a interação é repulsiva ($K_c < 1$ e $K_s > 1$) ou atrativa ($K_c > 1$ e $K_s < 1$) (28).

Um tipo de instabilidade que procuramos seria indicada pelo parâmetro v_s se tornar negativo. Para $v_s \rightarrow 0$, o setor de spin do modelo de Luttinger se torna instável e é preciso reter derivadas de ordem superior do campo ϕ_s , o que favorece magnetização não nula, como ilustra a Fig. 2.3. De fato, como veremos, a expressão que obtemos para v_s pode se tornar negativa, mas apenas para U grande, regime em que nossos cálculos não são mais válidos.

Figura 2.3 – Com a mudança de sinal na velocidade dos spinons do modelo de Luttinger, o termo proporcional a $(\partial_x \phi_s)^2$, que pode ser pensado como um potencial, fica instável. É preciso reter derivadas superiores do campo ϕ_s , como $(\partial_x \phi_s)^4$, para recuperar a estabilidade, o que favorece magnetização não nula, levando à transição para fase ferromagnética.

Assim, no regime fracamente interagente e em baixas energias, o setor de spin do modelo de Luttinger permanece estável mesmo com a inclusão de hopping de segundos vizinhos. Contudo, no setor de cargas, quando a densidade é comensurada com a rede,

o modelo se torna um isolante de carga. Isso ocorre para preenchimento quarto, que é quando Tasaki prova a existência da fase ferromagnética. Discutimos agora a bosonização do modelo da Eq. (2.29).

O procedimento de bosonização para o modelo da Eq. (2.29) é bastante similar ao procedimento para o modelo de Hubbard, que pode ser encontrado no Apêndice. Embora haja duas bandas, a linearização é feita em torno do nível de Fermi, que está na banda inferior em preenchimento quarto. Vamos ver como isto funciona na prática ao construir o operador de campo do sistema em termos de campos quirais (para leitores não familiarizados com os campos quirais definidos no método da bosonização, sugerimos consultar o Apêndice). O primeiro passo é construir o operador de campo a partir dos operadores de sítio.

A partir das equações estabelecidas na Sec. 2.1 para os operadores de sítio e de momentum, pode-se verificar que

$$c_{2j,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik2j} \left[-\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) g_{1,k,\sigma} + \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) g_{2,k,\sigma} \right]; \quad (2.31)$$

$$c_{2j+1,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik(2j+1)} \left[\cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) g_{1,k,\sigma} + \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) g_{2,k,\sigma} \right]. \quad (2.32)$$

No processo de linearização, tomamos $\theta_k \approx \theta_{k_F}$ (como $\theta_{k_F} = \theta_{-k_F}$, a aproximação é válida para os dois ramos), ignoramos os termos em que aparecem g_{2k} 's (por serem da banda de energias mais altas) e estendemos os níveis da banda inferior para baixo e para cima linearmente em torno dos dois pontos de Fermi:

$$c_{2j} \approx -\frac{1}{\sqrt{N}} \sin\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) \sum_k \left[e^{-i(k_F+k)2j} g_{1,-(k+k_F)} + e^{i(k_F+k)2j} g_{1,k+k_F} \right]; \quad (2.33)$$

$$c_{2j+1} \approx \frac{1}{\sqrt{N}} \cos\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) \sum_k \left[e^{-i(k_F+k)(2j+1)} g_{1,-(k+k_F)} + e^{i(k_F+k)(2j+1)} g_{1,k+k_F} \right]. \quad (2.34)$$

Agora definimos os operadores quirais: $g_{kL,\sigma} \equiv g_{1,-(k+k_F),\sigma}$ e $g_{kR,\sigma} \equiv g_{1,k+k_F,\sigma}$. Assim, o operador de sítio se torna

$$c_{j,\sigma} \approx f(k_F) \left(e^{-ik_F j} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikj} g_{kL,\sigma} + e^{ik_F j} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikj} g_{kR,\sigma} \right), \quad (2.35)$$

com $f(k_F) = -\sin\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right)$ se j é par e $f(k_F) = \cos\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right)$ se j é ímpar.

Aqui aparece uma diferença crucial em relação ao modelo de Hubbard tradicional:

como o operador de sítio possui formas diferentes para os sítios pares e para os ímpares, o limite para o contínuo não é imediato. É preciso definir uma função que alterne entre $-\sin\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right)$ e $\cos\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right)$. Uma função com essa propriedade é

$$f(k_F, x) = \frac{1}{2} \left[\cos\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) - \sin\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) \right] - \frac{e^{i\pi x}}{2} \left[\cos\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) \right]. \quad (2.36)$$

Essa função contém uma parte suave, indicada pelo primeiro termo da direita, e uma parte oscilante, indicada pelo segundo termo.

Assim, no limite do contínuo, definimos o campo

$$\psi_\sigma(x) = f(k_F, x) \left(e^{-ik_F x} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ikx} g_{kL,\sigma} + e^{ik_F x} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikx} g_{kR,\sigma} \right). \quad (2.37)$$

A principal diferença dessa expressão com relação ao campo para o modelo de Hubbard é que, além dos fatores $\exp(\pm ik_F x)$, há a contribuição adicional de $f(k_F, x)$ para as oscilações do campo.

Em termos dos campos quirais,

$$\psi_\sigma(x) = \sqrt{2} f(k_F, x) \left[e^{-ik_F x} \psi_{L,\sigma}(x) + e^{ik_F x} \psi_{R,\sigma}(x) \right], \quad (2.38)$$

em que

$$\psi_{(L,R),\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{\mp ikx} g_{k(L,R),\sigma}. \quad (2.39)$$

O fator $\sqrt{2}$ aparece porque o tamanho do sistema é $2N$, e não N . De qualquer modo, não estamos realmente interessados em acompanhar os fatores multiplicativos, mas sim as oscilações do campo, que são importantes para estabelecer em que casos o sistema é um isolante.

Agora bosonizamos a energia cinética. Para este termo, não há diferença em relação à bosonização do modelo de Hubbard, pois, em baixas energias, a forma da energia cinética depende apenas da velocidade de Fermi:

$$K = v_F \sum_{k,\sigma} k \left(c_{kL,\sigma}^\dagger c_{kL,\sigma} + c_{kR,\sigma}^\dagger c_{kR,\sigma} \right), \quad (2.40)$$

em que fica subentendido que esta expressão está ordenada normalmente.

O procedimento de redução do termo cinético a baixas energias por linearização em

ramos esquerdo e direito independe do modelo considerado, de forma que a versão bosônica de K é idêntica ao que se obteria para o modelo de Hubbard:

$$K = \frac{v_F}{2} \int dx \left[\Pi_c^2 + (\partial_x \phi_c)^2 + \Pi_s^2 + (\partial_x \phi_s)^2 \right]. \quad (2.41)$$

Resta, portanto, avaliar a interação.

A interação envolve o produto de quatro campos. Desejamos coletar os termos não oscilantes, mas, para isto, devemos considerar também a função $f(k_F, x)$, que escrevemos como

$$\sqrt{2}f(k_F, x) = f_a(k_F) + e^{i\pi x} f_b(k_F), \quad (2.42)$$

em que

$$f_a(k_F) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\cos\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) - \sin\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) \right] \quad (2.43)$$

e

$$f_b(k_F) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left[\cos\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) + \sin\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) \right]. \quad (2.44)$$

Para contabilizar os termos não oscilantes, consideramos todos os termos que encontramos ao bosonizar a interação para o modelo de Hubbard, e incluímos a possibilidade de uma fase adicional de π nas exponenciais oriunda de $f_b(k_F)$. O cálculo é extenso, mas não apresenta dificuldades conceituais uma vez que se saiba aplicar o mesmo procedimento para o modelo de Hubbard. Assim, apenas apresentamos os resultados.

Após considerar os termos não oscilantes que contribuem para modificar os parâmetros do líquido de Luttinger, concluimos que a contribuição é similar àquela dada pela interação no modelo de Hubbard, mas com U substituído por

$$\tilde{U} = U \left[\frac{3}{2} \cos^4\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) + \frac{3}{2} \sin^4\left(\frac{\theta_{k_F}}{2}\right) \right]. \quad (2.45)$$

O U efetivo nunca é apreciavelmente diferente do U original para qualquer que seja θ_{k_F} , como mostra a Fig. 2.4, e o setor de spin permanece estável.

Para deixar isto mais claro, inspecionamos para os parâmetros de Luttinger. Substituindo U por $\tilde{U}$ no modelo de Luttinger derivado do Hamiltoniano de Hubbard (a

Figura 2.4 – $\tilde{U}$ em função do ângulo de rotação que aparece na diagonalização de modelos de dois sítios por célula unitária. A bosonização deste tipo de modelo leva a um modelo de Luttinger idêntico ao do modelo de Hubbard tradicional, mas com a interação U substituída por $\tilde{U}$. Se, para algum ângulo, $\tilde{U}$ fosse muito maior que U , isto indicaria uma possibilidade de a velocidade dos spinons se tornar negativa mesmo no regime fracamente interagente. A figura nos mostra que isto não acontece e o setor de spin do modelo de Luttinger permanece estável neste regime.

bosonização do modelo de Hubbard pode ser encontrada no Apêndice),

$$H = \frac{v_F}{2} \int dx \left[\Pi_c^2 + \left(1 + \frac{\tilde{U}}{\pi v_F} \right) (\partial_x \phi_c)^2 + \Pi_s^2 + \left(1 - \frac{\tilde{U}}{\pi v_F} \right) (\partial_x \phi_s)^2 \right], \quad (2.46)$$

em que já se considerou as contribuições dos termos cinéticos e de interação.

Para determinar os parâmetros do líquido de Luttinger, comparamos a Eq. (2.46),

válida no regime fracamente interagente e em baixas energias, com a Eq. (2.30):

$$v_c = v_F \left(1 + \frac{\tilde{U}}{\pi v_F} \right)^{1/2}; \quad (2.47)$$

$$K_c = \left(1 + \frac{\tilde{U}}{\pi v_F} \right)^{-1/2}; \quad (2.48)$$

$$v_s = v_F \left(1 - \frac{\tilde{U}}{\pi v_F} \right)^{1/2}; \quad (2.49)$$

$$K_s = \left(1 - \frac{\tilde{U}}{\pi v_F} \right)^{-1/2}. \quad (2.50)$$

Como se vê, no regime fracamente interagente, em que $U \ll v_F$, v_s é sempre positivo, uma vez que $\tilde{U}$ é da ordem de U e, portanto, $\tilde{U} \ll v_F$. Se o fator multiplicativo que relaciona U e $\tilde{U}$ fosse grande em algum caso, poderíamos encontrar instabilidade no setor de spin ainda no regime de validade de nossa teoria. Isto, entretanto, não acontece, pois, como se vê na Eq. (2.45), o fator multiplicativo é uma combinação de funções trigonométricas, que nunca diferem apreciavelmente de 1. De qualquer modo, v_s diminui conforme U aumenta, o que é compatível com uma instabilidade favorável ao ferromagnetismo se extrapolarmos o resultado perturbativo para U grande, o que poderia levar a resultados pelo menos qualitativamente corretos (29).

Um termo proporcional a $\cos(\sqrt{8\pi}\phi_s)$ também tem sua constante de acoplamento afetada, mas, como no modelo de Hubbard, pode ser ignorado em baixas energias porque é marginalmente irrelevante (28).

Entretanto, devido ao fator $\exp(i\pi x)$ extra, aparecem combinações da forma $\exp[i(\pi \pm 4k_F)x]$, que não apareciam no modelo de Hubbard. Em geral, essa exponencial é oscilante, mas no caso particular em que $k_F = \pi/4$, as oscilações desaparecem. Este é justamente o caso em que Tasaki demonstra seus resultados. Neste caso particular, precisamos contabilizar os termos proporcionais a essas exponenciais. Isso leva a uma contribuição adicional para o Hamiltoniano, que tem a seguinte forma:

$$H \sim \frac{1}{(2\pi a)^2} \int dx \left(F_{L,\uparrow}^\dagger F_{R,\uparrow} F_{L,\downarrow}^\dagger F_{R,\downarrow} e^{i\sqrt{8\pi}\phi_c} + \text{H. c.} \right), \quad (2.51)$$

em que os operadores F 's são denominados fatores de Klein e são responsáveis por mudar o número de partículas no esquema da bosonização (mais informações no Apêndice), e a

é um comprimento que aparece na regularização de produtos de campos (pode-se pensar que $a \sim k_F^{-1}$).

Quando se adiciona este Hamiltoniano ao líquido de Luttinger, o modelo resultante é conhecido como modelo de Sine-Gordon (ignorando os fatores de Klein) (30). Este é um modelo bem conhecido e descreve um isolante. É preciso levar este termo em consideração porque ele é relevante (do ponto de vista do RG) quando $K_c < 1$, que é o nosso caso (veja a Eq. (2.48)) porque $\tilde{U} > 0$ devido à interação repulsiva e não há uma simetria que garanta que a constante de acoplamento deste termo flui para 0.

Isto indica, portanto, que no caso particular de preenchimento quarto, o modelo de Tasaki se torna um isolante assim que ligamos a repulsão eletrônica. Isto nada diz sobre o ferromagnetismo, mas nos faz questionar se esta transição de alguma forma é essencial para que exista também uma fase ferromagnética. Está fora do escopo deste trabalho responder a esta pergunta, mas ela serve como motivação para investigarmos como se comporta o ferromagneto quando passamos da fase isolante para a fase metálica dopando o sistema. Como a técnica de bosonização tradicional só funciona no regime fracamente interagente e não revela instabilidade na fase ferromagnética, temos que estudar o problema no regime de interação forte. Em certos casos, a separação spin-carga permanece válida neste regime (21). Assumimos essa propriedade e investigamos o acoplamento spin-carga na fase metálica.

Como veremos adiante, a dinâmica deste acoplamento é similar à do modelo de Kondo. O efeito Kondo poderia ter consequências para a transição ferromagnética, o que merece uma investigação mais detalhada do modelo que acopla spin e carga, mas isto está além do escopo desta dissertação.

No capítulo a seguir, examinamos os setores de carga e spin separadamente no regime fortemente interagente como passo preliminar. Na etapa seguinte, dopamos o sistema eletronicamente para passarmos para a fase metálica e estudamos o acoplamento entre setores de carga e de spin.

Capítulo 3

Setores de carga e spin no regime fortemente interagente

No capítulo anterior, examinamos a fase de Luttinger de modelos com dois sítios por célula unitária. Concluímos que o setor de spin permanece estável no regime fracamente interagente e o setor de carga transiciona para um isolante de Mott quando em estamos em preenchimento quarto ao ligarmos a interação.

O presente capítulo é um preparativo para estudarmos o regime fortemente interagente. Mesmo no regime fortemente interagente, ainda há separação spin-carga para modelos unidimensionais em que retroespalhamento é o processo dominante (21). Usamos essa propriedade para, primeiramente, descrever os setores de carga e spin separadamente e então propor um acoplamento fenomenológico entre os setores.

3.1 Refermionização do setor de cargas

Como preparativo para acoplar o setor de carga com o setor de spin, estudamos o setor de cargas na condição de preenchimento quarto, quando o setor de cargas passa a

ser descrito por um modelo de Sine-Gordon:

$$H = H_{LL} + H_{SG}; \quad (3.1)$$

$$H_{LL} = \int dx \frac{v_c}{2} \left[K_c \Pi_c^2 + \frac{1}{K_c} (\partial_x \phi_c)^2 \right] \quad (3.2)$$

$$H_{SG} = \frac{\Delta}{2\pi a} \int dx \left(F_{L,\uparrow}^\dagger F_{R,\uparrow} F_{L,\downarrow}^\dagger F_{R,\downarrow} e^{i\sqrt{8\pi}\phi_c} + \text{H. c.} \right), \quad (3.3)$$

em que Δ é um parâmetro que depende da repulsão eletrônica (o cálculo por bosonização até primeira ordem em U , que não apresentamos aqui, leva a $\Delta = 0$ quando estamos em preenchimento quarto, mas Δ deve ser diferente de 0 ao se considerar termos de ordens superiores de U). A interpretação física de Δ ficará mais clara adiante.

Como veremos a seguir, no caso particular em que $K_c = 1/2$, podemos refermionizar o modelo se definirmos os seguintes férmions quirais sem spin:

$$\psi_L(x) = \frac{\tilde{F}_L}{\sqrt{2\pi a}} e^{-i\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_L(x)}; \quad (3.4)$$

$$\psi_R(x) = \frac{\tilde{F}_R}{\sqrt{2\pi a}} e^{-i\sqrt{2\pi}\tilde{\phi}_R(x)}. \quad (3.5)$$

Nosso intuito é identificar o Hamiltoniano da Eq. (3.3) como um produto desses campos fermiônicos. O produto $\psi_R^\dagger(x)\psi_L^\dagger(x)$ tem a forma

$$\psi_R^\dagger(x)\psi_L^\dagger(x) \sim \frac{1}{2\pi a} e^{i\sqrt{2\pi}[\tilde{\phi}_R(x)-\tilde{\phi}_L(x)]}, \quad (3.6)$$

e, em termos do campo dual

$$\tilde{\phi}(x) = \frac{\tilde{\phi}_L(x) - \tilde{\phi}_R(x)}{\sqrt{2}}, \quad (3.7)$$

é

$$\psi_R^\dagger(x)\psi_L^\dagger(x) \sim \frac{1}{2\pi a} e^{i\sqrt{4\pi}\tilde{\phi}(x)}. \quad (3.8)$$

Isto é o que aparece no integrando da Eq. (3.3) se fizermos a identificação

$$\tilde{\phi}(x) = \sqrt{2}\phi_c(x), \quad (3.9)$$

o que exige também, para preservar relações de comutação, que definamos um novo campo

conjugado

$$\tilde{\Pi}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Pi_c(x). \quad (3.10)$$

Com essas identificações, H_{SG} está refermionizado, isto é, reexpresso em termos de campos fermiônicos:

$$H_{SG} = \Delta \int dx \left[\psi_R^\dagger(x) \psi_L(x) + \text{H. c.} \right]. \quad (3.11)$$

Resta avaliar H_{LL} , que, escrito em termos dos novos campos $\tilde{\phi}(x)$ e $\tilde{\Pi}(x)$, é

$$H_{LL} = \frac{v_c}{2} \int dx \left[2K_c \tilde{\Pi}_c^2 + \frac{1}{2K_c} (\partial_x \tilde{\phi}_c)^2 \right]. \quad (3.12)$$

Como antecipamos, para $K_c = 1/2$, o Hamiltoniano pode ser refermionizado, pois assume precisamente a forma da Eq. (2.41) (que é a versão bosônica da Eq. (2.40)) com $v_F = v_c$ (os campos de spin não aparecem porque os férmions que acabamos de definir são sem spin):

$$H_{LL} = v_c \sum_k k \left(c_{kR}^\dagger c_{kR} + c_{kL}^\dagger c_{kL} \right). \quad (3.13)$$

Em termos dos c_k 's, é fácil verificar que H_{SG} é dado por

$$H_{SG} = \Delta \sum_k \left(c_{kR}^\dagger c_{-kL} + \text{H. c.} \right). \quad (3.14)$$

Finalmente, o Hamiltoniano completo pode ser escrito como

$$H = \sum_k \begin{bmatrix} c_{kR}^\dagger & c_{-kL}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_c k & \Delta \\ \Delta & -v_c k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{kR} \\ c_{-kL} \end{bmatrix}. \quad (3.15)$$

Os autovalores do Hamiltoniano são

$$\epsilon_\pm(k) = \pm \sqrt{(v_c k)^2 + \Delta^2}, \quad (3.16)$$

que é a dispersão para partículas relativísticas de massa Δ e velocidade v_c . Em termos dos férmions sem spin, podemos ver explicitamente como o termo extra do modelo de Sine-Gordon leva a um isolante, pois gera um gap de 2Δ entre duas bandas (ao refermionizarmos nosso modelo, fica subentendido que o vácuo é o estado preenchido com férmions até $k = 0$, isto é, a banda inferior está completamente preenchida, e a banda superior está vazia).

Denotando por $c_{+,k}$ os operadores associados à banda superior, e $c_{-,k}$ os operadores associados à banda inferior, o setor de carga do modelo é dado por

$$H = \sum_k \left[\epsilon_+(k) c_{+,k}^\dagger c_{+,k} + \epsilon_-(k) c_{-,k}^\dagger c_{-,k} \right]. \quad (3.17)$$

Em nossos cálculos, tomamos $K_c = 1/2$ (esta condição é denominada ponto de Luther-Emery). Fora desta condição, a solução de Luther-Emery permanece válida para pequenas dopagens porque $K_c \neq 1$ apenas introduz uma interação entre férmions diluídos, que pode ser desprezada (31).

Na próxima seção, determinamos o espectro dos mágnons, que são as excitações de baixa energia no regime fortemente interagente para o setor de spin. De posse do espectro dos férmions sem spin e do espectro de mágnons, acoplamos localmente mágnons com os férmions, dopando o sistema para retirá-lo da condição de preenchimento quarto, que equivale a adicionar ou remover férmions sem spin (pois as densidades dos férmions originais e dos férmions sem spin estão relacionadas), o que retira o sistema da fase isolante.

3.2 Setor de spin no regime fortemente interagente: mágnons

Assumindo repulsão eletrônica alta o bastante para que um dado modelo esteja na fase ferromagnética, as excitações de baixas energias no setor de spin são modos de Goldstone, denominados mágnons no contexto de um ferromagneto (32). Um mágnon é uma partícula associada a uma onda de spin assim como um fóton está associado ao campo eletromagnético. O objetivo desta seção é determinar o espectro desse modo coletivo. Como a álgebra é extensa, aqui discutimos apenas o procedimento geral. As passagens explícitas podem ser encontradas no Apêndice.

Assumindo a existência da fase ferromagnética, um ansatz para o estado fundamental do modelo da Eq.(2.29) é $\left(\prod'_k g_{1,k,\uparrow}^\dagger \prod''_k g_{2,k,\uparrow}^\dagger\right) |0\rangle^*$. As linhas nos produtos indicam que o índice k está restrito de acordo com a dopagem. Por exemplo, para preenchimento quarto, o primeiro produto é sobre todo k e não há o segundo produto porque a banda 2 está vazia.

Sobre este estado fundamental consideramos excitações em que uma partícula de momentum k e spin $\uparrow$ é destruída, e uma de momentum $k+q$ e spin $\downarrow$ é criada em seu lugar. A forma mais geral do modo coletivo, no contexto do nosso modelo, é

$$\Omega_q^\dagger = \sum_k \begin{bmatrix} g_{1,k+q,\downarrow}^\dagger & g_{2,k+q,\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{11,k} & F_{12,k} \\ F_{21,k} & F_{22,k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{1,k,\uparrow} \\ g_{2,k,\uparrow} \end{bmatrix}, \quad (3.18)$$

ou, de forma mais compacta,

$$\Omega_q^\dagger = \sum_k g_{k+q,\downarrow}^\dagger F(k) g_{k,\uparrow}. \quad (3.19)$$

As amplitudes F 's são escolhidas para que a excitação tenha uma frequência bem definida ω_q , o que é imposto pela condição

$$[H, \Omega_q^\dagger] = \omega_q \Omega_q^\dagger, \quad (3.20)$$

que é a relação satisfeita por um operador de criação de um oscilador harmônico de frequência ω_q .

Obviamente a Eq. (3.20) não pode ser exata, pois, sendo H interagente, há termos quárticos na esquerda e apenas termos quadráticos na direita. O que se faz é usar o teorema de Wick para eliminar os termos quárticos e assim determinar aproximadamente ω_q (esta aproximação é conhecida como aproximação de RPA (33)).

Após calculado o comutador e eliminados os termos quárticos, só restarão termos quadráticos, isto é,

$$[H, \Omega_q^\dagger] = \sum_k g_{k+q,\downarrow}^\dagger A(k) g_{k,\uparrow}. \quad (3.21)$$

É justamente determinar a matriz $A(k)$ que é um procedimento trabalhoso e melhor detalhado no apêndice.

*Este estado só é o estado fundamental em caso de ferromagnetismo saturado.

Combinando as Eq. (3.20) e (3.21), segue que

$$A(k) - \omega_q F(k) = 0, \quad (3.22)$$

que é uma equação de autovalores e autovetores que determina ω_q .

Com fins ilustrativos, apresentamos na Fig. 3.1 o espectro dos mágnons para diversos valores de U no caso do modelo de Tasaki. Como é de se esperar pelo teorema de Goldstone, os mágnons possuem massa nula (no sentido relativístico). Nos restringindo ao

Figura 3.1 – Espectro dos mágnons para o modelo de Tasaki. As amplitudes de hopping de segundos vizinhos são $-s = -1$ e $t = 1$. O hopping de primeiros vizinhos é fixado pela relação $t' = \sqrt{2}(s + t)$. Para $U = 10$, encontramos energias negativas, o que indica instabilidade do estado ferromagnético.

regime de baixas energias, podemos aproximar a relação de dispersão por uma parábola.

Agora que descrevemos os setores de carga e spin separadamente, estamos interessados nos processos de espalhamento férmion-mágnon, particularmente quando se tira o sistema da fase isolante. Isto introduz dois pontos de Fermi e, como discutimos na introdução, há uma dinâmica de Kondo associada ao espalhamento entre os pontos de Fermi.

Contudo, antes de estudar especificamente este processo, consideramos, na seção seguinte, a interação férmion-mágnon em um contexto mais geral. Calculamos a auto-energia do mágnon e verificamos que há singularidades associadas aos momenta dos pontos de Fermi, que é um indício de que o espalhamento em torno desses pontos (e particularmente de um para o outro) é especial.

3.3 Derivação do Hamiltoniano de interação spin-carga

Já temos formas para os Hamiltonianos de carga e spin:

$$H_c = \sum_p \epsilon_+(p) c_{+,p}^\dagger c_{+,k} + \sum_p \epsilon_-(k) c_{-,p}^\dagger c_{-,p}; \quad (3.23)$$

$$H_s = \sum_k \omega_k \Omega_k^\dagger \Omega_k. \quad (3.24)$$

Aqui, $\epsilon_\pm(p)$ é dado pela Eq. (3.16) e discutimos como determinar ω_k na Sec. 3.2. Em baixas energias, a dispersão ω_k é aproximadamente parabólica: $\omega_k \approx \lambda k^2$.

O problema que se coloca agora é como acoplar esses dois setores. Não há uma receita definida, mas espera-se que os resultados mais relevantes independem de como isto é feito, afetando apenas detalhes das constantes de acoplamento.

Para acoplar carga e spin, consideramos, primeiramente, a situação em que só estamos interessados em descrever o setor de spin. Um modelo simples seria

$$H_s = J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}. \quad (3.25)$$

Esse modelo pode ser aproximadamente mapeado no indicado na Eq. (3.24) por uma transformação de Holstein-Primakoff (34):

$$S_j^z = s - \Omega_j^\dagger \Omega_j; \quad (3.26)$$

$$S_j^- = \Omega_j^\dagger (2s - \Omega_j^\dagger \Omega_j)^{1/2} \approx \sqrt{2s} \Omega_j^\dagger; \quad (3.27)$$

$$S_j^+ = (2s - \Omega_j^\dagger \Omega_j)^{1/2} \Omega_j \approx \sqrt{2s} \Omega_j. \quad (3.28)$$

Usamos que $\langle \Omega_j^\dagger \Omega_j \rangle = 0$ para o estado fundamental. Ω_j e Ω_k estão relacionados por

$$\Omega_j = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_k e^{ikj} \Omega_k. \quad (3.29)$$

Com essa transformação, pode-se verificar que $\omega_k = 2sJ(1 - \cos k)$, que não é consistente com o espectro de mágnons determinado na Sec. 3.2 de modo geral. Entretanto, em baixas energias, $\omega_k \approx sJk^2$. Assim, podemos usar o modelo de spins que interagem como primeiros vizinhos aproximadamente, ajustando o J para reproduzir a massa (não relativística) dos mágnons.

Agora introduzimos uma interação local com a carga, admitindo que J é, na verdade, uma função da densidade de férmions:

$$J = J_0 + J_1 \rho, \quad (3.30)$$

em que, por simplicidade, tomamos ρ como a densidade de férmions sem spin, isto é, $\rho = \psi_{+,j}^\dagger \psi_{+,j} + \psi_{-,j}^\dagger \psi_{-,j}$, em que esses operadores se relacionam com os operadores $c_{+,k}$ e $c_{-,k}$ por séries de Fourier.

Há alguma arbitrariedade nessa escolha, pois poderíamos, por exemplo, acoplar o spin à densidade de férmions sem spin quirais (aqueles definidos nas Eq. (3.4) e (3.5)). Isso geraria termos extras, capazes de destruir elétrons na banda de menor energia e criá-los na banda superior. Como o gap entre as bandas, que é 2Δ , deve ser grande no regime fortemente interagente, esses termos seriam desprezados de qualquer modo, restando, basicamente, os termos produzidos pela densidade $\psi_{+,j}^\dagger \psi_{+,j} + \psi_{-,j}^\dagger \psi_{-,j}$.

Para prosseguir, portanto, fazemos a transformação de Holstein-Primakoff sobre o Hamiltoniano

$$H_{sc} = J_1 \sum_i \rho_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}. \quad (3.31)$$

Aplicando a transformação já no contexto aproximado em que $\langle \Omega_j^\dagger \Omega_j \rangle = 0$,

$$\begin{aligned} H_{sc} = & J_1 \sum_j \sum_{\eta=\pm} \left[s^2 \psi_{\eta,j}^\dagger \psi_{\eta,j} - s \psi_{\eta,j}^\dagger \psi_{\eta,j} \Omega_j^\dagger \Omega_j - s \psi_{\eta,j}^\dagger \psi_{\eta,j} \Omega_{j+1}^\dagger \Omega_{j+1} \right. \\ & \left. + s \psi_{\eta,j}^\dagger \psi_{\eta,j} (\Omega_j^\dagger \Omega_{j+1} + \text{H. c.}) \right]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Agora fazemos a substituição indicada na Eq. (3.29) e também

$$\psi_{\eta,j} = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_k e^{ikj} c_{\eta,k}. \quad (3.33)$$

Além disso, desprezamos o termo $s^2 \psi_{\eta,j}^\dagger \psi_{\eta,j}$, que é só uma correção ao potencial químico.

O resultado disso é

$$H_{sc} = \frac{sJ_1}{2N} \sum_{k,p,q} \sum_{\eta=\pm} c_{\eta,p-q}^\dagger c_{\eta,p} \Omega_{k+q}^\dagger \Omega_k \left[e^{ik} + e^{-i(k+q)} - e^{-iq} - 1 \right]. \quad (3.34)$$

Em princípio, temos um candidato para o acoplamento spin-carga. O Hamiltoniano descreve um processo em que um mágnon de momentum k colide com um férmion de momentum p e momentum q é transferido do férmion para o mágnon.

No regime de baixas energias, podemos simplificar a função de acoplamento, que denotaremos por $\zeta(k, q)$:

$$\zeta(k, q) = \alpha \left[e^{ik} + e^{-i(k+q)} - e^{-iq} - 1 \right], \quad (3.35)$$

em que α é a constante multiplicativa $sJ_1/2N$. Expandindo as exponenciais até segunda ordem (pois as contribuições de primeira ordem se cancelam), obtém-se

$$\zeta(k, q) \approx -\alpha k(k+q). \quad (3.36)$$

Finalmente, um candidato para o acoplamento spin-carga é

$$H_{sc} = -\alpha \sum_{k,p,q} \sum_{\eta=\pm} k(k+q) c_{\eta,p-q}^\dagger c_{\eta,p} \Omega_{k+q}^\dagger \Omega_k. \quad (3.37)$$

Obviamente o acoplamento proposto nesta seção não é o único possível. Um outro exemplo de acoplamento permitido por simetria é o de corrente de spin com corrente de carga. Em todo caso, a constante de acoplamento seria independente da constante α que aparece na Eq. (3.37). Assim, singularidades associadas a este Hamiltoniano não são, em geral, canceladas por termos extras. O Hamiltoniano encontrado nesta seção deve ser encarado como parte de uma investigação preliminar para revelar o que já antecipamos: há singularidades no espectro do mágnon associadas aos pontos de Fermi introduzidos ao se dopar as bandas fermiônicas. Na próxima seção, calculamos a autoenergia do mágnon para encontrar essas singularidades.

3.4 Correções à auto-energia do mágnon

Nesta seção calculamos correções à auto-energia do mágnon, considerando o modelo

$$H = H_c + H_s + H_{sc}, \quad (3.38)$$

em que H_c é dado pela Eq. (3.23), H_s é dado pela Eq. (3.24) e H_{sc} é dado pela Eq. (3.37), com $\zeta(k, q) \approx -\alpha k(k + q)$.

Como já visto, H_c consiste de duas bandas, de energias $\epsilon_{\pm}(p) = \pm\sqrt{(v_c p)^2 + \Delta^2}$ ou, em baixas energias, $\epsilon_{\pm}(p) \approx \pm\Delta \pm \frac{p^2}{2\Delta}$. Em preenchimento quarto, a banda inferior está completamente preenchida. Para passarmos para a fase metálica, adicionamos férmions à banda superior, o que introduz dois pontos de Fermi, como ilustra a Fig. 3.2.

Figura 3.2 – Ocupação das bandas fermiônicas de um isolante de carga antes e após a dopagem. Embora não esteja ilustrado, outro processo de dopagem consiste em adicionar buracos à banda inferior.

Denotamos por ϵ_{p_F} a energia dos níveis de Fermi e medimos a energia com relação esses níveis:

$$\xi_{\pm,p} = \epsilon_{\pm}(p) - \epsilon_{p_F}. \quad (3.39)$$

Para calcular explicitamente a autoenergia, precisamos das funções de Green dos férmions e dos mágnons. São elas (35)

$$G_f(\xi_{\eta,p}, \omega) = \frac{1}{i\omega - \xi_{\eta,p}} \quad (3.40)$$

e

$$G_m(k, \omega) = \frac{1}{i\omega - \omega_k}, \quad (3.41)$$

respectivamente.

Começamos pela correção de primeira ordem, indicada no diagrama da Fig. 3.3. Em nossa notação, linhas contínuas são fermiônicas e linhas pontilhadas são bosônicas. Linhas onduladas representam a interação $\zeta(k, q)$. Denotando por Σ a autoenergia do mágnon,

Figura 3.3 – Correção de primeira ordem para a autoenergia do mágnon.

a correção de primeira ordem é

$$\Sigma^{(1)}(k, \omega) = \sum_{\eta} \zeta(k, 0) \int dp \int \frac{d\nu_p}{2\pi} G_f(\xi_{\eta,p}, \nu_p) e^{i\nu_p \epsilon}, \quad (3.42)$$

com $\epsilon \rightarrow 0^+$.

A integral em ν_p leva a

$$\Sigma^{(1)}(k, \omega) = -\alpha k^2 \sum_{\eta} \int dp \theta(-\xi_{\eta,p}), \quad (3.43)$$

em que $\theta(x)$ é a função de Heaviside. A contribuição de $\eta = -$ é divergente, pois há infinitos níveis na banda inferior dos férmions. Este é um efeito artificial da bosonização, que pode ser consertado, por exemplo, impondo-se um cutoff nas energias que permita descartar a banda inferior (isto é feito para o diagrama de segunda ordem, mais adiante).

A informação física relevante da Eq.(3.43) é que a correção é real e proporcional a k^2 , e apenas altera a massa (não relativística) do mágnon[†].

Assim, para observar algum efeito mais relevante, computamos o diagrama de segunda ordem, indicado na Fig. 3.4. A integral correspondente é

Figura 3.4 – Correção de segunda ordem para a autoenergia do mágnon.

$$\begin{aligned} \Sigma^{(2)}(k, \omega) = & - \int dp \int dq \zeta(k, q) \zeta(k+q, -q) \int \frac{d\nu_p}{2\pi} \int \frac{d\nu_q}{2\pi} G_m(k+q, \omega+\nu_q) \\ & G_f(\xi_{+,p-q}, \nu_p - \nu_q) G_f(\xi_{+,p}, \nu_p), \end{aligned} \quad (3.44)$$

em que já estamos desconsiderando contribuições da banda inferior escolhendo um cutoff centrado em torno dos pontos de Fermi. Assim, não há mais necessidade do índice η , que será omitido daqui em diante, para diferenciar os níveis inferiores dos superiores

Entretanto, mesmo nos restringindo a processos de baixas energias, isto é, $p \approx \pm p_F$, o momentum $p - q$ pode estar próximo do mesmo ponto de Fermi, caso em que $q \approx 0$ (espalhamento frontal), ou estar próximo do outro ponto, caso em que $q \approx \pm 2p_F$ (retroespalhamento). Antes de distinguir os dois casos, integramos nas frequências para reduzir a expressão a

$$\Sigma^{(2)}(k, \omega) = \int dp \int dq \zeta(k, q) \zeta(k+q, -q) \theta(\xi_{p-q}) \theta(-\xi_p) \frac{1}{i\omega - (\xi_{p-q} + \omega_{k+q} - \xi_p)}. \quad (3.45)$$

A expressão acima é válida para os dois processos de espalhamento anteriormente mencionados. Agora tratamos, primeiramente, o caso em que $p \approx p_F$ e $q \approx 0$. Usamos essa informação para linearizar as energias dos férmions em torno dos pontos de Fermi

[†]Termos independentes de k não aparecem porque o teorema de Goldstone proíbe um gap no espectro dos mágnons no caso de simetria $SU(2)$.

apropriados:

$$\xi_p \approx \tilde{v}_F(p - p_F) \quad (3.46)$$

e

$$\xi_{p-q} \approx \tilde{v}_F(p - q - p_F). \quad (3.47)$$

A diferença entre essas energias, que aparece no integrando, é

$$\xi_{p-q} - \xi_p \approx -\tilde{v}_F q. \quad (3.48)$$

Note que a dependência em p desaparece nessa diferença.

A correção de segunda ordem se torna

$$\Sigma^{(2)}(k, \omega) = \alpha^2 \int dq \, k^2(k+q)^2 \frac{1}{i\omega - [\lambda k^2 + (2\lambda k - \tilde{v}_F)q]} \int dp \, \theta(\xi_{p-q})\theta(-\xi_p) \quad (3.49)$$

em que também aproximamos ω_{k+q} por $\lambda k^2 + 2\lambda kq$.

Agora podemos facilmente executar a integral em p . As funções de Heaviside estabelecem, no regime linear, que $p_F + q < p < p_F$, do que também segue que q deve ser negativo. Assim, a integral em p apenas contribui com um fator $-q$:

$$\Sigma^{(2)}(k, \omega) \approx -\alpha^2 \int dq \, k^2(k+q)^2 \frac{q}{i\omega - [\lambda k^2 + (2\lambda k - \tilde{v}_F)q]} \quad (3.50)$$

Como a integral em p já gerou um termo proporcionou a q , tomamos $q \approx 0$ no fator $(k+q)^2$:

$$\Sigma^{(2)}(k, \omega) \approx -\alpha^2 k^4 \int_{-\Lambda}^0 dq \, \frac{q}{i\omega - (\lambda k^2 + u_k q)}, \quad (3.51)$$

em que

$$u_k \equiv 2\lambda k - \tilde{v}_F. \quad (3.52)$$

Os limites de integração originalmente seriam de $-\Lambda$ a Λ , em que Λ é um cutoff, mas, como já vimos, devido à integral em p , q deve ser negativo.

O resultado da integral é

$$\Sigma^{(2)}(k, \omega) = -\alpha^2 k^4 \left[-\frac{\Lambda u_k}{u_k^2} + \frac{i\omega - \lambda k^2}{u_k^2} \log \left(\frac{u_k \Lambda}{i\omega - \lambda k^2} \right) \right], \quad (3.53)$$

em que já assumimos que $\Lambda \gg \lambda k^2$ e $\Lambda \gg \omega$ para simplificar a expressão. Para obter

a autoenergia da função de Green retardada no formalismo de temperatura 0, fazemos a extensão analítica $i\omega \rightarrow \omega + i\epsilon$, com $\epsilon \rightarrow 0^+$:

$$\Sigma^{(2)}(k, \omega)_{\text{ret}} = -\alpha^2 k^4 \left[-\frac{\Lambda u_k}{u_k^2} + \frac{\omega - \lambda k^2 + i\epsilon}{u_k^2} \log \left(\frac{u_k \Lambda}{\omega - \lambda k^2 + i\epsilon} \right) \right]. \quad (3.54)$$

Tomando o limite $\epsilon \rightarrow 0^+$ e pegando a parte real (que é a correção no espectro do mágnon),

$$\Re \Sigma^{(2)}(k, \omega)_{\text{ret}} = -\alpha^2 k^4 \left[-\frac{\Lambda u_k}{u_k^2} + \frac{\omega - \lambda k^2}{u_k^2} \log \left(\frac{u_k \Lambda}{\omega - \lambda k^2} \right) \right]. \quad (3.55)$$

Essa correção tem uma singularidade logarítmica em $\omega = \lambda k^2$.

Em princípio, temos que considerar também o caso em que $p \approx -p_F$ (isto é, estamos próximos do ponto de Fermi da esquerda). Os resultados são similares e não serão apresentados aqui, uma vez que o conteúdo principal deste cálculo é a singularidade logarítmica em $\omega = \lambda k^2$.

Agora voltamos à Eq.(3.45) para investigar o processo em que $p \approx p_F$ e $q \approx 2p_F$. Neste caso, a aproximação linear para ξ_p ainda é $\tilde{v}_F(p - p_F)$, mas a aproximação para ξ_{p-q} deve ser modificada:

$$\xi_{p-q} \approx -\tilde{v}_F(p - q + p_F). \quad (3.56)$$

Por isso, quando consideramos a diferença $\xi_{p-q} - \xi_p$, a dependência em p se mantém:

$$\xi_{p-q} - \xi_p \approx \tilde{v}_F(q - 2p). \quad (3.57)$$

Já as funções de Heaviside estabelecem que $p < q - p_F$ e que $p < p_F$ (já considerando a linearização das energias). Como ambas as condições devem ser satisfeitas, temos que separar os casos em que $q < 2p_F$ (quando a primeira condição é mais restritiva) e $q > 2p_F$ (quando a segunda condição é mais restritiva). Vamos nos focar na integral em p , primeiramente, uma vez que ela não é tão imediata quanto no caso em que $q \approx 0$.

A integral em p , para $q < 2p_F$, é

$$f(q) = \int_{p_F - \Lambda}^{q - p_F} dp \frac{1}{i\omega - [\lambda(k + q)^2 + \tilde{v}_F q - 2\tilde{v}_F p]} \quad (3.58)$$

Definimos

$$p_0 \equiv \frac{-i\omega + \lambda(k + q)^2 + \tilde{v}_F q}{2\tilde{v}_F} \quad (3.59)$$

para reescrever a integral como

$$f(q) = \frac{1}{2\tilde{v}_F} \int_{p_F - \Lambda}^{q - p_F} dp \frac{1}{p - p_0}. \quad (3.60)$$

O resultado é

$$f(q) = \frac{1}{2\tilde{v}_F} [\log(q - p_F - p_0) - \log(-\Lambda + p_F - p_0)], \quad q < 2p_F. \quad (3.61)$$

Já se $q > 2p_F$, basta trocar $q - p_F$ por p_F :

$$f(q) = \frac{1}{2\tilde{v}_F} [\log(p_F - p_0) - \log(-\Lambda + p_F - p_0)], \quad q > 2p_F. \quad (3.62)$$

Agora voltamos à integral em q :

$$\Sigma^{(2)}(k, \omega) = \alpha^2 k^2 \int dq (k + q)^2 f(q). \quad (3.63)$$

Como $f(q)$ já tem termos dependentes de q , simplificamos o fator $(k + q)^2$. O argumento aqui é um pouco diferente, pois q não é próximo de 0. Estamos interessados em processos em que o mágnon também permanece com momentum em torno de p_F ou $-p_F$. Já que $q = 2p_F$, k deve estar próximo de $-p_F$, e $k + q$ deve estar próximo de p_F , que é aproximadamente $-k$. Em outras palavras, $k + q \approx -k$. Usando esta aproximação, a autoenergia agora se escreve como

$$\Sigma^{(2)}(k, \omega) \approx \alpha^2 k^4 \int dq f(q). \quad (3.64)$$

Linearizando os argumentos dos logaritmos em torno de $q = 2p_F$, definindo $\tilde{q}$ pela relação

$$q \equiv 2p_F + \tilde{q} \quad (3.65)$$

e mantendo apenas termos lineares em $\tilde{q}$, $f(q)$ se reescreve aproximadamente como

$$f(q) \approx \frac{1}{2\tilde{v}_F} \log \left\{ [\tilde{v}_F - 2\lambda(k + 2p_F)]\tilde{q} - \lambda(k + 2p_F)^2 + i\omega \right\} \\ - \frac{1}{2\tilde{v}_F} \log \left\{ -[\tilde{v}_F + 2\lambda(k + 2p_F)]\tilde{q} - \lambda(k + 2p_F)^2 + i\omega - 2\tilde{v}_F\Lambda \right\}, \quad (3.66)$$

$$q < 2p_F.$$

$$f(q) \approx \frac{1}{2\tilde{v}_F} \log \left\{ -[\tilde{v}_F + 2\lambda(k + 2p_F)]\tilde{q} - \lambda(k + 2p_F)^2 + i\omega \right\} \\ - \frac{1}{2\tilde{v}_F} \log \left\{ -[\tilde{v}_F + 2\lambda(k + 2p_F)]\tilde{q} - \lambda(k + 2p_F)^2 + i\omega - 2\tilde{v}_F\Lambda \right\}, \quad (3.67)$$

$$q > 2p_F.$$

O resultado de se fazer a integral e a extensão $i\omega \rightarrow \omega$ é

$$\Re \Sigma^{(2)}(k, \omega)_{\text{ret}} = \alpha^2 k^4 \times \quad (3.68)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\omega - \lambda(k + 2p_F)^2}{w_{2k}} \log \left[\frac{w_{2k}\Lambda}{\omega - \lambda(k + 2p_F)^2} \right] \\ & - \frac{\omega - \lambda(k + 2p_F)^2}{w_{1k}} \log \left[-\frac{w_{1k}\Lambda}{\omega - \lambda(k + 2p_F)^2} \right] \\ & + \frac{-2\tilde{v}_F\Lambda}{w_{2k}} \log \left[\frac{w_{2k} - 2\tilde{v}_F}{-w_{2k} - 2\tilde{v}_F} \right] \\ & + \Lambda \log \left[\frac{w_{2k}}{w_{2k} - 2\tilde{v}_F} \right] \\ & + \Lambda \log \left[\frac{w_{1k}}{w_{2k} + 2\tilde{v}_F} \right], \end{aligned} \quad (3.69)$$

em que usamos as abreviações $w_{1k} = \tilde{v}_F - 2\lambda(k + 2p_F)$ e $w_{2k} = -\tilde{v}_F - 2\lambda(k + 2p_F)$.

Apesar de a expressão ser grande, a informação essencial é a autoenergia também tem uma singularidade logarítmica $\omega = \lambda(k + 2p_F)$.

Os resultados desta seção nos motivam a investigar mais cuidadosamente o espalhamento entre férmion e mágnon em torno e entre os pontos de Fermi introduzidos pela dopagem. Este é o assunto do próximo capítulo.

Capítulo 4

Acoplamento spin-carga em um isolante ferromagnético dopado

No Capítulo 2, discutimos o modelo de Tasaki, que permite hopping de segundos vizinhos (característica que viola o teorema de Lieb e Mattis). Bosonizamos uma versão mais geral do modelo de Tasaki para determinar os parâmetros do líquido de Luttinger, mas verificamos que, em baixas energias, o setor de spin permanece estável. Já o setor de carga também permanece, de forma geral, estável. Contudo, quando a densidade é comensurada com a rede, o processo de umklapp se torna relevante e dá origem a uma fase isolante de Mott. É para esta mesma densidade que Tasaki prova a existência da fase ferromagnética. Assim, o ferromagneto de Tasaki é um isolante.

Tendo em vista as considerações acima, decidimos examinar o comportamento de um isolante ferromagnético após dopá-lo, retirando-o da fase isolante. No Capítulo 3, introduzimos um acoplamento fenomenológico entre o setor de spin e o setor de cargas no regime fortemente interagente. Tomamos como ponto de partida um modelo de Heisenberg, mas permitimos uma dependência na constante de acoplamento J com a densidade de carga. Calculamos perturbativamente a autoenergia do mágnon devido à esta interação, nos concentrando particularmente nos espalhamentos: em torno de um ponto de Fermi (p_F ou $-p_F$); e de um ponto de Fermi de um ponto de Fermi para o outro (de p_F para $-p_F$ ou vice-versa). Verificamos que a autoenergia do mágnon apresenta singularidades

logarítmicas on-shell exatamente nos níveis associados a p_F e $-p_F$. Nas próximas seções, investigamos mais detalhadamente esses espalhamentos para desvendarmos a origem física dessas singularidades.

4.1 Derivação de um modelo efetivo para o acoplamento spin-carga

Como discutimos na recapitulação, no modelo de Tasaki, a fase ferromagnética foi estabelecida, mas apenas para preenchimento quarto, quando o modelo é um isolante de cargas. Assim, estudamos o seguinte problema: dado um ferromagneto isolante, como o sistema se comporta após uma dopagem que o leva para fase metálica?

Começamos pela descrição dos setores de carga e spin antes do acoplamento. No setor de cargas, utilizamos as bandas indicadas na Eq. (3.16). Elas foram obtidas no ponto de Luther-Emery, quando é possível refermionizar o setor de cargas e expressá-lo em termos de férmions não interagentes. Fora do ponto de Luther-Emery, os férmions interagem, o que renormaliza o parâmetro Δ , mas mantém a estrutura com gap (28). Assim, em uma aproximação de baixas energias, a dispersão das bandas fermiônicas é quadrática:

$$\epsilon_{\pm}(p) = \pm\Delta \pm \frac{p^2}{2\Delta}, \quad (4.1)$$

em que Δ , que é a massa do férmion, em princípio é desconhecido e deve ser determinado fenomenologicamente (como discutido anteriormente, uma possibilidade é aproximar Δ por seu valor no ponto de Luther-Emery).

Como o parâmetro do gap, Δ , deve ser grande, ignoramos processos interbanda e mantemos apenas a banda superior (ou inferior, no caso de dopagem por buracos). Além disso, desprezamos a constante aditiva na relação de dispersão para os férmions:

$$\epsilon(p) = \gamma p^2, \quad (4.2)$$

em que definimos

$$\gamma \equiv \frac{1}{2\Delta}. \quad (4.3)$$

Essa dispersão é reproduzida pelo Hamiltoniano

$$H_C = \gamma \int dx \partial_x \psi^\dagger(x) \partial_x \psi(x). \quad (4.4)$$

Já no setor de spin, como assumimos ordem ferromagnética, as excitações de baixas energias são mágnons, com relação de dispersão aproximadamente quadrática:

$$\omega(k) = \lambda k^2. \quad (4.5)$$

O espectro dos mágnons e, conseqüentemente, λ dependem de detalhes do modelo. No Capítulo 3, determinamos o espectro para o modelo de Tasaki. Aqui assumimos λ conhecido e nos concentramos no acoplamento spin-carga. No regime de baixas energias, o Hamiltoniano dos mágnons é

$$H_S = \lambda \int dx \partial_x \Omega^\dagger(x) \partial_x \Omega(x). \quad (4.6)$$

Antes de acoplar H_C e H_S , linearizamos esses Hamiltonianos em torno dos níveis p_F e $-p_F$:

$$H_C = \int dx \psi_R^\dagger(x) [\epsilon(p_F) - iv\partial_x] \psi_R(x) + \int dx \psi_L^\dagger(x) [\epsilon(-p_F) + iv\partial_x] \psi_L(x), \quad (4.7)$$

$$H_S = \int dx \Omega_R^\dagger(x) [\omega(p_F) - iu\partial_x] \Omega_R(x) + \int dx \Omega_L^\dagger(x) [\omega(-p_F) + iu\partial_x] \Omega_L(x), \quad (4.8)$$

em que $v = \left. \frac{d\epsilon}{dp} \right|_{p=p_F}$ é a velocidade dos férmions e $u = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k=p_F}$ é a velocidade dos mágnons.

Para expressar H_C e H_S de forma mais compacta, definimos campos spinoriais*

$$\Psi(x) = \begin{bmatrix} \psi_R(x) \\ \psi_L(x) \end{bmatrix} \quad (4.9)$$

*Os campos spinoriais não devem ser confundidos com os campos dos Hamiltonianos que precedem a linearização, indicados nas Eq. (4.4) e (4.6). Como só usaremos as versões linearizadas indicadas nas Eq. (4.7) e (4.8), não há risco de ambigüidade.

e

$$\Omega(x) = \begin{bmatrix} \Omega_R(x) \\ \Omega_L(x) \end{bmatrix}. \quad (4.10)$$

Em termos dos campos spinoriais, os Hamiltonianos se expressam como

$$H_C = \int dx \Psi^\dagger(x) [\epsilon(p_F) - iv\sigma_z\partial_x] \Psi(x) \quad (4.11)$$

e

$$H_S = \int dx \Omega^\dagger(x) [\omega(p_F) - iu\sigma_z\partial_x] \Omega(x), \quad (4.12)$$

em que σ_z é a matriz de Pauli associada à direção z :

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (4.13)$$

Nesta linguagem, a quiralidade dos campos spinoriais é um pseudospin. Ao linearizarmos a teoria, passamos a medir os momenta a partir dos níveis de Fermi, que passam, portanto, a ter $p = 0$. É importante ter isto em mente, pois campos de quiralidade diferentes são linearizados em torno de pontos diferentes, o que precisa ser considerado nas regras de conservação de momentum (veja a seguir).

Conhecidos os Hamiltonianos livres, acoplamos fenomenologicamente férmions e mágnons. Assumindo uma interação local e conservação de momentum linear, as combinações de campos que podemos encontrar (já expressas em termos de componentes quirais) são da forma $\Psi_{\sigma_1}^\dagger(x)\psi_{\sigma_2}(x)\Omega_{\sigma_3}^\dagger(x)\Omega_{\sigma_4}(x)$ (em que o índice σ indica a quiralidade da componente), com a restrição de que haja o mesmo número de operadores de criação e de aniquilação para uma dada quiralidade. Isto porque um campo quiral direito (esquerdo) está associado a um momentum p_F ($-p_F$), devido à linearização em torno deste ponto.

Implementamos sistematicamente a conservação de momentum definindo

$$\varepsilon_\sigma = 1 \text{ se } \sigma = R; \quad (4.14)$$

$$\varepsilon_\sigma = -1 \text{ se } \sigma = L.$$

Com isso, a condição de conservação de momentum se traduz em

$$\varepsilon_{\sigma_1} - \varepsilon_{\sigma_2} + \varepsilon_{\sigma_3} - \varepsilon_{\sigma_4} = 0. \quad (4.15)$$

Essa condição implica conservação da componente z do pseudospin. Note que há um sinal negativo quando uma partícula é aniquilada.

As combinações possíveis são as seguintes: $LLLL$, $RRRR$, $LLRR$, $RRLL$, $LRRL$ e $RLLR$. Impondo também simetria de paridade, o Hamiltoniano de interação local mais geral que podemos escrever (desconsiderando operadores irrelevantes) é

$$H_{SC} = H_+ + H_- + H_1 + H_2, \quad (4.16)$$

em que

$$H_+ = g_{\perp} \int dx \psi_L^{\dagger}(x) \psi_R(x) \Omega_R^{\dagger}(x) \Omega_L(x), \quad (4.17)$$

$$H_- = g_{\perp} \int dx \psi_R^{\dagger}(x) \psi_L(x) \Omega_L^{\dagger}(x) \Omega_R(x), \quad (4.18)$$

$$H_1 = \frac{g_{\parallel}}{2} \int dx \left[\psi_R^{\dagger}(x) \psi_R(x) \Omega_R^{\dagger}(x) \Omega_R(x) + \psi_L^{\dagger}(x) \psi_L(x) \Omega_L^{\dagger}(x) \Omega_L(x) \right] \quad (4.19)$$

e

$$H_2 = -\frac{g'_{\parallel}}{2} \int dx \left[\psi_R^{\dagger}(x) \psi_R(x) \Omega_L^{\dagger}(x) \Omega_L(x) + \psi_L^{\dagger}(x) \psi_L(x) \Omega_R^{\dagger}(x) \Omega_R(x) \right]. \quad (4.20)$$

Em princípio, isto estabelece o modelo efetivo. Vamos reescrever o modelo nas próximas passagens para melhor elucidar suas consequências físicas.

Em notação spinorial, os Hamiltonianos de interação são dados por

$$H_+ = \frac{g_{\perp}}{4} \int dx \Psi^{\dagger}(x) \sigma_- \Psi(x) \Omega^{\dagger}(x) \sigma_+ \Omega(x), \quad (4.21)$$

$$H_- = \frac{g_{\perp}}{4} \int dx \Psi^{\dagger}(x) \sigma_+ \Psi(x) \Omega^{\dagger}(x) \sigma_- \Omega(x), \quad (4.22)$$

$$\begin{aligned} H_1 = \frac{g_{\parallel}}{2} \int dx & \left[\Psi^{\dagger}(x) \left(\frac{\mathbb{1} + \sigma_z}{2} \right) \Psi(x) \Omega^{\dagger}(x) \left(\frac{\mathbb{1} + \sigma_z}{2} \right) \Omega(x) \right. \\ & \left. + \Psi^{\dagger}(x) \left(\frac{\mathbb{1} - \sigma_z}{2} \right) \Psi(x) \Omega^{\dagger}(x) \left(\frac{\mathbb{1} - \sigma_z}{2} \right) \Omega(x) \right] \end{aligned} \quad (4.23)$$

e

$$H_2 = -\frac{g'_\parallel}{2} \int dx \left[\Psi^\dagger(x) \left(\frac{\mathbb{1} + \sigma_z}{2} \right) \Psi(x) \Omega^\dagger(x) \left(\frac{\mathbb{1} - \sigma_z}{2} \right) \Omega(x) \right. \\ \left. + \Psi^\dagger(x) \left(\frac{\mathbb{1} - \sigma_z}{2} \right) \Psi(x) \Omega^\dagger(x) \left(\frac{\mathbb{1} + \sigma_z}{2} \right) \Omega(x) \right]. \quad (4.24)$$

Simplificamos H_1 e H_2 separando termos que envolvem $\mathbb{1}$ e termos que envolvem σ_z :

$$H_1 = \frac{g_\parallel}{4} \int dx \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Omega^\dagger(x) \Omega(x) + \frac{g_\parallel}{4} \int dx \Psi^\dagger(x) \sigma_z \Psi(x) \Omega^\dagger(x) \sigma_z \Omega(x); \quad (4.25)$$

$$H_2 = -\frac{g'_\parallel}{4} \int dx \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Omega^\dagger(x) \Omega(x) + \frac{g'_\parallel}{4} \int dx \Psi^\dagger(x) \sigma_z \Psi(x) \Omega^\dagger(x) \sigma_z \Omega(x) \quad (4.26)$$

Agrupando H_1 e H_2 ,

$$H_1 + H_2 = \frac{g_\parallel - g'_\parallel}{4} \int dx \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Omega^\dagger(x) \Omega(x) + \frac{g_\parallel + g'_\parallel}{4} \int dx \Psi^\dagger(x) \sigma_z \Psi(x) \Omega^\dagger(x) \sigma_z \Omega(x). \quad (4.27)$$

O primeiro termo da direita da Eq. (4.27) é o espalhamento potencial entre mágnons e férmions. Vamos denotá-lo por H_V :

$$H_V = V \int dx \Psi^\dagger(x) \Psi(x) \Omega^\dagger(x) \Omega(x), \quad (4.28)$$

em que $V = (g_\parallel - g'_\parallel) / 4$.

Já o segundo termo da Eq. (4.27) é a interação entre as componentes z dos pseudospins dos férmions e dos mágnons. Este termo, que denotaremos por H_z , junto com H_+ e H_- , representa a interação local anisotrópica entre os pseudospins dos férmions e dos mágnons:

$$H_J = H_+ + H_- + H_z = \frac{J_\perp}{2} \int dx \Psi^\dagger(x) S_+ \Psi(x) \Omega^\dagger(x) S_- \Omega(x) \\ + \frac{J_\perp}{2} \int dx \Psi^\dagger(x) S_- \Psi(x) \Omega^\dagger(x) S_+ \Omega(x) \\ + J_\parallel \int dx \Psi^\dagger(x) S_z \Psi(x) \Omega^\dagger(x) S_z \Omega(x), \quad (4.29)$$

em que $S_i = \sigma_i / 2$, $J_\perp = 2g_\perp$ e $J_\parallel = g_\parallel + g'_\parallel$.

Em síntese, o modelo efetivo para a interação mágnon-férmion em torno dos pontos p_F e $-p_F$ consiste de um termo de espalhamento potencial e de interação local anisotrópica de pseudospins, em que a componente z do pseudospin representa a quiralidade. Trata-se de um tipo de modelo de Kondo anisotrópico, em que o mágnon pode ser encarado como

uma impureza móvel (e, em princípio, pode haver mais de uma impureza). De modo geral, este modelo é difícil de tratar. Entretanto, no espaço de um mágnon, podemos usar uma transformação unitária para reduzir o Hamiltoniano a um modelo de impureza fixo. A redução a um número fixo de mágnons é possível porque, devido à simetria $SU(2)$, a magnetização é conservada. Discutimos a seguir a transformação unitária.

Como há apenas um mágnon, é mais simples voltar ao formalismo de primeira quantização. Neste formalismo, o termo de espalhamento potencial é

$$H_V = V \sum_i \delta(X_i - X_M), \quad (4.30)$$

em que X_i é o operador posição de um férmion e X_M é o operador posição do mágnon. Já a interação de pseudospin se escreve como

$$H_J = \frac{J_\perp}{2} \sum_i [S_+^i S_-^M \delta(X_i - X_M) + S_-^i S_+^M \delta(X_i - X_M)] + J_\parallel \sum_i S_z^i S_z^M \delta(X_i - X_M), \quad (4.31)$$

em que S_ℓ^i e S_ℓ^M são as componentes ℓ do operador de pseudospin do i -ésimo férmion e do mágnon, respectivamente[†].

O objetivo da transformação unitária é eliminar X_M . Para isto, propõe-se (36)

$$U \equiv e^{-iPX_M}, \quad (4.32)$$

em que $P = \sum_i P_i$ é o momentum total dos férmions e X_M é a posição do mágnon. Como este operador é espacial (isto é, não envolve o pseudospin), só temos que saber o que é $U^\dagger \delta(X_i - X_M) U$ para obter os Hamiltonianos transformados. Com este fim, usamos a identidade (19)

$$e^{-B} f(A) e^B = f(A + C), \text{ em que } C \equiv [A, B], \quad (4.33)$$

válida se $[A, C] = [B, C] = 0$.

Aplicando a identidade ao caso em que $A = X_i$ e $B = iPX_M$ e usando que $C = -i[X_i, P]X_M = X_M$, segue que

$$U^\dagger f(X_i) U = f(X_i + X_M) \quad (4.34)$$

[†]Esses operadores não devem ser confundidos com as matrizes de pseudospin no formalismo de segunda quantização (como as que aparecem na Eq. (4.29), por exemplo), que são a representação desses operadores em uma dada base.

Em particular,

$$U^\dagger \delta(X_i - X_M) U = \delta(X_i). \quad (4.35)$$

Assim,

$$U^\dagger H_V U = V \sum_i \delta(X_i) \quad (4.36)$$

e

$$U^\dagger H_J U = \frac{J_\perp}{2} \sum_i \left[S_+^i S_-^M \delta(X_i) + S_-^i S_+^M \delta(X_i) \right] + J_\parallel \sum_i S_z^i S_z^M \delta(X_i), \quad (4.37)$$

Voltando ao formalismo de segunda quantização,

$$U^\dagger H_V U = V \Psi^\dagger(0) \Psi(0) \quad (4.38)$$

e

$$\begin{aligned} U^\dagger H_J U = & \frac{J_\parallel}{2} \left[\Psi^\dagger(0) S_+ \Psi(0) \Omega^\dagger S_- \Omega + \Psi^\dagger(0) S_- \Psi(0) \Omega^\dagger S_+ \Omega \right] \\ & + J_\perp \Psi^\dagger(0) S_z \Psi(0) \Omega^\dagger S_z \Omega, \end{aligned} \quad (4.39)$$

em que Ω é um spinor análogo ao da Eq. (4.10), mas sem o grau de liberdade de posição, uma vez que o operador X_M desapareceu após a transformação canônica:

$$\Omega = \begin{bmatrix} \Omega_R \\ \Omega_L \end{bmatrix}. \quad (4.40)$$

O termo de interação dos pseudospins é tradicionalmente escrito na forma

$$U^\dagger H_J U = \frac{J_\perp}{2} \left[S_+(0) S_-^M + S_-(0) S_+^M \right] + J_\parallel S_z(0) S_z^M, \quad (4.41)$$

em que $S_i(0)$ é a i -ésima componente do pseudospin dos férmions na origem.

Para sermos consistentes, entretanto, devemos transformar também os Hamiltonianos livres, indicados nas Eq. (4.11) e (4.12). Já que estamos em subespaços com números fixos de partícula, desprezamos termos de potencial químico:

$$H_C = \int dx \Psi^\dagger(x) [-iv\sigma_z \partial_x] \Psi(x) \quad (4.42)$$

e

$$H_S = \int dx \Omega^\dagger(x) [-iu\sigma_z \partial_x] \Omega(x). \quad (4.43)$$

Em analogia com o que fizemos com a interação, voltamos ao formalismo de primeira quantização. O Hamiltoniano dos férmions é[‡]

$$H_C = 2v \sum_i S_z^i P_i, \quad (4.44)$$

em que S_z^i é a componente z do operador de pseudospin do i -ésimo férmion e P_i , o seu momentum. Similarmente, o Hamiltoniano dos mágnons é

$$H_S = 2u S_z^M P_M, \quad (4.45)$$

em que S_z^M é a componente z do operador de pseudospin do mágnon e P_M é o momentum do mágnon.

Agora implementamos a transformação U . Como ela não envolve X_i 's, não modifica os P_i 's e, como consequência, H_C não muda:

$$U^\dagger H_C U = 2v \sum_i S_z^i P_i. \quad (4.46)$$

Já a dependência de $U = \exp(-iP X_M)$ em X_M modifica o momentum do mágnon:

$$U^\dagger f(P_M) U = f(P_M - P). \quad (4.47)$$

Essa relação se deriva facilmente da Eq. (4.33). Dela, segue que

$$U^\dagger H_S U = 2u S_z^M (P_M - P). \quad (4.48)$$

As Eq. (4.46) e (4.48) nos dão a contribuição cinética após a transformação. Podemos simplificá-las mais ao notarmos que P_M comuta com o Hamiltoniano, pois eliminamos X_M . Nos concentramos, então, no caso particular em que $P_M = 0$, que é quando o mágnon tem momentum correspondente aos pontos de Fermi.

Somando os Hamiltonianos livres já no caso em que $P_M = 0$, obtemos

$$U^\dagger (H_C + H_S) U = 2v \sum_i S_z^i P_i - 2u S_z^M \sum_i P_i. \quad (4.49)$$

[‡]A razão pela qual o operador de spin aparece no Hamiltoniano livre dos férmions é devido à linearização em dois pontos: a relação de dispersão dos férmions de direita (esquerda) é vp ($-vp$). O operador $2S_z^i$ garante a dispersão correta para cada quiralidade.

Em segunda quantização,

$$U^\dagger(H_C + H_S)U = \int dx \Psi^\dagger(x) [-iv\sigma_z\partial_x] \Psi(x) - \int dx \Psi^\dagger(x) [-iu\partial_x] \Psi(x) \Omega^\dagger \sigma_z \Omega. \quad (4.50)$$

Para melhor compreender o significado deste termo, passamos para a representação de momenta:

$$\Psi(x) = \sum_k \mathcal{F}(x, k) \Psi_k, \quad (4.51)$$

em que

$$\mathcal{F}(x, k) \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \begin{bmatrix} e^{ikx} & 0 \\ 0 & e^{-ikx} \end{bmatrix} \quad (4.52)$$

e[§]

$$\Psi_k \equiv \begin{bmatrix} c_{k,R} \\ c_{k,L} \end{bmatrix}. \quad (4.53)$$

Expressando $U^\dagger(H_C + H_S)U$ em termos de $\Psi_k^\dagger$ e Ψ_k ,

$$U^\dagger(H_C + H_S)U = v \sum_k k \Psi_k^\dagger \Psi_k - u \Omega^\dagger \sigma_z \Omega \sum_k k \Psi_k^\dagger \sigma_z \Psi_k, \quad (4.54)$$

em que usamos que $i\partial_x \mathcal{F}(x, k) = \sigma_z k \mathcal{F}(x, k)$, $-i\sigma_z \partial_x \mathcal{F}(x, k) = k \mathcal{F}(x, k)$ e a propriedade

$$\int dx \mathcal{F}^\dagger(x, k) \mathcal{F}(x, k') = \delta_{k,k'} \mathbb{1} \quad (4.55)$$

para eliminar os $\mathcal{F}$'s. Outra forma de escrever a Eq. (4.54) é

$$U^\dagger(H_C + H_S)U = v \sum_k k \Psi_k^\dagger \Psi_k - 2u S_z^M \sum_k k \Psi_k^\dagger \sigma_z \Psi_k \quad (4.56)$$

Discutimos agora o significado da Eq. (4.56). O primeiro termo da direita é a relação de dispersão original dos férmions de direita e esquerda, que é independente da quiralidade. Já o segundo termo depende das quiralidades do férmion e do mágnon: se são iguais, a velocidade do férmion (que originalmente é v) passa a ser $v - u$; se diferentes, passa a ser $v + u$. Há uma explicação pictórica para esse resultado. Quando férmions e mágnon têm a mesma quiralidade, se movem no mesmo sentido com velocidade v e u respectivamente. Ao adotarmos um referencial que se move com o mágnon (que é o significado físico da

[§]Devido à forma da matriz $\mathcal{F}(x, k)$, o operador $c_{k,L}$ na verdade corresponde a momentum $-k$.

transformação unitária da Eq. (4.32)), a velocidade do férmion passa a ser a velocidade relativa, $v - u$. Já se eles possuem quiralidades distintas, se movem em sentidos opostos e a velocidade relativa é $v + u$.

Finalmente, podemos escrever o Hamiltoniano completo transformado por U reunindo os resultados das Eq. (4.38), (4.39) e (4.54):

$$\begin{aligned}
 H = & v \sum_k k \Psi_k^\dagger \Psi_k - 2u S_z^M \sum_k k \Psi_k^\dagger \sigma_z \Psi_k \\
 & + \frac{J_\perp}{2} [S_+(0) S_-^M + S_-(0) S_+^M] + J_\parallel S_z(0) S_z^M \\
 & + V \Psi^\dagger(0) \Psi(0).
 \end{aligned} \tag{4.57}$$

O Hamiltoniano da Eq. (4.57) é muito similar ao modelo de Kondo tradicional (37). Essa similaridade explica o aparecimento de singularidades logarítmicas na auto-energia do mágnon que encontramos por teoria de perturbação até segunda ordem. A única diferença é o termo que depende da quiralidade relativa do mágnon e dos férmions, $-u S_z^M \sum_k k \Psi_k^\dagger \sigma_z \Psi_k$.

A investigação da Física deste modelo está além do escopo desta dissertação. No capítulo seguinte, fazemos uma recapitulação sucinta de como este modelo é obtido, discutimos que resultados físicos podemos esperar e como este modelo deve ser futuramente investigado.

Capítulo 5

Conclusão

Um dos paradigmas de sistemas unidimensionais é a separação spin-carga. No regime fracamente interagente, ela pode ser justificada com a técnica tradicional de bosonização. Mais recentemente, uma técnica alternativa foi proposta para justificar a separação no regime fortemente interagente (21). Partindo desta hipótese, consideramos o problema de se dopar um ferromagneto isolante. Como a maioria das demonstrações de ferromagnetismo é feita na fase isolante, investigamos os fenômenos físicos que aparecem na fase metálica.

Descrevemos o setor de carga por férmions sem spin distribuídos em duas bandas separadas por um gap, dada a condição de isolante. Ao dopar o sistema, introduzimos dois pontos de Fermi, como ilustrado na Fig. 3.2, p_F e $-p_F$. Já as excitações do setor de spin, uma vez que assumimos fase ferromagnética, são mágnons, os modos de Goldstone para esta quebra de simetria. Propusemos um acoplamento fenomenológico local entre férmions e mágnons e calculamos correções ao espectro do mágnon, o que nos revelou que os espalhamentos envolvendo os pontos de Fermi introduzido pela dopagem são fisicamente importantes. Recapitulamos em seguida os principais resultados que descrevem este espalhamento.

A física por trás do acoplamento é melhor visualizada se pensarmos na quiralidade (isto é, em que ramo está a partícula) como um pseudospin, tal que $\uparrow = R$ e $\downarrow = L$. Devido à interação férmion-mágnon, pode ocorrer retroespalhamento ou espalhamento frontal. No primeiro caso, uma partícula de momentum próximo a p_F colide com uma de

momentum próximo a $-p_F$ e os momenta se invertem. Na linguagem de pseudospin, o pseudospin das partículas se invertem. Já no caso de espalhamento frontal, duas partículas permanecem em seus respectivos ramos após a colisão, que podiam ser os mesmos ou distintos. Na linguagem de pseudospin, isto, em geral, é descrito por uma interação entre as componentes z dos pseudospins e por um termo de espalhamento potencial. Como vimos, esses processos são descritos pela parte interagente de um modelo de Kondo com impurezas móveis em que a quiralidade aparece como pseudospin.

Como a magnetização é conservada, podemos nos restringir ao espaço de um mágnon. Neste caso, usamos uma transformação canônica para eliminar o grau de liberdade de posição da impureza, o que deixa a parte interagente idêntica ao que teríamos no modelo de Kondo, eliminando também a energia cinética da impureza. O preço que se paga é que a velocidade de um férmions v passa a ser velocidade relativa $v - u$ ou $v + u$ (em que u é a velocidade do mágnon), o que depende da quiralidade relativa entre férmion e mágnon. Em outras palavras, a relação de dispersão dos férmions passa a depender da quiralidade da impureza, que é o que diferencia o modelo obtido do modelo de Kondo (no caso em que $u = 0$, eles são iguais).

Se pergunta agora qual é a Física por trás deste modelo. Ainda não temos uma resposta precisa para esta pergunta. Uma possibilidade é que, para u pequeno, a solução deste modelo seja a mesma do modelo de Kondo. Neste, um férmion forma um singlete com a impureza e o par se desacopla do restante do mar fermiônico. O singlete em questão difere de um singlete no modelo de Kondo tradicional por ser delocalizado no espaço e localizado no espaço de momenta: trata-se de uma combinação de pares com momenta p_F e $-p_F$, o que lembra um par de Cooper, mas entre mágnon e férmion.

Se o par formado diminuir a energia do sistema, a criação de mais mágnons se tornaria favorável, o que implicaria a instabilidade do ferromagnetismo metálico. Por outro lado, se o ferromagnetismo permanecer estável, implica a possibilidade de observar assinaturas do efeito Kondo na função espectral do mágnon por geração de ondas de spin.

Entretanto, é possível que o efeito da velocidade u do mágnon seja mais importante. No caso do modelo de Kondo, a impureza está acoplada diretamente apenas a um férmion.

No modelo que derivamos, a relação de dispersão dos férmions dependente do pseudospin da impureza acopla a impureza com todos os férmions, o que deixa a dúvida de se, neste caso, um único férmion e a impureza conseguem efetivamente se desacoplar do restante do sistema.

Seria, portanto, interessante determinar qual é o ponto fixo deste modelo. Uma análise preliminar por grupo de renormalização perturbativo (não apresentada neste trabalho) revela um fluxo para ponto fixo de acoplamento forte quando $v > u$, o que implica que deve ser utilizado o grupo de renormalização numérico. A maquinaria do grupo de renormalização numérico pode ser facilmente adaptada ao problema no espaço de apenas um mágnon.

Contudo, mesmo o grupo de renormalização numérico exige que se façam aproximações, particularmente ao se discretizar a banda dos férmions, dado o elevado custo computacional de diagonalizar o Hamiltoniano. Aqui podemos nos deparar novamente com um problema, pois uma das justificativas de porque o modelo de Kondo pôde ser tratado pelo grupo de renormalização numérico é que a impureza está diretamente acoplada a apenas com um sítio e este acoplamento é tratado de forma exata. Assim, mesmo que eventualmente se investigue mais a fundo a Física deste modelo com esta técnica, é preciso avaliar se as aproximações não controladas do grupo de renormalização numérico funcionam bem para o modelo aqui derivado.

Vale ressaltar que o modelo que derivamos não se restringe a apenas um mágnon em um mar de férmions unidimensional. Em princípio, qualquer problema com a mesma estrutura, isto é, um sistema com uma banda fermiônica com dois pontos de Fermi $-p_F$ e p_F no qual se injeta uma impureza com momentum próximo de um dos pontos de Fermi levará à mesma Física. Assim, o modelo derivado tem consequências para problemas de impurezas móveis mais gerais do que o espalhamento férmion-mágnon aqui estudado. O ingrediente essencial para uma dinâmica de Kondo é o sistema ser unidimensional: há apenas dois pontos de Fermi, o que leva a esta dinâmica em vez da formação de pólarons (38).

REFERÊNCIAS

- 1 ANDERSON, P. W. More is different. **Science**, v. 177, n. 4047, p. 393-396, 1972.
- 2 JO, G.-B. et al. Itinerant ferromagnetism in a Fermi gas of ultracold atoms. **Science**, v. 325, n. 5947, p. 1521–1524, 2009.
- 3 SANNER, C. et al. Correlations and pair formation in a repulsively interacting Fermi gas. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 24, p. 240404, jun. 2012.
- 4 HEISENBERG, W. On the theory of ferromagnetism. **Zeitschrift Fur Physik**, v. 49, n. 9-10, p. 619-636, Sept. 1928.
- 5 FAZEKAS, P. **Lecture notes on electron correlation and magnetism**. Singapore: World Scientific Publishing, 1999. (Series in modern condensed matter physics, v.5).
- 6 HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. **Proceedings of the Royal Society A**, v. 276, n. 1365, p. 238-257, Nov. 1963.
- 7 CLEVELAND, C. L.; MEDINA, R. A. Obtaining a Heisenberg Hamiltonian from the Hubbard model. **American Journal of Physics**, v. 44, n. 1, p. 44-46, Jan. 1976.
- 8 LIEB, E. H.; MATTIS, D. Theory of ferromagnetism and the ordering of electronic energy levels. **Physical Review**, v. 125, n. 1, p. 164, 1962.
- 9 NAGAOKA, Y. Ferromagnetism in a narrow, almost half-filled s Band. **Physical Review**, v. 147, n.1, p. 392-405, July 1966.

- 10 LIEB, E. H. Two theorems on the Hubbard model. **Physical Review Letters**, v. 62, n. 10, p. 1201-1204, Mar. 1989.

- 11 MIELKE, A. Ferromagnetism in the Hubbard model on line graphs and further considerations. **Journal of Physics A: mathematical and general**, v. 24, n. 14, p. 3311, 1991.

- 12 TASAKI, H. Ferromagnetism in Hubbard models. **Physical Review Letters**, v. 75, n. 25, p. 4678-4681, Dec. 1995.

- 13 PENC, K. et al. Ferromagnetism in multiband Hubbard models: from weak to strong Coulomb repulsion. **Physical Review B**, v. 54, n. 6, p. 4056-4067, 1996.

- 14 TANAKA, A.; TASAKI, H. Metallic ferromagnetism in the Hubbard model: a rigorous example. **Physical Review Letters**, v. 98, n. 11, p. 116402-1-4, 2007.

- 15 TASAKI, H. Hubbard model and the origin of ferromagnetism. **The European Physical Journal B**, v. 64, n. 3-4, p. 365-372, 19 Mar. 2008.

- 16 YANG, K. Ferromagnetic transition in one-dimensional itinerant electron systems. **Physical Review Letters**, v. 93, n. 6, p. 066401-1-4, Aug. 2004.

- 17 HALDANE, F. "Luttinger liquid theory" of one-dimensional quantum fluids. I. properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas. **Journal of Physics C: solid state physics**, v. 14, n. 19, p. 2585-2609, 1981.

- 18 SHANKAR, R. Renormalization-group approach to interacting fermions. **Reviews of Modern Physics**, v. 66, n. 1, p. 129-192, 1994.

- 19 DELFT, J. von.; SCHOELLER, H. **Bosonization for beginners — reformionization for experts**. Disponível em:
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/%28SICI%291521-3889%28199811%297:4%3C225::AID-ANDP225%3E3.0.CO;2-L/pdf>. Acesso em: 26 jun. 2013.

-
- 20 MIRANDA, E. Introduction to bosonization. **Brazilian Journal of Physics**, v. 33, n. 1, p. 3–35, 2003.
- 21 MATVEEV, K. A.; FURUSAKI, A.; GLAZMAN, L. I. Bosonization of strongly interacting one-dimensional electrons. **Physical Review B**, v. 76, n. 15, p. 155440-1-21, 2007.
- 22 KAMENEV, A.; GLAZMAN, L. I. Dynamics of a one-dimensional spinor Bose liquid: a phenomenological approach. **Physical Review A**, v. 80, n. 1, p. 011603-1-4, 2009.
- 23 KONDO, J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys. **Progress of Theoretical Physics**, v. 32, n. 1, p. 37–49, July 1964.
- 24 WILSON, K. The renormalization group: critical phenomena and the Kondo problem. **Reviews of Modern Physics**, v. 47, n. 4, p. 773–840, Oct. 1975.
- 25 KRISHNA-MURTHY, H. R.; WILKINS, J. W.; WILSON, K. G. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. I. static properties for the symmetric case. **Physical Review B**, v. 21, n. 3, p. 1003-1043, Feb. 1980.
- 26 KRISHNA-MURTHY, H.; WILKINS, J.; WILSON, K. Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. II. static properties for the asymmetric case. **Physical Review B**, v. 21, n. 3, p. 1044–1083, Feb. 1980.
- 27 ANDREI, N.; FURUYA, K.; LOWENSTEIN, J. H. Solution of the Kondo problem. **Reviews of Modern Physics**, v. 55, n. 2, p. 331–402, 1983.
- 28 GIAMARCHI, T. **Quantum physics in one dimension**. New York: Oxford University Press, 2004.
- 29 WANG, D. W.; MISHCHENKO, E. G.; DEMLER, E. Pseudospin ferromagnetism in double-quantum-wire systems. **Physical Review Letters**, v. 95, n. 8, p. 086802-1-4, 2005.

- 30 COLEMAN, S. Quantum sine-Gordon equation as the massive Thirring model. **Physical Review D**, v. 11, n. 8, p. 2088-2097, Apr. 1975.
- 31 SCHULZ, H. J. Critical behavior of commensurate-incommensurate phase transitions in two dimensions. **Physical Review B**, v. 22, n. 11, p. 5274-5277, 1980.
- 32 GOLDSTONE, J.; SALAM, A.; WEINBERG, S. Broken symmetries. **Physical Review**, v. 127, n. 3, p. 965–970, Aug. 1962.
- 33 RUMSCH, W.; NOLTING, W. Influence of spin-wave excitations on the ferromagnetic phase diagram in the Hubbard model. **Physical Review B**, v. 66, n. 19, p. 195109-1-7, Nov. 2002.
- 34 HOLSTEIN, T. Field dependence of the intrinsic domain magnetization of a ferromagnet. **Physical Review**, v. 58, n. 12, p. 1098–1113, Dec. 1940.
- 35 MAHAN, G. D. **Many-particle physics**. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2000.
- 36 CASTRO NETO, A. H.; FISHER, M. P. A. Dynamics of a heavy particle in a Luttinger liquid. **Physical Review B**, v. 53, n. 15, p. 9713-9718, Apr. 1996.
- 37 HEWSON, A. C. **The Kondo problem to heavy fermions**. Cambridge: Cambridge University Press, 1997.
- 38 SCHMIDT, R. et al. Fermi polarons in two dimensions. **Physical Review A**, v. 85, n. 2, p. 021602-1-5, 2012.

Apêndice A

O teorema de Lieb e Mattis para redes unidimensionais

Nesta seção, discutimos e demonstramos o teorema de Lieb e Mattis para redes unidimensionais com partículas fermiônicas idênticas. As hipóteses do teorema são discutidas em detalhe adiante, mas é essencial que só haja hopping entre primeiros vizinhos. Dificuldades técnicas impedem a generalização do teorema para hopping além de primeiros vizinhos. Além disso, resultados para o modelo de Tasaki (12) sugerem que o teorema não pode ser generalizado.

O teorema de Lieb e Mattis afirma que, para redes unidimensionais com condições de contorno periódicas, o estado fundamental é paramagnético, isto é, $S = 0$, em que S é o número quântico associado ao spin, desde que a rede seja descrita por um Hamiltoniano da forma

$$H = -K \sum_{i=1}^N \sum_{\sigma} \left(c_{i+1,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma} + \text{H.c.} \right) + V(\{n_j\}), \quad (\text{A.1})$$

em que N é o número de sítios da rede, $n_j = n_{j,\uparrow} + n_{j,\downarrow}$ e V é uma função simétrica dos operadores n_j .

Fisicamente, a condição de que o Hamiltoniano dependa de n_j , e não de $n_{j,\uparrow}$ ou $n_{j,\downarrow}$ separadamente, equivale a dizer que o Hamiltoniano é independente do spin. Essa condi-

ção é importante, pois o ferromagnetismo é caracterizado por uma polarização espontânea dos spins.

Já a condição de que V seja simétrica em relação a seus argumentos é uma forma de dizer que as partículas do sistema são idênticas. Isto fica mais claro quando consideramos a interação entre partículas, que assumimos ser uma função apenas de suas posições, em segunda quantização:

$$V = \sum_{i,j,\sigma,\nu} V(i,j) c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} c_{j,\nu}^\dagger c_{j,\nu}, \quad (\text{A.2})$$

que se escreve em termos de operadores número como

$$V = \sum_{i,j} V(i,j) n_i n_j. \quad (\text{A.3})$$

Para que V seja simétrica pela troca de n_i por n_j , a função $V(i,j)$, que é a interação em primeira quantização, deve ser simétrica pela troca de i por j , o que deve ser verdade para partículas indistinguíveis. Além disso, as interações que geralmente encontramos dependem da distância relativa entre as partículas, isto é, $V(i,j) = V(|i-j|)$, que apresentam a simetria necessária.

A única restrição severa do modelo indicado na Eq.(A.1) é que haja hopping apenas de primeiros vizinhos. Veremos que esta condição é importante para que o método de Lieb e Mattis se aplique e possamos demonstrar que o estado fundamental deste modelo tem $S = 0$. Assumimos, sem perda de generalidade, que $K > 0$ (se $K < 0$, podemos reverter o problema com uma transformação canônica).

Assim, em síntese, as hipóteses do teorema são: o Hamiltoniano tem a forma da Eq.(A.1), com V simétrica em relação aos argumentos e hopping apenas entre primeiros vizinhos; o Hamiltoniano depende apenas do número total de partículas, e não do número de partículas com spin para cima ou para baixo separadamente; as condições de contorno são periódicas. Nas próximas partes, discutimos a demonstração.

A demonstração consiste em dois passos: provar que o estado fundamental é não-degenerado; e provar que o estado fundamental não é ortogonal ao fundamental do modelo para o caso em que $V = 0$. Como, quando $V = 0$, o estado fundamental claramente tem $S = 0$, a condição de não-ortogonalidade exige que o estado fundamental para o caso em

que $V \neq 0$ também tenha $S = 0$ (uma vez que não é degenerado).

Antecipando dificuldades que aparecerão na demonstração, definimos os operadores de Pauli:

$$b_{i,\uparrow} = c_{i,\uparrow} \exp \left[i\pi \left(\sum_{j=1}^N n_{j,\downarrow} + \sum_{j=1}^{i-1} n_{j,\uparrow} \right) \right]; \quad (\text{A.4})$$

$$b_{i,\downarrow} = c_{i,\downarrow} \exp \left[i\pi \left(\sum_{j=1}^{i-1} n_{j,\downarrow} \right) \right]. \quad (\text{A.5})$$

A vantagem desses operadores, em relação aos operadores originais c_i 's, é que todos eles comutam, exceto por $b_{i\sigma}$ e $b_{i\sigma}^\dagger$, que anticomutam. Também se pode checar os operadores número permanecem com uma forma simples:

$$c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} = b_{j,\sigma}^\dagger b_{j,\sigma}. \quad (\text{A.6})$$

Mais adiante, quando utilizarmos as propriedades de comutação dos b 's, ficará claro porque eles são necessários.

O Hamiltoniano, reescrito em termos dos operadores de Pauli, assume basicamente a mesma forma:

$$H = -K \sum_{i,\sigma} \left(b_{i+1,\sigma}^\dagger b_{i,\sigma} + \text{H. c.} \right) + V(\{n_j\}). \quad (\text{A.7})$$

Isto só acontece porque há hopping apenas de primeiros vizinhos; para hopping além de primeiros vizinhos, surgem termos de hopping correlacionado, o que impede a generalização do teorema.

Como o Hamiltoniano tem simetria $SU(2)$, nos concentramos em estados com $M = 0$, em que M é o número quântico associado a S_z (a rigor, isto só é possível se o número de partículas é par; contudo, o spin desemparelhado para um número ímpar de partículas é irrelevante no limite termodinâmico). Construimos uma base de estados com $M = 0$ e expressamos o estado fundamental em termos dessa base.

Em geral, se a rede possui N sítios e $2p$ elétrons, temos p elétrons com spin para cima e p elétrons com spin para baixo. Como exemplo, para $N = 2$ e $p = 1$, uma base para o

subespaço de $M = 0$ é

$$|1\rangle = b_{1,\uparrow}^\dagger b_{1,\downarrow}^\dagger |0\rangle; \quad (\text{A.8})$$

$$|2\rangle = b_{2,\uparrow}^\dagger b_{2,\downarrow}^\dagger |0\rangle; \quad (\text{A.9})$$

$$|3\rangle = b_{1,\uparrow}^\dagger b_{2,\downarrow}^\dagger |0\rangle; \quad (\text{A.10})$$

$$|4\rangle = b_{2,\uparrow}^\dagger b_{1,\downarrow}^\dagger |0\rangle. \quad (\text{A.11})$$

Denotamos esses estados em que $M = 0$ por $|\alpha\rangle$, em que α varia de 1 a t e t é o número de estados do subespaço com $M = 0$:

$$t = \binom{N}{p}^2. \quad (\text{A.12})$$

Escrevemos o estado fundamental como combinação linear desses estados:

$$|\psi_0\rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} |\alpha\rangle, \quad (\text{A.13})$$

em que as amplitudes f_{α} são reais devido à simetria de reversão temporal. Denotamos a energia do estado fundamental por E_0 .

Vamos mostrar que $f_{\alpha} > 0$ ou $f_{\alpha} < 0$ para todo α , isto é, todos os coeficientes tem o mesmo sinal, se $|\psi_0\rangle$ é o estado fundamental (desta condição segue que o estado não pode ser ortogonal ao estado do Hamiltoniano em que $V = 0$). Começamos pela prova da desigualdade $f_{\alpha} \geq 0$ (ou $f_{\alpha} \leq 0$) e, em seguida, discutimos como excluir o 0.

Para provar que os coeficientes não podem mudar de sinal, consideramos um estado variacional da forma

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} g_{\alpha} |\alpha\rangle, \quad (\text{A.14})$$

com g_{α} 's reais. Veremos que, se permitirmos que g_{α} 's mudem o sinal, o estado

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{\alpha} |g_{\alpha}| |\alpha\rangle \quad (\text{A.15})$$

terá uma energia média menor. Portanto, o estado de menor energia deve ter todos os coeficientes com mesmo sinal.

Calculemos, então, a energia média de $|\psi\rangle$. A parte devido à interação é simples, pois, como V é uma função apenas de operadores número, $|\alpha\rangle$ é autoestado de V . Denotamos

o respectivo autovalor por V_α . Assim,

$$\langle \psi | V | \psi \rangle = \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 V_{\alpha}. \quad (\text{A.16})$$

A contribuição da energia cinética é um pouco mais trabalhosa. Como $|\alpha\rangle$ não é autoestado da parte cinética, que denotamos por T , apenas podemos afirmar que

$$T|\alpha\rangle = \sum_{\beta} T_{\beta\alpha}|\beta\rangle, \quad (\text{A.17})$$

em que $T_{\beta\alpha} \equiv \langle \beta | T | \alpha \rangle$.

Assim, quando T atua em $|\psi\rangle$, o resultado é

$$T|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} g_{\alpha} T_{\beta\alpha} |\beta\rangle. \quad (\text{A.18})$$

Segue que a contribuição média do termo cinético é

$$\langle \psi | T | \psi \rangle = \sum_{\alpha, \beta} g_{\alpha} g_{\beta} T_{\alpha\beta}. \quad (\text{A.19})$$

A energia média de $|\psi\rangle$ é

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{\alpha, \beta} g_{\alpha} g_{\beta} T_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha} g_{\alpha}^2 V_{\alpha}. \quad (\text{A.20})$$

A contribuição da energia potencial independente dos sinais dos g_{α} 's. Para analisar a energia cinética, precisamos considerar sua forma explícita,

$$T = -K \sum_{i, \sigma} b_{i+1, \sigma}^{\dagger} b_{i, \sigma} + \text{H. c.}, \quad (\text{A.21})$$

para determinar propriedades de seus elementos de matriz. Nas próximas passagens, vamos mostrar que $T_{\alpha\beta} \leq 0$.

O efeito do operador $b_{i+1, \sigma}^{\dagger} b_{i, \sigma}$ sobre a base dos $|\alpha\rangle$'s é simples: se o sítio $i+1$ estiver ocupado com um férmion de spin σ ou o sítio i não contiver um férmion de spin σ o resultado é 0; caso contrário, o férmion é deslocado, mas o estado resultante ainda é um dos elementos da base.

Este resultado deve ser enfatizado: os termos de hopping que compõem a energia cinética levam elementos da base em outros elementos da base ou no vetor nulo. Por exemplo, considere o estado $|3\rangle$ proposto na Eq.(A.10): $|3\rangle = b_{1, \uparrow}^{\dagger} b_{2, \downarrow}^{\dagger} |0\rangle$ e a atuação de

$b_{2,\uparrow}^\dagger b_{1,\uparrow}$ sobre esse estado:

$$b_{2,\uparrow}^\dagger b_{1,\uparrow} |3\rangle = b_{2,\uparrow}^\dagger b_{2,\downarrow}^\dagger |0\rangle = |2\rangle. \quad (\text{A.22})$$

É neste ponto que se vê a importância dos operadores de Pauli: por suas propriedades de comutação, não precisamos nos preocupar com a ordem dos operadores; um elemento da base é levado em outro elemento da base sem troca de sinais. Isto não é verdade para os operadores fermiônicos originais.

Decorre da discussão acima que os elementos de matriz $T_{\alpha\beta}$ são proporcionais a $-K$, com constante de proporcionalidade positiva ou nula (se todos os sítios estiverem completamente preenchidos, por exemplo, $T_{\alpha\beta} = 0$). A constante de proporcionalidade não nos interessa, mas pode ser determinada ao se contar de quantas formas é possível deslocar um férmion na rede. Como $K > 0$,

$$T_{\alpha\beta} \leq 0. \quad (\text{A.23})$$

Agora estamos prontos para comparar as energias dos estados dados pelas Eq.(A.14) e (A.15):

$$\langle \bar{\psi} | H | \bar{\psi} \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{\alpha, \beta} (|g_\alpha| |g_\beta| - g_\alpha g_\beta) T_{\alpha\beta}. \quad (\text{A.24})$$

Como $T_{\alpha\beta} \leq 0$ e $|g_\alpha| |g_\beta| \geq g_\alpha g_\beta$, segue que

$$\langle \bar{\psi} | H | \bar{\psi} \rangle \leq \langle \psi | H | \psi \rangle. \quad (\text{A.25})$$

Isso prova que os coeficientes do estado fundamental são todos de mesmo sinal.

Agora vamos provar que f_α é estritamente positivo ou negativo, isto é, não há coeficiente nulo. Suponha que algum estado da base esteja ausente combinação linear. Sucessivas atuações de H eventualmente levariam a esse estado devido aos termos de hopping. Contudo, por hipótese, o estado de partida é um autoestado do Hamiltoniano e, portanto, deve resultar em si mesmo a menos de fatores multiplicativos. Dessa condição, segue de imediato que o estado fundamental é não-degenerado: se ele o fosse, seria possível construir um estado misto em que um dos coeficientes é nulo, o que não pode acontecer.

Agora que já provamos que o estado fundamental não é degenerado, resta mostrar que $S = 0$. Vimos que os coeficientes f_α são todos de mesmo sinal e não nulos, o que também

se aplica ao caso em que $V = 0$. Neste caso, o produto escalar entre o estado para um modelo em que $V \neq 0$ e para o estado em que $V = 0$ não pode ser nulo, o que indica que os estados não são ortogonais. Eles possuem, portanto, o mesmo S , que é sabido ser $S = 0$ para o caso de $V = 0$, o que encerra a demonstração.

Apêndice B

Bosonização

Ao longo deste trabalho, usamos uma técnica conhecida como bosonização, que permite expressar campos fermiônicos em termos de exponenciais de campos bosônicos em sistemas unidimensionais. Nesta seção, fazemos uma breve explicação dos principais resultados da técnica. Não se espera, entretanto, que esta seção ensine bosonização a um leigo. Para isso, sugerimos as Ref.(19) e (20).

Seja $\psi(x)$ um operador de campo fermiônico associado a um certo sistema físico unidimensional de tamanho L :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_k e^{ikx} c_k. \quad (\text{B.1})$$

Linearizamos essa expressão em torno dos níveis de Fermi, como indicado pela Fig. B.1:

$$\psi(x) \approx \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{-i(k_F+k)x} c_{-(k_F+k)} + \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{i(k_F+k)x} c_{k_F+k}, \quad (\text{B.2})$$

em que os operadores do primeiro termo da direita correspondem ao ramo esquerdo e os operadores do segundo termo da direita correspondem ao ramo direito.

Definindo $c_{kL} \equiv c_{-(k_F+k)}$ e $c_{kR} \equiv c_{k_F+k}$, o campo fermiônico se reescreve como

$$\psi(x) \approx e^{-ik_F x} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} c_{kL} + e^{ik_F x} \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ikx} c_{kR}, \quad (\text{B.3})$$

Figura B.1 – Esquema de linearização das bandas em torno dos pontos de Fermi.

Exige-se que os operadores de momenta quirais satisfaçam a álgebra

$$\{c_{k\eta}, c_{k'\eta'}^\dagger\} = \delta_{k,k'} \delta_{\eta,\eta'}, \quad (\text{B.4})$$

em que η aqui é L ou R , mas pode ser usado para representar outras propriedades que distinguem os férmions, como o spin.

Agora definimos os campos quirais esquerdo e direito (chamados, em inglês, de left-movers e right-movers):

$$\psi_L(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} c_{kL}; \quad (\text{B.5})$$

$$\psi_R(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} e^{ikx} c_{kR}. \quad (\text{B.6})$$

A partir da álgebra dos operadores de momenta, pode-se mostrar que, no limite de $L \rightarrow \infty$,

$$\{\psi_\eta(x), \psi_{\eta'}^\dagger(x')\} = \delta(x - x') \delta_{\eta,\eta'}. \quad (\text{B.7})$$

Em termos dos campos quirais, o campo original, apresentado na Eq.(B.1), e que agora chamaremos de campo físico para diferenciá-lo dos campos quirais, é

$$\psi(x) \approx e^{-ik_F x} \psi_L(x) + e^{ik_F x} \psi_R(x). \quad (\text{B.8})$$

Nas próximas passagens, discutimos como expressar os campos quirais, e o campo físico como consequência da Eq.(B.8), em termos de campos bosônicos. Como a forma do campo esquerdo é muito similar à do campo direito, nos concentramos no campo direito e derivamos as expressões para o campo esquerdo pela substituição $x \rightarrow -x$.

Os bósons da teoria são os operadores de flutuação de densidade

$$b_{q,\sigma}^\dagger \equiv \frac{1}{\sqrt{n_q}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_{k+q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}; \quad (\text{B.9})$$

e

$$b_{q,\sigma} \equiv \frac{1}{\sqrt{n_q}} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_{k-q,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}, \quad (\text{B.10})$$

em que q é um número maior que 0 da forma $q = 2\pi n_q/L$, sendo n_q um inteiro. O índice σ rotula os diferentes tipos de férmions, podendo indicar spin ou quiralidade (isto é, a qual ramo pertence o férmion). Pode-se verificar que os operadores de flutuação de densidade satisfazem uma álgebra bosônica:

$$[b_{q,\sigma}, b_{q',\sigma'}^\dagger] = \delta_{q,q'} \delta_{\sigma,\sigma'}; \quad (\text{B.11})$$

$$[b_{q,\sigma}^\dagger, b_{q',\sigma'}^\dagger] = 0; \quad (\text{B.12})$$

$$[b_{q,\sigma}, b_{q',\sigma'}] = 0. \quad (\text{B.13})$$

A esses operadores estão associados estados de vácuo, sobre os quais a atuação dos b_q 's leva a 0. Como a atuação de b_q diminui o momentum dos elétrons de q , um dos estados de vácuos é aquele cujos níveis abaixo do nível de Fermi estão ocupados, de forma que é impossível transferir um elétron para um nível com menor momentum. Este estado está ilustrado na Fig. B.2. Uma vez que, no processo de linearização, introduz-se infinitos níveis abaixo do nível de Fermi, convencionou-se que a carga desse estado é 0 e denota-se o estado por $|0\rangle_0$. A carga de outros estados é medida em relação à carga deste.

Há, entretanto, outros estados de vácuo: desde que, abaixo de um certo nível, todos os

Figura B.2 – Estado de vácuo de carga 0 para o ramo direito.

níveis estejam ocupados, é impossível reduzir o momentum dos elétrons. Se, para construir este estado de vácuo, é preciso adicionar (remover) N elétrons em $|0\rangle_0$, denota-se o estado por $|N\rangle_0$ ($|-N\rangle_0$). A Fig. B.3 ilustra o estado $|-3\rangle_0$.

Os operadores $b_q^\dagger$'s criam excitações partícula-buraco em cima dos estados de vácuo. Pode-se mostrar que o conjunto dos estados de vácuo e as excitações promovidas pelos $b_q^\dagger$'s formam uma base para espaço de Hilbert em problemas unidimensionais, o que nos permite expressar todas as grandezas físicas em termos de operadores bosônicos.

Os únicos ingredientes adicionais para o esquema da bosonização são os denominados fatores de Klein, que denotamos por F . Eles são responsáveis por alterar o número de partículas do sistema, já que os operadores bosônicos conservam este número. Os fatores de Klein são escolhidos para que comutem com todos os operadores bosônicos. A atuação

Figura B.3 – Estado de vácuo de carga -3 para o ramo direito.

deles sobre os estados de vácuo leva a:

$$F^\dagger |N\rangle_0 = |N+1\rangle_0 \quad (\text{B.14})$$

$$F |N\rangle_0 = |N-1\rangle_0. \quad (\text{B.15})$$

Essas propriedades e a regra de que comutam com todos os operadores bosônicos é suficiente para determinar como atuam sobre qualquer estado. Para ver isso, denotamos por $|N\rangle$ um estado qualquer do subespaço de carga N . Esse estado pode ser escrito como

$$|N\rangle = f[\{b_q^\dagger\}] |N\rangle_0, \quad (\text{B.16})$$

em que $f[\{b_q^\dagger\}]$ é uma função arbitrária dos operadores bosônicos. Para atuar F ou $F^\dagger$ sobre este estado, usamos a regra de comutação para passar o fator de Klein através de $f[\{b_q^\dagger\}]$:

$$F |N\rangle = f[\{b_q^\dagger\}] |N-1\rangle_0. \quad (\text{B.17})$$

Assim, os estados $F|N\rangle$ e $F^\dagger|N\rangle$ consistem nas mesmas excitações partícula-buraco de $|N\rangle$ recriadas em um estado de vácuo de carga diferente.

Antes de continuar, cabe uma observação. Assim como há operadores para o ramo esquerdo e operadores para o ramo direito, os fatores de Klein precisam ser distinguidos. Devemos escrever F_L e F_R para diferenciar os ramos quando for apropriado.

Para ilustrar em um caso mais simples como se escreve uma grandeza física em termos de operadores bosônicos, consideramos o operador densidade dos férmions do ramo direito:

$$\rho_R(x) \equiv: \psi_R^\dagger(x)\psi_R(x) :, \quad (\text{B.18})$$

em que $::$ denota ordenamento normal (é necessário considerar o ordenamento normal devido à introdução de infinitos níveis abaixo do nível de Fermi). Esse objeto pode ser escrito em termos de operadores fermiônicos a partir da Eq.(B.6). Alguma manipulação da expressão obtida e comparação com a expressão dos operadores bosônicos leva a:

$$\rho_R(x) = \sum_{q>0} \frac{\sqrt{n_q}}{L} \left(e^{iqx} b_{q,R} + e^{-iqx} b_{q,R}^\dagger \right) + \frac{N_R}{L}. \quad (\text{B.19})$$

A interpretação dessa igualdade é simples: N_R/L é a contribuição do fundo uniforme de carga, sobre o qual se faz excitações partícula-buraco. Ressaltamos que esta não é a densidade dos férmions originais, que envolve o produto de campos físicos, o que dá origem a termos que misturam ramos.

Desejamos obter uma expressão para o campo fermiônico diretamente. Para este fim, calculamos $[b_{q,R}, \psi_R(x)]$. Isso pode ser feito substituindo cada um dos operadores por suas expressões em termos de operadores de momentum fermiônicos. O resultado é

$$[b_{q,R}, \psi_R(x)] = -\frac{e^{-iqx}}{\sqrt{n_q}} \psi_R(x). \quad (\text{B.20})$$

Dessa expressão segue que

$$b_{q,R} \psi_R(x) |N\rangle_0 = -\frac{e^{-iqx}}{\sqrt{n_q}} \psi_R(x) |N\rangle_0, \quad (\text{B.21})$$

isto é, $\psi_R(x)|N\rangle_0$ é um estado coerente de $b_{q,R}$ com autovalor $\alpha_q(x) \equiv -e^{-iqx}/\sqrt{n_q}$ e,

portanto, deve ser da forma

$$\psi_R(x)|N\rangle_0 = \Lambda(x)e^{\sum_{q>0} \alpha_q(x)b_q^\dagger} F|N\rangle_0. \quad (\text{B.22})$$

O fator de Klein é necessário porque $\psi_R(x)$ diminui a carga de 1.

A função $\Lambda(x)$ é determinada calculando-se o elemento de matriz ${}_0\langle N-1|\psi_R(x)|N\rangle_0$ de duas formas e comparando os resultados: uma utilizando a Eq.(B.22) e outra utilizando a Eq.(B.6). Pela comparação, conclui-se que $\Lambda(x) = \exp(i2\pi Nx/L)/\sqrt{L}$. Assim,

$$\psi_R(x)|N\rangle_0 = \frac{e^{i2\pi Nx/L}}{\sqrt{L}} e^{\sum_{q>0} \alpha_q(x)b_q^\dagger} F|N\rangle_0. \quad (\text{B.23})$$

Para determinar completamente $\psi_R(x)$, precisamos de uma fórmula análoga a essa para um estado $|N\rangle$ qualquer. Essa fórmula, que não será demonstrada aqui, é conhecida como fórmula de Mattis-Mandelstam:

$$\psi_R(x)|N\rangle = \frac{F}{\sqrt{L}} e^{i2\pi Nx/L} e^{\sum_{q>0} \alpha_q(x)b_q^\dagger} e^{-\sum_{q>0} \alpha_q^*(x)b_q} |N\rangle. \quad (\text{B.24})$$

Se quisermos pensar em N como um operador, os termos devem ser escritos nesta forma, pois F e N não comutam. A identidade acima é uma identidade entre operadores, uma vez que os estados de vácuo e suas excitações formam um conjunto completo.

A expressão para $\psi_R(x)$ em termos dos operadores bosônicos nos leva a definir o campo

$$\varphi_R(x) \equiv -\frac{i}{\sqrt{2\pi}} \sum_{q>0} \alpha_q^*(x)b_q, e^{-aq/2}, \quad (\text{B.25})$$

em que a é um cutoff da ordem de k_F^{-1} e o fator $\exp(-aq/2)$ garante a convergência. Também definimos o campo

$$\phi_R(x) \equiv \varphi_R(x) + \varphi_R(x)^\dagger. \quad (\text{B.26})$$

A importância deste campo é que a densidade $\rho_R(x)$ se escreve em termos deste como

$$\rho_R(x) = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \partial_x \phi_R(x) + \frac{N}{L}. \quad (\text{B.27})$$

A fórmula de Mattis-Mandelstam, em termos de campos bosônicos, é dada por

$$\psi_R(x) = \frac{F}{\sqrt{L}} e^{i2\pi Nx/L} e^{-i\sqrt{2\pi}\varphi_R^\dagger(x)} e^{-i\sqrt{2\pi}\varphi_R(x)}. \quad (\text{B.28})$$

Frequentemente, uma forma mais útil de escrever $\psi_R(x)$ é

$$\psi_R(x) = \frac{F}{\sqrt{2\pi a}} e^{i2\pi Nx/L} e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_R(x)}. \quad (\text{B.29})$$

Assim como a fórmula original, esta não será demonstrada aqui.

Precisamos de expressões equivalentes para os campos do ramo esquerdo. Nosso ponto de partida é a Eq.(B.19). A versão dela para o ramo esquerdo é

$$\rho_L(x) = \sum_{q>0} \frac{\sqrt{n_q}}{L} \left(e^{-iqx} b_{q,L} + e^{iqx} b_{q,L}^\dagger \right) + \frac{N_L}{L}, \quad (\text{B.30})$$

em que fizemos a substituição $x \rightarrow -x$.

Como os argumentos das exponenciais que acompanham os operadores aparecem com sinais trocados em relação ao que vimos para o ramo direito, isto nos motiva a definir o campo $\varphi_L(x)$ como

$$\varphi_L(x) \equiv -\frac{i}{\sqrt{2\pi}} \sum_{q>0} \alpha_q^*(-x) b_{q,L} e^{-aq/2}. \quad (\text{B.31})$$

Novamente, a diferença aqui em relação a $\varphi_R(x)$ é apenas a mudança $x \rightarrow -x$.

Já o campo $\phi_L(x)$ permanece como

$$\phi_L(x) \equiv \varphi_L(x) + \varphi_L(x)^\dagger, \quad (\text{B.32})$$

pois a mudança $x \rightarrow -x$ já foi incorporada. Assim, onde aparecem $\varphi_R(x)$, $\varphi_R^\dagger(x)$ ou $\phi_R(x)$ nas expressões do ramo direito, devemos substituir simplesmente pelos respectivos campos do ramo esquerdo para encontrar a expressão análoga do ramo esquerdo. Conclui-se que o análogo da Eq.(B.27) é

$$\rho_L(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \partial_x \phi_L(x) + \frac{N_L}{L}, \quad (\text{B.33})$$

em que utilizamos que $-\partial_{-x} = \partial_x$.

Já a fórmula de Mattis-Mandelstam toma a forma

$$\psi_L(x) = \frac{F}{\sqrt{L}} e^{-i2\pi Nx/L} e^{-i\sqrt{2\pi}\varphi_L^\dagger(x)} e^{-i\sqrt{2\pi}\varphi_L(x)} \quad (\text{B.34})$$

ou

$$\psi_L(x) = \frac{F}{\sqrt{2\pi a}} e^{-i2\pi Nx/L} e^{-i\sqrt{2\pi}\phi_L(x)}. \quad (\text{B.35})$$

Em princípio, com as fórmulas de Mattis-Mandelstam, conseguimos escrever qualquer grandeza física desde que as expressemos em termos dos campos esquerdo e direito. Mas é mais usual escrever as expressões em termos de outros campos bosônicos em vez dos definidos acima. Em vez de trabalhar com ϕ_L e ϕ_R , definimos:

$$\phi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_L(x) - \phi_R(x)] \quad (\text{B.36})$$

$$\theta(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_L(x) + \phi_R(x)]. \quad (\text{B.37})$$

Esses ainda não são os campos mais usuais, entretanto, pois não consideramos o spin. Quando consideramos o spin, temos quatro campos: $\phi_\uparrow(x), \phi_\downarrow(x), \theta_\uparrow(x), \theta_\downarrow(x)$. Preferimos a seguinte combinação deles:

$$\phi_c(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_\uparrow(x) + \phi_\downarrow(x)]; \quad (\text{B.38})$$

$$\phi_s(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_\uparrow(x) - \phi_\downarrow(x)]; \quad (\text{B.39})$$

$$\theta_c(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\theta_\uparrow(x) + \theta_\downarrow(x)] \quad (\text{B.40})$$

$$\theta_s(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\theta_\uparrow(x) - \theta_\downarrow(x)]. \quad (\text{B.41})$$

A razão para o índice c é que, como se pode facilmente checar, a densidade de férmions quirais é proporcional a $\partial_x \phi_c(x)$ (a menos do fundo uniforme de carga):

$$\sum_\sigma [\rho_{L,\sigma}(x) + \rho_{R,\sigma}(x)] = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \partial_x \phi_c(x) + \sum_\sigma \frac{N_{L,\sigma} + N_{R,\sigma}}{L}. \quad (\text{B.42})$$

De forma análoga, a magnetização dos férmions quirais é proporcional a $\partial_x \phi_s(x)$, o que justifica o índice s .

Listamos abaixo algumas combinações de campos fermiônicos que encontramos frequentemente em termos dos campos bosônicos $\phi_c(x), \phi_s(x), \theta_c(x)$ e $\theta_s(x)$:

$$: \psi_{L,\uparrow}^\dagger(x) \psi_{L,\uparrow} : = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \partial_x [\phi_c(x) + \phi_s(x)] + \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \partial_x [\theta_c(x) + \theta_s(x)] \quad (\text{B.43})$$

$$: \psi_{L,\downarrow}^\dagger(x) \psi_{L,\downarrow} : = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \partial_x [\phi_c(x) - \phi_s(x)] + \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \partial_x [\theta_c(x) - \theta_s(x)] \quad (\text{B.44})$$

$$: \psi_{R,\uparrow}^\dagger(x) \psi_{R,\uparrow} : = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \partial_x [\phi_c(x) + \phi_s(x)] - \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \partial_x [\theta_c(x) + \theta_s(x)] \quad (\text{B.45})$$

$$: \psi_{L,\downarrow}^\dagger(x) \psi_{L,\downarrow} : = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \partial_x [\phi_c(x) - \phi_s(x)] - \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \partial_x [\theta_c(x) - \theta_s(x)]. \quad (\text{B.46})$$

Ao escrevermos as expressões acima, assumimos que estamos no subespaço de carga 0 para os dois ramos.

Apêndice C

Líquido de Luttinger para o modelo de Hubbard

Com o fim de ilustrar a técnica de bosonização descrita acima, aplicamos o formalismo ao modelo de Hubbard, descrito por

$$H = -2t \sum_k \cos k c_k^\dagger c_k + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}. \quad (\text{C.1})$$

Começamos pelo primeiro termo, o de energia cinética. Fixada a densidade, fica definido também o nível de Fermi pela condição

$$k_F = \frac{n}{2\pi}, \quad (\text{C.2})$$

em que n é a densidade de elétrons.

Linearizando a banda em torno dos dois pontos de Fermi, reescrevemos o termo cinético como

$$K = \sum_k -v_F(k + k_F) c_{-(k+k_F)}^\dagger c_{-(k+k_F)} + \sum_k v_F(k_F + k) c_{k_F+k}^\dagger c_{k+k_F}. \quad (\text{C.3})$$

Ignoramos os termos proporcionais a k_F , que representam o potencial químico, e usamos as definições de operadores de momentum quirais, $c_{kL} \equiv c_{-(k_F+k)}$ e $c_{kR} = c_{k_F+k}$:

$$K = v_F \sum_k k \left(: c_{kL}^\dagger c_{kL} : + : c_{kR}^\dagger c_{kR} : \right). \quad (\text{C.4})$$

O ordenamento normal é necessário porque introduzimos infinitos níveis de energia abaixo do nível de Fermi.

Vamos bosonizar este termo começando pelo ramo da direita. Esta parte pode ser escrita como

$$K_R = \int dx : \psi_R^\dagger(x)(-i\partial_x)\psi_R(x) : . \quad (\text{C.5})$$

Uma vez que produtos de campos em um mesmo ponto do espaço usualmente leva a divergências, reescrevemos K_R como o limite

$$K_R = \lim_{a \rightarrow 0} -i \int dx \psi_R^\dagger(x) \frac{\psi_R(x+a) - \psi_R(x)}{a}. \quad (\text{C.6})$$

Por simplicidade de notação, vamos ignorar o símbolo de ordenamento normal a partir de agora.

Como sabemos que $\psi_R^\dagger(x)\psi_R(x)$ é a densidade de férmions da direita, nos concentramos em $\psi_R^\dagger(x)\psi_R(x+a)$. A receita para calcular essa expressão é usar a fórmula de Mattis-Mandelstam indicada na Eq.(B.29) para cada um dos campos e expandir o resultado em a . Isso leva a

$$\psi^\dagger(x)\psi(x+\epsilon) = -\frac{i}{2\pi a} + \psi_R^\dagger(x)\psi_R(x) + \frac{ia}{2} (\partial_x \phi_R(x))^2 + \dots \quad (\text{C.7})$$

O primeiro termo da direita é uma divergência ultravioleta que desaparece quando consideramos o ordenamento normal; o segundo é a densidade; o terceiro termo é a contribuição não trivial; por fim, os próximos termos não foram escritos porque vão a 0 no limite em que $a \rightarrow 0$ ou no limite em que $L \rightarrow \infty$, ou não contribuem quando colocados na integral em x .

Assim, a parte cinética é dada por

$$K_R = \int dx \frac{v_F}{2} [\partial_x \phi_R(x)]^2. \quad (\text{C.8})$$

De forma análoga, a contribuição do ramo esquerdo é

$$K_L = \int dx \frac{v_F}{2} [\partial_x \phi_L(x)]^2. \quad (\text{C.9})$$

Se considerarmos agora o spin,

$$K = \sum_{\sigma} \frac{v_F}{2} \int dx \left[(\partial_x \phi_{R,\sigma})^2 + (\partial_x \phi_{L,\sigma})^2 \right]. \quad (\text{C.10})$$

Uma vez que os campos que aparecem na expressão acima estão relacionados com os campos ϕ_c, θ_c, ϕ_s e θ_s por transformações canônicas, podemos imediatamente escrever

$$K = \frac{v_F}{2} \int dx \left[(\partial_x \phi_c)^2 + (\partial_x \theta_c)^2 + (\partial_x \phi_s)^2 + (\partial_x \theta_s)^2 \right]. \quad (\text{C.11})$$

Essa expressão já está no formato desejado. A única modificação a ser feita é que é usual escrever $\partial_x \theta$ como Π devido às relações de comutação que esses campos satisfazem (que não foram discutidas aqui, mas podem ser vistas na Ref.(20)):

$$K = \frac{v_F}{2} \int dx \left[(\partial_x \phi_c)^2 + (\Pi_c)^2 + (\partial_x \phi_s)^2 + (\Pi_s)^2 \right]. \quad (\text{C.12})$$

Como esse Hamiltoniano é quadrático nos campos, corresponde a dois tipos de bósons livres, que chamamos de holon (devido aos campos de carga) e spinon (devido aos campos de spin).

Vamos agora bosonizar a interação. O resultado interessante é que o Hamiltoniano final permanece quadrático nos campos: a interação apenas renormaliza a velocidade para cada campo.

Tomando o limite do contínuo, escrevemos o termo de interação como

$$V = U \int dx \psi_{\uparrow}^{\dagger}(x) \psi_{\uparrow}(x) \psi_{\downarrow}^{\dagger}(x) \psi_{\downarrow}(x). \quad (\text{C.13})$$

Escrevemos cada um dos campos em termos dos campos quirais, a partir da Eq.(B.8), e coletamos os termos não oscilantes. As combinações que aparecem são as seguintes (omitimos o argumento dos campos por brevidade):

$$\begin{aligned}\psi_{L,\uparrow}^\dagger \psi_{L,\uparrow} \psi_{L,\downarrow}^\dagger \psi_{L,\downarrow} &= \frac{1}{8\pi} [(\partial_x \phi_c)^2 - (\partial_x \phi_s)^2 + (\partial_x \theta_c)^2 - (\partial_x \theta_s)^2] \\ &\quad + \frac{1}{4\pi} [\partial_x \phi_c \partial_x \theta_c - \partial_x \phi_s \partial_x \theta_s]\end{aligned}\quad (\text{C.14})$$

$$\begin{aligned}\psi_{R,\uparrow}^\dagger \psi_{R,\uparrow} \psi_{R,\downarrow}^\dagger \psi_{R,\downarrow} &= \frac{1}{8\pi} [(\partial_x \phi_c)^2 - (\partial_x \phi_s)^2 + (\partial_x \theta_c)^2 - (\partial_x \theta_s)^2] \\ &\quad - \frac{1}{4\pi} [\partial_x \phi_c \partial_x \theta_c - \partial_x \phi_s \partial_x \theta_s]\end{aligned}\quad (\text{C.15})$$

$$\begin{aligned}\psi_{L,\uparrow}^\dagger \psi_{L,\uparrow} \psi_{R,\downarrow}^\dagger \psi_{R,\downarrow} &= \frac{1}{8\pi} [(\partial_x \phi_c)^2 - (\partial_x \phi_s)^2 - (\partial_x \theta_c)^2 + (\partial_x \theta_s)^2] \\ &\quad + \frac{1}{4\pi} [\partial_x \phi_c \partial_x \theta_s - \partial_x \phi_s \partial_x \theta_c]\end{aligned}\quad (\text{C.16})$$

$$\begin{aligned}\psi_{R,\uparrow}^\dagger \psi_{R,\uparrow} \psi_{L,\downarrow}^\dagger \psi_{L,\downarrow} &= \frac{1}{8\pi} [(\partial_x \phi_c)^2 - (\partial_x \phi_s)^2 - (\partial_x \theta_c)^2 + (\partial_x \theta_s)^2] \\ &\quad - \frac{1}{4\pi} [\partial_x \phi_c \partial_x \theta_s - \partial_x \phi_s \partial_x \theta_c]\end{aligned}\quad (\text{C.17})$$

Juntando todos esses termos, o Hamiltoniano interagente se torna

$$V = \frac{U}{2\pi} \int dx [(\partial_x \phi_c)^2 - (\partial_x \phi_s)^2]. \quad (\text{C.18})$$

O Hamiltoniano completo toma a forma

$$H = \frac{v_F}{2} \int dx \left[\Pi_c^2 + \left(1 + \frac{U}{\pi v_F}\right) (\partial_x \phi_c)^2 + \Pi_s^2 + \left(1 - \frac{U}{\pi v_F}\right) (\partial_x \phi_s)^2 \right], \quad (\text{C.19})$$

que ainda é quadrático nos bósons, mas com velocidades diferentes para os holons e para os spinons. Esse Hamiltoniano é o denominado modelo de Luttinger. Há uma forma mais geral de escrever o modelo, que foi apresentada na Eq.(2.30), que não se restringe apenas ao modelo de Hubbard.

Na verdade, há duas combinações adicionais que também resultam em termos não oscilantes: $\psi_{L,\uparrow}^\dagger \psi_{R,\uparrow} \psi_{R,\downarrow}^\dagger \psi_{L,\downarrow}$ e $\psi_{R,\uparrow}^\dagger \psi_{L,\uparrow} \psi_{L,\downarrow}^\dagger \psi_{R,\downarrow}$, que, escritos em função dos campos bosônicos, são:

$$\psi_{L,\uparrow}^\dagger \psi_{R,\uparrow} \psi_{R,\downarrow}^\dagger \psi_{L,\downarrow} = \frac{1}{(2\pi a)^2} e^{i2\sqrt{2\pi}\phi_S}; \quad (\text{C.20})$$

$$\psi_{R,\uparrow}^\dagger \psi_{L,\uparrow} \psi_{L,\downarrow}^\dagger \psi_{R,\downarrow} = \frac{1}{(2\pi a)^2} e^{-i2\sqrt{2\pi}\phi_S}. \quad (\text{C.21})$$

Juntos, esses objetos contribuem com um termo proporcional a $\cos(\sqrt{8\pi}\phi_S)$. Não discutiremos este termo em detalhes, mas é possível mostrar que dadas as simetrias do modelo de Hubbard, este termo pode ser ignorado. Em linhas gerais, a simetria SU(2) garante

que, por argumentos de grupo de renormalização, a constante de acoplamento deste termo vai a 0 no limite de baixas energias.

Apêndice D

Espectro do mágnon para redes com dois sítios por célula unitária

Nesta seção, discutimos como determinar o espectro dos mágnons na fase ferromagnética do modelo com dois sítios por célula unitária indicado na Eq.(2.29) para uma dopagem eletrônica arbitrária. A ideia é procurar modos coletivos harmônicos para as excitações de spin em baixas energias, isto é, modos que satisfaçam a Eq.(D.24). Isso leva a um espectro $\omega(q)$, que é o espectro dos mágnons.

Antes de determinar o espectro dos mágnons propriamente dito, fazemos algumas definições que simplificarão a álgebra. Definindo os spinores

$$g_{k,\sigma} \equiv \begin{bmatrix} g_{1,k,\sigma} \\ g_{2,k,\sigma} \end{bmatrix} \quad (\text{D.1})$$

e

$$c_{j,\sigma} \equiv \begin{bmatrix} c_{2j,\sigma} \\ c_{2j+1,\sigma} \end{bmatrix}, \quad (\text{D.2})$$

nosso ponto de partida são as Eq. (2.31) e (2.32), que, após invertidas e escritas em termos

dos spinores, levam a

$$g_{k,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{bmatrix} -\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) & \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-ik2j} & 0 \\ 0 & e^{-ik(2j+1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{2j,\sigma} \\ c_{2j+1,\sigma} \end{bmatrix}. \quad (\text{D.3})$$

A Eq.(D.3) nos leva a definir as matrizes

$$\Lambda(k) \equiv \begin{bmatrix} -\sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \\ \cos\left(\frac{\theta_k}{2}\right) & \sin\left(\frac{\theta_k}{2}\right) \end{bmatrix}, \quad (\text{D.4})$$

$$\mathcal{F}(j, k) \equiv \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{bmatrix} e^{-ik2j} & 0 \\ 0 & e^{-ik(2j+1)} \end{bmatrix} \quad (\text{D.5})$$

e

$$R(j, k) \equiv \Lambda(k) \mathcal{F}(j, k). \quad (\text{D.6})$$

Assim, a Eq.(D.3) assume a forma simples

$$g_{k,\sigma} = \sum_j R(j, k) c_{j,\sigma}. \quad (\text{D.7})$$

Similarmente,

$$g_{k,\sigma}^\dagger = \sum_j c_{j,\sigma}^\dagger R^\dagger(j, k), \quad (\text{D.8})$$

em que

$$g_{k,\sigma}^\dagger = \begin{bmatrix} g_{1,k,\sigma}^\dagger & g_{2,k,\sigma}^\dagger \end{bmatrix}, \quad (\text{D.9})$$

$$c_{j,\sigma}^\dagger = \begin{bmatrix} c_{2j,\sigma}^\dagger & c_{2j+1,\sigma}^\dagger \end{bmatrix}, \quad (\text{D.10})$$

e $R^\dagger(j, k)$ é o conjugado Hermitiano de $R(j, k)$.

As matrizes que definimos possuem algumas propriedades que usaremos mais adiante.

Pode-se verificar que $\Lambda(k)$ satisfaz:

$$\Lambda^\dagger(k) = \Lambda(k); \quad (\text{D.11})$$

$$\Lambda^\dagger(k) \Lambda(k) = \mathbb{1}. \quad (\text{D.12})$$

Já $\mathcal{F}(j, k)$ satisfaz:

$$\sum_k \mathcal{F}^\dagger(j, k) \mathcal{F}(\ell, k) = \delta_{j, \ell} \mathbb{1}; \quad (\text{D.13})$$

$$\sum_j \mathcal{F}^\dagger(j, k) \mathcal{F}(j, q) = \delta_{k, q} \mathbb{1}. \quad (\text{D.14})$$

Dessas relações, seguem as seguintes propriedades de $R(j, k)$:

$$R^\dagger(j, k) = \mathcal{F}^\dagger(j, k) \Lambda(k); \quad (\text{D.15})$$

$$R^\dagger(j, k) R(j, k) = \mathcal{F}^\dagger(j, k) \mathcal{F}(j, k); \quad (\text{D.16})$$

$$\sum_k R^\dagger(j, k) R(\ell, k) = \delta_{j, \ell} \mathbb{1}; \quad (\text{D.17})$$

$$\sum_j R^\dagger(j, k) R(j, q) = \delta_{k, q} \mathbb{1}. \quad (\text{D.18})$$

É conveniente também escrever $c_{j, \sigma}$ e $c_{j, \sigma}^\dagger$ em termos dos g 's, invertendo as Eq.(D.7) e (D.8):

$$c_{j, \sigma} = \sum_k R^\dagger(j, k) g_{k, \sigma}; \quad (\text{D.19})$$

$$c_{j, \sigma}^\dagger = \sum_k g_{k, \sigma}^\dagger R(j, k). \quad (\text{D.20})$$

Estabelecidas essas relações, voltamos à determinação do espectro do mágnon.

Na fase ferromagnética, um ansatz para o estado fundamental do modelo da Eq.(2.29) é

$$|\text{GS}\rangle = \left(\prod_k' g_{1, k, \uparrow}^\dagger \prod_k'' g_{2, k, \uparrow}^\dagger \right) |0\rangle. \quad (\text{D.21})$$

As linhas nos produtos indicam que o índice k está condicionado à dopagem. Por exemplo, em preenchimento quarto, o primeiro produto é sobre todo k e não há o segundo produto porque a banda 2 está vazia.

Sobre este estado realizamos excitações em que uma partícula de momentum k e spin $\uparrow$ é destruída, e uma de momentum $k + q$ e spin $\downarrow$ é criada em seu lugar. Nessas condições, o modo coletivo mais geral é

$$\Omega_q^\dagger = \sum_k \begin{bmatrix} g_{1, k+q, \downarrow}^\dagger & g_{2, k+q, \downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{11, k} & F_{12, k} \\ F_{21, k} & F_{22, k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{1, k, \uparrow} \\ g_{2, k, \uparrow} \end{bmatrix}, \quad (\text{D.22})$$

ou, simbolicamente,

$$\Omega_q^\dagger = \sum_k g_{k+q,\downarrow}^\dagger F(k) g_{k,\uparrow} \quad (\text{D.23})$$

As amplitudes F 's são escolhidas para que a excitação esteja associada a uma frequência bem definida ω_q , o que é imposto pela condição

$$[H, \Omega_q^\dagger] = \omega_q \Omega_q^\dagger, \quad (\text{D.24})$$

como já havia sido explicado no Capítulo 2. Nas próximas passagens, vamos, basicamente, determinar o lado esquerdo da Eq. (D.24).

Começamos pela contribuição da energia cinética, que segue de imediato de se atuar $K\Omega_q^\dagger - \Omega_q^\dagger K$ no estado fundamental:

$$[K, \Omega_q^\dagger] = \sum_k \begin{bmatrix} g_{1,k+q,\downarrow}^\dagger & g_{2,k+q,\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{11,k}(\epsilon_{1,k+q} - \epsilon_{1,k}) & F_{12,k}(\epsilon_{1,k+q} - \epsilon_{2,k}) \\ F_{21,k}(\epsilon_{2,k+q} - \epsilon_{1,k}) & F_{22,k}(\epsilon_{2,k+q} - \epsilon_{2,k}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{1,k,\uparrow} \\ g_{2,k,\uparrow} \end{bmatrix}. \quad (\text{D.25})$$

Definindo

$$G(k, q) \equiv \begin{bmatrix} F_{11,k}(\epsilon_{1,k+q} - \epsilon_{1,k}) & F_{12,k}(\epsilon_{1,k+q} - \epsilon_{2,k}) \\ F_{21,k}(\epsilon_{2,k+q} - \epsilon_{1,k}) & F_{22,k}(\epsilon_{2,k+q} - \epsilon_{2,k}) \end{bmatrix}, \quad (\text{D.26})$$

segue que

$$[K, \Omega_q^\dagger] = \sum_k g_{k+q,\downarrow}^\dagger G(k, q) g_{k,\uparrow} \quad (\text{D.27})$$

O comutador com o termo de interação é mais complicado, pois envolve mais operadores. Como a interação está expressa em termos de operadores de sítios e $\Omega_q^\dagger$ está expresso em termos de operadores de momentum, é preciso mudar a representação de um deles. Escolhemos representar $\Omega_q^\dagger$ em termos de operadores de sítios. No fim, será preciso voltar à representação de momentum, uma vez que precisaremos comparar os resultados com $\Omega_q^\dagger$ para determinar ω_q . Combinando as Eq. (D.7), (D.8) e (D.23),

$$\Omega_q^\dagger = \sum_k \sum_{j,\ell} c_{j,\downarrow}^\dagger R^\dagger(j, k+q) F(k) R(\ell, k) c_{\ell,\uparrow}. \quad (\text{D.28})$$

O termo de interação é $V = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$. Assim, devemos calcular $U \sum_i [n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \Omega_q^\dagger]$.

Notamos que $\Omega_q^\dagger$ é uma combinação de $c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow}$'s. Usamos a seguinte identidade:

$$\sum_i \left[n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} \right] = n_{j,\uparrow} c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} - c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} n_{\ell,\downarrow}. \quad (\text{D.29})$$

Vamos simplificar este objeto antes de seguir com o cálculo de $[V, \Omega_q^\dagger]$. Usamos o teorema de Wick para reescrever os termos da direita da Eq. (D.29). O teorema de Wick nos diz que uma sequência de operadores de criação e destruição pode ser escrita como uma soma do ordenamento normal desta sequência e algumas contrações. Enquanto os termos com contrações são tornam quadráticos, os termos devido ao ordenamento normal permanecem quárticos e são uma dificuldade. Fazemos uma aproximação: desprezamos esses termos, já que seu valor esperado com respeito ao vácuo é 0 (vácuo, neste contexto, é o estado ferromagnético).

Em síntese, usamos o teorema de Wick para reescrever a Eq. (D.29) e mantemos apenas termos quadráticos. Nesta aproximação, o segundo termo da direita pode ser ignorado, pois $\langle n_{\ell,\downarrow} \rangle = \langle c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\downarrow} \rangle = 0$, em que $\langle \rangle$ denota média sobre o estado ferromagnético. Resta o primeiro termo da direita, que contribui com

$$n_{j,\uparrow} c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} \approx \langle n_{j,\uparrow} \rangle c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} - \langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} \rangle c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow}. \quad (\text{D.30})$$

Com essa aproximação, a Eq. (D.29) se reescreve como

$$\sum_i \left[n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} \right] \approx \langle n_{j,\uparrow} \rangle c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} - \langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} \rangle c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow}. \quad (\text{D.31})$$

Agora voltamos à tarefa original, que é calcular $U \sum_i [n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \Omega_q^\dagger]$.

Como dito, $\Omega_q^\dagger$ é uma combinação de $c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow}$'s, que contribuirão com objetos como os da direita da Eq. (D.31) quando calcularmos $[V, \Omega_q^\dagger]$. Como há dois termos na direita da Eq. (D.31), separamos o comutador em duas contribuições

$$[V, \Omega_q^\dagger] = [V, \Omega_q^\dagger]_1 + [V, \Omega_q^\dagger]_2, \quad (\text{D.32})$$

em que $[V, \Omega_q^\dagger]_1$ são os termos provenientes de $\langle n_{j,\uparrow} \rangle c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow}$ e $[V, \Omega_q^\dagger]_2$ são os termos provenientes de $-\langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} \rangle c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow}$.

A contribuição $[V, \Omega_q^\dagger]_1$ é simples: cada $c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow}$ leva a $\langle n_{j,\uparrow} \rangle c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow}$, isto é, basta substi-

tuir $c_{2j,\downarrow}^\dagger$ por $\langle n_{2j,\uparrow} \rangle c_{2j,\downarrow}^\dagger$ e $c_{2j+1,\downarrow}^\dagger$ por $\langle n_{2j+1,\uparrow} \rangle c_{2j+1,\downarrow}^\dagger$. Isto equivale à substituição

$$\begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} c_{2j}^\dagger & c_{2j+1}^\dagger \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \langle n_{2j,\uparrow} \rangle & 0 \\ 0 & \langle n_{2j+1,\uparrow} \rangle \end{bmatrix}$$

Definindo M como

$$M \equiv \begin{bmatrix} \langle n_{2j,\uparrow} \rangle & 0 \\ 0 & \langle n_{2j+1,\uparrow} \rangle \end{bmatrix}, \quad (\text{D.33})$$

segue que

$$[V, \Omega_q^\dagger]_1 = U \sum_k \sum_{j,\ell} c_{j,\downarrow}^\dagger M R^\dagger(j, k+q) F(k) R(\ell, k) c_{\ell,\uparrow}, \quad (\text{D.34})$$

que obtivemos substituindo $c_{j,\downarrow}$ por $c_{j,\downarrow} M$ na expressão de $\Omega_q^\dagger$ indicada na Eq. (D.28) e multiplicando-a por U . Devido à simetria de translação a cada dois sítios, M independe de j .

Agora voltamos à representação de momentum. Com este fim, usamos que $\sum_\ell R(\ell, k) c_{\ell,\uparrow} = g_{k,\uparrow}$, escrevemos a matriz $R^\dagger(j, k+q)$ em termos de $\mathcal{F}^\dagger(j, k+q)$ e $\Lambda(k+q)$, e substituímos $c_{j,\downarrow}^\dagger$ pelo lado direito da Eq. (D.20):

$$[V, \Omega_q^\dagger]_1 = U \sum_k \sum_j \sum_p g_{p,\downarrow}^\dagger \Lambda(p) \mathcal{F}(j, p) M \mathcal{F}^\dagger(j, k+q) \Lambda(k+q) F(k) g_{k,\uparrow} \quad (\text{D.35})$$

As matrizes $\mathcal{F}(j, p)$ e M comutam, pois são diagonais. Trocamos a ordem delas e usamos que $\sum_j \mathcal{F}(j, p) \mathcal{F}^\dagger(j, k+q) = \delta_{p, k+q} \mathbb{1}$ para eliminar a soma em p :

$$[V, \Omega_q^\dagger]_1 = U \sum_k g_{k+q,\downarrow}^\dagger \Lambda(k+q) M \Lambda(k+q) F(k) g_{k,\uparrow}. \quad (\text{D.36})$$

Esse resultado está no formato desejado, pois pode ser facilmente comparado com $\Omega_q^\dagger$. Resta, entretanto, a contribuição $[V, \Omega_q^\dagger]_2$.

$[V, \Omega_q^\dagger]_2$ é a parcela do comutador com a interação gerada pelos termos da forma $-c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow} \langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} \rangle$ (que reordenamos para deixar objetos com índice j de um lado e objetos com índice ℓ do outro). Cada fator $c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow}$ de $\Omega_q^\dagger$ contribui com $-c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow} \langle c_{j,\uparrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow} \rangle$ quando tomamos o comutador.

Desconsideramos, por um momento, a média. Desde que a ordem dos operadores seja mantida, esta pode ser facilmente recuperada. Assim, cada $c_{j,\downarrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow}$ leva a $-c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{\ell,\uparrow}$.

Isto equivale à seguinte substituição na expressão de $\Omega_q^\dagger$:

$$\begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger \end{bmatrix} \rightarrow - \begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} c_{2j,\uparrow}^\dagger & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} c_{2j+1,\uparrow}^\dagger \end{bmatrix}.$$

Definimos

$$\left[c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow} c_{j,\uparrow}^\dagger \right]^\dagger \equiv \begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} c_{2j,\uparrow}^\dagger & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} c_{2j+1,\uparrow}^\dagger \end{bmatrix}. \quad (\text{D.37})$$

Essa notação é inconveniente e vamos nos livrar dela logo que possível. Por hora, temos que

$$\left[V, \Omega_q^\dagger \right]_2 = -U \sum_k \sum_{j,\ell} \left[c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow} c_{j,\uparrow}^\dagger \right]^\dagger R^\dagger(j, k+q) F(k) R(\ell, k) c_{\ell,\uparrow}. \quad (\text{D.38})$$

A Eq. (D.38) só é válida quando se toma a média sobre os dois últimos operadores. Por dificuldade de notação, a média não está escrita, mas será tomada assim que for possível explicitá-la. Usamos a soma em ℓ para simplificar um pouco mais:

$$\left[V, \Omega_q^\dagger \right]_2 = -U \sum_k \sum_j \left[c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow} c_{j,\uparrow}^\dagger \right]^\dagger R^\dagger(j, k+q) F(k) g_{k,\uparrow}. \quad (\text{D.39})$$

Para continuar simplificações, é preciso lidar com $\left[c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow} c_{j,\uparrow}^\dagger \right]^\dagger$. Escrevendo este objeto em sua forma explícita,

$$\left[V, \Omega_q^\dagger \right]_2 = -U \sum_k \sum_j \begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} c_{2j,\uparrow}^\dagger & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} c_{2j+1,\uparrow}^\dagger \end{bmatrix} R^\dagger(j, k+q) F(k) g_{k,\uparrow}. \quad (\text{D.40})$$

Agora usamos a média sobre os dois últimos operadores de cada termo para simplificar a expressão. Convém voltar à representação de momentum, já que o operador que está à direita é $g_{1,k,\uparrow}$ ou $g_{2,k,\downarrow}$ e as médias são relativamente simples na representação de momentum: $\langle g_{1(2),k,\uparrow}^\dagger g_{1(2),k,\uparrow} \rangle = 1$ se o nível k da banda inferior (superior) estiver ocupado e 0 se estiver desocupado. Assim, passamos $c_{2j,\uparrow}^\dagger$ e $c_{2j+1,\uparrow}^\dagger$ para a representação de momentum usando as relações:

$$c_{2j,\uparrow}^\dagger = \sum_p \left(\Lambda_{11}(p) g_{1,k,\uparrow}^\dagger + \Lambda_{12}(p) g_{2,p,\uparrow}^\dagger \right) \mathcal{F}_{11}(j, p) \quad (\text{D.41})$$

$$c_{2j+1,\uparrow}^\dagger = \sum_p \left(\Lambda_{21}(p) g_{1,p,\uparrow}^\dagger + \Lambda_{22}(p) g_{2,p,\uparrow}^\dagger \right) \mathcal{F}_{22}(j, p) \quad (\text{D.42})$$

Agora $[V, \Omega_q^\dagger]_2$ se reescreve como

$$[V, \Omega_q^\dagger]_2 = -U \sum_{k,p} \sum_j \left[c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} \sum_\alpha \Lambda_{1\alpha}(p) g_{\alpha,p,\uparrow}^\dagger \quad c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} \sum_\alpha \Lambda_{2\alpha}(p) g_{\alpha,p,\uparrow}^\dagger \right] \\ \times \mathcal{F}(j,p) R^\dagger(j, k+q) F(k) g_{k,\uparrow}. \quad (\text{D.43})$$

Note que foi possível separar a matriz $\mathcal{F}(j,p)$, não sendo necessário escrever os elementos $\mathcal{F}_{11}(j,p)$ e $\mathcal{F}_{22}(j,p)$ explicitamente como nas Eq. (D.41) e (D.42). Isto ocorreu porque $\mathcal{F}(j,p)$ é diagonal.

Para facilitar o processo de tomar a média, quebramos o termo da direita da Eq. (D.43) em duas partes:

$$[V, \Omega_q^\dagger]_2 = -U \sum_{k,p} \sum_j \left[c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} \Lambda_{11}(p) g_{1,p,\uparrow}^\dagger \quad c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} \Lambda_{21}(p) g_{1,p,\uparrow}^\dagger \right] \\ \times \mathcal{F}(j,p) R^\dagger(j, k+q) F(k) g_{k,\uparrow} \quad (\text{D.44}) \\ -U \sum_{k,p} \sum_j \left[c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} \Lambda_{12}(p) g_{2,p,\uparrow}^\dagger \quad c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} \Lambda_{22}(p) g_{2,p,\uparrow}^\dagger \right] \\ \times \mathcal{F}(j,p) R^\dagger(j, k+q) F(k) g_{k,\uparrow}.$$

Nesse formato, o primeiro termo da Eq. (D.44) só envolve $g_{1,p,\uparrow}^\dagger$ e o segundo termo só envolve $g_{2,p,\uparrow}^\dagger$. Isso permite implementar imediatamente as médias. Como exemplo, considere o primeiro termo. O operador $g_{1,p,\uparrow}^\dagger$ deve aparecer com seu par $g_{1,p,\uparrow}$. Isto só é possível se $k = p$, o que elimina a soma em k . Uma vez implementada a média, o par $g_{1,p,\uparrow}^\dagger g_{1,p,\uparrow}$ se torna 1 se p for um nível preenchido: a soma em p fica é restrita pelo preenchimento da banda inferior. Por fim, a combinação $g_{1,p,\uparrow}^\dagger g_{2,p,\uparrow}$ é 0 quando se considera a média. Em síntese, podemos eliminar a soma em k , trocar k por p , restringir a soma em p de acordo com o preenchimento da banda inferior, substituir $g_{1,p,\uparrow}^\dagger$ por 1 e $g_{k,\uparrow}$ por $[1 \ 0]^\dagger$.

Similarmente, para implementar a média no segundo termo da Eq. (D.44), eliminamos a soma em k , restringimos a soma em p de acordo com o preenchimento da banda superior, substituímos $g_{2,p,\uparrow}^\dagger$ por 1 e $g_{k,\uparrow}$ por $[0 \ 1]^\dagger$. Finalmente a expressão para $[V, \Omega_q^\dagger]$ se torna

$$\begin{aligned}
[V, \Omega_q^\dagger]_2 &= -U \sum_p' \sum_j \begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} \Lambda_{11}(p) & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} \Lambda_{21}(p) \end{bmatrix} \\
&\quad \times \mathcal{F}(j, p) R^\dagger(j, p+q) F(p) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&\quad -U \sum_p'' \sum_j \begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} \Lambda_{12}(p) & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} \Lambda_{22}(p) \end{bmatrix} \\
&\quad \times \mathcal{F}(j, p) R^\dagger(j, p+q) F(p) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{D.45}$$

Antes de manipular os operadores de sítios que restaram, podemos fazer mais uma simplificação:

$$\begin{aligned}
[V, \Omega_q^\dagger]_2 &= -U \sum_j \begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} \end{bmatrix} \\
&\quad \times \sum_p' \begin{bmatrix} \Lambda_{11}(p) & 0 \\ 0 & \Lambda_{21}(p) \end{bmatrix} \mathcal{F}(j, p) R^\dagger(j, p+q) F(p) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&\quad -U \sum_j \begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} \end{bmatrix} \\
&\quad \times \sum_p'' \begin{bmatrix} \Lambda_{12}(p) & 0 \\ 0 & \Lambda_{22}(p) \end{bmatrix} \mathcal{F}(j, p) R^\dagger(j, p+q) F(p) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{D.46}$$

ou simplesmente

$$\begin{aligned}
[V, \Omega_q^\dagger]_2 &= -U \sum_j \begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} \end{bmatrix} \\
&\quad \times \left\{ \sum_p' \begin{bmatrix} \Lambda_{11}(p) & 0 \\ 0 & \Lambda_{21}(p) \end{bmatrix} \mathcal{F}(j, p) R^\dagger(j, p+q) F(p) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right. \\
&\quad \left. + \sum_p'' \begin{bmatrix} \Lambda_{12}(p) & 0 \\ 0 & \Lambda_{22}(p) \end{bmatrix} \mathcal{F}(j, p) R^\dagger(j, p+q) F(p) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\}.
\end{aligned} \tag{D.47}$$

Usamos ainda que $R^\dagger(j, p+q) = \mathcal{F}^\dagger(j, p+q)\Lambda(p+q)$ e reordenamos as matrizes diagonais:

$$\begin{aligned} [V, \Omega_q^\dagger]_2 &= -U \sum_j \begin{bmatrix} c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} & c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} \end{bmatrix} \\ &\times \left\{ \sum_p' \mathcal{F}(j, p) \mathcal{F}^\dagger(j, p+q) \begin{bmatrix} \Lambda_{11}(p) & 0 \\ 0 & \Lambda_{21}(p) \end{bmatrix} \Lambda(p+q) F(p) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right. \\ &\left. + \sum_p'' \mathcal{F}(j, p) \mathcal{F}^\dagger(j, p+q) \begin{bmatrix} \Lambda_{12}(p) & 0 \\ 0 & \Lambda_{22}(p) \end{bmatrix} \Lambda(p+q) F(p) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{D.48})$$

Agora resta substituir $c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow}$ e $c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow}$ por expressões em termos de g 's:

$$c_{2j,\downarrow}^\dagger c_{2j,\uparrow} = \sum_{k_1, k_2} \sum_{\alpha, \beta} \Lambda_{1\alpha}(k_1) g_{\alpha, k_1, \downarrow} \Lambda_{1\beta}(k_2) g_{\beta, k_2, \uparrow} \mathcal{F}_{11}^\dagger(j, k_1) \mathcal{F}_{11}(j, k_2); \quad (\text{D.49})$$

$$c_{2j+1,\downarrow}^\dagger c_{2j+1,\uparrow} = \sum_{k_1, k_2} \sum_{\alpha, \beta} \Lambda_{2\alpha}(k_1) g_{\alpha, k_1, \downarrow} \Lambda_{2\beta}(k_2) g_{\beta, k_2, \uparrow} \mathcal{F}_{22}^\dagger(j, k_1) \mathcal{F}_{22}(j, k_2). \quad (\text{D.50})$$

Fazendo a substituição, obtemos

$$\begin{aligned} [V, \Omega_q^\dagger]_2 &= -U \times \\ &\sum_{j, k_1, k_2} \begin{bmatrix} g_{k_1, \downarrow} \tilde{\Lambda}_1(k_1, k_2) g_{k_2, \uparrow} & g_{k_1, \downarrow} \tilde{\Lambda}_2(k_1, k_2) g_{k_2, \uparrow} \end{bmatrix} \mathcal{F}^\dagger(j, k_1 - k_2) \\ &\times \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p' \mathcal{F}(j, p) \mathcal{F}^\dagger(j, p+q) \begin{bmatrix} \Lambda_{11}(p) & 0 \\ 0 & \Lambda_{21}(p) \end{bmatrix} \Lambda(p+q) F(p) \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right. \\ &\left. + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p'' \mathcal{F}(j, p) \mathcal{F}^\dagger(j, p+q) \begin{bmatrix} \Lambda_{12}(p) & 0 \\ 0 & \Lambda_{22}(p) \end{bmatrix} \Lambda(p+q) F(p) \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{D.51})$$

em que já utilizamos novamente que $\mathcal{F}$ e $\mathcal{F}^\dagger$ são matrizes diagonais e que $\mathcal{F}^\dagger(j, k_1) \mathcal{F}(j, k_2) = \mathcal{F}^\dagger(j, k_1 - k_2)/\sqrt{N}$ (que pode ser checado facilmente a partir da Eq. (D.5)) e definimos

$$\tilde{\Lambda}_1(k_1, k_2) \equiv \begin{bmatrix} \Lambda_{11}(k_1) \Lambda_{11}(k_2) & \Lambda_{11}(k_1) \Lambda_{12}(k_2) \\ \Lambda_{12}(k_1) \Lambda_{11}(k_2) & \Lambda_{12}(k_1) \Lambda_{12}(k_2) \end{bmatrix} \quad (\text{D.52})$$

e

$$\tilde{\Lambda}_2(k_1, k_2) \equiv \begin{bmatrix} \Lambda_{21}(k_1) \Lambda_{21}(k_2) & \Lambda_{21}(k_1) \Lambda_{22}(k_2) \\ \Lambda_{22}(k_1) \Lambda_{21}(k_2) & \Lambda_{22}(k_1) \Lambda_{22}(k_2) \end{bmatrix} \quad (\text{D.53})$$

Usando a relação

$$\sum_j \mathcal{F}^\dagger(j, k_1 - k_2) \mathcal{F}(j, p) \mathcal{F}^\dagger(j, p + q) = \frac{1}{\sqrt{N}} \delta_{k_1, k_2 + q} \mathbb{1}, \quad (\text{D.54})$$

segue que

$$\begin{aligned} [V, \Omega_q^\dagger]_2 &= -U \sum_k \begin{bmatrix} g_{k+q, \downarrow} \tilde{\Lambda}_1(k+q, k) g_{k, \uparrow} & g_{k+q, \downarrow} \tilde{\Lambda}_2(k+q, k) g_{k, \uparrow} \end{bmatrix} \\ &\times \frac{1}{\pi} \left\{ \int' dp \begin{bmatrix} \Lambda_{11}(p) \Lambda_{11}(p+q) & \Lambda_{11}(p) \Lambda_{12}(p+q) \\ \Lambda_{21}(p) \Lambda_{21}(p+q) & \Lambda_{21}(p) \Lambda_{22}(p+q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{11,p} \\ F_{21,p} \end{bmatrix} \right. \\ &\left. + \int'' dp \begin{bmatrix} \Lambda_{12}(p) \Lambda_{11}(p+q) & \Lambda_{12}(p) \Lambda_{12}(p+q) \\ \Lambda_{22}(p) \Lambda_{21}(p+q) & \Lambda_{22}(p) \Lambda_{22}(p+q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{12,p} \\ F_{22,p} \end{bmatrix} \right\}, \end{aligned} \quad (\text{D.55})$$

em que também substituímos $\frac{1}{N} \sum_p$ por $\frac{1}{\pi} \int dp$ (o fator $1/\pi$ em vez de $1/2\pi$ é porque a célula unitária do modelo tem dois sítios).

Para simplificar a forma da Eq. (D.55), definimos

$$\begin{aligned} I_1(q) &= \frac{1}{\pi} \int' dp [\Lambda_{11}(p) \Lambda_{11}(p+q) F_{11,p} + \Lambda_{11}(p) \Lambda_{12}(p+q) F_{21,p}] \\ &+ \frac{1}{\pi} \int'' dp [\Lambda_{12}(p) \Lambda_{11}(p+q) F_{12,p} + \Lambda_{12}(p) \Lambda_{12}(p+q) F_{22,p}] \end{aligned} \quad (\text{D.56})$$

e

$$\begin{aligned} I_2(q) &= \frac{1}{\pi} \int' dp [\Lambda_{21}(p) \Lambda_{21}(p+q) F_{11,p} + \Lambda_{21}(p) \Lambda_{22}(p+q) F_{21,p}] \\ &+ \frac{1}{\pi} \int'' dp [\Lambda_{22}(p) \Lambda_{21}(p+q) F_{12,p} + \Lambda_{22}(p) \Lambda_{22}(p+q) F_{22,p}]. \end{aligned} \quad (\text{D.57})$$

Finalmente, $[V, \Omega_q^\dagger]_2$ se reescreve como

$$[V, \Omega_q^\dagger]_2 = -U \sum_k g_{k+q, \downarrow}^\dagger \tilde{\Lambda}_1(k+q, k) g_{k, \uparrow} I_1(q) \quad (\text{D.58})$$

$$-U \sum_k g_{k+q, \downarrow}^\dagger \tilde{\Lambda}_2(k+q, k) g_{k, \uparrow} I_2(q). \quad (\text{D.59})$$

A Eq. (D.58) está no formato desejado, que é o de uma matriz intercalando $g_{k+q, \downarrow}^\dagger$ e $g_{k, \uparrow}$.

Para compactar a notação, denotamos essa matriz por $L(k, q)$:

$$[V, \Omega_q^\dagger]_2 = \sum_k g_{k+q, \downarrow}^\dagger L(k, q) g_{k, \uparrow}. \quad (\text{D.60})$$

Essa contribuição junto com a Eq. (D.36) nos dá $[V, \Omega_q^\dagger]$:

$$[V, \Omega_q^\dagger] = g_{k+q, \downarrow}^\dagger [U\Lambda(k+q)M\Lambda(k+q)F(k) + L(k, q)]g_{k, \uparrow} \quad (\text{D.61})$$

Agora que temos todas as parcelas do comutador com o Hamiltoniano, voltamos à Eq. (D.24), cujo lado esquerdo é $[H, \Omega_q^\dagger] = [K, \Omega_q^\dagger] + [V, \Omega_q^\dagger]$. A primeira contribuição está na Eq. (D.27) e a segunda está na Eq. (D.60). Já $\Omega_q^\dagger$, que aparece no membro da direita da Eq. (D.24), é dado pela Eq. (D.23). Com essas expressões, a Eq. (D.24) se torna

$$\sum_k g_{k+q, \downarrow}^\dagger [G(k, q) - \omega_q F(k) + U\Lambda(k+q)M\Lambda(k+q)F(k)] = - \sum_k g_{k+q, \downarrow}^\dagger L(k, q)g_{k, \uparrow} = 0, \quad (\text{D.62})$$

o que leva a um conjunto de quatro equações para os coeficientes da matriz $F(k)$:

$$\begin{bmatrix} K_{11}(k, q) & K_{12}(k, q) & 0 & 0 \\ K_{21}(k, q) & K_{22}(k, q) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & K_{33}(k, q) & K_{34}(k, q) \\ 0 & 0 & K_{43}(k, q) & K_{44}(k, q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_{11,k} \\ F_{21,k} \\ F_{12,k} \\ F_{22,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_\alpha \Lambda_{\alpha 1}(k+q)\Lambda_{\alpha 1}(k)I_\alpha(q) \\ \sum_\alpha \Lambda_{\alpha 2}(k+q)\Lambda_{\alpha 1}(k)I_\alpha(q) \\ \sum_\alpha \Lambda_{\alpha 1}(k+q)\Lambda_{\alpha 2}(k)I_\alpha(q) \\ \sum_\alpha \Lambda_{\alpha 2}(k+q)\Lambda_{\alpha 2}(k)I_\alpha(q) \end{bmatrix}, \quad (\text{D.63})$$

em que

$$K_{11}(k, q) = \frac{\epsilon_{1,k+q} - \epsilon_{1,k} - \omega_q}{U} + \langle n_{2j,\uparrow} \rangle \Lambda_{11}^2(k+q) \quad (\text{D.64})$$

$$+ \langle n_{2j+1,\uparrow} \rangle \Lambda_{12}(k+q) \Lambda_{21}(k+q),$$

$$K_{12}(k, q) = K_{21}(k, q) = \Lambda_{11}(k+q) \Lambda_{12}(k+q) \langle n_{2j,\uparrow} \rangle \quad (\text{D.65})$$

$$+ \Lambda_{12}(k+q) \Lambda_{22}(k+q) \langle n_{2j+1,\uparrow} \rangle,$$

$$K_{22}(k, q) = \frac{\epsilon_{2,k+q} - \epsilon_{1,k} - \omega_q}{U} + \langle n_{2j,\uparrow} \rangle \Lambda_{12}(k+q) \Lambda_{21}(k+q) \quad (\text{D.66})$$

$$+ \langle n_{2j+1,\uparrow} \rangle \Lambda_{22}^2(k+q),$$

$$K_{33}(k, q) = \frac{\epsilon_{1,k+q} - \epsilon_{2,k} - \omega_q}{U} + \langle n_{2j,\uparrow} \rangle \Lambda_{11}^2(k+q) \quad (\text{D.67})$$

$$+ \langle n_{2j+1,\uparrow} \rangle \Lambda_{12}(k+q) \Lambda_{21}(k+q),$$

$$K_{34}(k, q) = K_{43}(k, q) = \Lambda_{11}(k+q) \Lambda_{12}(k+q) \langle n_{2j,\uparrow} \rangle \quad (\text{D.68})$$

$$+ \Lambda_{12}(k+q) \Lambda_{22}(k+q) \langle n_{2j+1,\uparrow} \rangle,$$

$$K_{44}(k, q) = \frac{\epsilon_{2,k+q} - \epsilon_{2,k} - \omega_q}{U} + \langle n_{2j,\uparrow} \rangle \Lambda_{12}(k+q) \Lambda_{21}(k+q) \quad (\text{D.69})$$

$$+ \langle n_{2j+1,\uparrow} \rangle \Lambda_{22}^2(k+q),$$

em que usamos que $\Lambda_{12}(k) = \Lambda_{21}(k)$ para estabelecer que $K_{12}(k, q) = K_{21}(k, q)$ e $K_{34}(k, q) = K_{43}(k, q)$.

Resolvemos a Eq. (D.63) para os F 's (determinando-os em termos dos I 's) para então substituí-los nas Eq. (D.56) e (D.57). Isso dá um sistema linear de equações para I 's, e a exigência de que exista soluções não triviais nos dá $\omega(q)$.

A Eq. (D.63) consiste de dois sistemas lineares independentes, um para $F_{11,k}$ e $F_{21,k}$ e outro para $F_{12,k}$ e $F_{22,k}$, cujas soluções podem ser escritas como

$$\begin{bmatrix} F_{11,k} \\ F_{21,k} \end{bmatrix} = S(k, q) \begin{bmatrix} I_1(q) \\ I_2(q) \end{bmatrix} \quad (\text{D.70})$$

e

$$\begin{bmatrix} F_{12,k} \\ F_{22,k} \end{bmatrix} = T(k, q) \begin{bmatrix} I_1(q) \\ I_2(q) \end{bmatrix}, \quad (\text{D.71})$$

em que $S(k, q)$ e $T(k, q)$ são matrizes quadradas com coeficientes dados por

$$S_{11}(k, q) = \frac{-K_{12}(k, q)\Lambda_{12}(k+q)\Lambda_{11}(k) + K_{22}(k, q)\Lambda_{11}(k+q)\Lambda_{11}(k)}{\det K_{12}}, \quad (\text{D.72})$$

$$S_{12}(k, q) = \frac{-K_{12}(k, q)\Lambda_{22}(k+q)\Lambda_{21}(k) + K_{22}(k, q)\Lambda_{21}(k+q)\Lambda_{21}(k)}{\det K_{12}}, \quad (\text{D.73})$$

$$S_{21}(k, q) = \frac{-K_{12}(k, q)\Lambda_{11}(k+q)\Lambda_{11}(k) + K_{11}(k, q)\Lambda_{12}(k+q)\Lambda_{11}(k)}{\det K_{12}} \quad (\text{D.74})$$

$$S_{22}(k, q) = \frac{-K_{12}(k, q)\Lambda_{21}(k+q)\Lambda_{21}(k) + K_{11}(k, q)\Lambda_{22}(k+q)\Lambda_{21}(k)}{\det K_{12}} \quad (\text{D.75})$$

e

$$T_{11}(k, q) = \frac{-K_{34}(k, q)\Lambda_{12}(k+q)\Lambda_{12}(k) + K_{44}(k, q)\Lambda_{11}(k+q)\Lambda_{12}(k)}{\det K_{34}}, \quad (\text{D.76})$$

$$T_{12}(k, q) = \frac{-K_{34}(k, q)\Lambda_{22}(k+q)\Lambda_{22}(k) + K_{44}(k, q)\Lambda_{21}(k+q)\Lambda_{22}(k)}{\det K_{34}}, \quad (\text{D.77})$$

$$T_{21}(k, q) = \frac{-K_{34}(k, q)\Lambda_{11}(k+q)\Lambda_{12}(k) + K_{44}(k, q)\Lambda_{12}(k+q)\Lambda_{12}(k)}{\det K_{34}}, \quad (\text{D.78})$$

$$T_{22}(k, q) = \frac{-K_{34}(k, q)\Lambda_{21}(k+q)\Lambda_{22}(k) + K_{33}(k, q)\Lambda_{22}(k+q)\Lambda_{22}(k)}{\det K_{34}}, \quad (\text{D.79})$$

em que

$$\det K_{12} = K_{11}(k, q)K_{22}(k, q) - K_{12}(k, q)K_{21}(k, q) \quad (\text{D.80})$$

e

$$\det K_{34} = K_{33}(k, q)K_{44}(k, q) - K_{34}(k, q)K_{43}(k, q). \quad (\text{D.81})$$

Eliminando os F 's das Eq. (D.56) e (D.57), estas se reescrevem como

$$\begin{aligned} I_1(q) = & \frac{1}{\pi} \int' dp \left[\Lambda_{11}(p)\Lambda_{11}(p+q) \left(\sum_{\alpha=1}^2 S_{1\alpha}(p, q)I_{\alpha}(q) \right) \right. \\ & \left. + \Lambda_{11}(p)\Lambda_{12}(p+q) \left(\sum_{\alpha=1}^2 S_{2\alpha}(p, q)I_{\alpha}(q) \right) \right] \\ & + \frac{1}{\pi} \int'' dp \left[\Lambda_{12}(p)\Lambda_{11}(p+q) \left(\sum_{\alpha=1}^2 T_{1\alpha}(p, q)I_{\alpha}(q) \right) \right. \\ & \left. + \Lambda_{12}(p)\Lambda_{12}(p+q) \left(\sum_{\alpha=1}^2 T_{2\alpha}(p, q)I_{\alpha}(q) \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{D.82})$$

e

$$\begin{aligned}
 I_2(q) = & \frac{1}{\pi} \int' dp \left[\Lambda_{21}(p) \Lambda_{21}(p+q) \left(\sum_{\alpha=1}^2 S_{1\alpha}(p, q) I_{\alpha}(q) \right) \right. \\
 & \left. + \Lambda_{21}(p) \Lambda_{22}(p+q) \left(\sum_{\alpha=1}^2 S_{2\alpha}(p, q) I_{\alpha}(q) \right) \right] \\
 & + \frac{1}{\pi} \int'' dp \left[\Lambda_{22}(p) \Lambda_{21}(p+q) \left(\sum_{\alpha=1}^2 T_{1\alpha}(p, q) I_{\alpha}(q) \right) \right. \\
 & \left. + \Lambda_{22}(p) \Lambda_{22}(p+q) \left(\sum_{\alpha=1}^2 T_{2\alpha}(p, q) I_{\alpha}(q) \right) \right].
 \end{aligned} \tag{D.83}$$

As Eq. (D.82) e (D.83) podem ser reescritas em uma forma matricial,

$$V \begin{bmatrix} I_1(q) \\ I_2(q) \end{bmatrix} = 0, \tag{D.84}$$

em que V é uma matriz 2×2 . Para que exista solução não trivial, é necessário que $\det V = 0$. Essa condição dá uma equação transcendental que determina $\omega(q)$.