

FILIPE SOUZA MENDES GUIMARÃES

*Dinâmica de spins em nanoestruturas  
metálicas*

Niterói

Março de 2011

FILIPPE SOUZA MENDES GUIMARÃES

*Dinâmica de spins em nanoestruturas  
metálicas*

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do Título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Roberto Bechara Muniz

Co-orientador:

Prof. Dr. Antônio Tavares da Costa Jr.

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE  
INSTITUTO DE FÍSICA

Niterói

Março de 2011

G963d Guimarães, Filipe Souza Mendes.  
Dinâmicas de spins em nanoestruturas metálicas / Filipe  
Souza Mendes Guimarães ; orientador: Roberto Bechara Muniz ;  
Co-orientador: Antônio Tavares da Costa Jr. -- Niterói, 2011.  
180 f. : il.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal Fluminense,  
Instituto de Física, 2011.  
Bibliografia: f. 158-162.

1.MAGNETISMO. 2.NANOESTRUTURA. 3.NANOTUBOS DE CARBONO.  
4.SPIN. I.Muniz, Roberto Bechara, Orientador. II. Costa  
Júnior, Antônio Tavares, Co-orientador. III. Universidade  
Federal Fluminense. Instituto de Física, Instituição  
responsável. III.Título.

CDD 537

# *Dedicatória*

ao meu pai Luiz Alberto, à minha mãe Gláucia  
e à minha esposa Marina.

# *Agradecimentos*

Primeiramente, gostaria de agradecer duplamente ao Prof. Roberto Bechara Muniz: por sua orientação durante todos estes anos e também por manter o Instituto de Física da UFF sempre melhorando. Seus esforços em ambos os casos foram incansáveis, e eu o agradeço imensamente.

Não menos importantes na minha orientação, agradeço também ao Prof. Antônio Tavares da Costa Junior, co-orientador desta tese, e ao Prof. Mauro Santos Ferreira. Seus ensinamentos foram imensos e valorosos. Também devo meus agradecimentos ao Prof. Doug Mills, de Irvine, pela sua colaboração e por me dar uma oportunidade de trabalhar em seu grupo.

Aos professores da UFF que ajudaram em minha formação, em especial Prof. Jorge Sá Martins e Prof. Nivaldo Lemos, que me ensinaram muito durante os estágios docentes, meus sinceros agradecimentos. Agradeço também ao Prof. Caio Lewenkopf, por me auxiliar a entender aspectos da teoria semi-clássica discutida no capítulo 2 deste trabalho, e à Prof<sup>a</sup>. Andréa Latgé, por toda ajuda durante estes anos.

Agradeço aos meus colegas da UFF, que compartilham do mesmo processo, e sempre estão dispostos a estender a mão. Não posso citar um a um por falta de espaço e por correr o risco de esquecer alguém importante, simplesmente por ter uma memória fraca.

Aos meus pais, Luiz Alberto e Glaucia, e meu irmão Thiago, agradeço pelo carinho e pelo apoio durante toda minha vida. Minha família e meus amigos, apesar de não contribuírem diretamente com o conteúdo deste trabalho, me ajudaram de maneira incalculável, e certamente fazem parte dele.

Finalmente, agradeço à minha muito amada esposa Marina. Todo seu suporte e ajuda, para serem colocados em palavras, precisariam de um espaço maior do que todas as folhas desta dissertação. Seu amor e carinho foram sempre fundamentais.

# *Resumo*

Com o objetivo de compreender melhor a dinâmica de spins em nanoestruturas metálicas, investigamos o fenômeno do bombeamento de spins. Em 2002, Tserkovnyak e colaboradores propuseram que o movimento de precessão da magnetização de uma unidade magnética em contato com um metal não magnético poderia transferir momento angular aos elétrons de condução, gerando um fluxo de spins que se propagaria através do metal não magnético [1]. Este fluxo de momento angular, ou corrente de spins, contribui para o amortecimento da precessão da magnetização e se propaga sem a necessidade da existência de uma corrente de carga líquida. A corrente de spins pode ser usada para excitar uma outra unidade magnética localizada longe da primeira e, dessa forma, transportar informação através de meios condutores.

Para estudar este fenômeno, desenvolvemos um formalismo inteiramente quântico, baseado na teoria de resposta linear, para calcular o valor esperado da corrente de spins emitida pela precessão da magnetização de uma unidade magnética conectada a um metal não magnético. Mostramos que esta grandeza pode ser relacionada com uma susceptibilidade transversa magnética dinâmica generalizada. Neste trabalho, detalhamos também a teoria semi-clássica desenvolvida por Tserkovnyak e colaboradores [1] com o intuito de compará-la com a nossa formulação. Para ilustrar quantitativamente esta comparação, investigamos alguns sistemas relativamente simples. Mostramos que há um ótimo acordo entre as duas teorias, considerando suas diferenças de abordagem: enquanto em nossa teoria empregamos o formalismo da mecânica quântica para calcular a corrente de spins que emana da magnetização que foi posta em movimento de precessão, a teoria semi-clássica proposta por Tserkovnyak e colaboradores é baseada em matrizes de espalhamento e utiliza-se da aproximação adiabática para calcular a corrente bombeada para os contatos, longe da unidade magnética. Além disso, calculamos a variação espacial da corrente de spins, tanto no domínio das frequências quanto do tempo, para impurezas magnéticas embebidas em alguns sistemas unidimensionais, e mostramos que interferências quânticas desempenham um papel relevante neste fenômeno.

Empregamos também a nossa teoria para estudar a propagação de correntes de spins em algumas nanoestruturas a base de carbono. Mostramos que os nanotubos de carbono carregam a informação de spin por longas distâncias com pouca dispersão e com atenuação regulável. Estes sistemas, já conhecidos por serem bons condutores de elétrons e de fônons, se mostram também eficientes guias de ondas para correntes de spins. Investigamos a propagação de um pulso de corrente de spins através de nanotubos metálicos e mostramos que esta excitação viaja com a velocidade de Fermi e é capaz de induzir excitações similares em outras impurezas magnéticas presentes no meio [2]. Além da perturbação de spins em nanotubos de carbono, estudamos também a influência de um potencial de porta eletrostático na propagação desta perturbação em uma tira de grafeno. Mostramos que estes sistemas funcionam como transistores para a corrente de spins bombeada. Em outras palavras, podemos controlar a perturbação que atravessa uma região da tira com um

potencial eletrostático (que não depende do spin), permitindo ou bloqueando a passagem da corrente de spin através dela [3]. Os resultados acima sugerem que os materiais a base de carbono possuem grande potencial para serem empregados em dispositivos spintrônicos como transistores e memórias de alta velocidade, consumo de energia extremamente baixo e alta integração com os atuais dispositivos eletrônicos. Como a corrente de spins emitida por uma magnetização precessionante se propaga isotropicamente, uma grande fração da informação magnética é perdida quando utilizamos sondas locais. Propusemos então, em analogia com sistemas ópticos, que uma interface curva entre uma região com um potencial eletrostático e outra sem potencial aplicado atua como uma lente para as correntes de spins, apesar de serem de natureza não magnética. Mostramos que estas lentes podem ser utilizadas para redirecionar as correntes de spins que saem da fonte para uma região focalizada, onde uma sonda magnética pode ser colocada, evitando assim que uma fração considerável da informação magnética seja perdida.

# *Abstract*

In the present work, we investigate the spin pumping mechanism. In 2002, Tserkovnyak *et al.* proposed that a precessing magnetization of a magnetic unit coupled to a non-magnetic metal can transfer angular momentum to the conduction electrons, creating a spin flow that propagates across the non-magnetic metal [1]. This flux of angular momentum, or spin current, contributes to the damping of the precessing magnetization and propagates without a net charge current. The spin current can be used to excite a second magnetic unit, far away from the source, transporting information through conductors.

To study this phenomenon, we developed a fully quantum-mechanical approach, based on linear response theory, to calculate the expected value of the spin current emitted by the precession of a magnetization of a magnetic unit in contact with a non-magnetic metal. We showed that this quantity is related to generalized dynamical transverse magnetic susceptibilities. In this work, we also detail the semi-classical theory developed by Tserkovnyak *et al.* [1], and compare it with our formulation. To illustrate this comparison quantitatively, we investigate some relatively simple systems. An excellent agreement between the two theories is revealed, considering the differences between the approaches: while our theory is completely based on quantum mechanics to obtain the spin current that emanates from a precessing magnetization, the semi-classical theory is based on scattering matrices and makes use of the adiabatic approximation to calculate the spin current pumped inside the contacts, away from the magnetic unit. Moreover, we calculate the spatial distribution of the spin currents, as a function of frequency and time, for magnetic impurities embedded in unidimensional systems, and we show that quantum interferences play a central role in this phenomenon.

We also use our theory to study the propagation of spin currents in carbon-based nanostructures. We show that carbon nanotubes are able to carry information stored in a precessing magnetic moment for long distances with very little dispersion and with tunable degrees of attenuation. These systems, known to function as conduits for electrons and for phonons, are also efficient spin-current waveguides. Pulsed magnetic excitations are predicted to travel with the nanotube Fermi velocity and are able to induce similar excitations in remote locations [2]. In addition to the perturbation in carbon nanotubes, we also demonstrate that graphene can function as gate-controllable transistors for pumped spin currents. Furthermore, we propose as a proof of concept how these spin currents can be modulated by an electrostatic gate [3]. Because our proposal involves nano-sized systems that function with very high speeds and in the absence of any applied bias, it is potentially useful for the development of transistors capable of combining large processing speeds, enhanced integration and extremely low power consumption. As the spin current tends to travel omni-directionally, a large fraction of this information never reaches the probe and is lost. We propose, in analogy to optics systems, that a curved boundary between a gated and a non-gated region within graphene acts as an ideal lens for spin currents despite being entirely of non-magnetic nature. We show as a proof of concept

that such lenses can be utilized to redirect the spin current that travels away from a source onto a focus region where a magnetic probe is located, saving a considerable fraction of the magnetic information that would be otherwise lost.

# *Lista de Figuras*

- 1 Esquema ilustrativo de um sistema composto por dois contatos conectados a uma amostra espalhadora. Um potencial dependente do tempo  $\delta\mu_\beta(t)$  é aplicado no contato  $\beta$ , e a corrente é medida no contato  $\alpha$ , longe da região de espalhamento. A direção longitudinal  $\hat{\mathbf{z}}$  é definida positiva no sentido do reservatório para o contato.  $n, m$  se referem aos modos transversos nos contatos. . . . . p. 9
- 2 Em um período, os parâmetros  $X_i(t)$  e  $X_j(t)$  percorrem um circuito fechado no espaço  $(X_i, X_j)$ . A corrente bombeada depende da área  $A$  neste espaço de parâmetros. . . . . p. 24
- 3 Sistema composto por dois contatos normais e um espalhador ferromagnético, cuja magnetização precessiona. A ilustração representa elétrons de condução com spin  $\sigma$  que incidem na amostra pelo canal  $m$  do contato da esquerda e podem ser transmitidos ou refletidos pela amostra magnética, saindo com spin  $\sigma'$  em um canal  $n$  do contato da direita ou da esquerda, respectivamente. . . . . p. 27
- 4 Contorno das integrais das funções de Green no plano complexo. (a) A integral das funções de Green retardadas é analítica no semiplano complexo superior enquanto que (b) a integral das funções de Green avançadas é analítica no semiplano complexo inferior. . . . . p. 62
- 5 Funções de Fermi-Dirac envolvidas na integral da Eq. 3.131. . . . . p. 63
- 6 Comparação entre (a) a corrente de spins longe da impureza calculada com o formalismo quântico, e (b) a corrente de spins descrita pelo formalismo desenvolvido no capítulo 2, ambas em função da energia  $\epsilon = \hbar\omega$ , onde  $\omega$  é a frequência do campo aplicado. As linhas sólida, tracejada e pontilhada referem-se aos cálculos efetuados para diferentes valores de energias Zeeman  $\epsilon_0 = \hbar\omega_0$  iguais a  $1.0 \times 10^{-3}$ ,  $2.0 \times 10^{-3}$  e  $3.0 \times 10^{-3}$ , respectivamente. . . . . p. 70

7	Representação das diferentes regiões em uma cadeia linear infinita, onde as correntes de spins são calculadas na Fig. 8. O sítio preto representa a impureza magnética. . . . .	p. 71
8	Módulo do valor esperado da corrente de spins $ \langle \hat{I}_S^+ \rangle $ produzida pela precessão do momento no sítio 0, calculado em função da energia $\epsilon = \hbar\omega$ através de diferentes regiões mostradas na Fig. 7. A corrente de spins está em unidades de $g\mu_B b_0$ e o campo Zeeman é ajustado de forma que a frequência de ressonância na impureza seja $\epsilon_0 = \hbar\omega_0 = 10^{-3}$ . Estes cálculos foram feitos para o caso de uma banda semi-cheia. . . . .	p. 72
9	Comportamento espacial da corrente de spins para três escolhas de energias de Fermi, (a) $\epsilon_F = 0$ (banda semi-cheia), (b) $\epsilon_F = 0.1$ , e (c) $\epsilon_F = 0.2$ . Nestes cálculos, a energia Zeeman é $\epsilon_0 = 10^{-3}$ e a impureza é excitada na ressonância. . . . .	p. 73
10	Impureza magnética colocada a uma distância $N$ da ponta da cadeia semi-infinita. . . . .	p. 74
11	Variação espacial da corrente de spins gerada por um momento magnético que precessiona em uma cadeia semi-infinita de sítios, calculada na ressonância. A ponta da cadeia se encontra em $N = 1$ e a impureza magnética está localizada no sítio $N = 1001$ . Estes cálculos foram feitos com energia de Fermi $\epsilon_F = 0$ (banda semi-cheia). . . . .	p. 75
12	Módulo do valor esperado da corrente de spins emanada por uma impureza localizada na posição $N = 1001$ , em função da energia $\epsilon = \hbar\omega$ . Os cálculos mostram a influência dos estados de poço quântico entre a impureza e a superfície. A curva preta corresponde à corrente de spins calculada entre os sítios 1001 e 1000, e a curva vermelha corresponde à corrente de spins emanada para o lado infinito, calculada entre os sítios 1001 e 1002. As linhas tracejadas verticais indicam as energias nas quais os resultados mostrados nas Fig. 13 foram calculados. . . . .	p. 76

- 13 Variação espacial da corrente de spins gerada por um momento magnético que precessiona embebido em uma cadeia semi-infinita de sítios, calculada nas energias (a)  $\epsilon = 0.0119$  e (b)  $\epsilon = 0.0182$ , representadas por linhas tracejadas verticais na Fig. 12. A superfície é em  $N = 1$ , e a impureza precessionante está localizada no sítio  $N = 1001$ . Nestes cálculos, tomamos  $\epsilon_F = 0$ . . . . . p. 78
- 14 Variação espacial da corrente de spins gerada por um momento magnético que precessiona em uma cadeia semi-infinita de sítios, calculada na ressonância. A superfície se localiza no sítio  $N = 1$ , e a impureza precessionante em  $N = 1000$ . Nestes cálculos, tomamos  $\epsilon_F = 0$ . . . . . p. 79
- 15 Valores esperados das componentes  $\langle I_S^x \rangle$  e  $\langle I_S^y \rangle$  da corrente de spins, calculados em função do tempo, para três diferentes posições em relação à impureza magnética: (a)  $d = 1 \times 10^4 a_0$ , (b)  $d = 2 \times 10^4 a_0$ , (c)  $d = 3 \times 10^4 a_0$ . O pulso gaussiano é centrado na energia de ressonância  $\hbar\omega_0 = 10^{-3}$ , e sua variância é  $\sigma^2 = 4 \times 10^6$ . As linhas cheia e tracejada correspondem às componentes  $x$  e  $y$ , respectivamente. . . . . p. 80
- 16 (a) Valores esperados das componentes transversas da densidade de spins  $\delta\langle S_N^x \rangle$  e  $\delta\langle S_N^y \rangle$  calculadas em função do tempo no sítio da impureza magnética  $N$  situado a uma distância  $d = 2 \times 10^4 a_0$  da ponta da cadeia. (b) e (c) mostram os valores esperados das componentes  $\langle I_S^x \rangle$  e  $\langle I_S^y \rangle$  da corrente de spins calculados em função do tempo em duas posições distintas, especificadas por suas distâncias  $d_1 = 0.5d$  e  $d_2 = 1.5d$  em relação à ponta da cadeia, respectivamente. Neste caso, o pulso gaussiano é centrado na energia de ressonância  $\hbar\omega_0 = 10^{-2}$ , e sua variância é  $\sigma^2 = 10^6$ . . . . . p. 81
- 17 Valores esperados das componentes transversas  $\delta\langle S^x \rangle$  e  $\delta\langle S^y \rangle$  da densidade de spins calculadas em função do tempo à duas distâncias distintas da ponta da cadeia: (a)  $d_1 = 1 \times 10^4 a_0$ , e (b)  $d_2 = 3 \times 10^4 a_0$ , respectivamente. A impureza magnética está localizada a uma distância  $d = 2 \times 10^4 a_0$  da superfície. . . . . p. 82

18	(a) Rede do grafeno formada por triângulos vermelhos, e uma base de 2 átomos (um preto e um branco). Os vetores da rede direta $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ definem uma célula unitária. (b) Rede recíproca hexagonal, com os vetores $\mathbf{b}_1$ e $\mathbf{b}_2$ definidos de tal forma que $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$ . O hexágono verde ilustra a primeira Zona de Brillouin. . . . .	p. 85
19	Rede do grafeno com os vetores $\mathbf{a}_1$ e $\mathbf{a}_2$ , e a célula primitiva correspondente, como ilustrado na Fig. 18a. As setas vermelhas e verde indicam direções de enrolamento, que formam a circunferência de nanotubos armchair $(N, N)$ , e zigzag $(N, 0)$ , respectivamente. . . . .	p. 87
20	Esquema do nanotubo de carbono com uma única impureza magnética embebida em um sítio que chamaremos de 0. A seta representa a posição onde o spin eletrônico da Fig. 21 é medido. . . . .	p. 89
21	(a) Susceptibilidade transversa de spins $\chi_{i0}$ (em unidades de $\hbar/eV$ ) em função da frequência de excitação $\omega$ (em THz) para um NT (4,4). A distância entre o sítio $i$ e a impureza é $x_i = 3a_0$ . (b) As linhas cheias e tracejadas representam as componentes $\hat{x}$ e $\hat{y}$ da perturbação de spins $\delta\langle S_i^+(t) \rangle$ ; a linha cheia mais grossa indica $ \delta\langle S_i^+(t) \rangle $ . Spins estão em unidades de $\hbar g \mu_B h_0$ , onde $g \simeq 2$ para o elétron, $\mu_B$ é o magneton de Bohr e $h_0$ é a amplitude do campo transversal dependente do tempo; o tempo é dado em ps. Os resultados foram gerados para um pulso gaussiano centrado na frequência de ressonância $\omega = 0.6$ THz e com uma variância de $\sigma = 20.7$ ps. . . . .	p. 90
22	Amplitudes das perturbações transversas de spins (em unidades de $\hbar g \mu_B h_0$ ) em função do tempo (em ps) à diferentes distâncias $x_i$ da impureza magnética. As curvas marcadas de (1) a (6) representam as amplitudes das perturbações de spins calculadas em diferentes valores de $x_i = 0.3, 1.5, 3, 6, 9$ , e $12 \times 10^4 a_0$ , respectivamente. O gráfico menor mostra como as posições $x_i$ onde a perturbação de spins é observada em função do tempo que a amplitude máxima leva para atingir $x_i$ . . . . .	p. 91
23	Amplitudes das perturbações transversas de spins (em unidades de $\hbar g \mu_B h_0$ ) em função do tempo (em ps) calculadas em (a) $x_i = 3a_0$ e (b) $x_i = 30a_0$ . A curva preta foi calculada em sítios na mesma direção da impureza, enquanto que as curvas vermelhas foram calculadas para sítios diametralmente opostos. . . . .	p. 92

- 24 O eixo da esquerda representa os valores da amplitude máxima do pulso de excitação magnética,  $|\delta\langle S_i \rangle|_{\max}$  (em unidades de  $\hbar g \mu_B h_0$ ), medido em um sítio  $i$  e é mostrado pelas linhas cheias com círculos. O eixo da direita representa as larguras  $\Delta$  (in ps) dos pulsos medidos e são ilustrados pela curva tracejada com quadrados. Ambas as quantidades são plotadas em função da separação  $x_i$  (em unidades de  $a_0$ ) da posição da impureza. Os painéis (a) e (b) são para pulsos centrados na ressonância e fora da ressonância, respectivamente. . . . . p. 93
- 25 Duas impurezas magnéticas embebidas no nanotubo de carbono, separadas por uma distância  $x_i = 6 \times 10^4 a_0$ . . . . . p. 94
- 26 Amplitude do pulso de excitação magnética em função do tempo para o caso de duas impurezas magnéticas separadas por uma grande distância ( $x_i = 6 \times 10^4 a_0$ ), como mostrado na Fig. 25. A linha cheia mostra a perturbação de spins calculada na impureza onde a excitação é induzida, enquanto a linha tracejada é calculada na segunda impureza. . . . . p. 95
- 27 Perturbação de spins, representada pela susceptibilidade transversa de spins  $|\chi_{ij}(\omega)|$  (em unidades de  $\hbar/eV$ ), em função da voltagem de porta  $V_g$  (em unidades de eV). Quatro configurações diferentes são consideradas. Os *insets* ilustram estas configurações. Os círculos vermelhos representam os átomos magnéticos, a cruz azul mostra a posição onde a perturbação de spins é medida, na ausência de um objeto magnético de prova. A área cinza indica a região na qual o potencial de porta  $V_g$  é aplicado. Na configuração (a), temos um único átomo magnético; Na configuração (b), dois átomos magnéticos idênticos separados por uma distância  $D$ ; Em (c) temos uma linha de átomos magnéticos disposta perpendicularmente ao eixo da tira; Em (d) temos uma linha de átomos magnéticos e um outro átomo magnético (de prova) colocado a uma distância  $D$  da linha de impurezas. Os resultados apresentados nos painéis (b) e (d) foram divididos por  $10^2$  e  $10^4$ , respectivamente. . . . . p. 100

- 28 Perturbação de spins, representada pela susceptibilidade transversa de spins  $|\chi_{ij}(\omega)|$  (em unidades de  $\hbar/eV$ ), em função da posição (em unidades de  $a_0 = 2.46 \text{ \AA}$ ) para diferentes valores de  $V_g$ . Todos os resultados foram calculados para o caso ilustrado no painel (c) da Fig. 27. A área cinza representa a região com potencial de porta aplicado. (a)  $V_g = 0$  (linha preta);  $V_g = 0.106 \text{ eV}$  (linha vermelha com círculos);  $V_g = 0.212 \text{ eV}$  (linha azul com triângulos). (b)  $V_g = 0.027 \text{ eV}$  (linha preta);  $V_g = 0.133 \text{ eV}$  (linha vermelha com círculos);  $V_g = 0.239 \text{ eV}$  (linha azul com triângulos). p. 102
- 29 Diagrama esquemático representando a estrutura estudada. (a) Uma folha infinita de grafeno sobre o efeito de uma voltagem de porta que age apenas em uma região limitada do espaço (representada pela área cinza). A região com potencial de porta possui uma interface com curvatura definida pelo raio  $R$  que encontra-se a uma distância  $L_1$  das impurezas magnéticas. A seção delimitada pelas duas linhas pontilhadas horizontais é a célula unitária utilizada para representar o sistema com condições periódicas de contorno. (b) Interfaces planas são facilmente levadas em conta tomando o limite  $R \rightarrow \infty$ . As linhas tracejadas representam as posições onde a perturbação de spins é calculada na Fig. 30. . . . . p. 105
- 30 Magnitude da susceptibilidade transversa de spins na frequência de ressonância calculada em diferentes posições. O eixo horizontal dos gráficos principais correspondem às localizações marcadas pelas linhas tracejadas horizontais da Fig. 29. Os *insets* ilustram a susceptibilidade de spins calculadas ao longo de linhas verticais nas posições 5 do eixo ilustrado na Fig. 29. As linhas pontilhadas verticais indicam as posições onde os *insets* foram calculados. Todos os gráficos foram calculados para  $V_g = 2.4 \text{ eV}$ . (a) Resultados para a interface plana ( $R \rightarrow \infty$ ). (b) Resultados para a interface curva ( $R = 3a_0$ ). . . . . p. 107
- 31 Gráfico de código de cores da susceptibilidade de spins em função da posição na área sujeita a um potencial de porta ilustrada pelas áreas cinzas na Fig. 29. O painel de cima (baixo) corresponde à interface plana (curva) com parâmetros especificados na legenda da Fig. 30. . . p. 108
- 32 (a) Célula com 4 sítios definida por  $\mathbf{a}_A$  e  $\mathbf{a}_Z$ . (b) Vetores definidos por  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$ , com  $i, j = A, Z$ . . . . . p. 118

33	Circuito no plano complexo para resolver a integral dada pela Eq. A.41, com $D \geq 0$ . . . . .	p. 121
34	Circuito no plano complexo para resolver a integral dada pela Eq. A.41, com $D \geq 0$ . . . . .	p. 122
35	Nanotubos armchair semi-infinitos definidos pela função de onda da Eq. A.59. . . . .	p. 126
36	Superfícies dos nanotubos zigzag semi-infinitos definidas pela Eq. A.74.	p. 130
37	Função de Green local para $l = j = 0$ e $s = 2$ (sítio de superfície) calculada pela expressão analítica da Eq. A.89 (linha preta cheia) e pelo método recursivo (linha vermelha tracejada). . . . .	p. 134
38	Função de Green local para $l = j = 0$ e $s = 2$ (sítio de superfície) calculada pela expressão analítica corrigida obtida na Eq. A.101 (linha preta cheia) e pelo método recursivo (linha vermelha tracejada). . . .	p. 136

# *Sumário*

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	p. 1
<b>2</b>	<b>Teoria Semi-Clássica</b>	p. 8
2.1	Teoria do Bombeamento . . . . .	p. 8
2.1.1	Resposta a um potencial externo . . . . .	p. 8
2.1.1.1	Operador corrente . . . . .	p. 9
2.1.1.2	Potencial externo independente do tempo . . . . .	p. 14
2.1.1.3	Potencial externo dependente do tempo . . . . .	p. 15
2.1.2	Resposta a um potencial interno . . . . .	p. 21
2.2	Bombeamento paramétrico . . . . .	p. 23
2.3	Bombeamento de spins . . . . .	p. 25
2.3.1	Matriz de espalhamento . . . . .	p. 26
2.3.1.1	Coefficientes de reflexão e transmissão . . . . .	p. 28
2.3.2	Corrente de spins . . . . .	p. 31
<b>3</b>	<b>Teoria Quântica</b>	p. 38
3.1	Corrente de spins . . . . .	p. 39
3.1.1	Operador corrente de spins . . . . .	p. 39
3.1.2	Resposta linear para um campo harmônico . . . . .	p. 42
3.1.3	Resposta linear a um campo pulsado . . . . .	p. 44
3.2	Perturbação na densidade de spins . . . . .	p. 47
3.2.1	Campo externo harmônico . . . . .	p. 48

3.2.2	Pulso de campo externo . . . . .	p. 49
3.3	Susceptibilidade magnética transversa . . . . .	p. 49
3.3.1	Aproximação de fases aleatórias (RPA) . . . . .	p. 53
3.3.2	Aproximação Hartree-Fock . . . . .	p. 55
3.4	Susceptibilidade Hartree-Fock . . . . .	p. 59
<b>4</b>	<b>Aplicações a sistemas unidimensionais</b>	p. 66
4.1	Comparação entre teorias semi-clássica e quântica . . . . .	p. 66
4.2	Corrente de spins em cadeias lineares . . . . .	p. 71
4.2.1	Cadeia infinita . . . . .	p. 71
4.2.2	Cadeia semi-infinita . . . . .	p. 73
4.3	Pulso de corrente de spins . . . . .	p. 79
<b>5</b>	<b>Nanoestruturas a base de carbono</b>	p. 84
5.1	Nanotubos de carbono: guias de onda de spins . . . . .	p. 88
5.2	Transistor de correntes de spins a base de grafeno . . . . .	p. 96
5.3	Grafeno como uma lente não magnética . . . . .	p. 103
<b>6</b>	<b>Conclusões e perspectivas</b>	p. 109
<b>Apêndice A – Expressões analíticas para propagadores monoelétrônicos em nanotubos carbono</b>		p. 113
A.1	Grafeno . . . . .	p. 113
A.2	Nanotubos infinitos . . . . .	p. 117
A.2.1	Nanotubos Armchair . . . . .	p. 123
A.2.2	Nanotubos Zigzag . . . . .	p. 124
A.3	Nanotubos semi-infinitos . . . . .	p. 125
A.3.1	Nanotubos armchair semi-infinitos . . . . .	p. 126
A.3.2	Nanotubos zigzag semi-infinitos . . . . .	p. 129

<b>Apêndice B – Corrente de spins em multicamadas</b>	p. 137
B.1 Operador corrente de spins . . . . .	p. 137
B.2 Resposta linear para a corrente de spins . . . . .	p. 139
B.3 Susceptibilidade magnética transversa . . . . .	p. 142
B.3.1 Aproximação de fases aleatórias (RPA) . . . . .	p. 146
B.3.2 Aproximação Hartree-Fock . . . . .	p. 148
<b>Referências</b>	p. 158

# 1 *Introdução*

Dispositivos eletrônicos estão cada vez mais presentes em nosso dia a dia, desde os instrumentos de medição que permitem o avanço científico (microscópios de varredura, lasers, etc.) até computadores, celulares e câmeras fotográficas pessoais. Estes equipamentos nos trazem conforto e facilitam nossas vidas, além de auxiliarem a expansão do nosso conhecimento tanto do microcosmo quanto do macrocosmo. A busca constante pela melhoria destes dispositivos é uma das motivações da ciência e da engenharia.

Os equipamentos eletrônicos possuem em seus núcleos chips ou circuitos integrados, baseados em materiais semicondutores e transistores, que são os blocos fundamentais da eletrônica moderna. Em 1965, o então presidente da Intel, Gordon Moore fez uma previsão na qual o número de transistores presentes nos circuitos integrados seria dobrado, pelo mesmo custo, a cada 2 anos, aproximadamente [4]. Essa profecia tornou-se realidade e acabou ganhando o nome de Lei de Moore. Esta lei é verificada não apenas nos dispositivos de computadores, mas em qualquer tipo de chip, como os sensores de câmeras fotográficas amadoras e profissionais. Devido à miniaturização dos transistores, esse padrão continuou a se manter até hoje, mas espera-se chegar ao seu limite atômico na próxima década.

Para evitar uma estagnação, novas tecnologias estão sendo procuradas, descobertas e criadas, de modo que o desenvolvimento tecnológico permaneça melhorando cada vez mais. Nos últimos anos, Mike Mayberry, atual diretor de pesquisas de componentes da Intel, vem relatando alguns avanços e dificuldades encontradas ao se trabalhar com compostos semicondutores, como o Arseneto de Gálio (GaAs) [5, 6, 7, 8]. Este tipo de composto possui grandes vantagens em relação ao Silício, mas há grandes barreiras que os impedem de serem utilizados em larga escala.

Uma outra área que tem um imenso potencial para revolucionar a indústria tecnológica é a spintrônica, que explora, além da carga dos elétrons, seu grau de liberdade de spins. O controle destas quantidades permite o aprimoramento e o desenvolvimento de uma nova geração de dispositivos que combinam a eletrônica padrão com efeitos dependentes

de spin. Eles abrem novas perspectivas para a detecção e transmissão de informação, e para o armazenamento de dados em meios magnéticos. Além disso, apresentam grande sensibilidade, velocidades de processamento muito altas e baixo consumo de energia [9, 10]. Um exemplo precursor nesta área e que teve um grande impacto tecnológico foi a descoberta do fenômeno da magnetoresistência gigante [11, 12], que permitiu a construção de sensores que revolucionaram a indústria magnética e contribuíram para um aumento extraordinário na capacidade de armazenamento de dados em meios magnéticos. Ele foi descoberto em 1988 e rendeu o prêmio Nobel, em 2007, para Albert Fert e Peter Grünberg.

A dinâmica de spins em nanoestruturas magnéticas vem sendo objeto de estudo intenso nas últimas duas décadas. Há muitos desafios nesta área que precisam ser enfrentados. Alguns envolvem questões fundamentais tais como o desenvolvimento de formas eficientes de conseguir a injeção de spins em um metal não magnético e de medir correntes de spins puras (i.e., sem corrente elétrica líquida) [13, 14]. Um outro assunto muito importante e abrangente nesta área é a natureza dos mecanismos que amortecem o movimento de spins. Uma pergunta central é se há novos processos, inoperantes em escala macroscópica onde os mecanismos de amortecimento são relativamente bem entendidos, que sejam específicos do ambiente nanométrico.

A resposta a esta pergunta é afirmativa. Um mecanismo extrínseco conhecido como espalhamento de dois magnons é evidenciado em nanoestruturas magnéticas [15]. Um segundo mecanismo, intrínseco, que é o tema desta dissertação, é conhecido como bombeamento de spins. Para este processo acontecer, os spins de interesse devem residir em, ou estarem acoplados a uma estrutura metálica. Geralmente, os sistemas estudados onde o bombeamento de spins é observado são filmes ferromagnéticos ultrafinos, obtidos com metais ou ligas magnéticas de elementos 3d que são depositados em substratos metálicos. O momento angular da precessão dos spins dentro do filme ferromagnético é transferido para os elétrons de condução, o que gera uma corrente de spins no substrato. Esta perturbação de spins transporta momento angular através do condutor para longe do filme magnético, na direção normal à interface entre o filme e o substrato. Uma consequência é que a amplitude do movimento de precessão dentro do filme decai com o tempo. Este fluxo de spins é produzido sem a necessidade de uma diferença de potencial aplicada nos contatos e não envolve corrente elétrica líquida. Este mecanismo foi primeiramente discutido teoricamente por Berger [16] e Slonczewski [17], e descoberto experimentalmente por Urban, Woltersdorf e Heinrich [18].

Em substratos onde o comprimento de difusão de spins é muito longo, a corrente de

spins penetra profundamente no material. Então, ela pode encontrar um segundo filme ferromagnético colocado abaixo do substrato para excitar seus spins através do mecanismo de transferência de torque de spin [19]. Pode-se prever dispositivos que exploram este fenômeno, mais particularmente quando os spins do primeiro filme são excitados por pulsos curtos. Em um artigo recente, apresentamos estudos teóricos de excitações pulsadas em um segundo momento magnético causada pela corrente de spins gerada por um primeiro momento magnético, ambos embebidos em um nanotubo de carbono, um sistema físico diferente, porém relacionado, às camadas ferromagnéticas ultrafinas [2].

Estes sistemas onde a coerência de spins é mantida por grandes distâncias também são ideais para a geração de transistores de spins, uma das mais procuradas aplicações neste campo. Tais dispositivos devem possuir a capacidade de controlar as propriedades de transporte dependentes de spins da corrente eletrônica que o atravessa [20]. Nós sugerimos que a utilização de correntes puramente de spins pode ser uma solução para o problema da injeção de spins, e mostramos que elas podem ser controladas por um potencial de porta eletrostático [3].

Os trabalhos teóricos sobre bombeamentos de spins apresentados nas Refs. [16] e [17] são baseados em um modelo simples de poço quântico. Eles esclarecem vários aspectos relevantes do fenômeno, entretanto, a teoria não é inteiramente adequada para tratar sistemas mais realistas, apesar de fornecer estimativas de ordens de grandeza corretas para as taxas de relaxação observadas. Mais recentemente, uma abordagem semi-clássica foi utilizada para descrever o bombeamento de spins em um filme magnético ultrafino colocado entre dois contatos ligados a reservatórios [1, 21]. A teoria desenvolvida vem sendo aplicada com sucesso à sistemas de interesse [1, 21, 22]. Uma formulação teórica completamente quântica das excitações de spins em filmes ultrafinos também foi desenvolvida e aplicada para analisar a contribuição do bombeamento de spins para a relaxação ferromagnética [23]. Cálculos foram efetuados para filmes de Fe/Au(100), sem parâmetros livres, e os resultados obtidos estão em ótimo acordo com dados experimentais disponíveis [18]. As características sistemáticas exibidas nas larguras de linha encontradas em estudos de ressonância ferromagnética (FMR) em tricamadas FM/Cu/FM, depositadas em substratos metálicos [24], também foram reproduzidas e explicadas por essa teoria[23].

Estudos de excitações de ondas de spins em filmes ultrafinos utilizando técnicas de FMR motivaram bastante as investigações teóricas sobre os mecanismos de bombeamento de spins. Nesse contexto, também é importante mencionar que a técnica de espectroscopia de espalhamento de elétrons por perda de energia com polarização de spins (SPEELS)

vem sendo empregada com sucesso para observar excitações de ondas de spins com grandes vetores de onda, em filmes ferromagnéticos ultrafinos [25]. Os tempos de vida dessas excitações são muito curtos: elas sobrevivem por apenas dois ou três ciclos de oscilação. O mesmo mecanismo de bombeamento de spins discutido na literatura de ressonância ferromagnética explica quantitativamente as larguras de linha encontradas nos experimentos de SPEELS [23].

Deve ser notado que nenhuma das abordagens teóricas descritas acima calcula diretamente a corrente de spins, tampouco sua dependência espacial no substrato. A abordagem das Refs. [1] e [22], que veremos com mais detalhes no próximo capítulo, levam a formulas para o fluxo de momento angular de spins nos contatos, longe do filme ferromagnético apenas. Por outro lado, na Ref. [23], a função resposta (parte imaginária da susceptibilidade magnética transversa) é calculada, e a contribuição à relaxação magnética devido ao bombeamento de spins é extraída da sua largura de linha, de maneira similar ao que é feito na análise dos dados experimentais, sem um contato direto com a corrente de spins responsável por essa largura.

É importante desenvolver maneiras de calcular e estudar a corrente de spins diretamente, em um nível microscópico. Uma forma de fazer isto é através da abordagem de Landauer-Büttiker para o transporte eletrônico dependente de spins, utilizando, eventualmente, funções de Green fora do equilíbrio [26, 27]. Este método, entretanto, não será abordado neste trabalho. Aqui, desenvolvemos uma metodologia alternativa para calcular a corrente de spins, baseada na teoria de resposta linear de Kubo, e a utilizamos para explorar características da corrente de spins gerada pela precessão de um momento magnético embebido em uma matriz metálica não magnética. Nossa abordagem é completamente quântica, e tanto o momento magnético quanto o substrato são tratados dentro de um mesmo arcabouço, através de um modelo de elétrons itinerantes, de forma análoga à utilizada em estudos microscópicos anteriores de excitações de spins em nanoestruturas metálicas magnéticas [23, 28, 29].

Em nosso ponto de vista, o interesse no conhecimento direto da corrente de spins e sua distribuição espacial é estimulado por observações do efeito spin Hall inverso [30]. Se um movimento coerente de spins é excitado em um filme ultrafino sobre um substrato metálico, como discutido acima, uma corrente de spins normal à superfície se propaga do filme para o substrato. Esta corrente de spins contém uma componente DC. Se o acoplamento spin-órbita estiver presente, então aparece uma corrente de cargas DC paralela à interface. Isso produz uma voltagem Hall através do filme, com magnitude proporcional ao quadrado

da amplitude de precessão dos spins. A habilidade de executar cálculos explícitos da corrente de spins e sua distribuição espacial é um primeiro passo em direção a uma teoria microscópica do efeito spin Hall inverso.

Descrições de dinâmicas de spins em nanomagnetos metálicos onde o acoplamento spin-órbita é apreciável são relativamente recentes na literatura [31, 32, 33]. Devemos enfatizar, entretanto, que nesta tese vamos considerar apenas sistemas nos quais a interação spin-órbita pode ser desprezada. A teoria desenvolvida aqui ainda não leva esta interação em consideração, mas temos a perspectiva de incluí-la no nosso formalismo em um futuro próximo. Isto ampliará o seu leque de aplicabilidade e, talvez, permita uma abordagem microscópica unificada para o efeito de spin Hall inverso e correntes de spins nestes sistemas.

Como estamos interessados primeiramente em entender o efeito do bombeamento de spins, neste trabalho não vamos considerar o efeito Kondo de blindagem das unidades magnéticas [34]. Neste sentido, supomos que estamos acima da temperatura Kondo e que elas sejam suficientemente baixas nos sistemas tratados neste trabalho. Consideramos também que estes sistemas se comportam como líquidos de Fermi. Sendo assim, desprezamos efeitos de correlações que levam ao comportamento de líquido de Luttinger em sistemas unidimensionais ou quasi-unidimensionais [35].

Começaremos o estudo das correntes de spins, no capítulo 2 estudando a teoria semi-clássica apresentada nas Refs. [1] e [22]. Inicialmente, ela servirá como uma introdução mais detalhada para o fenômeno do bombeamento de spins. Devido à falta de uma referência completa sobre esta abordagem, sentimos a necessidade de apresentá-la de maneira compreensiva e com um desenvolvimento explícito, incluindo todas as aproximações e considerações feitas nesta formulação. Partimos da teoria de Büttiker para o bombeamento de cargas AC devido a um potencial (externo ou interno) que oscila devido à variação de um único parâmetro [36] e estendemos esta teoria para a variação de dois parâmetros simultaneamente, o que permite o bombeamento de uma corrente DC [37]. Finalmente, generalizamos a corrente bombeada para incluir o grau de liberdade de spins, e identificamos as contribuições para a corrente total que vem da corrente de carga e da corrente de momento angular de spins [1]. O entendimento desta teoria permitirá compararmos as previsões feitas por ela com as que obteremos utilizando o formalismo quântico que apresentaremos.

O capítulo 3 será dedicado à teoria que estamos propondo para o cálculo das correntes de spins bombeadas por unidades magnéticas embebidas em ou adsorvidas à substratos

metálicos não magnéticos. Nossa abordagem é completamente quântica, baseada no formalismo de Kubo para calcular a variação em uma grandeza do sistema em resposta linear devido à aplicação de um campo externo dependente do tempo de intensidade relativamente pequena. Mostramos que as correntes de spins estão relacionadas com susceptibilidades magnéticas transversas generalizadas, e apresentamos uma maneira de obtê-las em termos dos propagadores monoelétrônicos do sistema. Além disso, indicamos uma maneira alternativa de olhar a propagação do momento angular pelo substrato, através da densidade local de spins. Esta quantidade é proporcional à susceptibilidade magnética usual, que também pode ser obtida da mesma forma que a susceptibilidade generalizada. Obtemos tanto a corrente quanto a densidade de spins no domínio das frequências, para campos harmônicos, além de suas dependências temporais, para campos pulsados.

Para ilustrar a teoria desenvolvida, no capítulo 4 realizamos algumas aplicações utilizando sistemas bem simples, compostos por cadeias lineares com apenas uma impureza magnética embebida. Antes de obter os resultados numéricos da teoria quântica, entretanto, fazemos uma comparação entre ambos os formalismos, procurando enfatizar suas diferenças. Nossa intenção é mostrar que apesar da teoria que desenvolvemos ser apenas de primeira ordem no campo, ela possui algumas vantagens em relação à teoria semi-clássica adiabática. Consideramos uma cadeia linear infinita com uma impureza magnética embebida para obter as previsões quantitativas de cada uma das formulações. Fazemos ainda diversas outras aplicações da teoria quântica, obtendo a variação espacial da corrente de spins em sistemas unidimensionais infinitos e semi-infinitos, além de calcularmos seu comportamento em função do tempo. Estes resultados não podem ser obtidos pela teoria semi-clássica, na qual a corrente é calculada apenas nos contatos, longe da região onde há espalhamento na amostra magnética.

No capítulo 5, continuamos com as aplicações da formulação proposta neste trabalho, mas em sistemas compostos por materiais a base de carbono. Este tipo de sistema tem recebido uma grande atenção da comunidade científica devido às suas propriedades peculiares. O grafeno, o nanotubo de carbono e as nanofitas de grafeno possuem características mecânicas, ópticas, térmicas e elétricas que se destacam. Entre elas, estão suas altas mobilidades eletrônicas e longos comprimentos de coerência de spins, que indicam que eles são materiais ideais para a aplicação em dispositivos eletrônicos ou spintrônicos. Além disso, a hibridização  $sp^2$  nestes sistemas facilitam seus estudos, pois, dentro de certos limites, eles são razoavelmente bem descritos utilizando-se um modelo com apenas um orbital por sítio. Dentre os resultados que obtemos neste capítulo, mostramos que os nanotubos de carbono são bons guias de ondas de spins e tiras de grafeno funcionam

como transistores para correntes de spins ao aplicar potenciais de porta eletrostáticos. No primeiro deles, mostramos que as perturbações de spins se propagam como ondas planas no nanotubo, e no segundo, obtemos que a propagação destas perturbações podem ser controladas por um potencial de porta eletrostático. Em uma terceira aplicação, fazemos uma analogia da perturbação de spins com sistemas ópticos e mostramos uma maneira de redirecionar a corrente para um ponto focal, de maneira que a energia carregada pela corrente de spins não seja perdida.

Finalizamos, no capítulo 6, fazendo as conclusões finais do estudo desenvolvido, com um resumo dos resultados obtidos ao longo do trabalho. Além disso, não menos importante, estabelecemos nossos planos para as perspectivas futuras deste trabalho. Embora tenhamos feito um grande estudo do fenômeno do bombeamento de spins, muitos outros aspectos precisam ser estudados. Uma das grandes qualidades da teoria quântica que desenvolvemos é facilidade com a qual ela pode ser estendida para incluir outros efeitos, como a interação spin-órbita.

No apêndice A, obtemos expressões analíticas para os propagadores monoeletrônicos em nanotubos armchair e zigzag.

A teoria do capítulo 3 foi estendida formalmente para multicamadas no apêndice B para esses sistemas.

## 2 Teoria Semi-Clássica

Antes de formular a teoria que desenvolvemos para o bombeamento de spins, vamos estudar a teoria semi-clássica já existente para este fenômeno. Calcularemos primeiramente a corrente gerada por um potencial químico oscilatório externo, além da corrente bombeada pela variação de um parâmetro interno de uma amostra, teoria desenvolvida inicialmente por Buttiker *et al.* [36, 38]. Esta teoria descreve um bombeamento de uma corrente AC devido à variação de um único parâmetro interno do sistema. Ela foi posteriormente expandida por Brouwer para mostrar que uma corrente DC pode ser bombeada em um sistema mediante a variação de dois parâmetros internos do sistema [37]. Nosso objetivo final é obter a generalização feita por Tserkovnyak *et al.* [1] para tratar uma corrente bombeada dependente de spin.

### 2.1 Teoria do Bombeamento

A teoria do bombeamento desenvolvida por Buttiker e colaboradores deu origem a um artigo seminal em 1994 [36], que, apesar de ser referência de muitos trabalhos sobre o assunto, aborda uma teoria relativamente complexa de se reproduzir. O objetivo desta seção é tentar esclarecer todas as considerações e aproximações realizadas, para podermos entender e comparar com a teoria que vamos desenvolver nos próximos capítulos.

#### 2.1.1 Resposta a um potencial externo

Considere, por exemplo, uma amostra conectada a dois terminais  $\alpha$  e  $\beta$  como ilustrado na Fig. 1. Inicialmente, vamos calcular a variação na corrente que flui através do terminal  $\alpha$  devido a um potencial químico dependente do tempo e oscilatório  $\delta\mu_\beta(t)$  aplicado no contato  $\beta$ . Para isso, é conveniente expressar o operador corrente em termos de grandezas conhecidas relacionadas com os contatos e com a matriz de espalhamento associada à amostra.

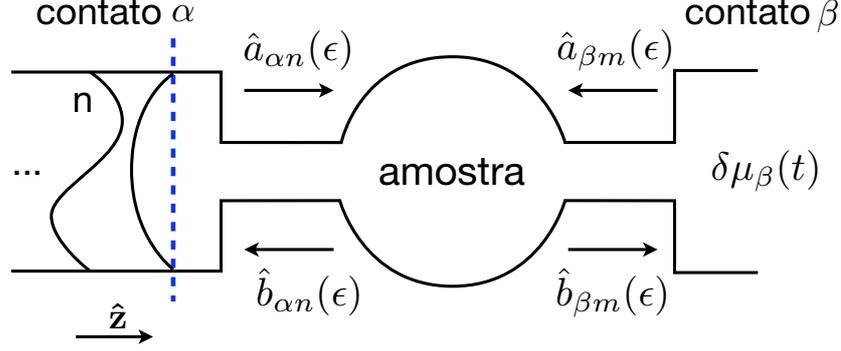


Figura 1: Esquema ilustrativo de um sistema composto por dois contatos conectados a uma amostra espalhadora. Um potencial dependente do tempo  $\delta\mu_\beta(t)$  é aplicado no contato  $\beta$ , e a corrente é medida no contato  $\alpha$ , longe da região de espalhamento. A direção longitudinal  $\hat{z}$  é definida positiva no sentido do reservatório para o contato.  $n, m$  se referem aos modos transversos nos contatos.

### 2.1.1.1 Operador corrente

Vamos partir do operador densidade de corrente de probabilidade, que é dado por

$$\hat{\mathbf{j}}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \nabla \hat{\Psi}(\mathbf{r}) - \left[ \nabla \hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r}) \right] \hat{\Psi}(\mathbf{r}) \right\}, \quad (2.1)$$

onde  $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$  e  $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$  são os operadores de campo que criam e destróem uma partícula na posição  $\mathbf{r}$ , respectivamente. O operador de corrente de carga que atravessa o contato  $\alpha$  (longe da amostra onde há espalhamento dos elétrons) pode ser escrito como

$$\hat{I}_\alpha(z, t) = e \int d\mathbf{r}_\perp \hat{\mathbf{j}}_{z\alpha}(\mathbf{r}, t), \quad (2.2)$$

onde  $\hat{z}$  é a direção longitudinal no contato  $\alpha$ , e a integral é feita em uma seção transversal de  $\alpha$  especificada pelas coordenadas  $\mathbf{r}_\perp$ . A densidade de corrente na direção  $\hat{z}$  é dada por

$$\hat{\mathbf{j}}_{z\alpha}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial z} - \left[ \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t)}{\partial z} \right] \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) \right\}. \quad (2.3)$$

Os operadores de campo  $\hat{\Psi}^\dagger(\mathbf{r})$  e  $\hat{\Psi}(\mathbf{r})$  são definidos como

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}(\mathbf{r}, t) &= \sum_n \psi_n(\mathbf{r}, t) \hat{a}_n \\ &= \sum_n \psi_n(\mathbf{r}) e^{-\frac{i\epsilon_n t}{\hbar}} \hat{a}_n, \end{aligned} \quad (2.4)$$

onde  $n$  representa um autoestado do hamiltoniano do contato. O operador  $\hat{a}_n$  destrói um elétron no estado  $n$ , e pode ser visto como o operador na representação de Heisenberg, em  $t = 0$ . A soma em  $n$  varre todos os estados  $\psi_n(\mathbf{r})$  da base completa.

Longe da amostra, podemos supor que os modos longitudinais (ao longo de  $\hat{\mathbf{z}}$ ) e transversais (perpendiculares à  $\hat{\mathbf{z}}$ ) em um dado terminal  $\alpha$  são separáveis. Como estamos interessados na informação contida na amostra, a forma específica que escolhermos para um contato não deverá ser importante. Na direção longitudinal, o sistema é aberto, e consideramos um gás de elétrons livres caracterizado por um vetor de onda contínuo  $k$ . É conveniente separar os estados incidentes e emergentes (à amostra), e introduzir a energia longitudinal  $\epsilon_\alpha^l(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$  como um número quântico. O modo transverso é quantizado e é descrito pelo índice  $n$  (correspondendo às energias transversais  $\epsilon_{\alpha,n}$ ). Estes estados também são chamados de *canais* transversos. Escrevemos então que a energia total é  $\epsilon_{\alpha,n}^t(k) = \epsilon_{\alpha,n} + \epsilon_\alpha^l(k)$ . Como  $\epsilon_\alpha^l(k)$  é sempre positivo, para uma dada energia total  $\epsilon = \epsilon_{\alpha,n}^t(k)$ , apenas um número finito de canais é acessível. O número de canais no contato  $\alpha$  será denotado por  $N_\alpha(\epsilon)$ .

O operador de campo pode ser expresso nesta base como

$$\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{N_\alpha(\epsilon)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk_{\alpha n} \phi_{\alpha n}(\mathbf{r}_\perp) e^{-\frac{i\epsilon t}{\hbar}} \left[ \hat{a}_{\alpha n}(k_{\alpha n}) e^{ik_{\alpha n} z} + \hat{b}_{\alpha n}(k_{\alpha n}) e^{-ik_{\alpha n} z} \right], \quad (2.5)$$

onde  $\phi_{\alpha n}$  são as funções de onda transversais no contato  $\alpha$  e introduzimos o vetor de onda

$$k_{\alpha n}(\epsilon) = \sqrt{\frac{2m(\epsilon - \epsilon_{\alpha,n}^n)}{\hbar^2}}. \quad (2.6)$$

A direção  $\hat{\mathbf{z}}$  positiva foi definida para os elétrons incidentes na amostra. Desta forma, o operador  $\hat{a}_{\alpha n}(k_{\alpha n})$  ( $\hat{b}_{\alpha n}(k_{\alpha n})$ ) destrói um elétron incidente (emergente) no canal  $n$  e vetor de onda  $k$  do contato  $\alpha$ .

Utilizando a relação entre vetor de onda  $k_{\alpha n}$  e a energia  $\epsilon$  dada pela Eq. 2.6, podemos reescrever a integral na Eq. 2.5 na forma

$$\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{N_\alpha(\epsilon)} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int \frac{d\epsilon}{\hbar v_{\alpha n}(\epsilon)} \phi_{\alpha n}(\mathbf{r}_\perp) e^{-\frac{i\epsilon t}{\hbar}} \left[ \hat{a}_{\alpha n}(k_{\alpha n}) e^{ik_{\alpha n} z} + \hat{b}_{\alpha n}(k_{\alpha n}) e^{-ik_{\alpha n} z} \right], \quad (2.7)$$

onde  $k_{\alpha n} = k_{\alpha n}(\epsilon)$  e a velocidade dos portadores  $v_{\alpha n}(\epsilon)$  é dada por

$$v_{\alpha n}(\epsilon) = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{dk_{\alpha n}(\epsilon)} = \frac{\hbar k_{\alpha n}(\epsilon)}{m}. \quad (2.8)$$

Nesse contexto, é conveniente introduzir os operadores  $\hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon)$  e  $\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon)$  que criam e aniquilam, respectivamente, elétrons incidentes na amostra com energia total  $\epsilon$ , no canal  $n$  do contato  $\alpha$ . Estes operadores podem ser definidos a partir da relação de comutação dos operadores referentes à partículas nos estados descritos pelos números quânticos  $n$  e

$k$ , que é dada por

$$\{a_{\alpha n}^\dagger(k_{\alpha n}), a_{\alpha m}(k'_{\alpha m})\} = \delta(k_{\alpha n} - k'_{\alpha m})\delta_{mn} . \quad (2.9)$$

Utilizando uma função arbitrária  $f(k_{\alpha m})$ , podemos escrever

$$\begin{aligned} \int dk'_{\alpha m} f(k'_{\alpha m}) \{a_{\alpha n}^\dagger(k_{\alpha n}), a_{\alpha m}(k'_{\alpha m})\} &= \int dk'_{\alpha m} f(k'_{\alpha m}) \delta(k_{\alpha n} - k'_{\alpha m}) \delta_{mn} \\ &= f(k_{\alpha n}) \delta_{mn} . \end{aligned} \quad (2.10)$$

Considerando a relação expressa na Eq. 2.6, podemos reescrever a igualdade acima como

$$\int \frac{d\epsilon'}{\hbar v_{\alpha m}(\epsilon')} f(k'_{\alpha m}(\epsilon')) \{a_{\alpha n}^\dagger(k_{\alpha n}), a_{\alpha m}(k'_{\alpha m})\} = f(\epsilon) \delta_{mn} . \quad (2.11)$$

Portanto,

$$[\hbar v_{\alpha m}(\epsilon')]^{-1} \{a_{\alpha n}^\dagger(k_{\alpha n}), a_{\alpha m}(k'_{\alpha m})\} = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{mn} . \quad (2.12)$$

Podemos definir os operadores

$$a_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) = [\hbar v_{\alpha n}(\epsilon)]^{-1/2} a_{\alpha n}^\dagger(k_{\alpha n}) , \quad \text{e} \quad (2.13)$$

$$a_{\alpha n}(\epsilon) = [\hbar v_{\alpha n}(\epsilon)]^{-1/2} a_{\alpha n}(k_{\alpha n}) , \quad (2.14)$$

de forma que

$$\{a_{\alpha n}^\dagger(\epsilon), a_{\alpha m}(\epsilon')\} = \delta(\epsilon - \epsilon') \delta_{mn} . \quad (2.15)$$

Analogamente, podemos também definir os operadores de criação  $\hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon)$  e de aniquilação  $\hat{b}_{\alpha n}(\epsilon)$ , para os elétrons emergentes.

Substituindo estes novos operadores no operador de campo dado pela Eq. 2.7, obtemos que

$$\hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{N_\alpha(\epsilon)} \int \frac{d\epsilon}{[2\pi\hbar v_{\alpha n}(\epsilon)]^{1/2}} \phi_{\alpha n}(\mathbf{r}_\perp) e^{-\frac{i\epsilon t}{\hbar}} \left[ \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) e^{ik_{\alpha n}z} + \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon) e^{-ik_{\alpha n}z} \right] , \quad (2.16)$$

enquanto que o operador de campo de criação é obtido tomando o complexo conjugado do expressão acima, ou seja,

$$\hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=1}^{N_\alpha(\epsilon)} \int \frac{d\epsilon}{[2\pi\hbar v_{\alpha n}(\epsilon)]^{1/2}} \phi_{\alpha n}^*(\mathbf{r}_\perp) e^{\frac{i\epsilon t}{\hbar}} \left[ \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) e^{-ik_{\alpha n}z} + \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) e^{ik_{\alpha n}z} \right] . \quad (2.17)$$

Estas expressões serão utilizadas para calcular o operador corrente, cuja expressão pode ser reescrita substituindo a Eq. 2.3 na Eq. 2.2. Ao fazer isto, teremos

$$\hat{I}_\alpha(z, t) = e \int d\mathbf{r}_\perp \frac{\hbar}{2mi} \left\{ \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t)}{\partial z} - \left[ \frac{\partial \hat{\Psi}_\alpha^\dagger(\mathbf{r}, t)}{\partial z} \right] \hat{\Psi}_\alpha(\mathbf{r}, t) \right\} . \quad (2.18)$$

Substituindo as Eqs. 2.16 e 2.17 no primeiro termo entre chaves da expressão acima, obtemos

$$\begin{aligned} \hat{I}_\alpha^{(1)}(z, t) = & \frac{e\hbar}{2mi} \sum_{m,n} \int \frac{d\epsilon}{[2\pi\hbar v_{\alpha n}(\epsilon)]^{1/2}} \frac{d\epsilon'}{[2\pi\hbar v_{\alpha m}(\epsilon')]^{1/2}} e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} \\ & \times \int d\mathbf{r}_\perp \phi_{\alpha n}^*(\mathbf{r}_\perp) \phi_{\alpha m}(\mathbf{r}_\perp) \left[ \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) e^{-ik_{\alpha n}(\epsilon)z} + \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) e^{ik_{\alpha n}(\epsilon)z} \right] \\ & \times \left[ ik_{\alpha m}(\epsilon') \hat{a}_{\alpha m}(\epsilon') e^{ik_{\alpha m}(\epsilon')z} - ik_{\alpha m}(\epsilon') \hat{b}_{\alpha m}(\epsilon') e^{-ik_{\alpha m}(\epsilon')z} \right]. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Utilizando a ortogonalidade dos estados transversos, i.e.,  $\int d\mathbf{r}_\perp \phi_{\alpha n}^*(\mathbf{r}_\perp) \phi_{\alpha m}(\mathbf{r}_\perp) = \delta_{mn}$  e a Eq. 2.8 para  $v_{\alpha n}(\epsilon)$ , podemos escrever

$$\begin{aligned} \hat{I}_\alpha^{(1)}(z, t) = & \frac{e}{4\pi\hbar} \sum_n \int \frac{d\epsilon d\epsilon'}{[v_{\alpha n}(\epsilon)v_{\alpha n}(\epsilon')]^{1/2}} e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} \\ & \times \left[ \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) e^{-ik_{\alpha n}(\epsilon)z} + \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) e^{ik_{\alpha n}(\epsilon)z} \right] \\ & \times \left[ v_{\alpha n}(\epsilon') \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon') e^{ik_{\alpha n}(\epsilon')z} - v_{\alpha n}(\epsilon') \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon') e^{-ik_{\alpha n}(\epsilon')z} \right]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Da mesma forma, o segundo termo da Eq. 2.18 será dado por

$$\begin{aligned} \hat{I}_\alpha^{(2)}(z, t) = & \frac{e}{4\pi\hbar} \sum_n \int \frac{d\epsilon d\epsilon'}{[v_{\alpha n}(\epsilon)v_{\alpha n}(\epsilon')]^{1/2}} e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} \\ & \times \left[ v_{\alpha n}(\epsilon) \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) e^{-ik_{\alpha n}(\epsilon)z} - v_{\alpha n}(\epsilon) \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) e^{ik_{\alpha n}(\epsilon)z} \right] \\ & \times \left[ \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon') e^{ik_{\alpha n}(\epsilon')z} + \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon') e^{-ik_{\alpha n}(\epsilon')z} \right]. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Somando os dois termos calculados acima, temos que o operador corrente é

$$\begin{aligned} \hat{I}_\alpha(z, t) = & \frac{e}{4\pi\hbar} \sum_n \int \frac{d\epsilon d\epsilon'}{[v_{\alpha n}(\epsilon)v_{\alpha n}(\epsilon')]^{1/2}} e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} \left\{ [v_{\alpha n}(\epsilon) + v_{\alpha n}(\epsilon')] \right. \\ & \times \left[ e^{i(k_{\alpha n}(\epsilon') - k_{\alpha n}(\epsilon))z} \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon') - e^{i(k_{\alpha n}(\epsilon) - k_{\alpha n}(\epsilon'))z} \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon') \right] \\ & + [v_{\alpha n}(\epsilon) - v_{\alpha n}(\epsilon')] \\ & \times \left. \left[ e^{-i(k_{\alpha n}(\epsilon') + k_{\alpha n}(\epsilon))z} \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon') - e^{i(k_{\alpha n}(\epsilon) + k_{\alpha n}(\epsilon'))z} \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon') \right] \right\}. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Até aqui não fizemos qualquer aproximação, exceto pelo fato de termos considerado que os modos transversais e longitudinais são separáveis nos contatos. A expressão obtida, entretanto, é bastante complicada e possui uma dependência com a posição  $z$  indesejada. Porém, ela pode ser simplificada levando-se em conta que em várias quantidades de interesse (como, por exemplo, a corrente média, o ruído, ou momentos maiores da distribuição de corrente), as energias envolvidas no espalhamento  $\epsilon$  e  $\epsilon'$  ou coincidem, ou são muito próximas entre si. Isso equivale a considerar apenas o espalhamento elástico ou quase-

elástico, onde as partículas espalhadas saem com energia igual ou muito próxima das partículas incidentes. Por outro lado, as velocidades  $v_n(\epsilon)$  variam muito lentamente com a energia na escala da energia de Fermi, i.e., a relação de dispersão não apresenta nenhuma singularidade próximo à  $\epsilon_F$ . Portanto, podemos desprezar sua dependência com a energia, e reduzir a Eq. 2.22 para a forma

$$\hat{I}_\alpha(t) \simeq \frac{e}{h} \sum_n \int d\epsilon d\epsilon' e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} \left[ \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon') - \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon') \right]. \quad (2.23)$$

Esta expressão para o operador corrente é um dos resultados mais importantes e utilizados da Ref. [36]. Ela pode também ser escrita em termos da matriz de espalhamento  $\hat{S}$ , lembrando que a relação entre os elétrons incidentes e emergentes é

$$\hat{b}_{\alpha n}(\epsilon) = \sum_{\beta m} S_{\alpha\beta, nm}(\epsilon) \hat{a}_{\beta m}(\epsilon). \quad (2.24)$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  se referem aos contatos e  $n$  e  $m$  aos canais. O operador de criação será

$$\hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) = \sum_{\beta m} \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon). \quad (2.25)$$

Utilizamos estes resultados para calcular o segundo termo da Eq. 2.23, que envolve

$$\sum_n \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon') = \sum_{\beta\gamma} \sum_{mnk} \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon) S_{\alpha\gamma, nk}(\epsilon') \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon'). \quad (2.26)$$

Desta forma, ficamos com um operador corrente que envolve apenas os operadores relacionados aos elétrons incidentes e à matriz de espalhamento:

$$\begin{aligned} \hat{I}_\alpha(t) &= \frac{e}{h} \sum_{\beta\gamma} \sum_{mnk} \int d\epsilon d\epsilon' e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) \left[ \delta_{nm} \delta_{nk} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\gamma} - S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon) S_{\alpha\gamma, nk}(\epsilon') \right] \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon') \\ &= \frac{e}{h} \sum_{\beta\gamma} \sum_{mk} \int d\epsilon d\epsilon' e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) \left[ \delta_{mk} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\gamma} - \sum_n S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon) S_{\alpha\gamma, nk}(\epsilon') \right] \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon') \\ &= \frac{e}{h} \sum_{\beta\gamma} \sum_{mk} \int d\epsilon d\epsilon' e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) A_{\beta\gamma}^{mk}(\alpha; \epsilon, \epsilon') \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon'), \end{aligned} \quad (2.27)$$

onde a matriz  $A$  é definida como

$$A_{\beta\gamma}^{mk}(\alpha; \epsilon, \epsilon') = \delta_{mk} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\gamma} - \sum_n S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon) S_{\alpha\gamma, nk}(\epsilon'). \quad (2.28)$$

### 2.1.1.2 Potencial externo independente do tempo

Para calcular a corrente gerada por um potencial externo, escrevemos inicialmente o valor esperado do operador corrente obtido na Eq. 2.27,

$$\langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle = \frac{e}{h} \sum_{\beta\gamma} \sum_{mk} \int d\epsilon d\epsilon' e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} A_{\beta\gamma}^{mk}(\alpha; \epsilon, \epsilon') \langle \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon') \rangle . \quad (2.29)$$

Para elétrons em equilíbrio térmico nos contatos, o valor esperado dos operadores de criação e aniquilação de um gás de Fermi são da forma

$$\langle \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon') \rangle = \delta_{\beta\gamma} \delta_{mk} \delta(\epsilon - \epsilon') f_\beta(\epsilon) . \quad (2.30)$$

Ficamos então com

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle &= \frac{e}{h} \sum_{\beta\gamma} \sum_{mk} \int d\epsilon d\epsilon' e^{\frac{i(\epsilon-\epsilon')t}{\hbar}} A_{\beta\gamma}^{mk}(\alpha; \epsilon, \epsilon') \delta_{\beta\gamma} \delta_{mk} \delta(\epsilon - \epsilon') f_\beta(\epsilon) \\ &= \frac{e}{h} \sum_{\beta m} \int d\epsilon A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon) f_\beta(\epsilon) \\ &= \frac{e}{h} \sum_{\beta m} \int d\epsilon \left[ \delta_{\alpha\beta} - \sum_n S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon) S_{\alpha\beta, nm}(\epsilon) \right] f_\beta(\epsilon) \\ &= \frac{e}{h} \sum_{\beta} \int d\epsilon \left[ N_\alpha \delta_{\alpha\beta} - \text{Tr} \left( \underline{S}_{\beta\alpha}^\dagger \underline{S}_{\alpha\beta} \right) \right] f_\beta(\epsilon) , \end{aligned} \quad (2.31)$$

onde  $\underline{S}$  é a matriz de espalhamento nos canais, e o traço é tomado sobre os canais do contato  $\alpha$ .

Colocando uma voltagem  $V_\beta$  no reservatório  $\beta$ , o potencial químico sai do valor de equilíbrio  $\mu_0$  para  $\mu_\beta = \mu_0 + eV_\beta$ . Desta forma,

$$f_\beta(\epsilon) \simeq f_0 + eV_\beta \frac{df_0}{d\epsilon} , \quad (2.32)$$

onde  $f_0$  é a distribuição de equilíbrio, igual em todos os contatos. Assim,

$$\langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle = \frac{e^2}{h} \sum_{\beta} V_\beta \int d\epsilon \left[ N_\alpha \delta_{\alpha\beta} - \text{Tr} \left( \underline{S}_{\beta\alpha}^\dagger \underline{S}_{\alpha\beta} \right) \right] \frac{df_0}{d\epsilon} , \quad (2.33)$$

pois o termo proporcional a  $f_0$  envolve  $N_\alpha - \text{Tr} \left( \underline{R}_{\alpha\alpha} + \sum_{\beta} \underline{T}_{\alpha\beta} \right)$ , onde  $\underline{R}_{\alpha\alpha}$  é a matriz de reflexão nos canais do contato  $\alpha$  e  $\underline{T}_{\alpha\beta}$  é a matriz de transmissão dos canais do contato  $\alpha$  para o  $\beta$ . Este termo é nulo devido à conservação da corrente.

### 2.1.1.3 Potencial externo dependente do tempo

Para obter a corrente gerada por potenciais oscilatórios aplicados aos terminais, precisamos primeiro descrever a dinâmica dos elétrons neles. O hamiltoniano dos elétrons em um dado contato  $\alpha$  pode ser escrito da forma

$$\hat{H} = \sum_n \int dk \left[ \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(k) \hat{a}_{\alpha n}(k) + \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(k) \hat{b}_{\alpha n}(k) \right] (\epsilon_n(k) - \mu_0 - \delta\mu_\alpha(t)) . \quad (2.34)$$

O operador  $\hat{a}_{\alpha n}^\dagger(k)$  ( $\hat{a}_{\alpha n}(k)$ ) cria (destrói) um elétron incidente no contato  $\alpha$ , canal  $n$  e vetor de onda  $k$ , enquanto o operador  $\hat{b}_{\alpha n}^\dagger(k)$  ( $\hat{b}_{\alpha n}(k)$ ) cria (destrói) um elétron emergente no contato  $\alpha$ , canal  $n$  e vetor de onda  $k$ .

Tratando novamente a energia  $\epsilon$  como um número quântico, podemos escrever

$$\hat{H} = \sum_n \int \frac{d\epsilon}{\hbar v_{\alpha n}(\epsilon)} \left[ \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(k_{\alpha n}) \hat{a}_{\alpha n}(k_{\alpha n}) + \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(k_{\alpha n}) \hat{b}_{\alpha n}(k_{\alpha n}) \right] (\epsilon - \mu_0 - \delta\mu_\alpha(t)) , \quad (2.35)$$

onde  $k_{\alpha n} = k_{\alpha n}(\epsilon)$ , dada pela Eq. 2.6, e a velocidade  $v_{\alpha n}(\epsilon)$  foi obtida na Eq. 2.8. Usando os operadores de criação e aniquilação definidos nas Eqs. 2.13 e 2.14, obtemos

$$\hat{H} = \sum_n \int d\epsilon \left[ \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) + \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon) \right] (\epsilon - \mu_0 - \delta\mu_\alpha(t)) . \quad (2.36)$$

Note que o hamiltoniano não perturbado é

$$\hat{H}_0 = \sum_n \int d\epsilon \left[ \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) + \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon) \right] (\epsilon - \mu_0) , \quad (2.37)$$

com autoestados de energia  $\epsilon - \mu_0$ , e o hamiltoniano que descreve a perturbação dependente do tempo  $\delta\mu_\alpha(t)$  é dado por

$$\hat{H}_1 = - \sum_n \int d\epsilon \delta\mu_\alpha(t) \left[ \hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) + \hat{b}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon) \hat{b}_{\alpha n}(\epsilon) \right] . \quad (2.38)$$

Utilizando a equação de movimento do operador  $\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t)$  na representação de Heisenberg (lembrando que  $\epsilon$  é um índice), teremos

$$\begin{aligned} \dot{\hat{a}}_{\alpha n}(\epsilon, t) &= \frac{1}{i\hbar} \left[ \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon), \hat{H} \right] (t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int d\epsilon' (\epsilon' - \mu_0 - \delta\mu_\alpha(t)) \left[ \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon), \hat{a}_{\alpha m}^\dagger(\epsilon') \hat{a}_{\alpha m}(\epsilon') \right] (t) . \end{aligned} \quad (2.39)$$

Utilizando as relações de comutação entre  $\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon)$  e  $\hat{a}_{\alpha n}^\dagger(\epsilon)$  explicitadas na Eq. 2.15, além

da identidade

$$[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\} , \quad (2.40)$$

temos que

$$\begin{aligned} \dot{\hat{a}}_{\alpha n}(\epsilon, t) &= \frac{1}{i\hbar} \sum_m \int d\epsilon' [\epsilon' - \mu_0 - \delta\mu_\alpha(t)] \delta_{mn} \delta(\epsilon - \epsilon') \hat{a}_{\alpha m}(\epsilon', t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\epsilon - \mu_0 - \delta\mu_\alpha(t)] \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t) . \end{aligned} \quad (2.41)$$

Resolvendo esta equação por separação de variáveis, obtemos

$$\ln \left[ \frac{\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t)}{\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t=0)} \right] = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' [\epsilon - \mu_0 - \delta\mu_\alpha(t')] , \quad (2.42)$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t) &= \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t=0) \exp \left\{ \frac{1}{i\hbar} \int_0^t dt' [\epsilon - \mu_0 - \delta\mu_\alpha(t')] \right\} \\ &= \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) e^{-\frac{i(\epsilon - \mu_0)t}{\hbar} - i\phi_\alpha(t)} , \end{aligned} \quad (2.43)$$

onde fizemos, por simplicidade,  $\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t=0) = \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon)$ . Como consequência da perturbação  $\delta\mu_\alpha$  no potencial químico, a evolução no tempo do operador  $\hat{a}_{\alpha n}$  adquire uma fase extra  $\phi_\alpha$  dada por

$$\phi_\alpha(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t dt' \delta\mu_\alpha(t') \quad (2.44)$$

Considerando que a perturbação  $\hat{H}_1$  é pequena, i.e., a variação no potencial químico  $\delta\mu_\alpha$  é pequena comparada à largura de banda, podemos expandir a Eq. 2.43 até primeira ordem em  $\phi_\alpha$ , ou seja,

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t) &= \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) e^{-\frac{i(\epsilon - \mu_0)t}{\hbar}} e^{-i\phi_\alpha(t)} \\ &\simeq \hat{a}_{\alpha n}^{(0)}(\epsilon, t) [1 - i\phi_\alpha(t)] , \end{aligned} \quad (2.45)$$

onde

$$\hat{a}_{\alpha n}^{(0)}(\epsilon, t) = \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) e^{-\frac{i(\epsilon - \mu_0)t}{\hbar}} \quad (2.46)$$

é a evolução temporal de  $\hat{a}_{\alpha n}$  sem perturbação.

Para um potencial químico harmônico da forma

$$\begin{aligned} \delta\mu_\alpha(t) &= \delta\mu_\alpha \cos(\omega t) \\ &= \delta\mu_\alpha \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2} , \end{aligned} \quad (2.47)$$

a diferença de fase mostrada na Eq. 2.44 se torna

$$\begin{aligned}\phi_\alpha(t) &= -\frac{\delta\mu_\alpha}{2\hbar} \int_0^t dt' \left( e^{i\omega t'} + e^{-i\omega t'} \right) \\ &= -\frac{\delta\mu_\alpha}{2i\hbar\omega} \left( e^{i\omega t} - e^{-i\omega t} \right)\end{aligned}\quad (2.48)$$

Substituindo este resultado na Eq. 2.45

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t) &\simeq \hat{a}_{\alpha n}^{(0)}(\epsilon, t) \left[ 1 + \frac{\delta\mu_\alpha}{2\hbar\omega} \left( e^{i\omega t} - e^{-i\omega t} \right) \right] \\ &= \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) e^{-\frac{i(\epsilon-\mu_0)t}{\hbar}} + \frac{\delta\mu_\alpha}{2\hbar\omega} \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) e^{-\frac{i(\epsilon-\hbar\omega-\mu_0)t}{\hbar}} - \frac{\delta\mu_\alpha}{2\hbar\omega} \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) e^{-\frac{i(\epsilon+\hbar\omega-\mu_0)t}{\hbar}},\end{aligned}\quad (2.49)$$

Os operadores podem ser  $\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon)$  podem ser vistos também como  $\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon - \mu_0)$ , ou seja, operadores que criam elétrons com energia  $\epsilon$ , acima do potencial químico  $\mu_0$ . Desta forma, podemos fazer as mudanças de variáveis  $\mu = \mu_0 \pm \hbar\omega$  no segundo e terceiro termos da Eq. 2.49 para obter

$$\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon - \mu_0) e^{-\frac{i(\epsilon-\mu_0\mp\hbar\omega)t}{\hbar}} = \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon - \mu \pm \hbar\omega) e^{-\frac{i(\epsilon-\mu)t}{\hbar}}. \quad (2.50)$$

Como estamos integrando sobre todos os valores de energia, podemos redefinir o potencial químico de forma que

$$\begin{aligned}\hat{a}_{\alpha n}(\epsilon, t) &= \hat{a}_{\alpha n}^1(\epsilon) e^{-\frac{i(\epsilon-\mu_0)t}{\hbar}} \\ &\simeq \left\{ \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon) + \frac{\delta\mu_\alpha}{2\hbar\omega} \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon + \hbar\omega) - \frac{\delta\mu_\alpha}{2\hbar\omega} \hat{a}_{\alpha n}(\epsilon - \hbar\omega) \right\} e^{-\frac{i(\epsilon-\mu_0)t}{\hbar}}.\end{aligned}\quad (2.51)$$

Esta é a evolução temporal do operador de criação, até primeira ordem em  $\delta\mu_\alpha$ , devido à perturbação harmônica de frequência  $\omega$  dada pela Eq. 2.47. Note que ele depende dos operadores de criação com energias  $\epsilon + \hbar\omega$  e  $\epsilon - \hbar\omega$  no equilíbrio. Para obter a corrente, substituímos o operador perturbado em  $t = 0$ ,  $\hat{a}_{\alpha n}^1(\epsilon)$ , no valor esperado da Eq. 2.29. Esta média será dada por

$$\begin{aligned}\langle \hat{a}_{\beta m}^{1\dagger}(\epsilon) \hat{a}_{\gamma k}^1(\epsilon') \rangle &\simeq \left\langle \left\{ \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) + \frac{\delta\mu_\beta}{2\hbar\omega} \left[ \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon + \hbar\omega) - \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon - \hbar\omega) \right] \right\} \right. \\ &\quad \left. \times \left\{ \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon') + \frac{\delta\mu_\gamma}{2\hbar\omega} \left[ \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon' + \hbar\omega) - \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon' - \hbar\omega) \right] \right\} \right\rangle.\end{aligned}\quad (2.52)$$

Lembrando que o valor esperado dos operadores de criação e aniquilação no equilíbrio

é dado pela Eq. 2.30, obtemos, em resposta linear na perturbação  $\delta\mu$ ,

$$\begin{aligned}
\langle \hat{a}_{\beta m}^{1\dagger}(\epsilon) \hat{a}_{\gamma k}^1(\epsilon') \rangle &\simeq \langle \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon') \rangle \\
&+ \frac{\delta\mu_\beta}{2\hbar\omega} \left[ \langle \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon + \hbar\omega) \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon') \rangle - \langle \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon - \hbar\omega) \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon') \rangle \right] \\
&+ \frac{\delta\mu_\gamma}{2\hbar\omega} \left[ \langle \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon' + \hbar\omega) \rangle - \langle \hat{a}_{\beta m}^\dagger(\epsilon) \hat{a}_{\gamma k}(\epsilon' - \hbar\omega) \rangle \right] \\
&= \delta_{\beta\gamma} \delta_{mk} \delta(\epsilon - \epsilon') f_0 \\
&+ \frac{\delta\mu_\beta}{2\hbar\omega} \delta_{\beta\gamma} \delta_{mk} [\delta(\epsilon + \hbar\omega - \epsilon') f_0(\epsilon + \hbar\omega) - \delta(\epsilon - \hbar\omega - \epsilon') f_0(\epsilon - \hbar\omega)] \\
&+ \frac{\delta\mu_\gamma}{2\hbar\omega} \delta_{\beta\gamma} \delta_{mk} [\delta(\epsilon - \epsilon' - \hbar\omega) f_0(\epsilon) - \delta(\epsilon - \epsilon' + \hbar\omega) f_0(\epsilon)] .
\end{aligned} \tag{2.53}$$

Note que, como estamos considerando que o sistema sem perturbação tem o mesmo potencial químico em todos os contatos (como pode ser visto no hamiltoniano que descreve o sistema, dado pela Eq. 2.37), os termos são proporcionais à  $f_0$ , distribuição de Fermi-Dirac no equilíbrio, comum para todos os contatos. Se não considerássemos a mesma distribuição, a corrente gerada por esta diferença de potencial nos contatos seria a mesma que obtemos na Eq. 2.33. Aqui, queremos encontrar apenas a variação na corrente  $\delta\langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle$  devido à perturbação oscilatória  $\hat{H}_1$ . Utilizando a Eq. 2.53 na Eq. 2.29, ficamos com

$$\begin{aligned}
\delta\langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle &= \frac{e}{\hbar} \sum_{\beta m} \frac{\delta\mu_\beta}{2\hbar\omega} \int d\epsilon \left\{ e^{-i\omega t} A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon + \hbar\omega) [f_0(\epsilon + \hbar\omega) - f_0(\epsilon)] \right. \\
&\quad \left. + e^{i\omega t} A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon - \hbar\omega) [f_0(\epsilon) - f_0(\epsilon - \hbar\omega)] \right\} .
\end{aligned} \tag{2.54}$$

Para a perturbação harmônica, será mais simples calcular a resposta da corrente no domínio das frequências. Desta forma, fazemos a transformada de Fourier para encontrar  $\delta\langle \hat{I}_\alpha(\omega) \rangle$ , tomando o cuidado para evitar a duplicidade da variável  $\omega$ . Assim,

$$\begin{aligned}
\delta\langle \hat{I}_\alpha(\omega) \rangle &= \int dt e^{i\omega t} \delta\langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle \\
&= \frac{e}{\hbar} \sum_{\beta m} \frac{\delta\mu_\beta}{2\hbar\omega'} \int d\epsilon \left\{ 2\pi\delta(\omega - \omega') A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon + \hbar\omega') [f_0(\epsilon + \hbar\omega') - f_0(\epsilon)] \right. \\
&\quad \left. + 2\pi\delta(\omega + \omega') A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon - \hbar\omega') [f_0(\epsilon) - f_0(\epsilon - \hbar\omega')] \right\} ,
\end{aligned} \tag{2.55}$$

onde  $\omega'$  é a frequência de excitação. Utilizando as funções  $\delta(\omega \pm \omega')$  para filtrar as funções

que as multiplicam com os argumentos correspondentes, teremos

$$\begin{aligned} \delta\langle\hat{I}_\alpha(\omega)\rangle &= \frac{e}{\hbar} \sum_{\beta m} \pi \delta\mu_\beta \int d\epsilon \left\{ \delta(\omega - \omega') A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon + \hbar\omega) \frac{f_0(\epsilon + \hbar\omega) - f_0(\epsilon)}{\hbar\omega} \right. \\ &\quad \left. + \delta(\omega + \omega') A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon + \hbar\omega) \frac{f_0(\epsilon) - f_0(\epsilon + \hbar\omega)}{-\hbar\omega} \right\} \quad (2.56) \\ &= \frac{e}{\hbar} \sum_{\beta m} \int d\epsilon A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon + \hbar\omega) \frac{f_0(\epsilon + \hbar\omega) - f_0(\epsilon)}{\hbar\omega} \pi \delta\mu_\beta [\delta(\omega - \omega') + \delta(\omega + \omega')] . \end{aligned}$$

A transformada de Fourier do potencial mostrado na Eq. 2.47 é

$$\begin{aligned} \delta\mu_\alpha(\omega) &= \int dt e^{i\omega t} \delta\mu_\alpha(t) \\ &= \frac{\delta\mu_\alpha}{2} \int dt \left( e^{i(\omega + \omega')t} + e^{i(\omega - \omega')t} \right) \quad (2.57) \\ &= \pi \delta\mu_\alpha [\delta(\omega + \omega') + \delta(\omega - \omega')] . \end{aligned}$$

Identificando este termo na Eq. 2.56, obtemos finalmente que

$$\delta\langle\hat{I}_\alpha(\omega)\rangle = \frac{e}{\hbar} \sum_{\beta m} \int d\epsilon A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon + \hbar\omega) \frac{f_0(\epsilon + \hbar\omega) - f_0(\epsilon)}{\hbar\omega} \delta\mu_\beta(\omega) , \quad (2.58)$$

onde, pela definição da matriz  $A$ , dada pela Eq. 2.28,

$$\begin{aligned} \sum_m A_{\beta\beta}^{mm}(\alpha; \epsilon, \epsilon + \hbar\omega) &= \sum_m \delta_{\alpha\beta} - \sum_{mn} S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon) S_{\alpha\beta, nm}(\epsilon + \hbar\omega) \\ &= \text{Tr} \left[ \underline{1}_{\alpha\beta} - \underline{S}_{\beta\alpha}^\dagger(\epsilon) \underline{S}_{\alpha\beta}(\epsilon + \hbar\omega) \right] . \quad (2.59) \end{aligned}$$

Vamos agora considerar a aproximação adiabática, na qual a frequência de excitação  $\omega$  é pequena quando comparada com as frequências naturais do sistema (e.g., frequências de transição entre sítios vizinhos). Isto equivale a fazer uma perturbação tão lenta que, a cada instante, os elétrons estão em equilíbrio com o sistema, ou seja, a matriz de espalhamento varia muito pouco com a energia. Com esta aproximação, podemos expandir  $\underline{S}_{\alpha\beta}(\epsilon + \hbar\omega)$  da forma

$$\underline{S}_{\alpha\beta}(\epsilon + \hbar\omega) \simeq \underline{S}_{\alpha\beta}(\epsilon) + \hbar\omega \frac{d\underline{S}_{\alpha\beta}(\epsilon)}{d\epsilon} . \quad (2.60)$$

Assim, a Eq. 2.58 se torna

$$\delta\langle\hat{I}_\alpha(\omega)\rangle \simeq \frac{e}{\hbar} \sum_{\beta} \delta\mu_\beta(\omega) \int d\epsilon \frac{df_0(\epsilon)}{d\epsilon} \text{Tr} \left[ \underline{1}_{\alpha\beta} - \underline{S}_{\beta\alpha}^\dagger(\epsilon) \underline{S}_{\alpha\beta}(\epsilon) - \hbar\omega \underline{S}_{\beta\alpha}^\dagger(\epsilon) \frac{d\underline{S}_{\alpha\beta}(\epsilon)}{d\epsilon} \right] . \quad (2.61)$$

Ao fazer a transformada de Fourier, os dois primeiros termos darão origem à corrente calculada na Eq. 2.33, que é nula para uma variação comum nos potenciais químicos dos

contatos. O termo restante é

$$\begin{aligned}\delta\langle\hat{I}_\alpha(t)\rangle &= \frac{e}{2\pi i} \sum_\beta \frac{1}{2\pi} \int d\omega(-i\hbar\omega) e^{-i\omega t} \delta\mu(\omega) \int d\epsilon \frac{df_0(\epsilon)}{d\epsilon} \text{Tr} \left[ \underline{S}_{\beta\alpha}^\dagger(\epsilon) \frac{d\underline{S}_{\alpha\beta}(\epsilon)}{d\epsilon} \right] \\ &= \frac{e}{2\pi i} \sum_\beta \int d\epsilon \frac{df_0(\epsilon)}{d\epsilon} \text{Tr} \left[ \underline{S}_{\beta\alpha}^\dagger(\epsilon) \frac{d\underline{S}_{\alpha\beta}(\epsilon)}{d\epsilon} \right] \frac{d\delta\mu(\omega)}{dt}.\end{aligned}\quad (2.62)$$

Pela unitariedade da matriz de espalhamento, que pode ser escrita como

$$\underline{S}^\dagger(\epsilon)\underline{S}(\epsilon) = \hat{1}, \quad (2.63)$$

podemos obter, por uma simples derivação em relação à energia,

$$\underline{S}^\dagger(\epsilon) \frac{d\underline{S}(\epsilon)}{d\epsilon} = -\frac{d\underline{S}^\dagger(\epsilon)}{d\epsilon} \underline{S}(\epsilon). \quad (2.64)$$

Retornando à Eq. 2.62,

$$\delta\langle\hat{I}_\alpha(t)\rangle = -\frac{e}{2\pi i} \sum_{\beta,mn} \int d\epsilon \frac{df_0(\epsilon)}{d\epsilon} \left[ \frac{dS_{\beta\alpha,mn}^*(\epsilon)}{d\epsilon} S_{\alpha\beta,nm}(\epsilon) \right] \frac{d\delta\mu(\omega)}{dt}. \quad (2.65)$$

À  $T = 0K$ , temos que

$$-\frac{\partial f_0(\epsilon)}{\partial\epsilon} = \delta(\epsilon - \epsilon_F). \quad (2.66)$$

Sendo assim, a corrente gerada por um potencial oscilatório comum nos potenciais químicos de todos os contatos é

$$\delta\langle\hat{I}_\alpha(t)\rangle = \frac{e}{2\pi i} \sum_{\beta,mn} \left[ \frac{dS_{\beta\alpha,mn}^*(\epsilon)}{d\epsilon} S_{\alpha\beta,nm}(\epsilon) \right]_{\epsilon=\epsilon_F} \frac{d\delta\mu(\omega)}{dt}. \quad (2.67)$$

Esta corrente, em geral, não é nula, mesmo para variações iguais em todos os terminais. Isto significa que a corrente não é invariante sob um deslocamento comum dos potenciais de todas as voltagens aplicadas. Em outras palavras, esta descrição prevê uma corrente que não é conservada, e portanto ela não descreve corretamente a divisão das correntes entre os contatos. Isto acontece devido às cargas adicionais levadas ao condutor pela perturbação dependente do tempo, que criam um potencial coulombiano interno  $U_i(\mathbf{r}, t)$ , e que não foram consideradas na descrição anterior.

## 2.1.2 Resposta a um potencial interno

Vamos então encontrar a resposta da corrente devido a um parâmetro *interno* do sistema,  $X_i(t)$ , que varia lentamente no tempo. Vamos supor que este parâmetro oscila de maneira harmônica com frequência  $\omega$  e está confinado à amostra. Um fluxo de elétrons incidentes com energia  $\epsilon$ , ao ser espalhado, pode ganhar ou perder quantas de energia  $\hbar\omega$  [39]. Portanto, o estado emergente será caracterizado pela energia  $\epsilon_\ell = \epsilon + \ell\hbar\omega$ , com  $\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Se o espalhamento independente do tempo pode ser descrito por uma matriz de espalhamento  $\hat{S}(\epsilon, X_i)$ , ao considerar a variação no tempo de  $X_i(t)$ , na aproximação adiabática a matriz varia muito pouco dentro do intervalo de tempo em que um elétron interage com a amostra. Desta forma, o espalhamento é descrito pela matriz de espalhamento  $\hat{S}(\epsilon, X_i(t))$ . Como estamos supondo uma perturbação periódica, i.e.,  $X_i(t) = X_i(t + 2\pi/\omega)$ , podemos expandir a matriz de espalhamento em uma série de Fourier

$$\hat{S}(\epsilon, X_i(t)) = \sum_{\ell=-\infty}^{\infty} \hat{S}_0^\ell(\epsilon) e^{-i\ell\omega t}, \quad (2.68)$$

onde os coeficientes  $\hat{S}_0^\ell(\epsilon)$  são dados pela transformada inversa

$$\hat{S}_0^\ell(\epsilon) = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} dt e^{i\ell\omega t} \hat{S}(\epsilon, X_i(t)). \quad (2.69)$$

Estes coeficientes determinam as amplitudes de espalhamento das partículas que incidem com energia  $\epsilon$  e emergem com energia  $\epsilon_\ell$ . Desta forma, podemos definir as matrizes de espalhamento de Floquet como

$$\hat{S}(\epsilon + \ell\hbar\omega, \epsilon) = \hat{S}(\epsilon, \epsilon - \ell\hbar\omega) = \hat{S}_0^\ell(\epsilon), \quad (2.70)$$

de modo que o operador de aniquilação  $\hat{b}_{\alpha n}$  de um elétron emergente no canal  $n$  do contato  $\alpha$  podem ser escritos em termos dos operadores  $\hat{a}_{\beta m}$  de elétrons incidentes no canal  $m$  do contato  $\beta$  da forma

$$\hat{b}_{\alpha n}(\epsilon) = \sum_{\beta, m} \sum_{\ell} S_{\alpha\beta, nm}(\epsilon, \epsilon - \ell\hbar\omega) \hat{a}_{\beta m}(\epsilon - \ell\hbar\omega). \quad (2.71)$$

Escrevendo o valor esperado do operador corrente escrito na Eq. 2.23 e substituindo a Eq. 2.71, teremos

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle = & \frac{e}{h} \sum_n \int d\epsilon \left[ f_\alpha(\epsilon) \right. \\ & \left. - \sum_{\beta,m} \sum_{\ell\ell'} e^{i(\ell'-\ell)\omega t} S_{\beta\alpha,mn}^*(\epsilon - \ell'\hbar\omega, \epsilon) S_{\alpha\beta,nm}(\epsilon + \ell\hbar\omega, \epsilon) f_\beta(\epsilon - \ell'\hbar\omega) \right], \end{aligned} \quad (2.72)$$

onde já utilizamos a Eq. 2.30 para os valores esperados dos operadores de criação e aniquilação. Com o auxílio das Eqs. 2.68 e 2.70, não é difícil de ver que

$$\sum_{\beta,m} \sum_{\ell\ell'} e^{i(\ell'-\ell)\omega t} S_{\beta\alpha,mn}^*(\epsilon - \ell'\hbar\omega, \epsilon) S_{\alpha\beta,nm}(\epsilon + \ell\hbar\omega, \epsilon) = \sum_{\beta,m} S_{\beta\alpha,mn}^*(\epsilon, t) S_{\alpha\beta,nm}(\epsilon, t) = 1, \quad (2.73)$$

e, portanto,

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle = & \frac{e}{h} \sum_{\beta,mn} \int d\epsilon \sum_{\ell\ell'} e^{i(\ell'-\ell)\omega t} S_{\beta\alpha,mn}^*(\epsilon - \ell'\hbar\omega, \epsilon) S_{\alpha\beta,nm}(\epsilon + \ell\hbar\omega, \epsilon) \\ & \times [f_\alpha(\epsilon) - f_\beta(\epsilon - \ell'\hbar\omega)]. \end{aligned} \quad (2.74)$$

Supondo todos os contatos com um mesmo potencial químico, e portanto, mesma distribuição  $f_0(\epsilon)$ , além de considerar novamente a aproximação adiabática,

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle = & \frac{e}{2\pi i} \sum_{\beta,mn} \int d\epsilon \frac{df_0(\epsilon)}{d\epsilon} \sum_{\ell\ell'} i\ell'\omega e^{i(\ell'-\ell)\omega t} S_{\beta\alpha,mn}^*(\epsilon - \ell'\hbar\omega, \epsilon) S_{\alpha\beta,nm}(\epsilon + \ell\hbar\omega, \epsilon) \\ = & \frac{e}{2\pi i} \sum_{\beta,mn} \int d\epsilon \frac{df_0(\epsilon)}{d\epsilon} \left[ \frac{dS_{\beta\alpha,mn}^*(\epsilon, X_i(t))}{dt} S_{\alpha\beta,nm}(\epsilon, X_i(t)) \right]. \end{aligned} \quad (2.75)$$

Para temperatura nula, a derivada da função distribuição é dada pela Eq. 2.66 e podemos ainda escrever

$$\langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle = - \frac{e}{2\pi i} \sum_{\beta,mn} \left[ \frac{dS_{\beta\alpha,mn}^*(\epsilon, X_i(t))}{dt} S_{\alpha\beta,nm}(\epsilon, X_i(t)) \right]_{\epsilon=\epsilon_F}. \quad (2.76)$$

Para escrever da maneira como ela é mais encontrada, utilizamos novamente a relação entre a matriz espalhamento e sua derivada em relação à energia obtida na Eq. 2.64.

Assim, teremos

$$\begin{aligned} \langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle &= -\frac{e}{4\pi i} \sum_{\beta, mn} \left[ \frac{dS_{\beta\alpha, mn}^*}{dt} S_{\alpha\beta, nm} - S_{\beta\alpha, mn}^* \frac{dS_{\alpha\beta, nm}}{dt} \right]_{\epsilon=\epsilon_F} \\ &= \frac{e}{2\pi} \sum_{\beta, mn} \text{Im} \left[ S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon, X_i(t)) \frac{dS_{\alpha\beta, nm}(\epsilon, X_i(t))}{dt} \right]_{\epsilon=\epsilon_F}. \end{aligned} \quad (2.77)$$

Esta é a corrente bombeada ao variar um parâmetro interno do sistema. A teoria abordada nesta seção é amplamente utilizada em sistemas de pontos quânticos e ainda é foco de constantes estudos [40].

## 2.2 Bombeamento paramétrico

A teoria desenvolvida na seção anterior descreve uma corrente bombeada devido à variação harmônica de um único parâmetro interno do sistema. Como esta variação é oscilatória, a matriz de espalhamento também irá mudar de maneira semelhante, e a corrente bombeada será uma corrente alternada. Para notar isto mais facilmente, reescrevemos a Eq. 2.77 da forma

$$\langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle = e \frac{dn_\alpha}{dX_i} \frac{dX_i(t)}{dt}, \quad (2.78)$$

onde

$$\frac{dn_\alpha}{dX_i} = \frac{1}{2\pi} \sum_{\beta, mn} \text{Im} \left[ S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon, X_i(t)) \frac{\delta S_{\alpha\beta, nm}(\epsilon, X_i(t))}{\delta X_i} \right]_{\epsilon=\epsilon_F} \quad (2.79)$$

é chamada de emissividade do contato  $\alpha$ . Se  $X_i(t + 2\pi/\omega) = X_i(t)$ , a corrente bombeada também terá o mesmo período.

Para mostrar que uma corrente direta pode ser gerada pela variação de parâmetros internos do sistema, seguimos Brouwer [37] e notamos que, como  $I = dQ/dt$ , a carga bombeada no contato  $\alpha$  por uma variação infinitesimal no parâmetro  $\delta X_i$  é

$$\delta \langle \hat{Q}_\alpha(t) \rangle = e \frac{dn_\alpha}{dX_i} \delta X_i(t). \quad (2.80)$$

Se a matriz de espalhamento depender de dois parâmetros internos, uma variação oscilatória simultânea em ambos os parâmetros irá bombear uma carga igual a

$$\delta \langle \hat{Q}_\alpha(t) \rangle = e \frac{\partial n_\alpha(X_i, X_j)}{\partial X_i} \delta X_i(t) + e \frac{\partial n_\alpha(X_i, X_j)}{\partial X_j} \delta X_j(t). \quad (2.81)$$

Para encontrar a carga total bombeada em um período  $\tau = 2\pi/\omega$ , devemos integrar a

equação acima para obter

$$\langle \hat{Q}_\alpha(\tau) \rangle = e \int_0^\tau dt \left[ \frac{\partial n_\alpha(X_i, X_j)}{\partial X_i} \frac{dX_i(t)}{dt} + \frac{\partial n_\alpha(X_i, X_j)}{\partial X_j} \frac{dX_j(t)}{dt} \right]. \quad (2.82)$$

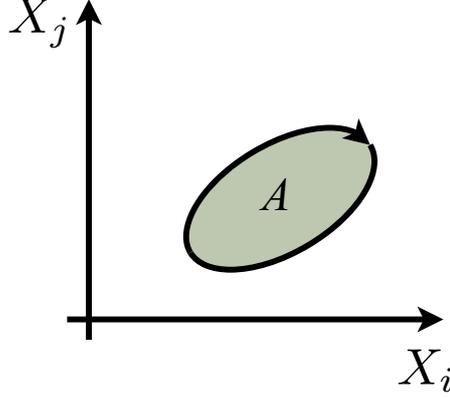


Figura 2: Em um período, os parâmetros  $X_i(t)$  e  $X_j(t)$  percorrem um circuito fechado no espaço  $(X_i, X_j)$ . A corrente bombeada depende da área  $A$  neste espaço de parâmetros.

As equações paramétricas  $X_i = X_i(t)$  e  $X_j = X_j(t)$  definem, em um período  $\tau$ , um circuito fechado no espaço  $(X_i, X_j)$ , como mostra a figura 2. Utilizando o teorema de Green, a carga total bombeada em um período  $\tau$  pode ser expressa por uma integral sobre a área  $A$  da superfície delimitada por este circuito, da forma

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}_\alpha(\tau) \rangle &= e \int_A dX_i dX_j \left[ \frac{\partial}{\partial X_i} \frac{\partial n_\alpha(X_i, X_j)}{\partial X_j} - \frac{\partial}{\partial X_j} \frac{\partial n_\alpha(X_i, X_j)}{\partial X_i} \right] \\ &= \frac{e}{\pi} \int_A dX_i dX_j \sum_{\beta, mn} \text{Im} \left[ \frac{\delta S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon, X_i(t), X_j(t))}{\delta X_i} \frac{\delta S_{\alpha\beta, nm}(\epsilon, X_i(t), X_j(t))}{\delta X_j} \right]_{\epsilon=\epsilon_F}. \end{aligned} \quad (2.83)$$

A corrente é obtida dividindo-se esta carga pelo período  $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$ ,

$$\langle \hat{I}_\alpha(\tau) \rangle = \frac{e\omega}{2\pi^2} \int_A dX_i dX_j \sum_{\beta, mn} \text{Im} \left[ \frac{\delta S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon, X_i(t), X_j(t))}{\delta X_i} \frac{\delta S_{\alpha\beta, nm}(\epsilon, X_i(t), X_j(t))}{\delta X_j} \right]_{\epsilon=\epsilon_F}. \quad (2.84)$$

Para escrever esta corrente bombeada na forma obtida por Brouwer, basta escrever  $\text{Im}z = (z - z^*)/2i$  e utilizar uma relação análoga à Eq. 2.64, porém entre a matriz de espalhamento e sua derivada em relação a um parâmetro  $X$ . Desta forma,

$$\langle \hat{I}_\alpha(\tau) \rangle = \frac{ie\omega}{4\pi^2} \int_A dX_i dX_j \text{Tr} [R_{X_i}, R_{X_j}]_{\alpha\alpha}, \quad (2.85)$$

onde

$$R_X = -i \frac{\delta \hat{S}}{\partial X} \hat{S}^\dagger \quad (2.86)$$

são matrizes hermitianas no espaço de canais e de contatos, o traço é tomado sobre o espaço dos contatos, e  $[ , ]$  denota o comutador.

Se considerarmos variações oscilatórias da forma  $\delta X_i(t) = \delta X_i^0 \sin(\omega t)$  e  $\delta X_j(t) = \delta X_j^0 \sin(\omega t - \varphi)$ , onde as amplitudes  $\delta X_i^0$  e  $\delta X_j^0$  são pequenas comparadas com a escala em que as propriedades de espalhamento mudam de maneira significativa, podemos desprezar as dependências em  $X_i$  e  $X_j$  dentro do integrando de 2.84. Assim, sabendo que a área da elipse definida no espaço de fases  $(X_i, X_j)$  é  $A = \pi \delta X_i^0 \delta X_j^0 \sin(\varphi)$ , temos que

$$\delta \langle \hat{I}_\alpha(\tau) \rangle = \frac{e\omega \delta X_i^0 \delta X_j^0 \sin(\varphi)}{2\pi} \sum_{\beta, mn} \text{Im} \left[ \frac{\delta S_{\beta\alpha, mn}^*(\epsilon)}{\delta X_i} \frac{\delta S_{\alpha\beta, nm}(\epsilon)}{\delta X_j} \right]_{\epsilon=\epsilon_F}. \quad (2.87)$$

Se  $X_i$  e  $X_j$  variam em fase ou com uma diferença de fase de  $\pi$ , a área definida pelas equações  $X_i = X_i(t)$  e  $X_j = X_j(t)$  no espaço  $(X_i, X_j)$  será nula. A área, e portanto a corrente, serão máximas quando a defasagem for de  $\pi/2$ .

## 2.3 Bombeamento de spins

A teoria do bombeamento foi generalizada por Tserkovnyak *et al.* de modo a incluir o spin eletrônico na expressão da corrente obtida na Eq. 2.77 [1]. Os operadores de criação e aniquilação  $\hat{a}_{\beta m \sigma}^\dagger(\epsilon)$  e  $\hat{a}_{\beta m \sigma}(\epsilon)$  utilizados para obtê-la devem levar em conta o spin  $\sigma$ , e as médias no equilíbrio, antes dada pela Eq. 2.30, passam a ser matrizes  $2 \times 2$  no espaço de spins. Desta forma, a expressão da corrente bombeada incorpora tanto o fluxo de cargas quando o de momento angular, e também é uma matriz no espaço de spins. Vamos mostrar que a corrente total  $\hat{I}$  pode ser escrita em termos das matrizes de Pauli e da identidade, da forma

$$\hat{I} = \frac{1}{2} I_C \hat{1} - \frac{e}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{I}_S. \quad (2.88)$$

As quantidades  $I_C$  e  $\mathbf{I}_S$  são valores esperados da corrente de carga e de spin, respectivamente. Uma descrição completa da corrente de spins requer um objeto tensorial, com um dos índices representando as componentes da direção do transporte e o segundo índice representando a polarização do spin. Nas geometrias consideradas nas Refs. [1] e [22] e que vamos levar em conta aqui, a direção do transporte é normal às superfícies do filme, o que não é colocado explicitamente pelos autores. O caráter vetorial da corrente de spins

se refere então à polarização de spin carregada pela corrente.

Nosso objetivo agora será calcular a corrente de spins bombeada quando a magnetização de uma amostra magnética é posta para precessionar. Assim como foi feito nas Refs. [1] e [22], vamos supor que os momentos magnéticos de um ferromagneto ultrafino precessionam coerentemente e em fase, de forma que a magnetização é caracterizada por um vetor rígido que gira com o tempo. Mesmo sem aplicar uma diferença de potencial entre os contatos, os elétrons de condução viajam pelo sistema e são espalhados por esta amostra. Eles passam então a carregar a informação da unidade magnética que varia no tempo. Em sistemas com dimensão menores ao comprimento de difusão de spins, nos quais podemos desprezar o efeito de inversão de spins nos terminais, o elétron chega no terminal ainda com a informação magnética da amostra, gerando assim uma corrente de spins.

Para calcular esta corrente, devemos obter a matriz de espalhamento dependente do tempo de uma amostra cuja magnetização precessiona e substituí-la na Eq. 2.77. O parâmetro dependente do tempo  $X(t)$  do qual a matriz de espalhamento é um funcional, no caso de uma magnetização precessionante, é o ângulo azimutal  $\phi$  da magnetização. A resposta linear calculada anteriormente para variações muito pequenas no potencial interno (comparadas com as energias eletrônicas), agora representará uma variação no parâmetro  $\delta\phi$  pequena no tempo. Em outras palavras, a aproximação linear neste caso equivale à aproximação adiabática, na qual a frequência de precessão é muito lenta comparada com a frequência natural dos elétrons. Escrevendo a matriz de espalhamento no espaço de spins e identificando a dependência no tempo através do ângulo azimutal, basta calcular  $\partial\hat{S}/\partial\phi$  para obter a fórmula final da corrente de spins  $\mathbf{I}_S$ .

### 2.3.1 Matriz de espalhamento

Para calcular a matriz de espalhamento através de uma amostra magnética que precessiona, seguiremos os passos realizados na Ref. [41]. Inicialmente, vamos considerar um hamiltoniano dependente de spins em um referencial fixo  $R$  da forma

$$\hat{H}_R = \hat{H}_0 + \hat{H}^s , \quad (2.89)$$

onde  $\hat{H}_0$  é a parte não dependente do spin, que pode ser escrita como

$$\hat{H}_0 = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] \hat{1} , \quad (2.90)$$

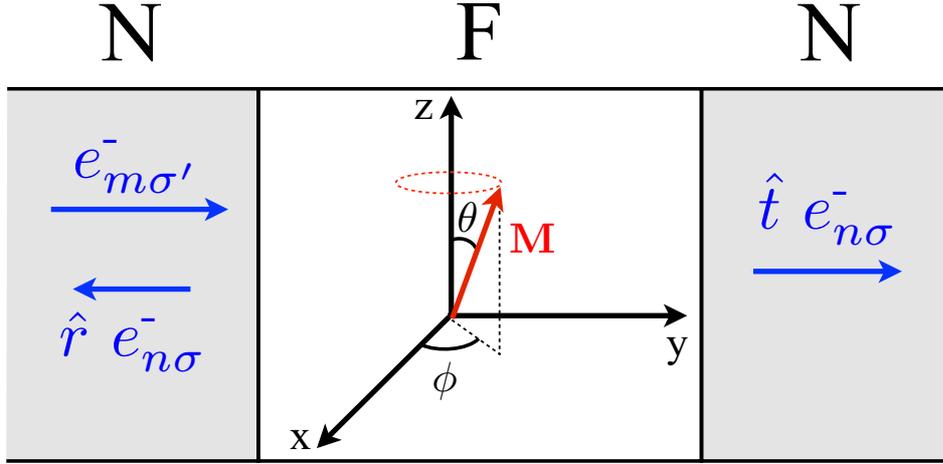


Figura 3: Sistema composto por dois contatos normais e um espalhador ferromagnético, cuja magnetização precessiona. A ilustração representa elétrons de condução com spin  $\sigma$  que incidem na amostra pelo canal  $m$  do contato da esquerda e podem ser transmitidos ou refletidos pela amostra magnética, saindo com spin  $\sigma'$  em um canal  $n$  do contato da direita ou da esquerda, respectivamente.

e  $\hat{H}^s$  é a o termo de troca, que vamos supor da forma

$$\hat{H}^s = (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}) V^s(\mathbf{r}) . \quad (2.91)$$

Estamos considerando o material ferromagnético como um grande spin cuja direção da magnetização é  $\mathbf{m}$ . Se  $\mathbf{m}$  A identidade e as matrizes de Pauli são definidas como

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} , \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} , \quad (2.92)$$

e o vetor unitário  $\mathbf{m}$  é

$$\mathbf{m} = \frac{\mathbf{M}}{M_0} = \begin{pmatrix} \text{sen } \theta \cos \phi \\ \text{sen } \theta \text{sen } \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} . \quad (2.93)$$

Os ângulos  $\theta$  e  $\phi$  são mostrados na Fig. 3 e correspondem à inclinação e ao ângulo azimutal, respectivamente.

Com estas definições, o hamiltoniano de spins  $\hat{H}^s$  é

$$\hat{H}^s = (\hat{\sigma}_x m_x + \hat{\sigma}_y m_y + \hat{\sigma}_z m_z) V^s(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \text{sen } \theta e^{-i\phi} \\ \text{sen } \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} V^s(\mathbf{r}) . \quad (2.94)$$

A transformação unitária que diagonaliza este hamiltoniano é dada pela matriz de rotação

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} & -\text{sen } \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ \text{sen } \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} , \quad (2.95)$$

cuja a inversa é

$$\hat{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} & \text{sen} \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \\ -\text{sen} \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\phi}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (2.96)$$

Se a equação de Schödinger no referencial fixo  $R$  é  $\hat{H}_R \hat{\Psi} = E \hat{\Psi}$ , onde  $\Psi$  é um spinor, no referencial girado  $R'$  ela será

$$\hat{H}_{R'} \hat{\Phi} = E \hat{\Phi}, \quad (2.97)$$

onde

$$\hat{H}_{R'} = \hat{U}^{-1} \hat{H}_R \hat{U}, \text{ e} \quad (2.98a)$$

$$\hat{\Phi} = \hat{U}^{-1} \hat{\Psi}. \quad (2.98b)$$

A diagonalização do termo dependente de spin do hamiltoniano, dado pela Eq. 2.94, resultará em

$$\hat{H}_{R'}^s = \hat{U}^{-1} (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{m}) \hat{U} V^s(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} V^s(\mathbf{r}) = \hat{\sigma}_z V^s(\mathbf{r}). \quad (2.99)$$

Portanto, a transformação inversa entre spinores de elétrons com spin  $\sigma = \pm 1/2$  pode ser escrita em termos de suas componentes como

$$\hat{\Psi}_\sigma = \sum_{\sigma'} \hat{U}_{\sigma\sigma'} \hat{\Phi}_{\sigma'}, \quad (2.100)$$

onde

$$\hat{\Phi}_\uparrow = \Phi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\Phi}_\downarrow = \Phi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.101)$$

### 2.3.1.1 Coeficientes de reflexão e transmissão

Vamos supor que um feixe de elétrons incide na amostra pela esquerda e é refletida e transmitida, como mostra a Fig. 3. A função de onda de um elétron com spin  $\sigma$  em um canal  $n$  na região  $N$  da esquerda pode ser escrita, no referencial fixo  $R$ , como

$$\hat{\Psi}_\sigma^n(k_n, \mathbf{r}_\perp) = \phi_n(\mathbf{r}_\perp) e^{ik_n z} \hat{\xi}_{R,\sigma} + \sum_{m,\sigma'} \phi_m(\mathbf{r}_\perp) e^{-ik_m z} \hat{r}_{R,\sigma\sigma'}^{nm} \hat{\xi}_{R,\sigma'}. \quad (2.102)$$

onde  $\phi_n(\mathbf{r}_\perp)$  são os modos transversais,  $\hat{\xi}$  são os spinores, e a direção  $z$  positiva do espaço de posições foi tomada para os elétrons incidentes na amostra pelo lado esquerdo. Da mesma forma, na região  $N$  do lado direito, teremos

$$\hat{\Psi}_\sigma^n(k_n, \mathbf{r}_\perp) = \sum_{m,\sigma'} \phi_m(\mathbf{r}_\perp) e^{ik_m z} \hat{t}_{R,\sigma\sigma'}^{nm} \hat{\xi}_{R,\sigma'}. \quad (2.103)$$

Já no referencial girado, no qual o hamiltoniano é diagonal e a dinâmica dos spins é desacoplada, a função de onda será

$$\hat{\Phi}_\sigma^n(k_n, \mathbf{r}_\perp) = \phi_n(\mathbf{r}_\perp) e^{ik_n z} \hat{\xi}_{R',\sigma} + \sum_{m,\sigma'} \phi_m(\mathbf{r}_\perp) e^{-ik_m z} \hat{r}_{R',\sigma\sigma'}^{nm} \hat{\xi}_{R',\sigma'} , \quad (2.104)$$

com  $\hat{\xi}_{R',\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  e  $\hat{\xi}_{R',\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . A relação entre os spinores  $\hat{\xi}$  é dada pela Eq. 2.100, ou seja,

$$\hat{\xi}_{R,\sigma} = \sum_{\sigma'} \hat{U}_{\sigma\sigma'} \hat{\xi}_{R',\sigma'} . \quad (2.105)$$

Desta forma, multiplicando a Eq. 2.104 por  $\hat{U}$  pela esquerda e comparando com a Eq. 2.102, concluímos que as matrizes de reflexão devem obedecer a relação de transformação

$$\hat{r}_R = \hat{U} \hat{r}_{R'} \hat{U}^{-1} . \quad (2.106)$$

Analogamente, podemos escrever a função de onda na região  $N$  do lado direito da Fig. 3 no referencial girado,

$$\hat{\Phi}_\sigma^n(k_n, \mathbf{r}_\perp) = \sum_{m,\sigma'} \phi_m(\mathbf{r}_\perp) e^{ik_m z} \hat{t}_{R',\sigma\sigma'}^{nm} \hat{\xi}_{R',\sigma'} . \quad (2.107)$$

Seguindo os mesmos passos descritos acima, obtemos facilmente que

$$\hat{t}_R = \hat{U} \hat{t}_{R'} \hat{U}^{-1} . \quad (2.108)$$

Como  $\hat{U}$  é uma função dos ângulos  $\theta$  e  $\phi$  de  $\mathbf{m}$ , as Eqs. 2.106 e 2.108 permitem calcularmos o efeito da precessão da magnetização nas matrizes de reflexão e transmissão no referencial fixo, conhecendo apenas as matrizes correspondentes no sistema onde  $\mathbf{m} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ , i.e., no referencial no qual o spin eletrônico é um bom número quântico.

Levando em conta que o hamiltoniano no sistema de referência  $R'$  é diagonal, não há inversão de spins durante o espalhamento neste referencial, ou seja,

$$\begin{aligned} \hat{r}_{R',\sigma\sigma'} &= \delta_{\sigma\sigma'} \hat{r}_\sigma , \text{ e} \\ \hat{t}_{R',\sigma\sigma'} &= \delta_{\sigma\sigma'} \hat{t}_\sigma , \end{aligned} \quad (2.109)$$

onde  $\hat{r}_\sigma$  e  $\hat{t}_\sigma$  são os coeficientes de reflexão e transmissão para elétrons com spin  $\sigma$  no referencial  $R'$ . Substituindo nas Eqs. 2.106 e 2.108, obtemos, para os coeficientes no

referencial fixo,

$$\begin{aligned}\hat{r}_{R,\sigma\sigma'} &= \sum_{s,s'} \hat{U}_{\sigma s} \hat{r}_{R',ss'} \hat{U}_{s'\sigma'}^{-1} \\ &= \hat{U}_{\sigma\uparrow} \hat{U}_{\uparrow\sigma'}^{-1} \hat{r}_{\uparrow} + \hat{U}_{\sigma\downarrow} \hat{U}_{\downarrow\sigma'}^{-1} \hat{r}_{\downarrow},\end{aligned}\quad (2.110)$$

e

$$\hat{t}_{R,\sigma\sigma'} = \hat{U}_{\sigma\uparrow} \hat{U}_{\uparrow\sigma'}^{-1} \hat{t}_{\uparrow} + \hat{U}_{\sigma\downarrow} \hat{U}_{\downarrow\sigma'}^{-1} \hat{t}_{\downarrow} . \quad (2.111)$$

Definimos as matrizes  $\hat{u}_{\sigma\sigma'}^{\uparrow} = \hat{U}_{\sigma\uparrow} \hat{U}_{\uparrow\sigma'}^{-1}$  e  $\hat{u}_{\sigma\sigma'}^{\downarrow} = \hat{U}_{\sigma\downarrow} \hat{U}_{\downarrow\sigma'}^{-1}$ , de maneira que

$$\hat{r}_R = \hat{u}^{\uparrow} \hat{r}_{\uparrow} + \hat{u}^{\downarrow} \hat{r}_{\downarrow}, \quad (2.112a)$$

$$\hat{t}_R = \hat{u}^{\uparrow} \hat{t}_{\uparrow} + \hat{u}^{\downarrow} \hat{t}_{\downarrow}. \quad (2.112b)$$

As matrizes  $\hat{u}^{\uparrow}$  e  $\hat{u}^{\downarrow}$  são calculadas utilizando as Eqs. 2.95 e 2.96, e são dadas por

$$\hat{u}^{\uparrow} = \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad e \quad (2.113)$$

$$\hat{u}^{\downarrow} = \begin{pmatrix} \sin^2 \frac{\theta}{2} & -\cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} & \cos^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.114)$$

Note que a matriz  $\hat{\sigma} \cdot \mathbf{m}$  calculada na Eq. 2.94 pode ser reescrita da forma

$$\begin{aligned}\hat{\sigma} \cdot \mathbf{m} &= \begin{pmatrix} 2 \cos^2 \frac{\theta}{2} - 1 & 2 \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ 2 \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} & 2 \sin^2 \frac{\theta}{2} - 1 \end{pmatrix} \\ &= 2 \left\{ \begin{pmatrix} \cos^2 \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} & \sin^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \hat{1} \right\} \\ &= 2 \left\{ \hat{u}^{\uparrow} - \frac{1}{2} \hat{1} \right\}.\end{aligned}\quad (2.115)$$

Além disso, temos também que

$$\begin{aligned}-\hat{\sigma} \cdot \mathbf{m} &= 2 \left\{ \begin{pmatrix} \sin^2 \frac{\theta}{2} & -\cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi} & \cos^2 \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \hat{1} \right\} \\ &= 2 \left\{ \hat{u}^{\downarrow} - \frac{1}{2} \hat{1} \right\}.\end{aligned}\quad (2.116)$$

Logo, as matrizes  $\hat{u}^{\sigma}$ , calculadas nas Eqs. 2.113 e 2.114, podem ser escritas de maneira mais simples como

$$\hat{u}^{\uparrow} = \frac{1}{2} (\hat{1} + \hat{\sigma} \cdot \mathbf{m}), \quad (2.117a)$$

$$\hat{u}^{\downarrow} = \frac{1}{2} (\hat{1} - \hat{\sigma} \cdot \mathbf{m}). \quad (2.117b)$$

As matrizes  $\hat{u}^{\uparrow}$  e  $\hat{u}^{\downarrow}$  definem operadores de projeção de spins, pois ao aplicá-los a uma

função de onda genérica  $\hat{\psi}$ , criamos autoestados do operador de spin  $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}$ :

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}) \hat{u}^\uparrow \hat{\psi} = \frac{1}{2} [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m} + (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m})^2] \hat{\psi} = \hat{u}^\uparrow \hat{\psi} \quad (2.118)$$

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}) \hat{u}^\downarrow \hat{\psi} = \frac{1}{2} [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m} - (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m})^2] \hat{\psi} = -\hat{u}^\downarrow \hat{\psi} \quad (2.119)$$

pois  $(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m})^2 = \hat{1}$ .

Finalmente, podemos escrever a matriz de espalhamento no referencial fixo  $R$  em termos dos coeficientes de reflexão e transmissão no referencial  $R'$ . Considerando que o sistema mostrado na Fig. 3 é simétrico, i.e., o lado esquerdo  $E$  e direito  $D$  são iguais, podemos escrever que

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{S}_{EE} & \hat{S}_{ED} \\ \hat{S}_{DE} & \hat{S}_{DD} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{r}_R & \hat{t}_R \\ \hat{t}_R & \hat{r}_R \end{pmatrix} \quad (2.120)$$

Utilizando as transformações dos coeficientes entre os referenciais, dada pelas Eqs. 2.112a e 2.112b, obtemos

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \hat{u}^\uparrow \hat{r}_\uparrow + \hat{u}^\downarrow \hat{r}_\downarrow & \hat{u}^\uparrow \hat{t}_\uparrow + \hat{u}^\downarrow \hat{t}_\downarrow \\ \hat{u}^\uparrow \hat{t}_\uparrow + \hat{u}^\downarrow \hat{t}_\downarrow & \hat{u}^\uparrow \hat{r}_\uparrow + \hat{u}^\downarrow \hat{r}_\downarrow \end{pmatrix} = \hat{u}^\uparrow \hat{S}^\uparrow + \hat{u}^\downarrow \hat{S}^\downarrow, \quad (2.121)$$

onde  $\hat{S}^\sigma$  é a matriz de espalhamento para elétrons com spin  $\sigma$  no referencial em que  $\mathbf{m} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ . Há dois pontos importantes de serem ressaltados: primeiro devemos chamar a atenção para o fato de que apesar de  $\hat{u}^\sigma$  e  $\hat{S}^\sigma$  serem matrizes  $2 \times 2$  no caso que estamos considerando (spin  $s = \frac{1}{2}$  e 2 contatos), a primeira delas é uma matriz no espaço de spins, enquanto que a segunda é matriz no espaço dos contatos. O segundo ponto é que apesar dos coeficientes no espaço de spins serem diagonais no referencial girado, o mesmo não ocorre para o referencial fixo. Em outras palavras, mesmo sem inversão de spins no sistema  $R'$ , haverá inversão de spins no referencial  $R$ . Uma outra forma de perceber isto é notar que no primeiro referencial, as componentes fora da diagonal das matrizes de espalhamento  $S^{\uparrow\downarrow}$  e  $S^{\downarrow\uparrow}$  são nulas, diferentemente do segundo.

### 2.3.2 Corrente de spins

Para obter uma expressão para a corrente de spins, é preciso notar inicialmente que devemos incluir o grau de liberdade de spin na expressão da corrente obtida na Eq. 2.77. Como estamos considerando uma corrente eletrônica, temos  $s = \frac{1}{2}$  e vamos utilizar a matriz de espalhamento  $2 \times 2$  obtida na Eq. 2.121. Portanto, a corrente será dada por

$$\langle \hat{I}_\alpha(t) \rangle = \frac{e}{2\pi} \sum_{\beta, mn} \text{Im} \left[ \hat{S}_{\beta\alpha, mn}^\dagger(\epsilon, X_i(t)) \frac{d\hat{S}_{\alpha\beta, nm}(\epsilon, X_i(t))}{dt} \right]_{\epsilon=\epsilon_F}. \quad (2.122)$$

Desta forma, esta corrente incorpora tanto o fluxo de cargas quanto de spins. Precisamos identificar uma maneira de separar cada uma destas contribuições, com o objetivo de calcular apenas a corrente de spins desejada.

Para isto, lembramos que as densidades de correntes de carga e de spins são definidas como sendo a média da velocidade dos portadores na direção da corrente multiplicada pela densidade correspondente (de carga ou spins), ou seja,

$$J_C^\mu(\mathbf{r}) = \langle v_\mu \rho(\mathbf{r}) \rangle, \text{ e } \hat{\mathbf{J}}_S^\mu(\mathbf{r}) = \langle v_\mu \hat{\mathbf{S}}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (2.123)$$

É importante perceber que as componentes do vetor densidade de corrente de spins correspondem à componente do momento angular que está propagando, e que a direção de propagação é dada pela componente  $\mu$  da velocidade. As densidades de carga e spins são dadas por

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) &= e \sum_{\alpha} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \psi_{\alpha}(\mathbf{r}), \\ \mathbf{S}(\mathbf{r}) &= \frac{\hbar}{2} \sum_{\alpha\beta} \psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_{\beta}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.124)$$

A densidade de corrente total que flui em uma determinada direção pode ser escrita, no espaço de spins, como

$$\hat{J}^\mu(\mathbf{r}) = \frac{J_C^\mu(\mathbf{r})}{2} \hat{1} + \frac{e}{\hbar} \hat{\mathbf{J}}_S^\mu(\mathbf{r}). \quad (2.125)$$

Com esta definição, as componentes da diagonal são dadas pela soma do primeiro termo com a componente  $z$  do vetor  $\hat{\mathbf{J}}_S^\mu$ . Estas componentes representam as densidades de corrente para cada tipo de spin  $\hat{J}_\uparrow^\mu(\mathbf{r})$  e  $\hat{J}_\downarrow^\mu(\mathbf{r})$ . A densidade de corrente de cargas é obtida pelo traço de  $\hat{J}^\mu(\mathbf{r})$ .

A corrente é obtida integrando-se a densidade de corrente sobre uma área  $d\mathbf{A}$ . Ao considerar o sistema ilustrado na Fig. 3, podemos escolher uma seção transversal de um contato  $\alpha$ , de maneira que teremos uma expressão equivalente para a corrente:

$$\hat{I}_\alpha = \frac{I_C}{2} \hat{1} + \frac{e}{\hbar} \hat{\mathbf{I}}_S. \quad (2.126)$$

Separando as componentes de spin, podemos definir um vetor corrente de spins  $\mathbf{I}_S$  de forma que

$$\hat{I}_\alpha = \frac{I_C}{2} \hat{1} + \frac{e}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{I}_S. \quad (2.127)$$

Lembrando que a Eq. 2.122 representa a corrente total gerada apenas pela variação de um parâmetro interno  $X(t)$  do sistema (não há nenhum potencial externo aplicado

ao sistema), podemos identificá-la com a corrente total  $\hat{I}_\alpha$  da Eq. 2.127. Para calcular esta corrente, notamos que o parâmetro  $X(t)$  que estamos variando neste caso é o ângulo azimutal da magnetização  $\phi(t)$ . Assim, a Eq. 2.122 se torna

$$\hat{I}_\alpha = \frac{e}{2\pi} \sum_{\beta, mn} \text{Im} \left[ \hat{S}_{\beta\alpha, mn}^\dagger(\epsilon, \phi(t)) \frac{d\hat{S}_{\alpha\beta, nm}(\epsilon, \phi(t))}{dt} \right]_{\epsilon=\epsilon_F}, \quad (2.128)$$

onde as matrizes de espalhamento dadas pela Eq. 2.121 serão, para o espalhamento devido a uma magnetização precessionante,

$$\begin{aligned} \hat{S} &= \hat{u}^\dagger(t) \hat{S}^\dagger + \hat{u}^\downarrow(t) \hat{S}^\downarrow \\ &= \frac{1}{2} [\hat{1} + \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}(t)] \hat{S}^\dagger + \frac{1}{2} [\hat{1} - \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}(t)] \hat{S}^\downarrow \\ &= \frac{1}{2} \left[ (\hat{S}^\dagger + \hat{S}^\downarrow) + \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}(t) (\hat{S}^\dagger - \hat{S}^\downarrow) \right]. \end{aligned} \quad (2.129)$$

Como estamos considerando que a cada instante de tempo o referencial  $R'$  é girado de forma que  $\mathbf{m} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ , as matrizes  $\hat{S}^\sigma$  não dependem do tempo. A derivada da matriz de espalhamento em relação ao tempo é

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{S}_{\alpha\beta, nm}(\epsilon, \phi(t))}{dt} &= \frac{d\hat{u}^\dagger}{dt} S_{\alpha\beta, nm}^\dagger(\epsilon) + \frac{d\hat{u}^\downarrow}{dt} S_{\alpha\beta, nm}^\downarrow(\epsilon) \\ &= \frac{1}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} \left[ S_{\alpha\beta, nm}^\dagger(\epsilon) - S_{\alpha\beta, nm}^\downarrow(\epsilon) \right]. \end{aligned} \quad (2.130)$$

Como estamos trabalhando com as componentes no espaço dos contatos e dos canais,  $S_{\alpha\beta, mn}^\sigma$  não é mais uma matriz na equação acima (a parte matricial no espaço de spins está em  $\hat{u}^\sigma$ ). Para simplificar a notação e evitar congestionar as equações, omitiremos os índices e argumentos das matrizes de espalhamento nas próximas equações. Basta lembrar que os índices de  $S^*$  são trocados em relação aos índices de  $S$ . Desta forma, a corrente bombeada pode ser escrita como

$$\hat{I}_\alpha = \frac{e}{8\pi} \sum_{\beta, mn} \text{Im} \left\{ [(S^{\uparrow*} + S^{\downarrow*}) + \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}(t) (S^{\uparrow*} - S^{\downarrow*})] \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \dot{\mathbf{m}}(t) (S^\dagger - S^\downarrow) \right\}_{\epsilon=\epsilon_F}, \quad (2.131)$$

Utilizando a identidade das matrizes de Pauli

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{A}) (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{B}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) \hat{1} + i \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}), \quad (2.132)$$

com  $\mathbf{A} = \dot{\mathbf{m}}(t)$  e  $\mathbf{B} = \mathbf{m}(t)$ , obtemos a relação

$$[\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{m}(t)] [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \dot{\mathbf{m}}(t)] = i \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\mathbf{m}(t) \times \dot{\mathbf{m}}(t)]. \quad (2.133)$$

Substituindo este resultado na Eq. 2.131 e abrindo o termo dentro da parte imaginária,

ficamos com

$$\begin{aligned} \hat{I}_\alpha &= \frac{e}{8\pi i} \sum_{\beta, mn} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \dot{\mathbf{m}}(t) (S^{\downarrow*} S^\uparrow - S^{\uparrow*} S^\downarrow) \\ &\quad + \frac{e}{8\pi} \sum_{\beta, mn} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\mathbf{m}(t) \times \dot{\mathbf{m}}(t)] (S^{\uparrow*} S^\uparrow - S^{\uparrow*} S^\downarrow - S^{\downarrow*} S^\uparrow + S^{\downarrow*} S^\downarrow) , \end{aligned} \quad (2.134)$$

onde as componentes das matrizes de espalhamento são calculadas na energia de Fermi  $\epsilon_F$ . Escrevendo a Eq. 2.134 como matrizes no espaço dos contatos, teremos

$$\begin{aligned} \hat{I}_\alpha &= \frac{e}{8\pi i} \sum_{mn} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \dot{\mathbf{m}}(t) \left( \hat{S}^{\downarrow*} \hat{S}^\uparrow - \hat{S}^{\uparrow*} \hat{S}^\downarrow \right)_{\alpha\alpha} \\ &\quad + \frac{e}{8\pi} \sum_{mn} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\mathbf{m}(t) \times \dot{\mathbf{m}}(t)] \left( \hat{S}^{\uparrow*} \hat{S}^\uparrow - \hat{S}^{\uparrow*} \hat{S}^\downarrow - \hat{S}^{\downarrow*} \hat{S}^\uparrow + \hat{S}^{\downarrow*} \hat{S}^\downarrow \right)_{\alpha\alpha} , \end{aligned} \quad (2.135)$$

onde  $\hat{S}^\sigma$  é matriz no espaço de contatos e  $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$  são as matrizes de Pauli (no espaço de spins). Na equação acima ainda omitimos os índices  $m$  e  $n$  de canais das matrizes  $\hat{S}$ , mas retornaremos com eles a partir de agora. Os produtos de matrizes que precisamos calcular são da forma

$$\begin{aligned} \hat{S}_{mn}^{\sigma*} \hat{S}_{nm}^{\sigma'} &= \begin{pmatrix} r_{mn}^{\sigma*} & t_{mn}^{\sigma*} \\ t_{mn}^{\sigma*} & r_{mn}^{\sigma*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{nm}^{\sigma'} & t_{nm}^{\sigma'} \\ t_{nm}^{\sigma'} & r_{nm}^{\sigma'} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} r_{mn}^{\sigma*} r_{nm}^{\sigma'} + t_{mn}^{\sigma*} t_{nm}^{\sigma'} & r_{mn}^{\sigma*} t_{nm}^{\sigma'} + t_{mn}^{\sigma*} r_{nm}^{\sigma'} \\ t_{mn}^{\sigma*} r_{nm}^{\sigma'} + r_{mn}^{\sigma*} t_{nm}^{\sigma'} & t_{mn}^{\sigma*} t_{nm}^{\sigma'} + r_{mn}^{\sigma*} r_{nm}^{\sigma'} \end{pmatrix} , \end{aligned} \quad (2.136)$$

pois estamos considerando que ambos os contatos são iguais, de forma que os coeficientes de transmissão e reflexão  $t_{DE} = t_{ED}$  e  $r_{DE} = r_{ED}$ . O primeiro termo da Eq. 2.135 pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \hat{I}_\alpha^{(1)} &= \frac{e}{8\pi i} \sum_{mn} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \dot{\mathbf{m}}(t) (r_{mn}^{\downarrow*} r_{nm}^\uparrow + t_{mn}^{\downarrow*} t_{nm}^\uparrow - r_{mn}^{\uparrow*} r_{nm}^\downarrow - t_{mn}^{\uparrow*} t_{nm}^\downarrow)_{\alpha\alpha} \\ &= -\frac{e}{4\pi} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \dot{\mathbf{m}}(t) \sum_{mn} \text{Im} (r_{mn}^{\uparrow*} r_{nm}^\downarrow + t_{mn}^{\uparrow*} t_{nm}^\downarrow)_{\alpha\alpha} \\ &= -\frac{e}{4\pi} A_i \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \dot{\mathbf{m}}(t) , \end{aligned} \quad (2.137)$$

onde  $A_i$ , que não depende mais do contato  $\alpha$  pois estamos considerando todos os contatos iguais, é dado por

$$A_i = \sum_{mn} \text{Im} (r_{nm}^\downarrow r_{mn}^{\uparrow*} + t_{nm}^\downarrow t_{mn}^{\uparrow*}) . \quad (2.138)$$

Já o segundo termo da Eq. 2.135 é

$$\begin{aligned}
\hat{I}_\alpha &= \frac{e}{8\pi} \sum_{mn} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\mathbf{m}(t) \times \dot{\mathbf{m}}(t)] \left( r_{mn}^{\uparrow*} r_{nm}^\uparrow + t_{mn}^{\uparrow*} t_{nm}^\uparrow - r_{mn}^{\uparrow*} r_{nm}^\downarrow - t_{mn}^{\uparrow*} t_{nm}^\downarrow \right. \\
&\quad \left. - r_{mn}^{\downarrow*} r_{nm}^\uparrow - t_{mn}^{\downarrow*} t_{nm}^\uparrow + r_{mn}^{\downarrow*} r_{nm}^\downarrow + t_{mn}^{\downarrow*} t_{nm}^\downarrow \right)_{\alpha\alpha} \\
&= \frac{e}{8\pi} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\mathbf{m}(t) \times \dot{\mathbf{m}}(t)] \sum_{mn} (|r_{nm}^\uparrow - r_{nm}^\downarrow|^2 + |t_{nm}^\uparrow - t_{nm}^\downarrow|^2)_{\alpha\alpha} \\
&= \frac{e}{4\pi} A_r \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\mathbf{m}(t) \times \dot{\mathbf{m}}(t)] ,
\end{aligned} \tag{2.139}$$

com

$$A_r = \frac{1}{2} \sum_{mn} (|r_{nm}^\uparrow - r_{nm}^\downarrow|^2 + |t_{nm}^\uparrow - t_{nm}^\downarrow|^2) . \tag{2.140}$$

Comparando as Eqs. 2.137 e 2.139 com o termo da corrente de spins da Eq. 2.127, chegamos finalmente na equação para a corrente de spins bombeada para um dos contatos

$$\mathbf{I}_S = \frac{\hbar}{4\pi} \left[ A_r \mathbf{m}(t) \times \frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} - A_i \frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} \right] , \tag{2.141}$$

onde  $A_r$  e  $A_i$  são dados pelas Eqs 2.140 e 2.138. Eles ainda podem ser reescritos da forma

$$A_r + iA_i = g^{\uparrow\downarrow} - t^{\uparrow\downarrow} , \tag{2.142}$$

onde, utilizando a unitariedade da matriz de espalhamento para cada direção de spins,

$$g^{\sigma\sigma'} = \sum_{mn} \left( \delta_{nm} - r_{nm}^\sigma r_{mn}^{\sigma'*} \right) , \text{ e} \tag{2.143a}$$

$$t^{\sigma\sigma'} = \sum_{mn} t_{nm}^\sigma t_{mn}^{\sigma'*} . \tag{2.143b}$$

A Eq. 2.141 é uma expressão vetorial para o fluxo de momento angular de cada componente de spin. Ela é o resultado principal deste capítulo, e nosso objetivo foi mostrar todos os passos e aproximações utilizadas para obtê-la. Para calcularmos a corrente de spins emitida por uma magnetização que varia no tempo, precisamos dos coeficientes de espalhamento para calcular  $A_r$  e  $A_i$ , além de conhecer a dinâmica da magnetização ( $\mathbf{m}(t)$  e  $\frac{d\mathbf{m}}{dt}$ ). Uma maneira de obter esta dinâmica é através da equação fenomenológica de Landau-Lifshitz-Gilbert

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = \gamma \mathbf{m} \times \mathbf{B}_{ext} + \alpha \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt} , \tag{2.144}$$

onde  $\gamma = -\frac{g\mu_B}{\hbar}$  é o fator giromagnético do elétron e  $\alpha$  é o coeficiente de amortecimento de Gilbert. Utilizando a equação de continuidade para a densidade de spins, podemos

escrever que

$$\hbar \frac{d\hat{\mathbf{S}}}{dt} = -\mathbf{I}_S, \quad (2.145)$$

onde  $\hat{S}^m = \frac{1}{2}\sigma^m$ . Sabendo que a relação entre a magnetização e o operador de spins é  $\mathbf{M} = M_S \mathbf{m} = -g\mu_B \mathbf{S}$ , com  $M_S$  sendo a magnetização de saturação, podemos escrever

$$\frac{d\hat{\mathbf{m}}}{dt} = \frac{g}{4\pi m_0} \left[ A_r \mathbf{m}(t) \times \frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} - A_i \frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} \right], \quad (2.146)$$

onde  $m_0$  é o momento magnético da impureza em unidades de magnetons de Bohr, e já substituímos a corrente de spins utilizando a Eq. 2.141. Esta é a contribuição da corrente de spins para a taxa de variação da magnetização. Considerando que a Eq. 2.144 descreve a dinâmica da magnetização sem levar em conta o bombeamento de spins, podemos acrescentar a contribuição dada pela Eq. 2.146 à Eq. 2.144 para obter

$$\left( 1 + \frac{gA_i}{4\pi m_0} \right) \frac{d\mathbf{m}}{dt} = \gamma \mathbf{m} \times \mathbf{B}_{ext} + \left( \alpha + \frac{gA_r}{4\pi m_0} \right) \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt}. \quad (2.147)$$

Nesta equação,  $\alpha$  representa o coeficiente de amortecimento intrínseco quando o bombeamento de spins está ausente. Reescrevendo esta equação na forma da Eq. 2.144, obtemos

$$\frac{d\mathbf{m}}{dt} = \gamma' \mathbf{m} \times \mathbf{B}_{ext} + \alpha' \mathbf{m} \times \frac{d\mathbf{m}}{dt}, \quad (2.148)$$

onde os fatores renormalizados  $\gamma'$  e  $\alpha'$  são

$$\gamma' = \frac{4\pi m_0}{4\pi m_0 + gA_i} \gamma, \text{ e} \quad (2.149a)$$

$$\alpha' = \frac{4\pi m_0 \alpha + gA_r}{4\pi m_0 + gA_i}. \quad (2.149b)$$

Como ilustração da teoria semi-clássica do bombeamento de spins, vamos supor uma precessão elíptica de uma magnetização com frequência  $\omega$ , como em um experimento de ressonância ferromagnética. Neste caso, já conhecemos a dinâmica da magnetização  $\mathbf{m}(t)$ , e não vamos precisar resolver a Eq. 2.148. Vamos mostrar que apesar da Eq. 2.141 ter sido obtida considerando que a matriz de espalhamento dependia de apenas um parâmetro  $X(t) = \phi(t)$  na Eq. 2.128, ainda assim é possível haver uma corrente DC bombeada por esta magnetização. Apesar deste resultado parecer surpreendente levando em conta a teoria de Brouwer mostrada na seção 2.2, ele passa a fazer sentido quando lembramos que a matriz de espalhamento depende da direção da magnetização, e, portanto, de suas componentes  $m^x(t)$  e  $m^y(t)$ . Estes são os dois parâmetros representados por  $X_i$  e  $X_j$  na teoria de bombeamento paramétrica. No caso de uma precessão elíptica, podemos

escrever que

$$\mathbf{m}(t) = m_0^x \cos(\omega t) \hat{\mathbf{x}} + m_0^y \cos(\omega t - \varphi) \hat{\mathbf{y}} + m_0^z \hat{\mathbf{z}} . \quad (2.150)$$

Para calcular a corrente de spins, precisamos também de sua derivada,

$$\frac{d\mathbf{m}(t)}{dt} = -\omega m_0^x \sin(\omega t) \hat{\mathbf{x}} - \omega m_0^y \sin(\omega t - \varphi) \hat{\mathbf{y}} . \quad (2.151)$$

Substituindo na Eq. 2.141, temos que a corrente de spins bombeada em função do tempo é

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_S = & \frac{\hbar}{4\pi} [A_r \omega m_0^y m_0^z \sin(\omega t - \varphi) - A_i \omega m_0^x \sin(\omega t)] \hat{\mathbf{x}} \\ & - \frac{\hbar}{4\pi} [A_r \omega m_0^x m_0^z \sin(\omega t) + A_i \omega m_0^y \sin(\omega t - \varphi)] \hat{\mathbf{y}} \\ & + \frac{\hbar A_r}{4\pi} \omega m_0^x m_0^y \sin(\varphi) \hat{\mathbf{z}} . \end{aligned} \quad (2.152)$$

Assim, podemos ver que as componentes  $I_S^x$  e  $I_S^y$  são oscilatórias (AC) e possuem média temporal nula, enquanto que  $I_S^z$  é uma componente DC. Além disso, notamos que esta componente direta da corrente depende da defasagem  $\varphi$  entre as componentes  $m^x$  e  $m^y$  da magnetização. Se  $\varphi = 0$ , as duas componentes estão em fase e nenhuma corrente é bombeada na direção  $I_S^z$ , enquanto que a corrente é máxima para  $\varphi = \pi/2$  (precessão circular). Este exemplo também ilustra o teorema da área no espaço de fases,  $(m^x, m^y)$  neste caso, mostrado na seção 2.2. Também será importante para futuras discussões notar que esta componente DC é bilinear nas amplitudes das componentes  $m^x$  e  $m^y$  da magnetização.

No próximo capítulo, desenvolveremos uma teoria alternativa, completamente quântica, para o cálculo das correntes de spins. Vamos mostrar as vantagens de usar esta abordagem para calcular as correntes de spins ao invés de recorrer à Eq. 2.141, e pretendemos aplicar as duas teorias para um sistema simples, com o objetivo de discutir suas diferenças.

### 3 Teoria Quântica

A teoria semi-clássica mostrada no capítulo anterior permite o cálculo da corrente de spins e de grandezas como o coeficiente de amortecimento de Gilbert e o fator giromagnético na presença do bombeamento de spins. Entretanto, esta teoria permite apenas o cálculo da corrente emitida para os contatos e não leva em conta as interferências quânticas dos elétrons devido ao potencial do espalhador. Além disso, a generalização para o espaço de spins desenvolvida por Tserkovnyak e colaboradores considera que toda a camada magnética se comporta como uma única magnetização precessionante. Ela ainda pressupõe um conhecimento prévio da matriz de espalhamento para cada componente de spin através da amostra ferromagnética.

Neste capítulo, vamos desenvolver uma teoria completamente quântica, multiorbital, que leva em conta toda a estrutura eletrônica de um sistema. Diferentemente da teoria de Büttiker, partimos do hamiltoniano do sistema, escrito no modelo de ligações fortes e que leva em conta uma interação efetiva blindada entre os elétrons pelo modelo de Hubbard. Assim, a estrutura eletrônica deste modelo será descrita então por

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} + \hat{H}_Z , \quad (3.1)$$

onde  $\hat{H}_0$  representa o hamiltoniano de ligações fortes e é dado por

$$\hat{H}_0 = \sum_{\substack{ij \\ \sigma}} \sum_{\mu\nu} t_{ij}^{\mu\nu} c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{j\nu\sigma} . \quad (3.2)$$

Aqui,  $t_{ij}^{\mu\nu}$  é a integral de hopping entre os orbitais  $\mu$  do sítios  $i$  e  $\nu$  do sítio  $j$ ,  $\hat{c}_{i\mu\sigma}^\dagger$  ( $\hat{c}_{i\mu\sigma}$ ) cria (destrói) um elétron com spin  $\sigma$  no orbital  $\mu$  do sítio  $i$ ,  $t_{ii}^{\mu\mu} = \epsilon_i^\mu$  é a energia do orbital  $\mu$  do sítio  $i$ .

O termo  $\hat{H}_{int}$  representa a interação elétron-elétron e é dado por

$$\hat{H}_{int} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\mu\nu\gamma\xi} U_{\mu\nu\gamma\xi}^i c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\xi\sigma'} c_{i\gamma\sigma} . \quad (3.3)$$

Estamos considerando que a interação  $U_i$  entre elétrons nos metais é de curto alcance devido ao efeito de blindagem nestes materiais, e por este motivo  $\hat{H}_{int}$  representa uma interação local. Esta interação é a responsável pela formação de um momento magnético nos sítios das impurezas.

O terceiro termo do hamiltoniano,  $\hat{H}_Z$ , é o termo Zeeman, que descreve a interação dos elétrons com um campo magnético externo  $\mathbf{B}_j$  ou alguma anisotropia do sistema. Ele é dado por

$$\hat{H}_Z = g\mu_B \sum_j \hat{\mathbf{S}}_j \cdot \mathbf{B}_j , \quad (3.4)$$

onde  $\hat{S}_j^m = \frac{1}{2} \sum_\gamma \sum_{ss'} c_{j\gamma s}^\dagger \sigma_{ss'}^m c_{j\gamma s'}$ .

## 3.1 Corrente de spins

Calcularemos agora a corrente de spins em um modelo completamente quântico utilizando a teoria de resposta linear. Vamos considerar que um campo magnético externo dependente do tempo coloca a magnetização para precessionar, e desejamos calcular a corrente de spins gerada por esta excitação. Com este objetivo, vamos calcular o operador corrente de spins no modelo descrito pelo hamiltoniano da Eq. 3.1.

### 3.1.1 Operador corrente de spins

Para obter o operador corrente de spins, vamos utilizar a equação de continuidade para a densidade de momento angular de spins,

$$\hbar \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_i^S = \boldsymbol{\tau} . \quad (3.5)$$

O torque aplicado se deve ao campo magnético aplicado, ou seja,

$$\boldsymbol{\tau} = -g\mu_B \mathbf{S}_i \times \mathbf{B}_i \quad (3.6)$$

Utilizando a equação de movimento do operador  $\mathbf{S}_i$  na representação de Heisenberg,

$$i\hbar \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = [\mathbf{S}_i, \hat{H}] , \quad (3.7)$$

podemos reescrever a equação de continuidade como

$$-i[\mathbf{S}_i, \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} + \hat{H}_Z] + \nabla \cdot \mathbf{J}_i^S = -g\mu_B \mathbf{S}_i \times \mathbf{B}_i . \quad (3.8)$$

Calculando o comutador de  $\mathbf{S}_i$  com o hamiltoniano da interação Zeeman, podemos ver que

$$-i[\mathbf{S}_i, \hat{H}_Z] = -g\mu_B \mathbf{S}_i \times \mathbf{B}_i, \quad (3.9)$$

e portanto

$$-i[\mathbf{S}_i, \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}] + \nabla \cdot \mathbf{J}_i^S = 0. \quad (3.10)$$

Integrando a Eq. 3.10 dentro de um volume  $V$

$$-i \int_V [\mathbf{S}_i, \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}] d\tau + \int_V \nabla \cdot \mathbf{J}_i^S d\tau = 0. \quad (3.11)$$

A corrente de spins é definida como o fluxo da densidade de corrente que atravessa a superfície  $S$  que delimita o volume  $V$ , i.e.,

$$\mathbf{I}_S = \int_V \nabla \cdot \mathbf{J}_i^S d\tau = \oint_S \mathbf{J}_i^S \cdot d\mathbf{A}. \quad (3.12)$$

A equação de continuidade se torna então,

$$\mathbf{I}_S = i \sum_{i \in V} [\mathbf{S}_i, \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}]. \quad (3.13)$$

Ao invés de calcularmos separadamente as componentes transversas  $I_S^x$  e  $I_S^y$  da corrente de spins, calcularemos  $I_S^+ = I_S^x + iI_S^y$ . As componentes  $I_S^x$  e  $I_S^y$  podem ser obtidas, respectivamente, tomando-se a parte real e imaginária de  $I_S^+$ , e a amplitude da corrente transversa total pelo módulo de  $|\hat{I}_S^+| = \sqrt{|\hat{I}_S^x|^2 + |\hat{I}_S^y|^2}$ . Assim,

$$I_S^+ = i \sum_{i \in V} [S_i^+, \hat{H}_0 + \hat{H}_{int}]. \quad (3.14)$$

Primeiro, vamos calcular o comutador do operador de spins  $S_i^+$  com o hamiltoniano de ligações fortes  $\hat{H}_0$ :

$$[S_i^+, \hat{H}_0] = \sum_{\sigma} \sum_{m, n} \sum_{\mu, \nu, \eta} t_{mn}^{\mu\nu} [c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\eta\downarrow}, c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{n\nu\sigma}]. \quad (3.15)$$

Calculando o comutador do lado direito da equação acima, obtemos

$$\begin{aligned} [c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\eta\downarrow}, c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{n\nu\sigma}] &= c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\eta\downarrow} c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{n\nu\sigma} - c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{n\nu\sigma} c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\eta\downarrow} \\ &= c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{n\nu\sigma} \delta_{mi} \delta_{\mu\eta} \delta_{\sigma\downarrow} - c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{i\eta\downarrow} \delta_{ni} \delta_{\nu\eta} \delta_{\sigma\uparrow}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Substituindo de volta na Eq. 3.15, teremos

$$\begin{aligned}
[S_i^+, \hat{H}_0] &= \sum_{\substack{m,n \\ \sigma}} \sum_{\mu\nu\eta} t_{mn}^{\mu\nu} \left\{ c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{n\nu\sigma} \delta_{mi} \delta_{\mu\eta} \delta_{\sigma\downarrow} - c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{i\eta\downarrow} \delta_{ni} \delta_{\nu\eta} \delta_{\sigma\uparrow} \right\} \\
&= \sum_m \sum_{\mu\nu} \left\{ t_{im}^{\mu\nu} c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{m\nu\downarrow} - t_{mi}^{\mu\nu} c_{m\mu\uparrow}^\dagger c_{i\nu\downarrow} \right\} \\
&= \sum_j \sum_{\mu\nu} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} - t_{ji}^{\nu\mu} c_{j\nu\uparrow}^\dagger c_{i\mu\downarrow} \right\} .
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Em seguida, precisamos do comutador com o hamiltoniano de interação

$$[S_i^+, \hat{H}_{int}] = \frac{1}{2} \sum_{\substack{m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\mu\nu\gamma\xi\eta} U_{\mu\nu\gamma\xi}^m [c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\eta\downarrow}, c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{m\gamma\sigma}] . \tag{3.18}$$

O comutador acima resulta em

$$\begin{aligned}
[c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\eta\downarrow}, c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{m\gamma\sigma}] &= c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\eta\downarrow} c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{m\gamma\sigma} - c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{m\gamma\sigma} c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\eta\downarrow} \\
&= c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{m\gamma\sigma} \delta_{mi} \delta_{\mu\eta} \delta_{\sigma\downarrow} - c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{m\gamma\sigma} \delta_{mi} \delta_{\nu\eta} \delta_{\sigma'\downarrow} \\
&\quad + c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\gamma\sigma} c_{i\eta\downarrow} \delta_{mi} \delta_{\xi\eta} \delta_{\sigma'\uparrow} - c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{i\eta\downarrow} \delta_{mi} \delta_{\gamma\eta} \delta_{\sigma\uparrow} .
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Voltando com este resultado na Eq. 3.18

$$\begin{aligned}
[S_i^+, \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\mu\nu\gamma\xi\eta} U_{\mu\nu\gamma\xi}^m \left\{ c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{m\gamma\sigma} \delta_{mi} \delta_{\mu\eta} \delta_{\sigma\downarrow} - c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{m\gamma\sigma} \delta_{mi} \delta_{\nu\eta} \delta_{\sigma'\downarrow} \right. \\
&\quad \left. + c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\gamma\sigma} c_{i\eta\downarrow} \delta_{mi} \delta_{\xi\eta} \delta_{\sigma'\uparrow} - c_{m\mu\sigma}^\dagger c_{m\nu\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} c_{i\eta\downarrow} \delta_{mi} \delta_{\gamma\eta} \delta_{\sigma\uparrow} \right\} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \sum_{\mu\nu\gamma\xi} U_{\mu\nu\gamma\xi}^i \left\{ c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{i\nu\sigma}^\dagger c_{i\xi\sigma} c_{i\gamma\downarrow} - c_{i\nu\uparrow}^\dagger c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\xi\downarrow} c_{i\gamma\sigma} \right. \\
&\quad \left. + c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\nu\uparrow}^\dagger c_{i\gamma\sigma} c_{i\xi\downarrow} - c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{i\nu\sigma}^\dagger c_{i\xi\sigma} c_{i\gamma\downarrow} \right\} \\
&= 0 .
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Portanto, o operador corrente de spins é dado por

$$I_S^+ = i \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} - t_{ji}^{\nu\mu} c_{j\nu\uparrow}^\dagger c_{i\mu\downarrow} \right\} . \tag{3.21}$$

O somatório no índice  $j$  envolve apenas sítios fora do volume  $V$  pois a contribuição dos termos  $j \in V$  é nula.

Para facilitar a notação, podemos ainda definir um “operador de spins” generalizado

da forma

$$S_{ij}^{m\mu\nu} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} c_{j\nu\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^m c_{i\mu\beta} , \quad (3.22)$$

onde  $\sigma^m$ ,  $m = x, y, z$ , representam as matrizes de Pauli. Assim, reescrevemos o operador corrente de spins

$$I_S^+ = i \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} S_{ij}^{+\mu\nu} - t_{ji}^{\nu\mu} S_{ji}^{+\nu\mu} \right\} . \quad (3.23)$$

Este operador nos permitirá calcular a corrente de spins transversa à direção  $\hat{z}$  emitida por uma magnetização precessionante e que sai de um volume  $V$ .

### 3.1.2 Resposta linear para um campo harmônico

Vamos considerar que o campo estático  $\mathbf{B}_j = B_0 \hat{\mathbf{z}}$  e aplicaremos um campo magnético com polarização circular e perpendicular ao campo estático, i.e.,

$$\mathbf{b}_\perp(t) = b_0 [\cos(\omega t) \hat{\mathbf{x}} - \text{sen}(\omega t) \hat{\mathbf{y}}] , \quad (3.24)$$

que se acopla com a densidade de spins da unidade magnética localizada no sítio 0 (a generalização para mais de uma impureza é imediata, bastando somar nos índices dos sítios que compõem a unidade magnética). Em termos práticos, há diferentes formas de produzir esta perturbação dependente do tempo[21, 42, 43]. Queremos então calcular a variação no valor esperado da corrente de spins causada por esta perturbação relativamente fraca dependente do tempo. Neste caso, a variação  $\delta \langle I_S^+ \rangle = \langle I_S^+ \rangle$ , pois não há corrente de spins fluindo no sistema não perturbado. A interação entre o campo dependente do tempo e a densidade de spins é descrita pelo hamiltoniano

$$\begin{aligned} \hat{H}_\perp &= g\mu_B \mathbf{b}_\perp(t) \cdot \hat{\mathbf{S}}_0(t) \\ &= g\mu_B b_0 [\cos(\omega t) S_0^x - \text{sen}(\omega t) S_0^y] \\ &= \frac{g\mu_B b_0}{2} [e^{-i\omega t} S_0^- + e^{i\omega t} S_0^+] , \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde  $S_0^m = \sum_\gamma S_{00}^{m\gamma\gamma}$ .

Supondo que a intensidade do campo transverso aplicado  $b_0 \ll B_0$ , podemos usar a teoria de resposta linear para calcular a corrente de spins gerada pela interação. Temos que

$$\langle I_S^+ \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int dt' \Theta(t-t') \langle [I_S^+(t), \hat{H}_\perp(t')] \rangle . \quad (3.26)$$

Substituindo as Eqs. 3.23 e 3.25 na equação acima, obtemos

$$\begin{aligned} \langle I_S^+(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \frac{g\mu_B b_0}{2} i \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \int dt' \Theta(t-t') \\ &\times \langle [t_{ij}^{\mu\nu} S_{ij}^{+\mu\nu}(t) - t_{ji}^{\nu\mu} S_{ji}^{+\nu\mu}(t), e^{-i\omega t'} S_{00}^{-\gamma\gamma}(t') + e^{i\omega t'} S_{00}^{+\gamma\gamma}(t')] \rangle . \end{aligned} \quad (3.27)$$

Como o valor esperado é calculado com base nos estados do sistema não perturbado, i.e., descritos pelo hamiltoniano representado na Eq. 3.1, não há nenhum mecanismo de inversão de spins. Portanto, os comutadores da forma  $[S_{ij}^{+\mu\nu}(t), S_{kl}^{+\gamma\eta}(t')] = 0$ . Ficamos então com

$$\begin{aligned} \langle I_S^+(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \frac{g\mu_B b_0}{2} i \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \int dt' \Theta(t-t') e^{-i\omega t'} \langle [t_{ij}^{\mu\nu} S_{ij}^{+\mu\nu}(t) - t_{ji}^{\nu\mu} S_{ji}^{+\nu\mu}(t), S_{00}^{-\gamma\gamma}(t')] \rangle \\ &= \frac{g\mu_B b_0}{2} i \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \int dt' e^{-i\omega t'} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} \chi_{ij00}^{+-\mu\nu\gamma\gamma}(t-t') - t_{ji}^{\nu\mu} \chi_{ji00}^{+-\nu\mu\gamma\gamma}(t-t') \right\} , \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde  $\chi_{ijkl}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(t-t')$  é o que chamamos de susceptibilidade magnética transversa generalizada (pois depende dos operadores de spin generalizados mostrados na Eq. 3.22), definida por

$$\chi_{ijkl}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(t-t') = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \langle [S_{ij}^{+\mu\nu}(t), S_{kl}^{-\gamma\xi}(t')] \rangle . \quad (3.29)$$

Podemos ainda reescrever a Eq. 3.28 fazendo a transformação de variáveis  $t'' = t - t'$  na integral, obtendo

$$\langle I_S^+(t) \rangle = i \frac{g\mu_B b_0}{2} e^{-i\omega t} \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} \chi_{ij00}^{+-\mu\nu\gamma\gamma}(\omega) - t_{ji}^{\nu\mu} \chi_{ji00}^{+-\nu\mu\gamma\gamma}(\omega) \right\} , \quad (3.30)$$

onde

$$\chi_{ijkl}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(\omega) = \int dt' e^{i\omega t'} \chi_{ijkl}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(t') . \quad (3.31)$$

A equação 3.30 expressa a corrente transversa de spins gerada pela precessão de uma magnetização que é mantida pelo campo oscilatório de frequência  $\omega$ , cuja interação com os spins é representada pela Eq. 3.25. Outros tipos de excitações podem ser considerados, e vamos mostrar algumas delas na próxima seção.

### 3.1.3 Resposta linear a um campo pulsado

A corrente de spins calculada na seção anterior é a resposta para um campo oscilatório de frequência  $\omega$ , que mantém a magnetização em precessão e a corrente sendo bombeada à todo instante. A dependência temporal dessa corrente não exibe nenhuma estrutura interessante - ela envolve apenas a exponencial oscilatória  $e^{-i\omega t}$ . Por isso, as aplicações que mostraremos desta equação serão sempre relacionadas com as frequências ou com a distribuição espacial da corrente.

Entretanto, nossa abordagem nos permite calcular a resposta para qualquer tipo de campo magnético transversal aplicado, desde que ele tenha amplitude muito menor que o campo estático, de modo que contribuições de ordens maiores que a linear sejam desprezíveis. Nesta seção, vamos obter uma expressão geral para a corrente bombeada devido a um campo magnético aplicado na direção  $\hat{x}$  e vamos particularizar para um pulso delta e um pulso gaussiano.

Vamos considerar inicialmente um campo magnético genérico na direção  $\hat{\mathbf{x}}$ , que pode ser escrito como

$$\mathbf{b}(t) = b(t)\hat{\mathbf{x}} = \frac{1}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} b(\omega)\hat{\mathbf{x}} . \quad (3.32)$$

Supondo novamente que este campo magnético é aplicado apenas no sítio 0, o hamiltoniano de interação do campo externo com a densidade de spins é

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int}(t) &= g\mu_B \mathbf{b}(t) \cdot \hat{\mathbf{S}}_0(t) = g\mu_B b(t) \hat{S}_0^x(t) \\ &= \frac{g\mu_B}{2} b(t) [S_0^+(t) + S_0^-(t)] . \end{aligned} \quad (3.33)$$

Queremos calcular, usando a teoria de resposta linear, a corrente de spins gerada pela aplicação desta perturbação no sítio 0. Assim, utilizando o hamiltoniano de interação dado pela Eq. 3.33,

$$\begin{aligned} \langle I_S^m(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int dt' \Theta(t-t') \left\langle \left[ \hat{I}_S^m(t), \hat{H}_{int}(t') \right] \right\rangle \\ &= -\frac{g\mu_B i}{2\hbar} \int dt' \Theta(t-t') b(t') \left\{ \left\langle \left[ \hat{I}_S^m(t), S_0^+(t') \right] \right\rangle + \left\langle \left[ \hat{I}_S^m(t), S_0^-(t') \right] \right\rangle \right\} . \end{aligned} \quad (3.34)$$

Como o campo perturbativo é aplicado na direção transversal à direção de quantização do spin, será conveniente continuarmos calculando o valor esperado da componente  $\hat{I}_S^+$  do operador corrente de spins, dada pela Eq. 3.23. Utilizando também a Eq. 3.32 para

escrever o campo no domínio das frequências, teremos

$$\begin{aligned} \langle I_S^+(t) \rangle &= \frac{g\mu_B}{4\pi\hbar} \int dt' \Theta(t-t') \int d\omega e^{-i\omega t'} b(\omega) \\ &\quad \times \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} \langle [\hat{S}_{ij}^{+\mu\nu}(t), S_{00}^{-\gamma\gamma}(t')] \rangle - t_{ji}^{\nu\mu} \langle [\hat{S}_{ji}^{+\nu\mu}(t), S_{00}^{-\gamma\gamma}(t')] \rangle \right\} . \end{aligned} \quad (3.35)$$

Identificando a susceptibilidade magnética transversa generalizada, dada pela Eq. 3.29, podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle I_S^+(t) \rangle &= i \frac{g\mu_B}{4\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} b(\omega) \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \int dt' e^{i\omega(t-t')} \\ &\quad \times \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} \chi_{ij00}^{+\mu\nu\gamma\gamma}(t-t') - t_{ji}^{\nu\mu} \chi_{ji00}^{+\nu\mu\gamma\gamma}(t-t') \right\} . \end{aligned} \quad (3.36)$$

Fazendo a mudança de variáveis  $t'' = t - t' \Rightarrow dt'' = -dt'$ , e utilizando a transformada de Fourier da susceptibilidade, mostrada na Eq. 3.31, obtemos

$$\langle I_S^+(t) \rangle = i \frac{g\mu_B}{4\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} b(\omega) \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} \chi_{ij00}^{+\mu\nu\gamma\gamma}(\omega) - t_{ji}^{\nu\mu} \chi_{ji00}^{+\nu\mu\gamma\gamma}(\omega) \right\} . \quad (3.37)$$

Esta é a corrente de spins dependente do tempo que é bombeada por uma magnetização que precessiona devido a um campo magnético genérico  $b(t)$  na direção  $\hat{\mathbf{x}}$ .

Vamos agora particularizar este resultado para alguns casos especiais de pulsos magnéticos:

- **Pulso delta**

Uma magnetização que é retirada do equilíbrio instantaneamente em  $t = \tau$  pode ser descrita por um campo magnético da forma

$$\mathbf{b}(t) = b_0 \delta(t - \tau) \hat{\mathbf{x}} \quad \Rightarrow \quad b(\omega) = \int dt e^{i\omega t} b(t) = e^{i\omega\tau} b_0 . \quad (3.38)$$

Substituindo na Eq. 3.37, a corrente de spins bombeada será

$$\langle I_S^+(t) \rangle = i \frac{g\mu_B b_0}{4\pi} \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \int d\omega e^{-i\omega(t-\tau)} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} \chi_{ij00}^{+\mu\nu\gamma\gamma}(\omega) - t_{ji}^{\nu\mu} \chi_{ji00}^{+\nu\mu\gamma\gamma}(\omega) \right\} . \quad (3.39)$$

Identificando a transformada inversa de Fourier, definida pela inversa da Eq. 3.31, obtemos

$$\langle I_S^+(t) \rangle = i \frac{g\mu_B b_0}{2} \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} \chi_{ij00}^{+\mu\nu\gamma\gamma}(t - \tau) - t_{ji}^{\nu\mu} \chi_{ji00}^{+\nu\mu\gamma\gamma}(t - \tau) \right\} . \quad (3.40)$$

Apesar deste resultado parecer simples, ele envolve o cálculo da susceptibilidade transversa magnética em função do tempo. Esta função resposta é encontrada através de sua transformada de Fourier, e, portanto, a corrente deve ser calculada da forma mostrada na Eq. 3.39. Como a susceptibilidade  $\chi_{ijkl}^{+-}(\omega)$ , apesar de tender a zero para grandes frequências, é uma função não trivial para todo  $\omega$ , a integral deverá ser calculada de  $-\infty$  a  $\infty$ , ou em uma grande região de frequências. Isso torna os cálculos computacionais da corrente muito custosos. Uma maneira de evitar este problema é utilizar um pulso que se limita a uma região finita do espaço de frequências, como, por exemplo, um pulso gaussiano.

### • Pulso gaussiano

Vamos considerar agora a perturbação causada por pulso de campo magnético na forma de uma gaussiana centrada em  $t = \tau$  e com largura  $\sigma$ ,

$$\mathbf{b}(t) = b_0 e^{-\frac{(t-\tau)^2}{2\sigma^2}} \hat{\mathbf{x}}. \quad (3.41)$$

A transformada deste pulso será

$$\begin{aligned} b(\omega) &= b_0 \int dt e^{i\omega t} e^{-\frac{(t-\tau)^2}{2\sigma^2}} \\ &= \sqrt{2\pi}\sigma b_0 e^{i\omega\tau} e^{-\frac{\omega^2\sigma^2}{2}}, \end{aligned} \quad (3.42)$$

onde completamos o quadrado na exponencial e utilizamos a normalização

$$\int dx e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} = \sqrt{2\pi}\sigma. \quad (3.43)$$

A corrente de spins bombeada ao excitar a magnetização com um pulso de campo magnético dado pela Eq. 3.41 é encontrada substituindo a Eq. 3.42 na Eq. 3.37. Obtemos então

$$\langle I_S^+(t) \rangle = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega e^{-\frac{\omega^2\sigma^2}{2}} I_S(\omega, t - \tau), \quad (3.44)$$

onde

$$I_S(\omega, t - \tau) = \frac{ig\mu_B b_0}{2} e^{-i\omega(t-\tau)} \sum_{\substack{i \in V \\ j \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} \left\{ t_{ij}^{\mu\nu} \chi_{ij00}^{+\mu\nu\gamma\gamma}(\omega) - t_{ji}^{\nu\mu} \chi_{ji00}^{+\nu\mu\gamma\gamma}(\omega) \right\}. \quad (3.45)$$

A corrente obtida na Eq. 3.44, apesar de ser mais complicada do que a obtida na Eq. 3.39, é mais conveniente para uma implementação numérica. Isto acontece devido ao fator  $e^{-\frac{\omega^2\sigma^2}{2}}$  que vai rapidamente a zero para frequências relativamente grandes (comparadas com  $1/\sigma$ ).

Um pulso centrado em  $t = \tau$  não traz nenhuma característica nova; há apenas um deslocamento na resposta da corrente. A transformada do pulso gaussiano no tempo centrado em  $t = \tau$  é uma gaussiana centrada em  $\omega = 0$  multiplicada por uma fase. Será interessante estudarmos o que acontece ao excitar a magnetização com um pulso gaussiano centrado em uma frequência não nula.

- **Pulso gaussiano deslocado na frequência**

Supondo um pulso gaussiano centrado em  $t = 0$ , a Eq. 3.42 se torna apenas uma gaussiana centrada em  $\omega = 0$ . Partindo desta equação, vamos agora considerar um pulso centrado em  $\omega = \omega_0$  da forma

$$b(\omega) = \sqrt{2\pi}\sigma b_0 e^{-\frac{(\omega-\omega_0)^2\sigma^2}{2}}. \quad (3.46)$$

A resposta da corrente será semelhante à Eq. 3.44, porém com  $\tau = 0$  e a gaussiana deslocada de  $\omega_0$ :

$$\langle I_S^+(t) \rangle = \frac{\sigma}{\sqrt{2\pi}} \int d\omega e^{-\frac{(\omega-\omega_0)^2\sigma^2}{2}} I_S(\omega, t), \quad (3.47)$$

onde  $I_S(\omega, t)$  é dado pela Eq. 3.45.

As correntes de spins que calculamos nesta seção permitem estudar a dinâmica de spins em função da frequência ou no domínio do tempo, além de podermos analisar sua distribuição espacial. Esta abordagem envolve o cálculo direto da corrente de spins e as mudanças que esta causa na densidade de spins, permitindo um estudo muito mais detalhado do fenômeno do bombeamento de spins. Uma outra maneira de investigar a dinâmica dos spins, alternativa mas também complementar ao cálculo direto da corrente de spins, é através da perturbação na densidade de spins.

## 3.2 Perturbação na densidade de spins

Quando uma corrente de spins é emitida por uma unidade magnética, o fluxo de momento angular que se propaga pelo sistema perturba a densidade de spins por onde passa. Na seção anterior, mostramos uma maneira de calcular diretamente a corrente de spins no sistema. Examinaremos agora como esta corrente perturba a densidade de spins local em um determinado sítio  $i$  da rede.

### 3.2.1 Campo externo harmônico

Vamos mais uma vez considerar o caso em que um campo externo harmônico é aplicado em uma unidade magnética localizada na posição 0 do sistema. Agora, ao invés de utilizar a teoria de resposta linear para calcular a resposta da corrente de spins, vamos estudar o que acontece com as componentes transversas da própria densidade de spins em um sítio qualquer  $i$ . Temos que

$$\delta\langle S_i^+(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int dt' \Theta(t-t') \langle [S_i^+(t), \hat{H}_\perp(t')] \rangle . \quad (3.48)$$

O hamiltoniano de interação entre o campo magnético e a densidade de spins é dado pela Eq. 3.25. Substituindo na Eq. 3.48,

$$\delta\langle S_i^+(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \frac{g\mu_B b_0}{2} \sum_{\mu\gamma} \int dt' e^{-i\omega t'} \Theta(t-t') \langle [S_{ii}^{+\mu\mu}(t), S_{00}^{-\gamma\gamma}(t')] \rangle , \quad (3.49)$$

onde já levamos em conta que  $\langle [S_{ii}^{+\mu\mu}(t), S_{00}^{+\gamma\gamma}(t')] \rangle = 0$ . Identificando a susceptibilidade generalizada, dada pela Eq. 3.29,

$$\delta\langle S_i^+(t) \rangle = \frac{g\mu_B b_0}{2} \sum_{\mu\gamma} \int dt' e^{-i\omega t'} \chi_{ii00}^{+-\mu\mu\gamma\gamma}(t-t') . \quad (3.50)$$

Finalmente, utilizando a transformada de Fourier da susceptibilidade, definida na Eq. 3.31,

$$\delta\langle S_i^+(t) \rangle = \frac{g\mu_B b_0}{2} e^{-i\omega t} \sum_{\mu\gamma} \chi_{ii00}^{+-\mu\mu\gamma\gamma}(\omega) . \quad (3.51)$$

Note que  $\sum_{\mu\gamma} \chi_{ii00}^{+-\mu\mu\gamma\gamma}(\omega) = \chi_{i0}^{+-}(\omega)$  é a susceptibilidade magnética transversa usual, escrita na notação da susceptibilidade generalizada que definimos na Eq. 3.29. Esta susceptibilidade é muito utilizada nos estudos de dinâmica de spins. Através de sua parte imaginária, pode-se obter informações sobre as energias de excitações de spins de um sistema através de seus picos, além dos respectivos tempos de vida das excitações pelas suas larguras de linha. Ademais, pela própria Eq. 3.51 podemos ver que o valor absoluto da função resposta é proporcional à amplitude de oscilação da magnetização, e sua fase fornece a defasagem entre a magnetização e o campo externo aplicado.

Através das componentes transversas da densidade de spins também é possível obter informações sobre a propagação da corrente de spins que flui através do material. Para mostrar melhor a complementariedade destas duas formas de olhar a dinâmica de spins, é interessante estudar a perturbação na densidade de spins devido a um pulso de campo

externo gaussiano.

### 3.2.2 Pulso de campo externo

Para estudar a resposta da densidade de spins devido à um pulso magnético gaussiano, vamos primeiro obter a resposta devido à interação mais geral dada pela Eq. 3.33. A variação nas componentes transversas do spin é dada por

$$\begin{aligned}\delta\langle S_i^+(t)\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int dt' \Theta(t-t') \frac{g\mu_B}{4\pi} \int d\omega e^{-i\omega t'} b(\omega) \langle [S_i^+(t), S_0^-(t')] \rangle \\ &= \frac{g\mu_B}{4\pi} \int d\omega b(\omega) e^{-i\omega t} \sum_{\mu\gamma} \chi_{ii00}^{+-\mu\mu\gamma\gamma}(\omega).\end{aligned}\quad (3.52)$$

Particularizando para o campo magnético gaussiano deslocado na frequência, dado pela Eq. 3.46, obtemos

$$\delta\langle S_i^+(t)\rangle = \frac{\sigma g\mu_B b_0}{2\sqrt{2\pi}} \int d\omega e^{-\frac{(\omega-\omega_0)^2\sigma^2}{2}} e^{-i\omega t} \sum_{\mu\gamma} \chi_{ii00}^{+-\mu\mu\gamma\gamma}(\omega).\quad (3.53)$$

No capítulo 4, vamos mostrar algumas aplicações em cadeias lineares, onde podemos utilizar a Eq. 3.53 para obter mais informações sobre a dinâmica de spins, além de utilizar esta equação para investigar alguns aspectos interessantes da perturbação de spins em materiais à base de carbono.

As grandezas obtidas, tanto no cálculo da perturbação na densidade de spins como diretamente na corrente de spins, envolvem susceptibilidades magnéticas em função da frequência. A primeira é proporcional à susceptibilidades transversas magnéticas usuais  $\chi_{ij}^{+-\mu\nu} = \chi_{ijj}^{+-\mu\mu\nu\nu}$ , enquanto que a segunda envolve susceptibilidades generalizadas  $\chi_{ijkl}^{+-\mu\nu\gamma\xi}$ . Na seção seguinte mostraremos como elas podem ser calculadas em sistemas metálicos descritos por um modelo de elétrons itinerante.

## 3.3 Susceptibilidade magnética transversa

A susceptibilidade magnética transversa pode ser escrita como:

$$\chi_{ij}^{+-\mu\nu}(t) = \langle\langle S_i^{+\mu}(t); S_j^{-\nu}(0)\rangle\rangle = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [S_i^{+\mu}(t), S_j^{-\nu}(0)] \rangle, \quad (3.54)$$

onde  $S_i^{+\mu}$  é o operador de subida de spin no orbital  $\mu$  do sítio  $i$  e  $S_j^{-\nu}$  é o operador de descida de spin no orbital  $\nu$  do sítio  $j$ . Para evitar uma notação muito congestionada, vamos omitir os índices  $+-$  da susceptibilidade transversa a partir de agora.

Para calcular a corrente de spins obtida na Eq. 3.30, precisamos calcular a susceptibilidade magnética transversa generalizada mostrada na Eq. 3.29 [44]. Para obter a susceptibilidade da Eq. 3.54, basta fazer  $\chi_{ij}^{\mu\nu} = \chi_{iijj}^{\mu\nu\nu}$ . A susceptibilidade generalizada pode ser escrita da forma

$$\chi_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi}(t) = \langle\langle S_{ij}^{+\mu\nu}(t); S_{kl}^{-\gamma\xi}(0) \rangle\rangle, \quad (3.55)$$

definida em termos dos operadores de spin generalizados definidos na Eq. 3.22, cujas componentes  $S^+$  e  $S^-$  são

$$S_{ij}^{+\mu\nu}(t) = c_{i\mu\uparrow}^\dagger(t) c_{j\nu\downarrow}(t), \quad (3.56a)$$

$$S_{kl}^{-\gamma\xi}(0) = c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{l\xi\uparrow}. \quad (3.56b)$$

Ela obedece a seguinte equação de movimento:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi}(t) = \delta(t) \langle\langle [S_{ij}^{+\mu\nu}(t), S_{kl}^{-\gamma\xi}(0)] \rangle\rangle + \langle\langle [S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}]; S_{kl}^{-\gamma\xi} \rangle\rangle. \quad (3.57)$$

Devido à função  $\delta(t)$ , o comutador do primeiro termo do lado direito da Eq. 3.57 pode ser calculado em  $t = 0$ . Este termo é dado por

$$\begin{aligned} [S_{ij}^{+\mu\nu}, S_{kl}^{-\gamma\xi}] &= c_{i\mu\uparrow}^\dagger \underbrace{c_{j\nu\downarrow} c_{k\gamma\downarrow}^\dagger}_{\delta_{jk} \delta_{\nu\gamma}} c_{l\xi\uparrow} - c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{l\xi\uparrow} c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \\ &= c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{l\xi\uparrow} \delta_{jk} \delta_{\nu\gamma} - c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \delta_{il} \delta_{\mu\xi}. \end{aligned} \quad (3.58)$$

O comutador que envolve o hamiltoniano pode ser separado em suas diferentes partes utilizando a Eq. 3.1, de forma que

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}] = [S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_0] + [S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}] + [S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_Z]. \quad (3.59)$$

O primeiro deles, envolvendo o hamiltoniano de ligações fortes  $\hat{H}_0$ , será

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_0] = \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta} t_{mn}^{\alpha\beta} [c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}, c_{m\alpha\sigma}^\dagger c_{n\beta\sigma}], \quad (3.60)$$

onde o comutador é dado por

$$[c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}, c_{m\alpha\sigma}^\dagger c_{n\beta\sigma}] = c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{n\beta\sigma} \delta_{jm} \delta_{\nu\alpha} \delta_{\sigma\downarrow} - c_{m\alpha\sigma}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \delta_{in} \delta_{\mu\beta} \delta_{\sigma\uparrow}. \quad (3.61)$$

Substituindo o resultado encontrado na Eq. 3.60, podemos escrever

$$\begin{aligned} [S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_0] &= \sum_{mn} \sum_{\sigma} t_{mn}^{\alpha\beta} \left( c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{n\beta\sigma} \delta_{jm} \delta_{\nu\alpha} \delta_{\sigma\downarrow} - c_{m\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\nu\downarrow} \delta_{in} \delta_{\mu\beta} \delta_{\sigma\uparrow} \right) \\ &= \sum_{m\alpha} \left( t_{jm}^{\nu\alpha} c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{m\alpha\downarrow} - t_{mi}^{\alpha\mu} c_{m\alpha\uparrow}^{\dagger} c_{j\nu\downarrow} \right). \end{aligned} \quad (3.62)$$

Este termo ainda pode ser reescrito da forma mais conveniente

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_0] = \sum_{m\alpha} \sum_{n\beta} \left( t_{jn}^{\nu\beta} \delta_{mi} \delta_{\mu\alpha} - t_{mi}^{\alpha\mu} \delta_{jn} \delta_{\nu\beta} \right) S_{mn}^{+\alpha\beta}. \quad (3.63)$$

Para o segundo termo da Eq. 3.59, com  $\hat{H}_{int}$  explicitado na Eq. 3.3, teremos

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}] = \frac{1}{2} \sum_{\substack{k \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\alpha\beta\gamma\xi} U_{\alpha\beta\gamma\xi}^k \left[ c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{j\nu\downarrow}, c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{k\beta\sigma'}^{\dagger} c_{k\xi\sigma'} c_{k\gamma\sigma} \right]. \quad (3.64)$$

O comutador, depois de algum trabalho, pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \left[ c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{j\nu\downarrow}, c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{k\beta\sigma'}^{\dagger} c_{k\xi\sigma'} c_{k\gamma\sigma} \right] &= c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{k\beta\sigma'}^{\dagger} c_{k\xi\sigma'} c_{k\gamma\sigma} \delta_{kj} \delta_{\alpha\nu} \delta_{\sigma\downarrow} \\ &\quad + c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{k\xi\sigma'} c_{k\gamma\sigma} \delta_{kj} \delta_{\beta\nu} \delta_{\sigma'\downarrow} \\ &\quad - c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{k\beta\sigma'}^{\dagger} c_{j\nu\downarrow} c_{k\gamma\sigma} \delta_{ki} \delta_{\mu\xi} \delta_{\sigma'\uparrow} \\ &\quad - c_{k\alpha\sigma}^{\dagger} c_{k\beta\sigma'}^{\dagger} c_{k\xi\sigma'} c_{j\nu\downarrow} \delta_{ki} \delta_{\mu\gamma} \delta_{\sigma\uparrow}. \end{aligned} \quad (3.65)$$

Substituindo este resultado na Eq. 3.64, podemos reordenar os termos do meio para obter

$$\begin{aligned} [S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta\gamma\xi \\ \sigma'}} U_{\nu\beta\gamma\xi}^j c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{j\beta\sigma'}^{\dagger} c_{j\xi\sigma'} c_{j\gamma\downarrow} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\gamma\xi} U_{\alpha\nu\gamma\xi}^j c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{j\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\gamma\sigma} c_{j\xi\downarrow} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma} U_{\alpha\beta\gamma\mu}^i c_{i\beta\uparrow}^{\dagger} c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{i\gamma\sigma} c_{j\nu\downarrow} - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha\beta\xi \\ \sigma'}} U_{\alpha\beta\mu\xi}^i c_{i\alpha\uparrow}^{\dagger} c_{i\beta\sigma'}^{\dagger} c_{i\xi\sigma'} c_{j\nu\downarrow}. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Mudando os nomes das variáveis de forma a unificar os somatórios ( $\xi \rightarrow \alpha$  e  $\sigma' \rightarrow \sigma$  no primeiro termo,  $\xi \rightarrow \beta$  no segundo, e  $\xi \rightarrow \gamma$  e  $\sigma' \rightarrow \sigma$  no quarto), ficamos com

$$\begin{aligned} [S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma} \left( U_{\nu\beta\gamma\alpha}^j c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{j\beta\sigma}^{\dagger} c_{j\alpha\sigma} c_{j\gamma\downarrow} + U_{\alpha\nu\gamma\beta}^j c_{i\mu\uparrow}^{\dagger} c_{j\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\gamma\sigma} c_{j\beta\downarrow} \right. \\ &\quad \left. - U_{\alpha\beta\gamma\mu}^i c_{i\beta\uparrow}^{\dagger} c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{i\gamma\sigma} c_{j\nu\downarrow} - U_{\alpha\beta\mu\gamma}^i c_{i\alpha\uparrow}^{\dagger} c_{i\beta\sigma}^{\dagger} c_{i\gamma\sigma} c_{j\nu\downarrow} \right). \end{aligned} \quad (3.67)$$

Vamos agora trocar os índices  $\alpha \rightleftharpoons \beta$  no primeiro e no terceiro termo, bem como  $\beta \rightleftharpoons \gamma$

no segundo termo, obtendo

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}] = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha\beta\gamma \\ \sigma}} \left[ (U_{\nu\alpha\gamma\beta}^j + U_{\alpha\nu\beta\gamma}^j) c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} c_{j\gamma\downarrow} - (U_{\beta\alpha\gamma\mu}^i + U_{\alpha\beta\mu\gamma}^i) c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\beta\sigma}^\dagger c_{i\gamma\sigma} c_{j\nu\downarrow} \right]. \quad (3.68)$$

Como a interação efetiva entre elétrons  $U_{\mu\nu\gamma\xi}^i$  é definida por

$$\begin{aligned} U_{\mu\nu\gamma\xi}^i &= \langle i\mu, i\nu | v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') | i\gamma, i\xi \rangle \\ &= \int d^3r d^3r' \phi_\mu^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \phi_\nu^*(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i) v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi_\gamma(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \phi_\xi(\mathbf{r}' - \mathbf{R}_i), \end{aligned} \quad (3.69)$$

onde  $v(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  é o potencial eletrônico já levando em conta o efeito de blindagem, podemos ver que

$$U_{1234} = U_{2143}. \quad (3.70)$$

Utilizando esta simetria, e já trocando o índice de soma  $\gamma \rightarrow \lambda$  para evitar duplicidade de índices quando substituirmos este resultado na equação de movimento, a Eq. 3.68 se torna

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}] = \sum_{\substack{\alpha\beta\lambda \\ \sigma}} \left( U_{\nu\alpha\lambda\beta}^j c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} c_{j\lambda\downarrow} - U_{\beta\alpha\lambda\mu}^i c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\beta\sigma}^\dagger c_{i\lambda\sigma} c_{j\nu\downarrow} \right). \quad (3.71)$$

Para obter o último comutador que nos falta calcular, entre  $S_{ij}^{+\mu\nu}$  e  $\hat{H}_Z$  dado pela Eq. 3.4, vamos supor um campo magnético estático aplicado em todo o sistema. Como veremos mais a frente, esta suposição não é necessária, mas evita cálculos mais complexos. Como estamos definindo a direção de equilíbrio da magnetização no eixo  $\hat{\mathbf{z}}$ ,

$$\begin{aligned} [S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_Z] &= \frac{g\mu_B B}{2} \sum_k \sum_\gamma \left[ c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}, c_{k\gamma\uparrow}^\dagger c_{k\gamma\uparrow} - c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{k\gamma\downarrow} \right] \\ &= -\hbar\omega_0 S_{ij}^{+\mu\nu}, \end{aligned} \quad (3.72)$$

onde  $\hbar\omega_0 = g\mu_B B$ .

Juntando os resultados obtidos nas Eqs. 3.58, 3.63, 3.71 e 3.72 para os comutadores

e substituindo na equação de movimento escrita na Eq. 3.57, teremos

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \chi_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi}(t) = & \delta(t) \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{l\xi\uparrow} \delta_{jk} \delta_{\nu\gamma} - c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \delta_{il} \delta_{\mu\xi} \rangle \\
& + \sum_{m\alpha} \sum_{n\beta} \left( t_{jn}^{\nu\beta} \delta_{mi} \delta_{\mu\alpha} - t_{mi}^{\alpha\mu} \delta_{jn} \delta_{\nu\beta} \right) \chi_{mnkl}^{\alpha\beta\gamma\xi} \\
& + \sum_{\substack{\alpha\beta\lambda \\ \sigma}} \langle \langle U_{\nu\alpha\lambda\beta}^j c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} c_{j\lambda\downarrow} - U_{\beta\alpha\lambda\mu}^i c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\beta\sigma}^\dagger c_{i\lambda\sigma} c_{j\nu\downarrow}; S_{kl}^{-\gamma\xi} \rangle \rangle \\
& - \hbar\omega_0 \chi_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi}(t) .
\end{aligned} \tag{3.73}$$

Note que o segundo termo do lado direito já é proporcional à susceptibilidade que estamos calculando. O último termo é apenas um deslocamento da equação de movimento no espaço de frequências. Já o terceiro envolve susceptibilidades de ordem mais alta. Para resolver esta equação de movimento exatamente, precisaríamos conhecer estas funções de Green. Porém, a equação de movimento para elas envolvem funções de ordem ainda mais alta. Em algum momento temos que truncar esta série infinita. Utilizaremos aqui as aproximações de Hartree Fock (HF) e de fases aleatórias (RPA), que equivalem à desacoplar a dinâmica de spins no hamiltoniano e à linearizar a Eq. 3.73, respectivamente. Obteremos desta forma uma relação que nos permitirá calcular a susceptibilidade interagente (RPA) conhecendo a susceptibilidade em campo médio (HF).

### 3.3.1 Aproximação de fases aleatórias (RPA)

Para obter a equação de movimento nesta aproximação, reescrevemos o terceiro termo da Eq. 3.73 como

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{\alpha\beta\lambda \\ \sigma}} U_{\nu\alpha\lambda\beta}^j c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{j\beta\sigma} c_{j\lambda\downarrow} - U_{\beta\alpha\lambda\mu}^i c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\beta\sigma}^\dagger c_{i\lambda\sigma} c_{j\nu\downarrow} \\
= & \sum_{\substack{\alpha\beta\lambda \\ \sigma}} U_{\beta\alpha\lambda\mu}^i c_{i\beta\sigma}^\dagger c_{j\nu\downarrow} c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\lambda\sigma} - U_{\nu\alpha\lambda\beta}^j c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{j\lambda\downarrow} c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\beta\sigma} .
\end{aligned} \tag{3.74}$$

Na aproximação de fases aleatórias, linearizamos a equação substituindo o produto de 4 operadores pela soma das combinações de 2 operadores

$$c_1^\dagger c_2 c_3^\dagger c_4 \rightarrow \langle c_1^\dagger c_2 \rangle c_3^\dagger c_4 - \langle c_1^\dagger c_4 \rangle c_3^\dagger c_2 + \langle c_3^\dagger c_4 \rangle c_1^\dagger c_2 - \langle c_3^\dagger c_2 \rangle c_1^\dagger c_4 . \tag{3.75}$$

Desta forma, a Eq. 3.74 se torna

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha\beta\lambda} U_{\beta\alpha\lambda\mu}^i c_{i\beta\sigma}^\dagger c_{j\nu\downarrow} c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\lambda\sigma} - U_{\nu\alpha\lambda\beta}^j c_{j\alpha\sigma}^\dagger c_{j\lambda\downarrow} c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\beta\sigma} \\
& \rightarrow \sum_{\alpha\beta\lambda} U_{\beta\alpha\lambda\mu}^i \left\{ \langle c_{i\beta\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \rangle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\lambda\downarrow} - \langle c_{i\beta\uparrow}^\dagger c_{i\lambda\uparrow} \rangle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} - \langle c_{i\beta\downarrow}^\dagger c_{i\lambda\downarrow} \rangle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} + \langle c_{i\alpha\uparrow}^\dagger c_{i\lambda\uparrow} \rangle c_{i\beta\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \right\} \\
& - U_{\nu\alpha\lambda\beta}^j \left\{ \langle c_{j\alpha\downarrow}^\dagger c_{j\lambda\downarrow} \rangle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\beta\downarrow} - \langle c_{j\alpha\uparrow}^\dagger c_{j\beta\uparrow} \rangle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\lambda\downarrow} - \langle c_{j\alpha\downarrow}^\dagger c_{j\beta\downarrow} \rangle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\lambda\downarrow} + \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\beta\uparrow} \rangle c_{j\alpha\uparrow}^\dagger c_{j\lambda\downarrow} \right\}, \quad (3.76)
\end{aligned}$$

onde já consideramos que os valores esperados da forma  $\langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \rangle$  e  $\langle c_{i\mu\downarrow}^\dagger c_{j\nu\uparrow} \rangle$  são nulos. Para explicitar a susceptibilidade  $\chi_{m\eta\lambda\xi}^{\alpha\beta\gamma\xi}$ , primeiro trocamos os índices  $\alpha \rightarrow \eta$  e  $\beta \rightarrow \rho$ , e em seguida explicitamos  $S_{mn}^{+\alpha\beta}$ , ficando com

$$\begin{aligned}
& \sum_{\eta\rho\lambda} \sum_{m\eta\alpha\beta} U_{\rho\eta\lambda\mu}^i \left\{ \langle c_{i\rho\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{ni} \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\lambda} - \langle c_{i\rho\uparrow}^\dagger c_{i\lambda\uparrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\nu} \right. \\
& \quad \left. - \langle c_{i\rho\downarrow}^\dagger c_{i\lambda\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\nu} + \langle c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\lambda\uparrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\rho} \delta_{\beta\nu} \right\} S_{mn}^{+\alpha\beta} \\
& - U_{\nu\eta\lambda\rho}^j \left\{ \langle c_{j\eta\downarrow}^\dagger c_{j\lambda\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\rho} - \langle c_{j\eta\uparrow}^\dagger c_{j\rho\uparrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\lambda} \right. \\
& \quad \left. - \langle c_{j\eta\downarrow}^\dagger c_{j\rho\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\lambda} + \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\rho\uparrow} \rangle \delta_{mj} \delta_{nj} \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\lambda} \right\} S_{mn}^{+\alpha\beta}. \quad (3.77)
\end{aligned}$$

Para facilitar a comparação entre as equações de movimento da susceptibilidade nas aproximações RPA e Hartree-Fock, vamos reorganizar a Eq. 3.77 da forma

$$\begin{aligned}
& \sum_{\eta\rho\lambda} \sum_{m\eta\alpha\beta} S_{mn}^{+\alpha\beta} \left\{ U_{\rho\eta\lambda\mu}^i \langle c_{i\rho\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{ni} \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\lambda} - U_{\nu\eta\lambda\rho}^j \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\rho\uparrow} \rangle \delta_{mj} \delta_{nj} \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\lambda} \right. \\
& - U_{\rho\eta\lambda\mu}^i \left[ \langle c_{i\rho\uparrow}^\dagger c_{i\lambda\uparrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\nu} + \langle c_{i\rho\downarrow}^\dagger c_{i\lambda\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\nu} - \langle c_{i\eta\uparrow}^\dagger c_{i\lambda\uparrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\rho} \delta_{\beta\nu} \right] \\
& \left. - U_{\nu\eta\lambda\rho}^j \left[ \langle c_{j\eta\downarrow}^\dagger c_{j\lambda\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\rho} - \langle c_{j\eta\uparrow}^\dagger c_{j\rho\uparrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\lambda} - \langle c_{j\eta\downarrow}^\dagger c_{j\rho\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\mu} \delta_{\beta\lambda} \right] \right\}. \quad (3.78)
\end{aligned}$$

Somando em  $\eta$  e  $\lambda$  nos dois primeiros termos, eles ficam da forma

$$\sum_{\rho} \sum_{m\eta\alpha\beta} \left\{ U_{\rho\alpha\beta\mu}^i \langle c_{i\rho\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{ni} - U_{\nu\alpha\beta\rho}^j \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\rho\uparrow} \rangle \delta_{mj} \delta_{nj} \right\} S_{mn}^{+\alpha\beta}. \quad (3.79)$$

Os termos restantes podem ser reescritos fazendo a troca  $\lambda \rightarrow \xi$  e rearrumando os termos, de forma que

$$\begin{aligned}
& \sum_{\eta\rho\xi} \sum_{m\eta\alpha\beta} S_{mn}^{+\alpha\beta} \left\{ U_{\nu\eta\xi\rho}^n \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\mu} \left[ \langle c_{n\eta\uparrow}^\dagger c_{n\rho\uparrow} \rangle \delta_{\beta\xi} + \langle c_{n\eta\downarrow}^\dagger c_{n\rho\downarrow} \rangle \delta_{\beta\xi} - \langle c_{n\eta\downarrow}^\dagger c_{n\xi\downarrow} \rangle \delta_{\beta\rho} \right] \right. \\
& \quad \left. - U_{\rho\eta\xi\mu}^m \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\beta\nu} \left[ \langle c_{m\rho\downarrow}^\dagger c_{m\xi\downarrow} \rangle \delta_{\alpha\eta} + \langle c_{m\rho\uparrow}^\dagger c_{m\xi\uparrow} \rangle \delta_{\alpha\eta} - \langle c_{m\eta\uparrow}^\dagger c_{m\xi\uparrow} \rangle \delta_{\alpha\rho} \right] \right\}. \quad (3.80)
\end{aligned}$$

Realizando as somas dentro dos colchetes e unificando os somatórios, obtemos

$$\begin{aligned} & \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta\rho\xi} S_{mn}^{+\alpha\beta} \left\{ \delta_{mi}\delta_{nj}\delta_{\alpha\mu} \left[ U_{\nu\rho\beta\xi}^n \langle c_{n\rho\uparrow}^\dagger c_{n\xi\uparrow} \rangle + U_{\nu\rho\beta\xi}^n \langle c_{n\rho\downarrow}^\dagger c_{n\xi\downarrow} \rangle - U_{\nu\rho\xi\beta}^n \langle c_{n\rho\downarrow}^\dagger c_{n\xi\downarrow} \rangle \right] \right. \\ & \quad \left. - \delta_{mi}\delta_{nj}\delta_{\beta\nu} \left[ U_{\rho\alpha\xi\mu}^m \langle c_{m\rho\downarrow}^\dagger c_{m\xi\downarrow} \rangle + U_{\rho\alpha\xi\mu}^m \langle c_{m\rho\uparrow}^\dagger c_{m\xi\uparrow} \rangle - U_{\alpha\rho\xi\mu}^m \langle c_{m\rho\uparrow}^\dagger c_{m\xi\uparrow} \rangle \right] \right\} . \end{aligned} \quad (3.81)$$

Finalmente, utilizando a simetria da Eq. 3.70 nos quatro últimos termos, ficamos com

$$\begin{aligned} & \sum_{mn} \sum_{\alpha\beta\rho\xi} S_{mn}^{+\alpha\beta} \left\{ \delta_{mi}\delta_{nj}\delta_{\alpha\mu} \left[ U_{\nu\rho\beta\xi}^n \langle c_{n\rho\uparrow}^\dagger c_{n\xi\uparrow} \rangle + (U_{\nu\rho\beta\xi}^n - U_{\rho\nu\beta\xi}^n) \langle c_{n\rho\downarrow}^\dagger c_{n\xi\downarrow} \rangle \right] \right. \\ & \quad \left. - \delta_{mi}\delta_{nj}\delta_{\beta\nu} \left[ U_{\alpha\rho\mu\xi}^m \langle c_{m\rho\downarrow}^\dagger c_{m\xi\downarrow} \rangle + (U_{\alpha\rho\mu\xi}^m - U_{\rho\alpha\mu\xi}^m) \langle c_{m\rho\uparrow}^\dagger c_{m\xi\uparrow} \rangle \right] \right\} . \end{aligned} \quad (3.82)$$

A equação de movimento na aproximação RPA, dada pela Eq. 3.73, pode ser reagrupada na forma

$$\left( i\hbar \frac{d}{dt} + \hbar\omega_0 \right) \chi_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi}(t) = \delta(t) D_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi} + \sum_{\substack{mn \\ \alpha\beta}} \left( K_{ijmn}^{\mu\nu\alpha\beta} + J_{ijmn}^{\mu\nu\alpha\beta} + J'_{ijmn}{}^{\mu\nu\alpha\beta} \right) \chi_{mnkl}^{\alpha\beta\gamma\xi} , \quad (3.83)$$

onde

$$D_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi} = \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{l\xi\uparrow} \delta_{jk} \delta_{\nu\gamma} - c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \delta_{il} \delta_{\mu\xi} \rangle , \quad (3.84a)$$

$$K_{ijmn}^{\mu\nu\alpha\beta} = t_{jn}^{\nu\beta} \delta_{mi} \delta_{\mu\alpha} - t_{mi}^{\alpha\mu} \delta_{jn} \delta_{\nu\beta} , \quad (3.84b)$$

$$J_{ijmn}^{\mu\nu\alpha\beta} = \sum_{\rho} \left\{ U_{\rho\alpha\beta\mu}^i \langle c_{i\rho\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{ni} - U_{\nu\alpha\beta\rho}^j \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\rho\uparrow} \rangle \delta_{mj} \delta_{nj} \right\} , \quad (3.84c)$$

$$\begin{aligned} J'_{ijmn}{}^{\mu\nu\alpha\beta} &= \sum_{\rho\xi} \delta_{mi}\delta_{nj}\delta_{\alpha\mu} \left\{ U_{\nu\rho\beta\xi}^n \langle c_{n\rho\uparrow}^\dagger c_{n\xi\uparrow} \rangle + (U_{\nu\rho\beta\xi}^n - U_{\rho\nu\beta\xi}^n) \langle c_{n\rho\downarrow}^\dagger c_{n\xi\downarrow} \rangle \right\} \\ & \quad - \delta_{mi}\delta_{nj}\delta_{\beta\nu} \left\{ U_{\alpha\rho\mu\xi}^m \langle c_{m\rho\downarrow}^\dagger c_{m\xi\downarrow} \rangle + (U_{\alpha\rho\mu\xi}^m - U_{\rho\alpha\mu\xi}^m) \langle c_{m\rho\uparrow}^\dagger c_{m\xi\uparrow} \rangle \right\} , \end{aligned} \quad (3.84d)$$

Tendo em vista que no modelo de ligações fortes os autoestados atômicos associados a diferentes orbitais são ortogonais a Eq. 3.84d torna-se

$$\begin{aligned} J'_{ijmn}{}^{\mu\nu\alpha\beta} &= \sum_{\rho} \delta_{mi}\delta_{nj}\delta_{\alpha\mu} \left\{ U_{\nu\rho\beta\rho}^n \langle n_{n\rho\uparrow} \rangle + (U_{\nu\rho\beta\rho}^n - U_{\rho\nu\beta\rho}^n) \langle n_{n\rho\downarrow} \rangle \right\} \\ & \quad - \delta_{mi}\delta_{nj}\delta_{\beta\nu} \left\{ U_{\alpha\rho\mu\rho}^m \langle n_{m\rho\downarrow} \rangle + (U_{\alpha\rho\mu\rho}^m - U_{\rho\alpha\mu\rho}^m) \langle n_{m\rho\uparrow} \rangle \right\} . \end{aligned} \quad (3.85)$$

### 3.3.2 Aproximação Hartree-Fock

Vamos agora calcular a susceptibilidade magnética transversa na aproximação de campo médio. Uma maneira de fazer esta aproximação é considerar que a dinâmica de spins é desacoplada no hamiltoniano de interação dado pela Eq. 3.3. Isso é equivalente

a utilizar a Eq. 3.75 para substituir o produto de 4 operadores na Eq. 3.3, ou seja,

$$\begin{aligned} c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\xi\sigma'} c_{i\gamma\sigma} &\rightarrow \langle c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \rangle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\gamma\sigma} + \langle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\gamma\sigma} \rangle c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \\ &\quad - \langle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \rangle \delta_{\sigma\sigma'} c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\gamma\sigma} - \langle c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\gamma\sigma} \rangle \delta_{\sigma\sigma'} c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\xi\sigma'} , \end{aligned} \quad (3.86)$$

onde  $\delta_{\sigma\sigma'}$  surge devido à média dos operadores de criação e aniquilação com diferentes índices de spins. Desta forma, o hamiltoniano de interação na aproximação HF é dada por

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int}^{HF} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\mu\nu\gamma\xi} U_{\mu\nu\gamma\xi}^i \left\{ \langle c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \rangle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\gamma\sigma} + \langle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\gamma\sigma} \rangle c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \right. \\ &\quad \left. - \langle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \rangle \delta_{\sigma\sigma'} c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\gamma\sigma} - \langle c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\gamma\sigma} \rangle \delta_{\sigma\sigma'} c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \right\} . \end{aligned} \quad (3.87)$$

Trocando os índices de orbital  $\mu \rightleftharpoons \nu$  e  $\xi \rightleftharpoons \gamma$ , bem como os índices de spin  $\sigma \rightleftharpoons \sigma'$  no segundo e quarto termos, podemos reescrever o hamiltoniano como

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int}^{HF} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{i \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\mu\nu\gamma\xi} \left\{ U_{\mu\nu\gamma\xi}^i \langle c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \rangle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\gamma\sigma} + U_{\nu\mu\xi\gamma}^i \langle c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \rangle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\gamma\sigma} \right. \\ &\quad \left. - U_{\mu\nu\gamma\xi}^i \langle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \rangle \delta_{\sigma\sigma'} c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\gamma\sigma} - U_{\nu\mu\xi\gamma}^i \langle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \rangle \delta_{\sigma\sigma'} c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\gamma\sigma} \right\} . \end{aligned} \quad (3.88)$$

Utilizando a simetria da interação efetiva explicitada na Eq. 3.70 no segundo termo e no quarto termo, notamos que estes termos se igualam ao primeiro e ao terceiro, respectivamente. Fazendo a troca de índices  $\mu \rightleftharpoons \nu$  no segundo termo, e notando que  $\sigma = \sigma'$ , teremos

$$\hat{H}_{int}^{HF} = \sum_{\substack{i \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\mu\nu\gamma\xi} \left( U_{\mu\nu\gamma\xi}^i - U_{\nu\mu\gamma\xi}^i \delta_{\sigma\sigma'} \right) \langle c_{i\nu\sigma'}^\dagger c_{i\xi\sigma'} \rangle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{i\gamma\sigma} . \quad (3.89)$$

Para a equação de movimento, precisamos calcular

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}^{HF}] = \sum_{\substack{m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\eta\rho\gamma\xi} \left( U_{\eta\rho\gamma\xi}^m - U_{\rho\eta\gamma\xi}^m \delta_{\sigma\sigma'} \right) \langle c_{m\rho\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} \rangle [c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}, c_{m\eta\sigma}^\dagger c_{m\gamma\sigma}] . \quad (3.90)$$

O comutador é dado por

$$[c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}, c_{m\eta\sigma}^\dagger c_{m\gamma\sigma}] = c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{m\gamma\sigma} \delta_{mj} \delta_{\nu\eta} \delta_{\sigma\downarrow} - c_{m\eta\sigma}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \delta_{mi} \delta_{\mu\gamma} \delta_{\sigma\uparrow} . \quad (3.91)$$

Substituindo em 3.90 e somando em  $\sigma$ :

$$\begin{aligned} [S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}^{HF}] &= \sum_{\substack{m \\ \sigma}} \sum_{\eta\rho\gamma\xi} \left\{ \left( U_{\eta\rho\gamma\xi}^m - U_{\rho\eta\gamma\xi}^m \delta_{\sigma\downarrow} \right) \langle c_{m\rho\sigma}^\dagger c_{m\xi\sigma'} \rangle \delta_{mj} \delta_{\nu\eta} c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{m\gamma\downarrow} \right. \\ &\quad \left. - \left( U_{\eta\rho\gamma\xi}^m - U_{\rho\eta\gamma\xi}^m \delta_{\sigma\uparrow} \right) \langle c_{m\rho\sigma}^\dagger c_{m\xi\sigma'} \rangle \delta_{mi} \delta_{\mu\gamma} c_{m\eta\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \right\} . \end{aligned} \quad (3.92)$$

Vamos agora somar o primeiro termo em  $\eta$  e trocar  $\gamma \rightarrow \eta$ , além de somar em  $\gamma$  no segundo termo. Desta forma

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}^{HF}] = \sum_{\sigma'} \sum_{\eta\rho\xi} \left( U_{\nu\rho\eta\xi}^m - U_{\rho\nu\eta\xi}^m \delta_{\sigma'\downarrow} \right) \langle c_{m\rho\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} \rangle \delta_{mj} c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{m\eta\downarrow} - \left( U_{\eta\rho\mu\xi}^m - U_{\rho\eta\mu\xi}^m \delta_{\sigma'\uparrow} \right) \langle c_{m\rho\sigma'}^\dagger c_{m\xi\sigma'} \rangle \delta_{mi} c_{m\eta\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}. \quad (3.93)$$

Abrindo a soma de spins, obtemos

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}^{HF}] = \sum_{\eta\rho\xi} \delta_{mj} \left\{ U_{\nu\rho\eta\xi}^m \langle c_{m\rho\uparrow}^\dagger c_{m\xi\uparrow} \rangle + (U_{\nu\rho\eta\xi}^m - U_{\rho\nu\eta\xi}^m) \langle c_{m\rho\downarrow}^\dagger c_{m\xi\downarrow} \rangle \right\} c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{m\eta\downarrow} - \delta_{mi} \left\{ U_{\eta\rho\mu\xi}^m \langle c_{m\rho\downarrow}^\dagger c_{m\xi\downarrow} \rangle + (U_{\eta\rho\mu\xi}^m - U_{\rho\eta\mu\xi}^m) \langle c_{m\rho\uparrow}^\dagger c_{m\xi\uparrow} \rangle \right\} c_{m\eta\uparrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}. \quad (3.94)$$

Para explicitar o termo  $S_{mn}^{+\alpha\beta}$ , vamos fazer as seguintes mudanças: no primeiro termo trocamos os índices  $m \rightarrow n$  e  $\eta \rightarrow \beta$ , e adicionamos  $\delta_{mi}$  e  $\delta_{\mu\alpha}$ ; no segundo, trocamos  $\eta \rightarrow \alpha$ , e adicionamos  $\delta_{nj}$  e  $\delta_{\nu\beta}$ . Desta forma, ficamos com

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}, \hat{H}_{int}^{HF}] = \sum_{\substack{mn \\ \alpha\beta\rho\xi}} S_{mn}^{+\alpha\beta} \left\{ \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\alpha\mu} \left[ U_{\nu\rho\beta\xi}^n \langle c_{n\rho\uparrow}^\dagger c_{n\xi\uparrow} \rangle + (U_{\nu\rho\beta\xi}^n - U_{\rho\nu\beta\xi}^n) \langle c_{n\rho\downarrow}^\dagger c_{n\xi\downarrow} \rangle \right] - \delta_{mi} \delta_{nj} \delta_{\nu\beta} \left[ U_{\alpha\rho\mu\xi}^m \langle c_{m\rho\downarrow}^\dagger c_{m\xi\downarrow} \rangle + (U_{\alpha\rho\mu\xi}^m - U_{\rho\alpha\mu\xi}^m) \langle c_{m\rho\uparrow}^\dagger c_{m\xi\uparrow} \rangle \right] \right\} \quad (3.95) \\ = \sum_{\substack{mn \\ \alpha\beta\rho\xi}} J'_{ijmn}{}^{\mu\nu\alpha\beta} S_{mn}^{+\alpha\beta},$$

onde  $J'_{ijmn}{}^{\mu\nu\alpha\beta}$  é dado pela Eq. 3.84d. Substituindo este resultado na Eq. 3.73 no lugar do termo de interação, obtemos

$$\left( i\hbar \frac{d}{dt} + \hbar\omega_0 \right) \chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(t) = \delta(t) D_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi} + \sum_{\substack{mn \\ \alpha\beta}} \left( K_{ijmn}^{\mu\nu\alpha\beta} + J'_{ijmn}{}^{\mu\nu\alpha\beta} \right) \chi_{mnkl}^{0\alpha\beta\gamma\xi}, \quad (3.96)$$

onde  $\chi^0$  representa a susceptibilidade magnética transversa na aproximação de Hartree-Fock, e  $D$ ,  $K$  e  $J'$  são dados pelas equações 3.84a, 3.84b e 3.85, respectivamente.

As equações de movimento obtidas nas Eqs. 3.83 e 3.96 podem ser reescritas na forma matricial como

$$\left( i\hbar \frac{d}{dt} + \hbar\omega_0 \right) \chi(t) = \delta(t) D + (K + J + J') \chi(t), \quad (3.97a)$$

$$\left( i\hbar \frac{d}{dt} + \hbar\omega_0 \right) \chi^0(t) = \delta(t) D + (K + J') \chi^0(t). \quad (3.97b)$$

Fazendo a transformada de Fourier destas equações obtemos

$$\hbar(\omega + \omega_0) \chi(\omega) = D + (K + J + J') \chi(\omega) , \quad (3.98a)$$

$$\hbar(\omega + \omega_0) \chi^0(\omega) = D + (K + J') \chi^0(\omega) . \quad (3.98b)$$

Da Eq. 3.98a, podemos obter

$$\chi(\omega) - [\hbar(\omega + \omega_0) - K - J']^{-1} J \chi(\omega) = [\hbar(\omega + \omega_0) - K - J']^{-1} D , \quad (3.99)$$

enquanto que pela Eq. 3.98b, é fácil ver que

$$\chi^0(\omega) = [\hbar(\omega + \omega_0) - K - J']^{-1} D . \quad (3.100)$$

Substituindo a Eq. 3.100 em 3.99, encontramos

$$\chi(\omega) = \chi^0(\omega) + \chi^0(\omega) P \chi(\omega) , \quad (3.101)$$

onde  $P = D^{-1} J \Rightarrow DP = J$ , ou ainda, em termos de suas componentes,

$$\sum_{\substack{kl \\ \gamma\xi}} D_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi} P_{klmn}^{\gamma\xi\alpha\beta} = J_{ijmn}^{\mu\nu\alpha\beta} . \quad (3.102)$$

Utilizando as componentes de  $D$  e  $J$  definidas nas Eqs. 3.84a e 3.84c, respectivamente, teremos

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{kl \\ \gamma\xi}} \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{l\xi\uparrow} \delta_{jk} \delta_{\nu\gamma} - c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \delta_{il} \delta_{\mu\xi} \rangle P_{klmn}^{\gamma\xi\alpha\beta} \\ &= \sum_{\rho} \left\{ U_{\rho\alpha\beta\mu}^i \langle c_{i\rho\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{ni} - U_{\nu\alpha\beta\rho}^j \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\rho\uparrow} \rangle \delta_{mj} \delta_{nj} \right\} . \end{aligned} \quad (3.103)$$

Para obter uma expressão para as componentes de  $P$ , trocamos os índices  $\xi \rightarrow \rho$  e  $\gamma \rightarrow \rho$  no lado esquerdo, e invertemos a ordem dos termos no lado direito. Assim,

$$\begin{aligned} & \sum_{l\rho} \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{l\rho\uparrow} \rangle P_{jlmn}^{\nu\rho\alpha\beta} - \sum_{k\rho} \langle c_{k\rho\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \rangle P_{kimn}^{\rho\mu\alpha\beta} \\ &= - \sum_{\rho} \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger c_{j\rho\uparrow} \rangle \delta_{mj} \delta_{nj} U_{\nu\alpha\beta\rho}^j + \sum_{\rho} \langle c_{i\rho\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow} \rangle \delta_{mi} \delta_{ni} U_{\rho\alpha\beta\mu}^i . \end{aligned} \quad (3.104)$$

Desta forma, fica fácil de perceber que

$$P_{klmn}^{\gamma\xi\alpha\beta} = -U_{\gamma\alpha\beta\xi}^k \delta_{lk} \delta_{mk} \delta_{nk} . \quad (3.105)$$

Utilizando este resultado na Eq. 3.101 em termos das componentes das matrizes, obtemos

$$\begin{aligned}\chi_{ijkl}^{\mu\nu\gamma\xi}(\omega) &= \chi_{ijkl}^0(\omega) + \sum_{\substack{m\nu r s \\ \eta\rho\alpha\beta}} \chi_{ijmn}^0(\omega) P_{m\nu r s}^{\eta\rho\alpha\beta} \chi_{rskl}^{\alpha\beta\gamma\xi}(\omega) \\ &= \chi_{ijkl}^0(\omega) - \sum_{\substack{m \\ \eta\rho\alpha\beta}} \chi_{ijmm}^0(\omega) U_{\eta\alpha\beta\rho}^m \chi_{mmkl}^{\alpha\beta\gamma\xi}(\omega).\end{aligned}\quad (3.106)$$

Para calcular a susceptibilidade magnética transversa usual a partir da susceptibilidade generalizada, particularizamos a Eq. para  $\chi_{ij}^{\mu\gamma}(\omega) = \chi_{iijj}^{\mu\mu\gamma\gamma}(\omega)$ , de forma que

$$\chi_{ij}^{\mu\gamma}(\omega) = \chi_{ij}^0(\omega) - \sum_{\substack{m \\ \eta\rho\alpha\beta}} \chi_{im}^0(\omega) U_{\eta\alpha\beta\rho}^m \chi_{mj}^{\alpha\beta\gamma\gamma}(\omega). \quad (3.107)$$

Note que como estamos utilizando uma descrição multiorbital, aparecem susceptibilidades que dependem de quatro índices de orbital. Em uma abordagem de um orbital por sítio, a Eq. 3.107 se resume a

$$\chi_{ij}(\omega) = \chi_{ij}^0(\omega) - \sum_m \chi_{im}^0(\omega) U^m \chi_{mj}(\omega), \quad (3.108)$$

que só envolve susceptibilidades transversas usuais.

As Eqs. 3.106-3.108 nos permitem calcular a susceptibilidade na aproximação de fases aleatórias conhecendo a susceptibilidade  $\chi^0$ . Ela é de extrema importância, pois apesar de conseguirmos calcular a susceptibilidade na aproximação Hartree-Fock (como mostraremos na seção seguinte), ela não traz informações sobre as correlações de spins, já que as dinâmicas de elétrons com spins  $\uparrow$  e  $\downarrow$  estão desacopladas.

### 3.4 Susceptibilidade Hartree-Fock

A susceptibilidade magnética transversa é uma grandeza fundamental no estudo da dinâmica de spins. Já vimos que ela incorpora informações sobre a dinâmica local de spins, e também que está relacionada com correntes de spins emitidas por magnetizações precessionantes, além de serem utilizadas em estudos de ondas de spins em sistemas ferromagnéticos. Nesta seção iremos calcular a susceptibilidade magnética transversa na aproximação de campo médio, na qual as dinâmicas dos elétrons com spins  $\uparrow$  e  $\downarrow$  são desacopladas. Mostramos que com este resultado, podemos obter a susceptibilidade na aproximação RPA através da Eq. 3.106.

A definição da susceptibilidade generalizada é

$$\chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(t) = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t)\langle[S_{ij}^{+\mu\nu}(t), S_{kl}^{-\gamma\xi}(0)]\rangle, \quad (3.109)$$

onde o comutador é dado por

$$[S_{ij}^{+\mu\nu}(t), S_{kl}^{-\gamma\xi}(0)] = c_{i\mu\uparrow}^\dagger(t)c_{j\nu\downarrow}(t)c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{l\xi\uparrow} - c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{l\xi\uparrow} c_{i\mu\uparrow}^\dagger(t)c_{j\nu\downarrow}(t). \quad (3.110)$$

Como a dinâmica dos elétrons com spins  $\uparrow$  e  $\downarrow$  são descorrelacionadas,

$$\chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(t) = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t) \left[ \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger(t)c_{l\xi\uparrow} \rangle \langle c_{j\nu\downarrow}(t)c_{k\gamma\downarrow}^\dagger \rangle - \langle c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}(t) \rangle \langle c_{l\xi\uparrow} c_{i\mu\uparrow}^\dagger(t) \rangle \right]. \quad (3.111)$$

Adicionando e subtraindo o termo  $\langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger(t)c_{l\xi\uparrow} \rangle \langle c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}(t) \rangle$ , podemos escrever

$$\chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(t) = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t) \left[ \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger(t)c_{l\xi\uparrow} \rangle \langle \{c_{j\nu\downarrow}(t), c_{k\gamma\downarrow}^\dagger\} \rangle - \langle c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}(t) \rangle \langle \{c_{i\mu\uparrow}^\dagger(t), c_{l\xi\uparrow}\} \rangle \right]. \quad (3.112)$$

A função de Green monoelétrica retardada é dada por

$$G_{ij}^{\mu\nu\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar}\Theta(t)\langle\{c_{i\mu\sigma}(t), c_{j\nu\sigma}^\dagger\}\rangle, \quad (3.113)$$

e podemos ver que

$$[G_{ij}^{\mu\nu\sigma}(t)]^* = \frac{i}{\hbar}\Theta(t)\langle\{c_{i\mu\sigma}^\dagger(t), c_{j\nu\sigma}\}\rangle. \quad (3.114)$$

Substituindo as as funções de Green escritas nas Eqs. 3.113 e 3.114 na Eq. 3.112, esta se torna

$$\chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(t) = \langle c_{i\mu\uparrow}^\dagger(t)c_{l\xi\uparrow} \rangle G_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(t) + \langle c_{k\gamma\downarrow}^\dagger c_{j\nu\downarrow}(t) \rangle [G_{il}^{\mu\xi\uparrow}(t)]^*. \quad (3.115)$$

Utilizando a função de Green monoelétrica avançada, definida por

$$G_{ij}^{-\mu\nu\sigma}(t) = \frac{i}{\hbar}\Theta(-t)\langle\{c_{i\mu\sigma}(t), c_{j\nu\sigma}^\dagger\}\rangle, \quad (3.116)$$

pode-se mostrar que

$$\langle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{l\xi\sigma}(t) \rangle = \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} f(\omega) \left[ \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\sigma}(\omega) - \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\sigma}(\omega) \right], \quad (3.117)$$

onde  $\tilde{G}(\omega)$  e  $\tilde{G}^-(\omega)$  representam as transformadas de Fourier no tempo dos propagadores monoelétricos retardados e avançados, respectivamente. Pela propriedade cíclica do traço, que é tomado ao se fazer o valor esperado, podemos ainda notar que

$$\langle c_{i\mu\sigma}^\dagger c_{l\xi\sigma}(t) \rangle = \langle c_{i\mu\sigma}^\dagger e^{\frac{i\hbar t}{\hbar}} c_{l\xi\sigma} e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}} \rangle = \langle c_{i\mu\sigma}^\dagger(-t)c_{l\xi\sigma} \rangle, \quad (3.118)$$

de onde obtemos

$$\langle c_{i\mu\sigma}^\dagger(t) c_{l\xi\sigma} \rangle = \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega e^{i\omega t} f(\omega) \left[ \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\sigma}(\omega) - \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\sigma}(\omega) \right], \quad (3.119)$$

Substituindo as Eqs. 3.117 (com  $i\mu, l\xi \rightarrow k\gamma, j\nu$  respectivamente) e 3.119 na susceptibilidade escrita na Eq. 3.115, e utilizando a identidade  $[G_{il}^{\mu\xi\sigma}(t)]^* = G_{li}^{-\xi\mu\sigma}(-t)$ , teremos

$$\begin{aligned} \chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(t) &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega e^{i\omega t} f(\omega) \left[ \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\uparrow}(\omega) - \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega) \right] G_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(t) \\ &+ \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega e^{-i\omega t} f(\omega) \left[ \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega) - \tilde{G}_{jk}^{-\nu\gamma\downarrow}(\omega) \right] G_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(-t). \end{aligned} \quad (3.120)$$

Trocando a variavel de integração de  $\omega \rightarrow \omega'$  e usando a transformada de Fourier definida na Eq. 3.31, teremos

$$\begin{aligned} \chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\omega) &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega' f(\omega') \left[ \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\uparrow}(\omega') - \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') \right] \int dt e^{i(\omega+\omega')t} G_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(t) \\ &+ \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega' f(\omega') \left[ \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega') - \tilde{G}_{jk}^{-\nu\gamma\downarrow}(\omega') \right] \int dt e^{i(\omega-\omega')t} G_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(-t). \end{aligned} \quad (3.121)$$

Identificando as transformadas de Fourier das funções de Green retardada e avançada, escrevemos a Eq. 3.121 como

$$\begin{aligned} \chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\omega) &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega' f(\omega') \left[ \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\uparrow}(\omega') - \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') \right] \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega) \\ &+ \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega' f(\omega') \left[ \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega') - \tilde{G}_{jk}^{-\nu\gamma\downarrow}(\omega') \right] \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega' - \omega). \end{aligned} \quad (3.122)$$

Como a função de Green retardada é analítica no semiplano superior e a função de Green avançada é analítica no semiplano inferior, podemos reescrever a equação acima agrupando os termos da forma

$$\begin{aligned} \chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\omega) &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega' f(\omega') \left\{ \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\uparrow}(\omega') \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega) - \tilde{G}_{jk}^{-\nu\gamma\downarrow}(\omega') \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega' - \omega) \right. \\ &\quad \left. + \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega') \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega' - \omega) - \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega) \right\}. \end{aligned} \quad (3.123)$$

À temperatura  $T = 0$ , a função de distribuição de Fermi-Dirac é uma função degrau:

$$f(\omega) = \begin{cases} 1 & \omega < \omega_F \\ 0 & \omega > \omega_F \end{cases}. \quad (3.124)$$

Com isto, o primeiro termo da Eq. 3.123 se torna

$$I_1 = \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\omega_F} d\omega' \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\uparrow}(\omega') \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega). \quad (3.125)$$

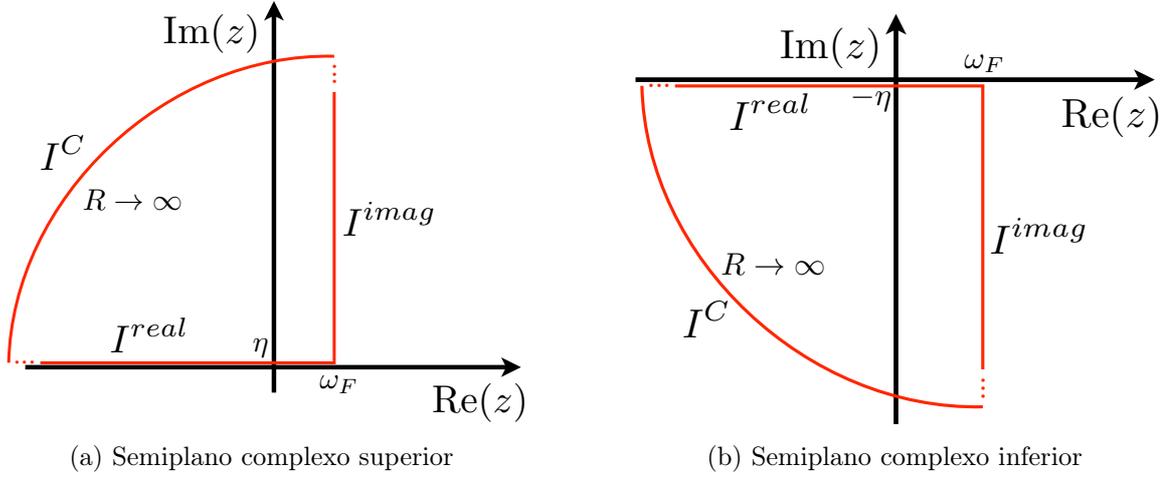


Figura 4: Contorno das integrais das funções de Green no plano complexo. (a) A integral das funções de Green retardadas é analítica no semiplano complexo superior enquanto que (b) a integral das funções de Green avançadas é analítica no semiplano complexo inferior.

Estendendo esta integral para o plano complexo com  $\omega' \rightarrow z \in \mathbb{C}$ , podemos fechar o caminho com uma reta vertical em  $z = \omega_F + iy$  (com  $dz = idy$ ) e um quarto de círculo com raio  $R \rightarrow \infty$ , como mostrado na Fig. 4a. Como não há pólos no semi-plano superior, a integral neste circuito fechado é nula. Além disso, o integrando é nulo no semi-círculo de raio infinito, já que cada função de Green  $G(z \rightarrow \infty) \sim z^{-1}$ . Desta forma, teremos:

$$I_1^{real} + I_1^{imag} + I_C^0 = 0 \quad (3.126a)$$

$$I_1^{real} = -I_1^{imag} . \quad (3.126b)$$

Portanto, a Eq. 3.125 pode ser reescrita como

$$I_1 = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\uparrow}(\omega_F + iy) \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega_F + \omega + iy) . \quad (3.127)$$

Analogamente, podemos estender a integral que envolve o produto de duas funções de Green avançadas na Eq. 3.123 para o plano complexo. Entretanto, neste caso o circuito, mostrado na Fig. 4b, deve ser fechado no semiplano inferior, onde a função de Green avançada não possui pólos. As Eqs. 3.126a-3.126b também valem para este termo, mas neste caso  $z = \omega_F - iy$  (e  $dz = -idy$ ). Logo,

$$\begin{aligned} I_2 &= -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\omega_F} dz \tilde{G}_{jk}^{-\nu\gamma\downarrow}(z) \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(z - \omega) \\ &= \frac{\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \tilde{G}_{jk}^{-\nu\gamma\downarrow}(\omega_F - iy) \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega_F - \omega - iy) . \end{aligned} \quad (3.128)$$

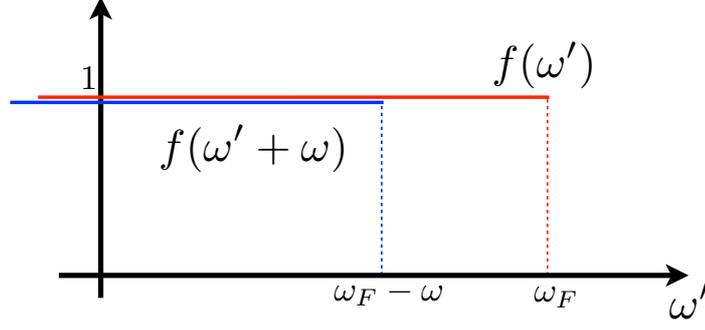


Figura 5: Funções de Fermi-Dirac envolvidas na integral da Eq. 3.131.

Como  $\tilde{G}_{jk}^{-\nu\gamma\sigma}(z) = [\tilde{G}_{kj}^{\gamma\nu\sigma}(z)]^*$ , a integral  $I_2$  pode ser calculada da forma

$$I_2 = \frac{\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \left[ \tilde{G}_{kj}^{\gamma\nu\downarrow}(\omega_F + iy) \tilde{G}_{il}^{\mu\xi\uparrow}(\omega_F - \omega + iy) \right]^* . \quad (3.129)$$

O terceiro e quarto termos envolvem produtos de funções de Green retardadas e avançadas, e podem ser escritos como

$$I_3 = \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega' f(\omega') \left[ \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega') \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega' - \omega) - \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega) \right] . \quad (3.130)$$

Não é possível obter um circuito no plano complexo que não haja polos. Porém, este termo pode ser simplificado fazendo a mudança de variáveis  $\omega'' = \omega' - \omega$  no primeiro deles e em seguida trocando a variável de integração  $\omega'' \rightarrow \omega'$ , i.e.,

$$\begin{aligned} I_3 &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega' \left[ f(\omega' + \omega) \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega) \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') - f(\omega') \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega) \right] \\ &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int d\omega' [f(\omega' + \omega) - f(\omega')] \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega) . \end{aligned} \quad (3.131)$$

À  $T = 0$ , as funções de Fermi-Dirac restringem os limites de integração na Eq. 3.131 (como mostrado na Fig. 5) e a integral se torna então

$$I_3 = -\frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\omega_F - \omega}^{\omega_F} d\omega' \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega) . \quad (3.132)$$

Esta integral, apesar de estar restrita a uma região relativamente pequena do espaço de frequências, não é simples de ser feita, já que as funções de Green possuem polos no eixo real.

Juntando os resultados das integrais obtidos nas Eqs. 3.127, 3.129 e 3.132, a suscep-

tibilidade na aproximação Hartree-Fock pode ser calculada por

$$\begin{aligned} \chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\omega) = & \frac{\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\uparrow}(\omega_F + iy) \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega_F + \omega + iy) \\ & + \frac{\hbar}{2\pi} \int_{\eta}^{\infty} dy \left[ \tilde{G}_{kj}^{\gamma\nu\downarrow}(\omega_F + iy) \tilde{G}_{il}^{\mu\xi\uparrow}(\omega_F - \omega + iy) \right]^* \\ & - \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\omega_F - \omega}^{\omega_F} d\omega' \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega) \end{aligned} \quad (3.133)$$

Esta é a expressão final para a susceptibilidade na aproximação de Hartree-Fock. Para calcular numericamente as duas primeiras integrais, de  $\eta$  a  $\infty$ , fazemos a mudança de variáveis

$$x = \frac{y - \eta}{y + 1} \rightarrow y = \frac{\eta + x}{1 - x}, \quad (3.134)$$

de forma que quando  $y = \eta$ ,  $x = 0$  e quando  $y \rightarrow \infty$ ,  $x \rightarrow 1$ . Assim, como  $dy = \frac{1+\eta}{(1-x)^2} dx$ , a Eq. 3.133 da susceptibilidade fica da forma

$$\begin{aligned} \chi_{ijkl}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\omega) = & \frac{\hbar(1+\eta)}{2\pi} \int_0^1 \frac{dx}{(1-x)^2} \tilde{G}_{li}^{\xi\mu\uparrow} \left( \omega_F + i \frac{\eta + x}{1-x} \right) \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow} \left( \omega_F + \omega + i \frac{\eta + x}{1-x} \right) \\ & + \frac{\hbar(1+\eta)}{2\pi} \int_0^1 \frac{dx}{(1-x)^2} \left[ \tilde{G}_{kj}^{\gamma\nu\downarrow} \left( \omega_F + i \frac{\eta + x}{1-x} \right) \tilde{G}_{il}^{\mu\xi\uparrow} \left( \omega_F - \omega + i \frac{\eta + x}{1-x} \right) \right]^* \\ & - \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{\omega_F - \omega}^{\omega_F} d\omega' \tilde{G}_{li}^{-\xi\mu\uparrow}(\omega') \tilde{G}_{jk}^{\nu\gamma\downarrow}(\omega' + \omega). \end{aligned} \quad (3.135)$$

De posse da susceptibilidade magnética generalizada na aproximação de Hartree-Fock, utilizamos a Eq. 3.106 para obter a susceptibilidade na aproximação de fases aleatórias, e as utilizamos para calcular a corrente de spins gerada por um campo harmônico, dada pela Eq. 3.52, gerada por um campo gaussiano, dada pela Eq. 3.45, ou ainda para obter a perturbação de spins, que no caso de um pulso gaussiano é dado pela Eq. 3.30.

A teoria quântica que acabamos de desenvolver permite estudar a dinâmica de spins com grandes detalhes, tanto no domínio das frequências quanto no tempo, além de podermos analisar como que essa perturbação de spins se propaga espacialmente. Isto não era possível com a teoria semi-clássica que mostramos no capítulo 2, que permitia apenas o cálculo da corrente emitida para os contatos, necessitando, para isso, do conhecimento da matriz de espalhamento e de uma maneira para calcular a dinâmica de  $\mathbf{m}(t)$  (por exemplo, através da equação de Landau-Lifshitz-Gilbert escrita na Eq. 2.148). Vamos ilustrar a abordagem de resposta linear descrita aqui, para alguns sistemas simples (unidimensionais e quasi-unidimensionais), nos capítulos seguintes. A extensão da nossa teoria para multicamadas metálicas, onde experimentos de bombeamento de spins vêm sendo

realizados [18, 19, 24, 42, 45], é feita no apêndice B.

## 4 *Aplicações a sistemas unidimensionais*

Este capítulo será dedicado às aplicações da teoria formulada no capítulo 3 em sistemas bastante simples. Nosso objetivo é mostrar as vantagens desta abordagem, que além de ser completamente quântica, permite o cálculo de uma grande variedade de propriedades magnéticas dinâmicas de um sistema que não eram possíveis de serem obtidas com a teoria desenvolvida no capítulo 2. Apesar de termos desenvolvido a teoria para um sistema multi-orbital da maneira geral, as aplicações que vamos tratar neste trabalho são para sistemas modelo (cadeias lineares) ou para sistemas à base de carbono, onde consideramos apenas o orbital  $\pi$  (no capítulo 5).

Como pretendemos mostrar as vantagens da teoria quântica em relação à semi-clássica, inicialmente será apropriado compararmos as correntes de spins obtidas por estas duas teorias. O modelo unidimensional que vamos tratar aqui é conveniente para enfatizarmos as diferenças entre os resultados obtidos pela teoria semi-clássica, dada pela Eq. 2.141 e os obtidos pela teoria quântica, dada pela Eq. 3.30.

### 4.1 Comparação entre teorias semi-clássica e quântica

Antes de fazermos uma comparação de resultados quantitativos entre as duas teorias, há um ponto fundamental, importante de ser ressaltado. Ele está relacionado com uma das diferenças básicas nas premissas das duas teorias: enquanto que a semi-clássica leva em conta uma aproximação adiabática, na qual os elétrons estão em equilíbrio com o campo externo a cada instante de tempo, a teoria quântica é baseada na teoria de resposta linear, onde só é levado em conta termos de primeira ordem na amplitude do campo externo  $b_0$ .

Para entender a implicação deste ponto mais claramente, vamos supor uma excitação de spins causada por um campo magnético harmônico de frequência  $\omega$ . Este caso é análogo ao que fizemos na Eq. 2.150 do final do capítulo 2, porém estamos agora supondo que o

campo magnético responsável pela precessão de  $\mathbf{m}(t)$  é oscilatório. Como a teoria semi-clássica é adiabática, a direção da magnetização segue a direção do campo oscilatório. Em resposta ao campo, devemos ter uma magnetização que evolui no tempo da forma  $\mathbf{m}(t) = \hat{\mathbf{z}} + \delta\mathbf{m}(t)$ , onde, em resposta linear,  $\delta\mathbf{m}(t)$  oscila também com frequência  $\omega$ . Pela teoria semi-clássica, teremos então duas componentes da corrente de spins: uma componente AC com frequência  $\omega$

$$\mathbf{I}_S^{(AC)} = \frac{\hbar}{4\pi} \left[ A_r \hat{\mathbf{z}} \times \frac{d\delta\mathbf{m}(t)}{dt} - A_i \frac{d\delta\mathbf{m}(t)}{dt} \right], \quad (4.1)$$

e outra componente DC proporcional à potência aplicada para pequenas amplitudes. Ou seja,

$$\mathbf{I}_S^{(DC)} = \frac{\hbar A_r}{4\pi} \left\langle \delta\mathbf{m}(t) \times \frac{d\delta\mathbf{m}(t)}{dt} \right\rangle, \quad (4.2)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  denota média temporal. Um exemplo desta corrente direta foi obtido na componente  $I_S^z$  da Eq. 2.152, para a precessão elíptica de uma magnetização. É esta componente DC que leva a uma voltagem de spin Hall inversa discutida na literatura [30, 46], quando o acoplamento spin órbita está presente no sistema. Note que uma voltagem Hall AC também está necessariamente presente.

Em nossa análise quântica, obtemos uma expressão para a corrente de spins dentro de um formalismo de Kubo de resposta linear. Nossa abordagem resulta apenas em uma componente AC que, no formalismo da Ref. [1], é descrito pela Eq. 4.1. Isto ocorre devido à componente DC ser bilinear nas amplitudes de  $m^x(t)$  e  $m^y(t)$ , como pode ser visto na componente  $I_S^z$  bombeada pela precessão elíptica, dada pela Eq. 2.152. Como a amplitude de cada uma destas componentes é proporcional à amplitude do campo transversal  $b_0$ , que estamos supondo ser muito pequena comparado com o campo estático, a componente DC é quadrática em  $b_0$ . Para sermos capazes de calcular esta componente, devemos ir além de resposta linear.

Entretanto, apesar de não conseguirmos calcular diretamente a componente DC da corrente de spins em teoria de resposta linear, ainda podemos utilizar a Eq. 3.30 da corrente quântica, em conjunto com a Eq. 2.141 para a corrente semi-clássica, para calcular  $\mathbf{I}_S^{(DC)}$ . Quando um campo externo é aplicado aos momentos responsáveis pela geração da corrente de spins, nós calculamos  $\mathbf{I}_S^{(AC)}$  diretamente, sem a necessidade de recorrer a uma descrição explícita dos autoestados de uma partícula do sistema, além de calcularmos  $\delta\mathbf{m}(t)$  com a mesma estrutura teórica. Desta forma, podemos extrair os coeficientes  $A_r$  e  $A_i$  por comparação de nossos resultados com os da Eq. 4.1, que mostra a polarização da corrente AC perpendicular à componente estática da magnetização. O

coeficiente  $A_i$  controla a magnitude da componente paralela à derivada temporal de  $\delta\mathbf{m}(t)$ , enquanto  $A_r$  controla a componente perpendicular a este vetor. De posse do coeficiente  $A_r$ , podemos utilizar a Eq. 4.2 para obter uma expressão para a componente DC da corrente de spins.

O principal ponto destas observações é que a nossa abordagem, baseada na teoria de resposta linear, descreve apenas a componente AC da corrente de spins, que é calculada em primeira ordem na amplitude da magnetização transversa, e não a componente DC, que é proporcional ao seu quadrado. Todavia, se aceitarmos a Eq. 2.141 como uma boa descrição da corrente de spins, podemos calcular a componente DC também pelo nosso formalismo, sem a necessidade de obter os coeficientes da matriz de espalhamento.

Para obter uma comparação numérica entre as correntes AC dadas pelas Eqs. 3.30 e 4.1, vamos considerar um sistema modelo bem simples composto por uma cadeia infinita de átomos não magnéticos, com apenas 1 orbital por sítio. Vamos supor que o sítio 0 é substituído por uma impureza magnética, cuja magnetização é posta em movimento de precessão gerando assim a corrente de spins a ser estudada. No hamiltoniano dado pela Eq. 3.1, consideramos  $U_i = 0$  em todos os sítios, exceto em  $i = 0$ . A escolha de  $U_0$  é feita de modo que o critério de Stoner para a formação de momento magnético local seja satisfeita. Isto garante a existência de um momento magnético  $\mathbf{m}_0 \neq 0$  no sítio 0. A corrente de spins é emitida pela precessão de  $\mathbf{m}_0$  e propaga-se no meio condutor tanto para esquerda quanto para a direita.

Por simplicidade, consideramos  $t_{ij} \neq 0$  entre primeiros vizinhos apenas, e escolhemos a integral de transferência  $t = 1$  como sendo a nossa unidade de energia. Desta forma, a largura de banda da cadeia linear é  $W = 4$ . Escolhemos também as energias atômicas  $\bar{\epsilon}_i = 0$  em todos os sítios  $i \neq 0$ . Desta forma, quando o valor da energia de Fermi for  $\epsilon_F = 0$ , o metal hospedeiro terá sua banda semi-preenchida. Ajustamos  $\bar{\epsilon}_0$  para obter ocupação  $n_0 = 1$  autoconsistentemente. Escolhemos  $U_0 = 10$  e, com estes parâmetros, obtemos um momento  $\mathbf{m}_0 = 0.916\mu_B$ . Este valor de interação eletrônica efetiva é extremamente alto comparado com os valores típicos de  $U$  para impurezas magnéticas de metais de transição 3d ( $U \approx 1\text{eV}$ ). Entretanto, como estamos trabalhando com um sistema unidimensional e levando em conta apenas um orbital tipo  $s$  por sítio, além de utilizar o mesmo valor da integral de transferência  $t$  para todos os sítios, necessitamos de um valor relativamente alto de  $U$  para garantir a formação de um momento local apreciável no sítio da impureza.

Para compararmos com os resultados da corrente  $\langle I_S^+ \rangle$  que calculamos na Eq. 3.30,

vamos reescrever a componente AC da corrente de spins, dada pela Eq. 4.1, como

$$I_S^+ = I_S^x + iI_S^y = \frac{i\hbar A}{4\pi} \frac{d\delta m^+(t)}{dt}, \quad (4.3)$$

onde  $A = A_r + iA_i$  já inclui as contribuições das correntes emitidas para a esquerda e para a direita. Tendo em vista que o sistema simétrico,  $A = A^{(E)} + A^{(D)} = 2A^{(E)}$ . A precessão de  $\mathbf{m}_0$  pode ser descrita pela equação fenomenológica de Landau-Lifshitz-Gilbert (Eq. 2.148), modificada pela presença do efeito do bombeamento de spins. Como não estamos considerando nenhum mecanismo explícito de dissipação, o coeficiente de amortecimento intrínseco  $\alpha = 0$ . A dinâmica das componentes  $\delta m^x$  e  $\delta m^y$  da magnetização são descritas por

$$\frac{d\delta m^x}{dt} = \gamma' (\delta m^y B^z - B^y) - \alpha' \frac{d\delta m^y}{dt}, \quad e \quad (4.4a)$$

$$\frac{d\delta m^y}{dt} = \gamma' (B^x - \delta m^x B^z) + \alpha' \frac{d\delta m^x}{dt}, \quad (4.4b)$$

onde já utilizamos que  $m^z = 1$ , e, portanto,  $\dot{m}^z = 0$ . Esta aproximação significa que já estamos considerando apenas termos de resposta linear. As Eqs. 4.4a e 4.4b podem ser reescritas e resolvidas diretamente para a componente  $\delta m^+$  como

$$\frac{d\delta m^+}{dt} = -i\gamma' B^z \delta m^+ + i\gamma' B^+ + i\alpha' \frac{d\delta m^+}{dt}. \quad (4.5)$$

Vamos considerar que a magnetização está sujeita ao mesmo campo magnético que utilizamos antes,  $\mathbf{B}(t) = B_0 \hat{z} + \mathbf{b}_\perp(t)$ , onde o campo harmônico transversal  $\mathbf{b}_\perp(t)$  é dado pela Eq. 3.24. As componentes transversas de  $\mathbf{m}_0$  também serão oscilatórias, da forma  $\delta m^+(t) = \delta m_0^+ e^{-i\omega t}$ . Substituindo na Eq. 4.5, obtemos

$$\delta m^+(t) = \frac{\gamma' b_0}{\gamma' B_0 - \omega (1 - i\alpha')} e^{-i\omega t}. \quad (4.6)$$

Aqui,  $\gamma'$  e  $\alpha'$  são dados pelas Eqs. 2.149a e 2.149b. Substituindo este resultado na Eq. 4.3, encontramos

$$I_S^+ = -g\mu_B b_0 \left[ \frac{A}{4\pi m_0 + gA_i} \right] \left[ \frac{m_0 \omega}{(\gamma' B_0 - \omega) + i\alpha' \omega} \right] e^{-i\omega t}. \quad (4.7)$$

Para proceder com a comparação, devemos calcular  $A_r$  e  $A_i$ , dados pelas Eqs. 2.140 e 2.138. Nestas expressões,  $r_{nm}^\sigma$  e  $t_{nm}^\sigma$  são os coeficientes de reflexão e transmissão para um elétron com spin  $\sigma$  na energia de Fermi  $\epsilon_F$  espalhado pela unidade magnética de um canal  $n$  para um canal  $m$  do metal normal. No nosso modelo unidimensional, há apenas um canal disponível tanto no estado inicial quanto final, de forma que  $r_{mn}^\sigma = r^\sigma \delta_{mn} \delta_{n0}$  e, similarmemente para  $t_{mn}^\sigma$ . Para uma cadeia linear, os coeficientes de reflexão e transmissão

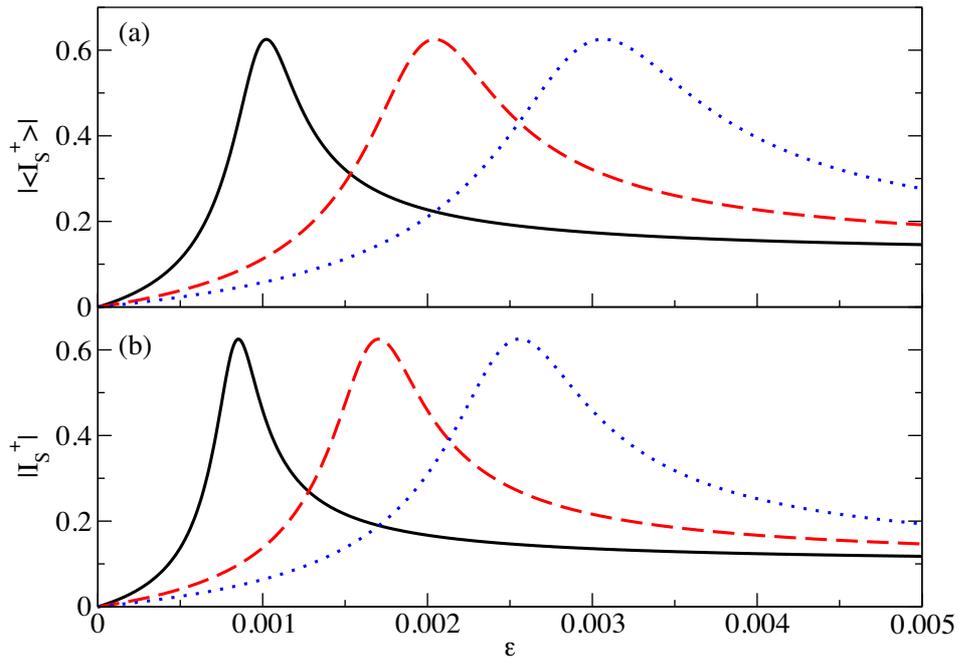


Figura 6: Comparação entre (a) a corrente de spins longe da impureza calculada com o formalismo quântico, e (b) a corrente de spins descrita pelo formalismo desenvolvido no capítulo 2, ambas em função da energia  $\epsilon = \hbar\omega$ , onde  $\omega$  é a frequência do campo aplicado. As linhas sólida, tracejada e pontilhada referem-se aos cálculos efetuados para diferentes valores de energias Zeeman  $\epsilon_0 = \hbar\omega_0$  iguais a  $1.0 \times 10^{-3}$ ,  $2.0 \times 10^{-3}$  e  $3.0 \times 10^{-3}$ , respectivamente.

são dados por [47]

$$r^\sigma = \frac{V^\sigma g_{00}^0(\epsilon_F)}{1 - V^\sigma g_{00}^0(\epsilon_F)}, \text{ e} \quad (4.8a)$$

$$t^\sigma = \frac{1}{1 - V^\sigma g_{00}^0(\epsilon_F)}, \quad (4.8b)$$

onde  $V^\sigma = -\sigma \frac{U_m}{2}$  com  $\sigma = \pm 1$  para spins majoritários ( $\uparrow$ ) e minoritários ( $\downarrow$ ), respectivamente, e  $g_{00}^0$  é o propagador monoelétrônico no sítio 0, referente ao sistema homogêneo.

A Fig. 6 apresenta uma comparação entre os resultados dos cálculos efetuados utilizando o formalismo quântico e as previsões semi-clássicas baseadas na Eq. 4.7 em conjunto com as Eqs. 2.140 e 2.138 para  $A_r$  e  $A_i$ . Todos os resultados foram obtidos para um mesmo sistema, ou seja, a estrutura eletrônica (calculada com os mesmos parâmetros) é utilizada em ambos os cálculos. Na Fig. 6(a), mostramos os resultados gerados com o formalismo apresentado no capítulo 3. Neste caso, como a corrente obtida na Eq. 2.141 pelo formalismo semi-clássico é calculada no contato, longe da amostra espalhadora, calculamos a corrente de spins muito longe da impureza, onde as interferências quânticas são desprezíveis. A Fig. 6(b) mostra os resultados da corrente obtida pela teoria desenvolvida no capítulo 2.

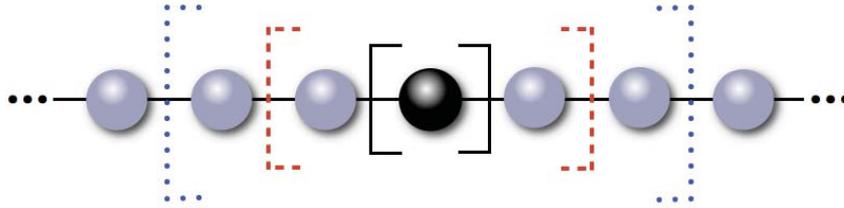


Figura 7: Representação das diferentes regiões em uma cadeia linear infinita, onde as correntes de spins são calculadas na Fig. 8. O sítio preto representa a impureza magnética.

A comparação mostra que os cálculos utilizando a teoria desenvolvida neste trabalho dão uma frequência de ressonância renormalizada um pouco mais alta que a obtida seguindo a teoria semi-clássica. Nossa sugestão é que esta diferença tem duas origens: a primeira está relacionada com a magnetização induzida, com a qual a corrente de spins pode interagir e que pode afetar sua frequência de precessão. Ao utilizar os coeficientes de espalhamento dados pelas Eqs. 4.8, estamos considerando apenas o espalhamento pela impureza magnética. Apesar de estarmos trabalhando com um sistema modelo, este ponto deixa ainda mais claro uma das desvantagens de se utilizar a teoria semi-clássica, que é a dificuldade de se obter uma boa descrição do espalhamento dependente do spin. O segundo fator que deve influenciar na diferença entre os resultados reside no fato de que enquanto a teoria de Tserkovnyak e colaboradores utiliza a aproximação adiabática ( $\omega \simeq 0$ ), a nossa análise é completamente dinâmica. O mesmo efeito é notado quando cálculos completamente dinâmicos de relações de dispersão de ondas de spins em filmes ultrafinos são comparados com aqueles gerados por uma teoria adiabática [28]. Aqui a diferença obtida é bem pequena.

## 4.2 Corrente de spins em cadeias lineares

Nesta seção utilizaremos a Eq. 3.30 para calcular a corrente de spins quântica que flui em cadeias unidimensionais de átomos. Cabe salientar que os resultados apresentados a seguir não podem ser obtidos com a teoria semi-clássica desenvolvida no capítulo 2.

### 4.2.1 Cadeia infinita

Prosseguiremos agora apresentando outros cálculos para o mesmo sistema discutido na seção 4.1, ilustrado na Fig. 7. Iniciamos mostrando na Fig. 8 o módulo do valor esperado da corrente de spins total,  $|\langle \hat{I}_S^+ \rangle|$ , em função da energia  $\epsilon = \hbar\omega$ , onde  $\omega$  é a frequência do campo aplicado, calculado através dos diferentes limites mostrados na

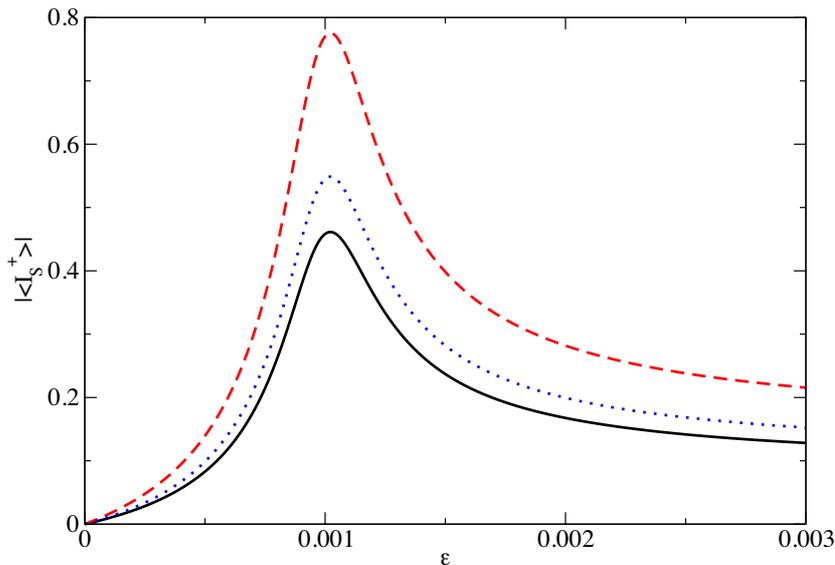


Figura 8: Módulo do valor esperado da corrente de spins  $|\langle \hat{I}_S^+ \rangle|$  produzida pela precessão do momento no sítio 0, calculado em função da energia  $\epsilon = \hbar\omega$  através de diferentes regiões mostradas na Fig. 7. A corrente de spins está em unidades de  $g\mu_B b_0$  e o campo Zeeman é ajustado de forma que a frequência de ressonância na impureza seja  $\epsilon_0 = \hbar\omega_0 = 10^{-3}$ . Estes cálculos foram feitos para o caso de uma banda semi-cheia.

Fig. 7. Estes resultados foram obtidos para  $\epsilon_F = 0$ , i.e., para a banda semi-cheia. A energia Zeeman escolhida foi  $\epsilon_0 = \hbar\omega_0 = 10^{-3}$ , que corresponde a um campo magnético de aproximadamente 10T. Encontramos uma ressonância bem próxima de  $\epsilon_0$ . Podemos ver claramente que há uma variação espacial na corrente de spins, e também é evidente que o momento emite uma corrente de spins considerável mesmo para frequências bem maiores que  $\omega_0$ .

Na Fig. 9, mostramos a variação espacial da corrente de spins, calculadas para três valores distintos de  $\epsilon_F$ , no caso onde a impureza é excitada na frequência de ressonância. A magnitude da corrente de spins decai, de forma oscilatória, ao se afastar da impureza e se aproxima de um valor constante para grandes distâncias. Isto é esperado na medida em que não há mecanismos de dissipação para as correntes de spins no modelo utilizado na nossa abordagem. A largura de linha medida a meia altura, entretanto, praticamente não varia em função da posição onde a corrente é calculada. Na Fig. 9(a), o cálculo é feito para o mesmo caso da banda semi-cheia mostrada na Fig. 8. Observamos oscilações com metade do comprimento de onda de Fermi em torno do valor médio da corrente de spins. Quando a banda é semi-cheia, o período de oscilação  $\Lambda = \frac{\pi}{k_F}$  é duas vezes o parâmetro de rede. Nas Figs. 9(b) e 9(c), mostramos a variação espacial para os casos onde a energia de Fermi é diferente do caso especial de uma banda semi-cheia. O vetor de onda de

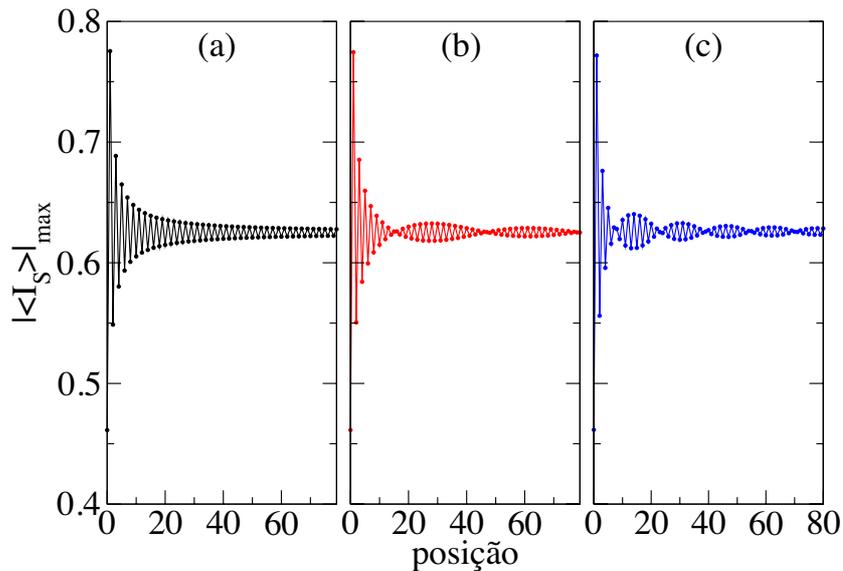


Figura 9: Comportamento espacial da corrente de spins para três escolhas de energias de Fermi, (a)  $\epsilon_F = 0$  (banda semi-cheia), (b)  $\epsilon_F = 0.1$ , e (c)  $\epsilon_F = 0.2$ . Nestes cálculos, a energia Zeeman é  $\epsilon_0 = 10^{-3}$  e a impureza é excitada na ressonância.

Fermi para estes dois casos são incomensuráveis com a rede, e, portanto, vemos oscilações com longos comprimentos de onda que são de natureza similar ao fenômeno de “aliasing” discutidos nos trabalhos iniciais sobre acoplamento de troca entre filmes ferromagnéticos mediados por uma camada espaçadora metálica não magnética [48].

#### 4.2.2 Cadeia semi-infinita

Vamos considerar agora uma impureza embebida em uma cadeia semi-infinita, como mostrado na Fig. 10. Neste caso, como o momento magnético precessionante está próximo de uma superfície, a variação espacial da corrente emanada difere drasticamente do caso de uma cadeia infinita que acabamos de considerar. Para cadeias unidimensionais sem dissipação, vemos que esta distância à ponta da cadeia não precisa ser necessariamente pequena. Em uma cadeia infinita, a corrente de spins viaja para a direita e para a esquerda, e a simetria requer que a amplitude da corrente em posições equidistantes da impureza sejam iguais. Entretanto, como foi notado em uma discussão fenomenológica apresentada por Valet e Fert [49], a corrente de spins deve se anular em uma superfície. Se a superfície está localizada em  $z = L$ , então, na região não magnética entre a impureza e a superfície, o perfil da variação espacial da corrente de spins terá a forma  $\sinh\left(\frac{L-z}{\lambda_S}\right)$ , onde o comprimento de difusão de spins  $\lambda_S$  é muito maior que o livre caminho médio, de acordo com a descrição dada na Ref. [49] (mais especificamente, pela Eq. C6). Em nosso modelo, o comprimento de difusão de spins é infinito, então a corrente de spins terá uma

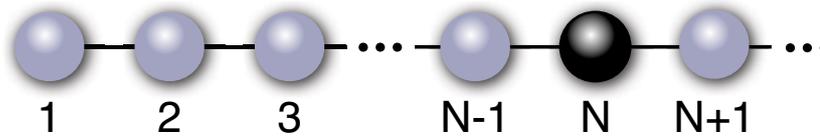


Figura 10: Impureza magnética colocada a uma distância  $N$  da ponta da cadeia semi-infinita.

variação linear, proporcional à  $(L - z)$ .

Isto é exatamente o que acontece, como ilustrado na Fig. 11, onde são mostrados os resultados da corrente de spins gerada por um momento precessionante embebido em uma cadeia semi-infinita de sítios, calculada na ressonância. A ponta da cadeia está localizada em  $N = 1$ , e a impureza magnética está localizada no sítio  $N = 1001$ . Para este cálculo, escolhemos novamente  $\epsilon_F = 0$  (banda semi-cheia) e a energia Zeeman  $\epsilon_0 = 10^{-3}$ . Pode-se ver que para a direita do momento precessionante, a corrente de spins decai para um valor constante conforme o momento angular é carregado para a parte infinita da cadeia. Entretanto, para o lado esquerdo, na região entre o momento e a superfície, vemos um decréscimo linear da corrente de spins, em excelente acordo com a discussão da Ref. [49]. A superfície influencia a variação espacial da corrente de spins mesmo quando o momento magnético se localiza muito longe da superfície. É claro que em materiais com comprimento de difusão de spins  $\lambda_S$  finito, o momento não sentirá a presença da superfície quando a distância entre ele e a superfície for muito grande comparada com  $\lambda_S$ . Vale notar que em materiais de alta pureza como os metais nobres, o comprimento de difusão de spins pode ser bastante longo. Pode-se crescer ferromagnetos 3d ultrafinos sobre substratos semicondutores tais como *GaAs*. Seria interessante revestir tais filmes com metais nobres como *Ag* (isto é frequentemente utilizado para prevenir oxidação de ferromagnetos) e então estudar a dependência da taxa de relaxação do bombeamento de spins como função da espessura da camada de revestimento.

Da Fig. 11, fica claro que a presença da superfície influencia fortemente a natureza da corrente de spins emanada pela impureza precessionante, mesmo quando a impureza está muito longe da superfície. Em nosso modelo com comprimento de difusão de spins infinito, nós observamos comportamento similar ao mostrado na Fig. 11 mesmo quando a impureza é colocada muito mais longe da superfície.

Podemos agora nos perguntar como que a largura de linha neste caso semi-infinito se aproxima da largura de linha de um sistema infinito ao mover a impureza para longe da superfície. Isso pode ser estudado através do cálculo da susceptibilidade transversa

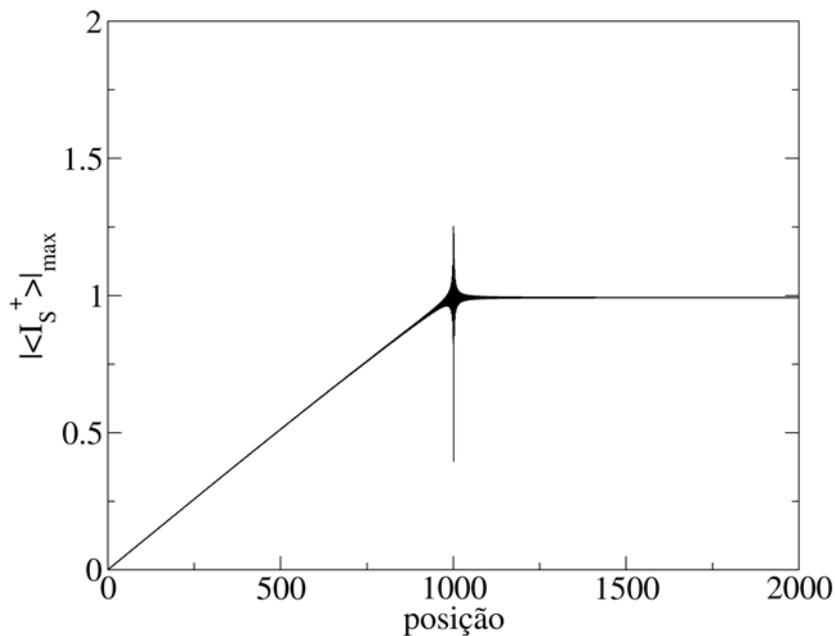


Figura 11: Variação espacial da corrente de spins gerada por um momento magnético que precessiona em uma cadeia semi-infinita de sítios, calculada na ressonância. A ponta da cadeia se encontra em  $N = 1$  e a impureza magnética está localizada no sítio  $N = 1001$ . Estes cálculos foram feitos com energia de Fermi  $\epsilon_F = 0$  (banda semi-cheia).

$\chi_{NN}^{+-}$  no sítio da própria impureza. Em princípio, podemos medir a largura da curva de ressonância calculada em função da distância do momento magnético à superfície para ver como que a largura de linha se aproxima do valor do material infinito.

Nós estudamos esta questão, mas percebemos que para um sistema unidimensional, independentemente da posição  $N$  da impureza, a região entre o sítio  $N$  e a ponta da cadeia  $N = 1$  comporta-se como um poço quântico finito. Isto acontece pois o elétron refletido na ponta da cadeia também é espalhado pelo potencial associado ao sítio da impureza. Há níveis ressonantes para o elétron nesta região, e eles produzem estruturas distintas na forma da curva de ressonância. Tais estruturas são evidentes na Fig. 12, onde mostramos o módulo do valor esperado da corrente de spins emitida em direção à ponta da cadeia (curva preta) e para o lado infinito (curva vermelha), ambas calculadas através da ligação entre a impureza magnética e o sítio adjacente, em função da energia  $\epsilon = \hbar\omega$ . O primeiro pico corresponde à ressonância na energia Zeeman  $\epsilon_0 = \hbar\omega_0 = 10^{-3}$ . As posições dos picos subsidiários em energias mais altas na curva preta praticamente coincidem com os mínimos encontrados na curva vermelha. Estes picos e mínimos estão associados aos estados ressonantes que aparecem no poço quântico formado entre a impureza e a ponta da cadeia. Suas energias, com muito boa aproximação, coincidem com as autoenergias de

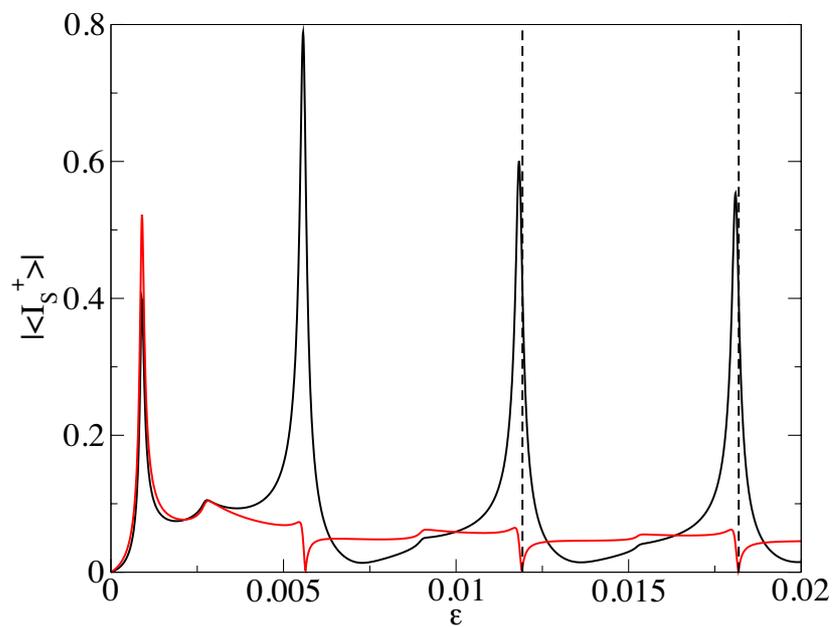


Figura 12: Módulo do valor esperado da corrente de spins emanada por uma impureza localizada na posição  $N = 1001$ , em função da energia  $\epsilon = \hbar\omega$ . Os cálculos mostram a influência dos estados de poço quântico entre a impureza e a superfície. A curva preta corresponde à corrente de spins calculada entre os sítios 1001 e 1000, e a curva vermelha corresponde à corrente de spins emanada para o lado infinito, calculada entre os sítios 1001 e 1002. As linhas tracejadas verticais indicam as energias nas quais os resultados mostrados nas Fig. 13 foram calculados.

uma cadeia finita com  $N - 1$  sítios, que são dadas por

$$\epsilon_n = -2t \cos\left(\frac{n\pi}{N}\right), n = \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(N - 1). \quad (4.9)$$

com autoestados correspondentes

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{2}{N}} i \sum_i \text{sen}\left(\frac{n\pi}{Na} x_i\right) |i\rangle, \quad (4.10)$$

onde  $|i\rangle$  é o estado atômico centrados no sítio  $i$ , localizado na posição  $x_i$ . Note que, nessas energias, a corrente de spins emitida para a direita é quase nula. Isto significa que a corrente fica aprisionada na região onde o poço quântico é formado.

Estruturas similares também são encontradas na resposta local  $\chi_{NN}^{+-}$ . Quando a impureza é afastada da ponta da cadeia, estes picos subsidiários são deslocados para energias menores, e se fundem com a estrutura ressonante principal da função resposta. Então, nestas circunstâncias, não fica claro como extrair algo que possa ser chamado de largura de linha quando o perfil da função resposta é tão complexo. Se “embaçarmos” estas estruturas subsidiárias aumentando a parte imaginária  $\eta$  da função de Green, o que equivale a introduzir um comprimento de difusão de spins finito, nossos cálculos produzem uma resposta que tende ao valor da cadeia infinita ao mover a impureza para muito longe da ponta da cadeia, como esperado.

A variação espacial da corrente de spins na região entre a impureza e a superfície é mais impressionante para frequências de excitação na vizinhança das ressonâncias subsidiárias mostradas na Fig. 12. Isto é ilustrado na Fig. 13. Na Fig. 13(a), vemos que a variação espacial é controlada por apenas um nível ressonante na região entre a impureza e a ponta da cadeia, e o mesmo acontece na Fig. 13(b). Tal comportamento requer uma descrição teórica quântica apropriada para ser compreendido e reflete a estrutura espacial dos autoestados da cadeia finita indicada na Eq. 4.10. Eles estão ausentes na abordagem macroscópica descrita por Valet e Fert [49], por exemplo. Será de grande interesse ver se tais propriedades estarão presentes em cálculos numéricos considerando uma descrição completa multiorbital da relaxação magnética pelo bombeamento de spins em filmes ultrafinos revestidos. Se a magnetização em tal filme é excitada por um campo de microondas, todos os spins em um dado plano paralelo à superfície e à interface vão precessionar em fase. Esta situação física é similar ao modelo unidimensional explorado neste trabalho, pois há uma simetria planar com o modo  $\mathbf{k}_\perp = 0$  sendo excitado.

Concluimos mencionando mais uma característica que é uma propriedade do modelo

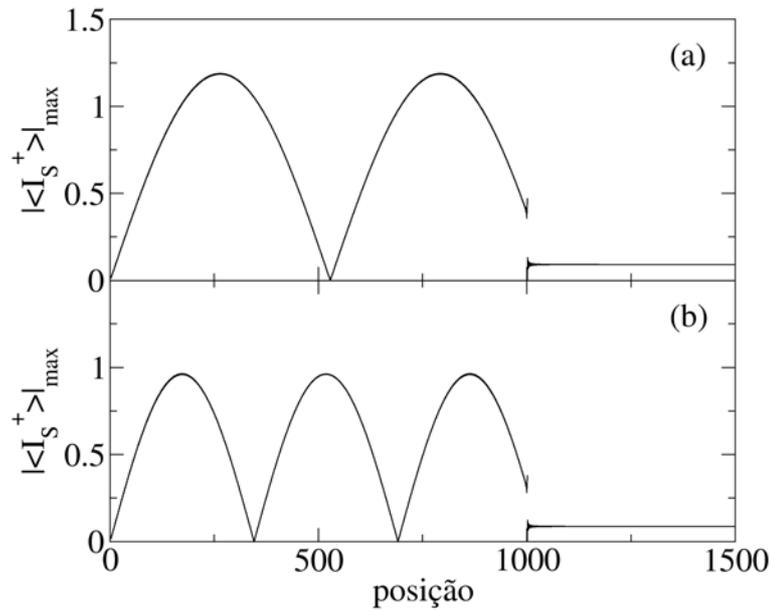


Figura 13: Variação espacial da corrente de spins gerada por um momento magnético que precessiona embebido em uma cadeia semi-infinita de sítios, calculada nas energias (a)  $\epsilon = 0.0119$  e (b)  $\epsilon = 0.0182$ , representadas por linhas tracejadas verticais na Fig. 12. A superfície é em  $N = 1$ , e a impureza precessionante está localizada no sítio  $N = 1001$ . Nestes cálculos, tomamos  $\epsilon_F = 0$ .

unidimensional que estamos estudando. Há um efeito que chamamos de “par/ímpar” na distribuição espacial da corrente de spins na presença de uma superfície. Na Fig. 11, mostramos a distribuição espacial da corrente de spins calculada na frequência de Larmor quando a impureza está localizada no sítio  $N = 1001$ , ou seja, a uma distância de 1000 parâmetros de rede da ponta da cadeia, localizada no sítio  $N = 1$ . Na Fig. 14, mostramos o que acontece quando a impureza é movida para um sítio da rede mais perto da ponta da cadeia, em  $N = 1000$ . Em ambas as figuras, a impureza é excitada na frequência de ressonância e os cálculos são feitos com banda semi-cheia. Vemos que nas duas figuras a corrente de spins se anula na superfície, como requer a condição de contorno mostrada na Ref. [49]. Entretanto, quando a impureza está em um sítio no qual  $N$  é par, há uma descontinuidade na corrente de spins no próprio sítio da impureza. Este também é um efeito quântico; o período de oscilações  $\Lambda$  para uma banda semi-cheia é de dois parâmetros de rede, então o movimento da impureza por um parâmetro de rede leva a uma mudança de fase de 180 graus para qualquer perturbação que envolve elétrons próximos ou na superfície de Fermi. A corrente de spins próxima à impureza do lado esquerdo da figura é uma superposição coerente da corrente emitida pela impureza em direção à superfície, com a corrente refletida pela superfície. Há efeitos de interferência quântica associados a estas duas correntes que se propagam em direções opostas, e o deslocamento da impureza

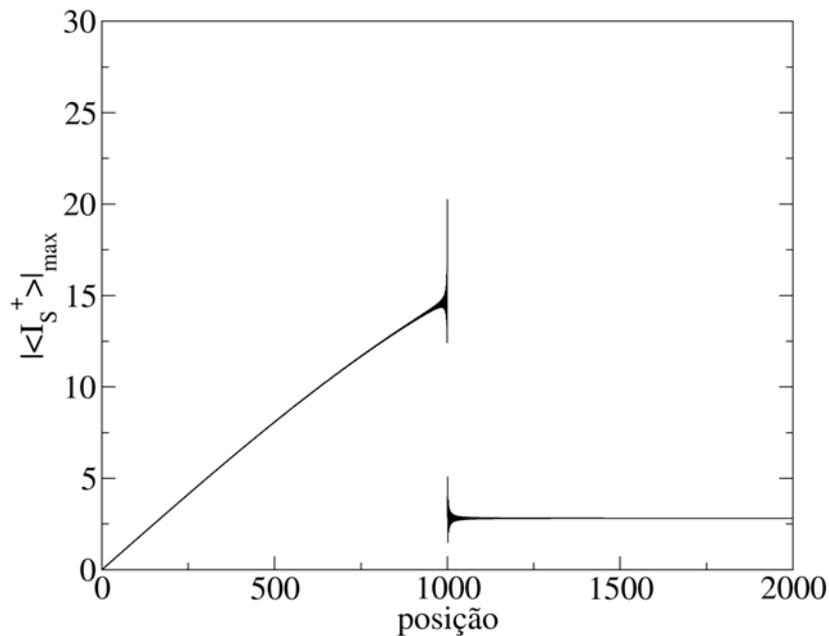


Figura 14: Variação espacial da corrente de spins gerada por um momento magnético que precessiona em uma cadeia semi-infinita de sítios, calculada na ressonância. A superfície se localiza no sítio  $N = 1$ , e a impureza precessionante em  $N = 1000$ . Nestes cálculos, tomamos  $\epsilon_F = 0$ .

por um parâmetro de rede afeta a corrente total emitida por ela de maneira considerável.

### 4.3 Pulso de corrente de spins

Vamos explorar agora algumas características da propagação da corrente de spins que aparecem quando o momento magnético é colocado para precessionar por um pulso magnético. Neste caso, conforme a corrente de spins é emitida, a amplitude da precessão de  $\mathbf{m}_0$  decai. Isso gera um pulso de perturbação de spins que é transmitido através do metal não magnético, e podemos estudá-lo diretamente pela corrente de spins dada pela Eq. 3.47, ou olhando para as componentes transversas do momento local, dadas pela Eq. 3.53. Consideramos que o pulso magnético gaussiano dependente do tempo está centrado na energia de ressonância  $\epsilon_0 = \hbar\omega_0$ , com variância  $\sigma^2$ .

Na Fig. 15, mostramos os valores esperados das componentes  $\langle I_S^x \rangle$  e  $\langle I_S^y \rangle$  da corrente de spins, calculadas em função do tempo, para três diferentes posições em relação à impureza magnética. A unidade de tempo neste caso é  $\hbar/t = \hbar$ , pois estamos considerando que a integral de transferência  $t = 1$ . Estes cálculos foram realizados para a energia Zeeman  $\epsilon = 10^{-3}$  e um pulso com variância  $\sigma^2 = 4 \times 10^6$ . Aqui também estamos considerando o

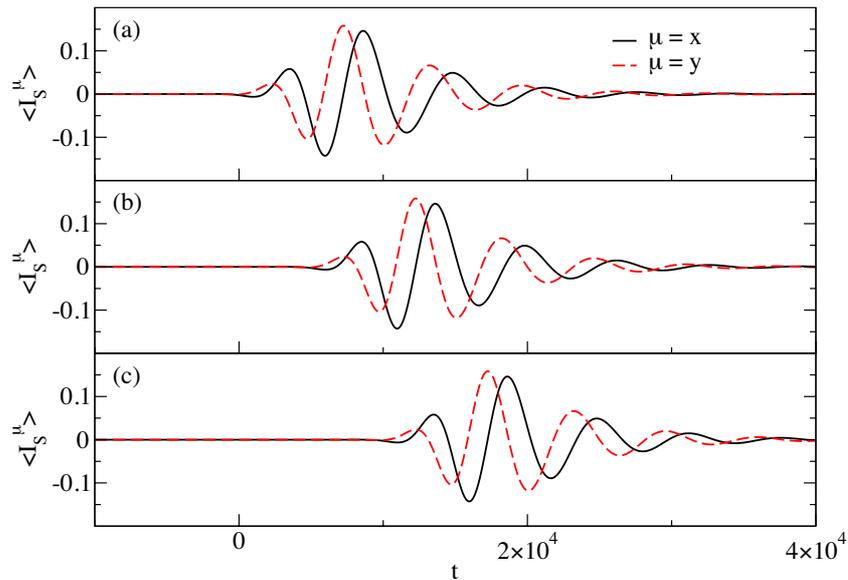


Figura 15: Valores esperados das componentes  $\langle I_S^x \rangle$  e  $\langle I_S^y \rangle$  da corrente de spins, calculados em função do tempo, para três diferentes posições em relação à impureza magnética: (a)  $d = 1 \times 10^4 a_0$ , (b)  $d = 2 \times 10^4 a_0$ , (c)  $d = 3 \times 10^4 a_0$ . O pulso gaussiano é centrado na energia de ressonância  $\hbar\omega_0 = 10^{-3}$ , e sua variância é  $\sigma^2 = 4 \times 10^6$ . As linhas cheia e tracejada correspondem às componentes  $x$  e  $y$ , respectivamente.

caso de uma banda semi-cheia. A velocidade do pulso pode ser determinada pelo intervalo de tempo que a amplitude máxima, por exemplo, demora para alcançar tais posições. Neste caso, encontramos que o pulso de spins se propaga com a velocidade  $v = 2a_0$  (nas unidades em que  $t = 1$ ), onde  $a_0$  é o parâmetro de rede da cadeia. Esta é a velocidade de Fermi de uma cadeia, que pode ser encontrada através de sua relação de dispersão

$$\epsilon(k) = -2 \cos(ka_0) . \quad (4.11)$$

Para a banda semi-cheia,  $k_F = \frac{\pi}{2a_0}$ , e calculando a velocidade dos elétrons na superfície de Fermi

$$v_F = \left. \frac{d\epsilon(k)}{dk} \right|_{k=k_F} = 2a_0 . \quad (4.12)$$

Isso indica que os elétrons de condução no nível de Fermi são os principais portadores da corrente de spins.

Em uma cadeia infinita, o pulso se propaga para longe da impureza tanto para a esquerda quanto para a direita indefinidamente. É interessante considerar novamente o sistema no qual a impureza magnética é colocada a uma certa distância da ponta de uma cadeia semi-infinita, como mostrado na Fig. 10. Ao excitar a impureza com um campo magnético gaussiano, geramos dois pulsos de corrente de spins: um que se move indefinidamente para o lado infinito da cadeia, e outro que viaja em direção à ponta da

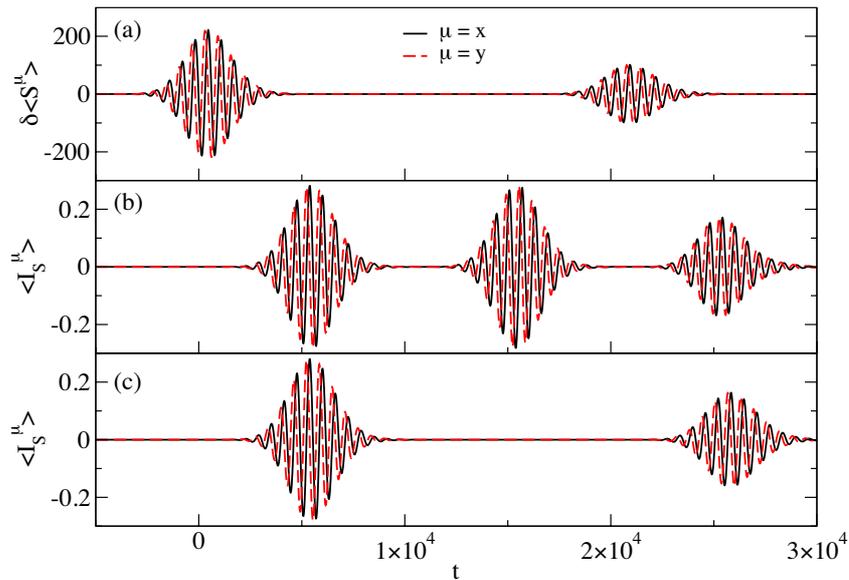


Figura 16: (a) Valores esperados das componentes transversas da densidade de spins  $\delta\langle S_N^x \rangle$  e  $\delta\langle S_N^y \rangle$  calculadas em função do tempo no sítio da impureza magnética  $N$  situado a uma distância  $d = 2 \times 10^4 a_0$  da ponta da cadeia. (b) e (c) mostram os valores esperados das componentes  $\langle I_S^x \rangle$  e  $\langle I_S^y \rangle$  da corrente de spins calculados em função do tempo em duas posições distintas, especificadas por suas distâncias  $d_1 = 0.5d$  e  $d_2 = 1.5d$  em relação à ponta da cadeia, respectivamente. Neste caso, o pulso gaussiano é centrado na energia de ressonância  $\hbar\omega_0 = 10^{-2}$ , e sua variância é  $\sigma^2 = 10^6$ .

cadeia, onde será refletido. Neste caso, para evitar uma sobreposição do pulso de corrente que se propaga para a ponta da cadeia e do pulso refletido, escolhemos a energia Zeeman  $\epsilon_0 = 10^{-2}$  e um pulso de campo magnético de variância  $\sigma^2 = 10^6$ . Apesar desta energia Zeeman corresponder a um campo magnético bastante alto, ainda estamos em um regime no qual as grandezas escalam linearmente com a intensidade do campo magnético, de maneira que podemos extrapolar nossos resultados para campos menores, e os resultados qualitativos que obtemos não se alteram.

Na Fig. 16(a) nós ilustramos o comportamento de  $\mathbf{m}_0$  através do valor esperado das componentes transversas da densidade de spins local  $\delta\langle S_N^x \rangle$  e  $\delta\langle S_N^y \rangle$  calculadas em função do tempo através da Eq. 3.53, no próprio sítio da impureza, localizado à uma distância  $d = 2 \times 10^4 a_0$  da ponta da cadeia. O primeiro pulso na Fig. 16(a) ilustra a precessão de  $\mathbf{m}_0$  que foi excitada pelo pulso de campo magnético transversal. O segundo pulso representa  $\mathbf{m}_0$  sendo reexcitado após um certo tempo pelo pulso refletido na ponta da cadeia, como no fenômeno de eco clássico. O tempo decorrido entre duas excitações sucessivas da impureza magnética é de  $\Delta\tau = 2d/v_F$ . Este processo acontece repetidamente, cada vez com uma amplitude menor devido à perda de energia acarretada pelo pulso emitido para o lado infinito em cada excitação. Nas Figs. 16(b) e 16(c) mostramos os valores esperados

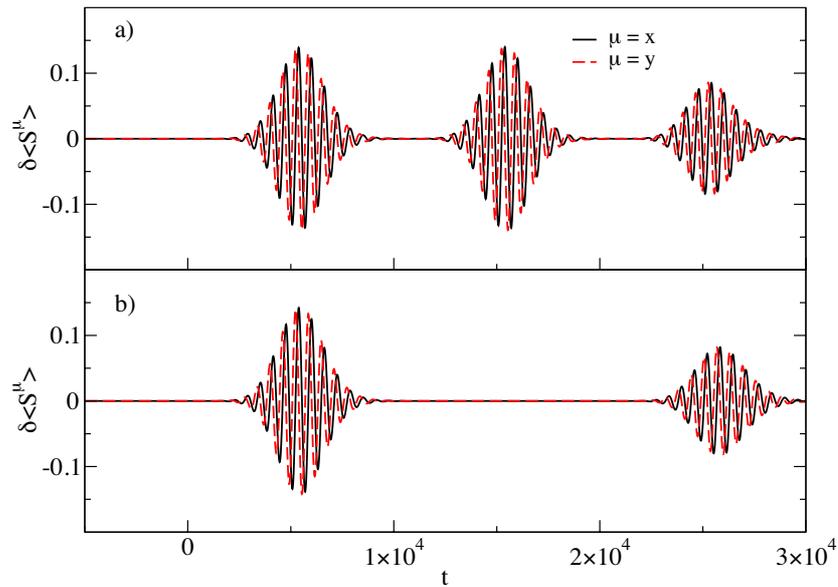


Figura 17: Valores esperados das componentes transversas  $\delta\langle S^x \rangle$  e  $\delta\langle S^y \rangle$  da densidade de spins calculadas em função do tempo à duas distâncias distintas da ponta da cadeia: (a)  $d_1 = 1 \times 10^4 a_0$ , e (b)  $d_2 = 3 \times 10^4 a_0$ , respectivamente. A impureza magnética está localizada a uma distância  $d = 2 \times 10^4 a_0$  da superfície.

das componentes  $\langle I_S^x \rangle$  e  $\langle I_S^y \rangle$  da corrente de spins em duas posições distintas, calculadas em função do tempo através da Eq. 3.47. A primeira delas é calculada à uma distância  $d_1 = 0.5d$  da superfície, ou seja, na metade do caminho entre a impureza e a ponta da cadeia; a outra é localizada à mesma distância da impureza, mas para o lado infinito, i.e.,  $d_2 = 1.5d$ . Na Fig 16(b) nós observamos a corrente de spins na posição  $d_1$  e vemos que leva um tempo  $\tau = d_1/v_F$  para o pulso gerado pela precessão de  $\mathbf{m}_0$  alcançar esta posição. Após este primeiro pulso passar por esta posição, ele leva duas vezes este tempo para refletir na ponta da cadeia e voltar a passar por  $d_1$  novamente. Ele será reabsorvido novamente por  $\mathbf{m}_0$  após um tempo  $\tau$  adicional e o processo se reinicia. Entretanto, como já foi mencionado, a amplitude do pulso nesta segunda excitação é menor. Na Fig. 16(c) ilustramos a corrente de spins que flui através de uma posição  $d_2$  à direita de  $\mathbf{m}_0$ . Como a distância  $d_2 - d = d_1$ , o primeiro pulso emanado de  $\mathbf{m}_0$  também leva um tempo  $\tau$  para atravessar este ponto. Entretanto, o segundo pulso que passa por  $d_2$ , correspondente à segunda excitação da impureza, irá levar um tempo  $4\tau$  após o primeiro, que equivale ao tempo em que o pulso leva para refletir na ponta da cadeia, reexcitar  $\mathbf{m}_0$  e chegar nesta posição.

Alternativamente, podemos analisar a propagação da corrente de spins pelo metal não magnético examinando a perturbação na densidade de spins local causada por ela em função do tempo. Para isso, vamos utilizar novamente a Eq. 3.53 para calcular os

valores esperados das componentes transversas  $\delta\langle S^x \rangle$  e  $\delta\langle S^y \rangle$  da densidade de spins, agora nos sítios  $N_1 = 1 \times 10^4$ , e  $N_2 = 3 \times 10^4$ , que correspondem às mesmas distâncias  $d_1$  e  $d_2$  nas quais calculamos a corrente de spins anteriormente. Os resultados da Fig. 17(a) mostram que os valores das amplitudes das componentes  $\delta\langle S^x \rangle$  e  $\delta\langle S^y \rangle$  calculados no metal normal são muito menores do que os obtidos no sítio da impureza mostrados na Fig. 16(a), como era esperado, pois a amplitude de precessão depende da magnetização local. Comparando as Figs. 16(b) e 16(c) com as Figs. 17(a) e 17(b), respectivamente, notamos que informações similares sobre a propagação do pulso de correntes de spins podem ser extraídas das componentes da perturbação de spins como havíamos comentado anteriormente na seção 3.2. Elas levam essencialmente às mesmas conclusões que tiramos dos cálculos das correntes de spins ilustrados na Fig. 16.

Como mostramos neste capítulo, mesmo com sistemas lineares muito simples, nós somos capazes de entender muitas propriedades das correntes de spins e das perturbações que elas provocam nas densidades locais de spin. A seguir, deixaremos de lado os modelos simples de cadeias lineares para tratar sistemas um pouco mais complexos baseados em materiais a base de carbono. Apesar de continuarmos trabalhando com sistemas quasi-unidimensionais, como os nanotubos e as nanofitas de carbono, mostraremos alguns comportamentos que são gerais da corrente de spins, além de outras características interessantes específicas deste tipo de material.

## 5 *Nanoestruturas a base de carbono*

As aplicações básicas ilustradas no capítulo 4 serviram tanto para testar o formalismo que desenvolvemos, comparando com a teoria existente, como para mostrarmos as vantagens de se utilizar esta teoria. Neste processo, passamos a entender melhor o fenômeno do bombeamento de spins e a maneira como um fluxo de momento angular se propaga através de um metal não magnético. Entretanto, utilizamos sistemas bastante simples e muito pouco realistas. Agora que já possuímos um entendimento maior das correntes de spins bombeadas por unidades magnéticas que precessionam, podemos avançar para sistemas um pouco mais complexos.

Pela simplicidade de serem tratadas, as nanoestruturas a base de carbono já seriam a extensão seguinte para outras aplicações da teoria desenvolvida nesta dissertação. Além de serem sistemas de baixa dimensão, o carbono destes materiais formam orbitais hibridizados do tipo  $sp^2$ , que fazem ligações planares  $\sigma$  relativamente fortes. Desta forma, as propriedades eletrônicas são basicamente caracterizadas pelo quarto orbital ( $p_z$ ) e são bem descritas por um modelo de ligações fortes com um orbital por sítio. Entretanto, conhecidos por suas extraordinárias propriedades mecânicas, térmicas, ópticas e elétricas, estes materiais se tornam ainda mais importantes por possuírem as características ideais para serem utilizados em dispositivos eletrônicos e spintrônicos reais.

A base de todas estas nanoestruturas é o grafeno, uma única camada atômica de um cristal de grafite. Os átomos de carbono da rede bidimensional do grafeno se arrumam em hexágonos, como em um favo de mel. Há dois tipos de sítios distintos na rede do grafeno, que é descrita por uma rede de Bravais triangular com uma base de 2 átomos, identificados como 1 e 2, ou preto e branco. A Fig. 18a ilustra a rede do grafeno no espaço real (rede direta). A rede recíproca, com seus vetores  $\mathbf{b}_i$  definidos pela relação  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$  é formada por hexágonos, como mostra a Fig. 18b. Uma das particularidades do grafeno já pode ser vista em sua relação de dispersão, que é conhecida desde 1947 [50] e é deduzida no apêndice A deste trabalho. Ela exhibe um comportamento linear com o vetor de onda  $\mathbf{k}$  para estados próximos ao nível de Fermi, o que permite uma descrição

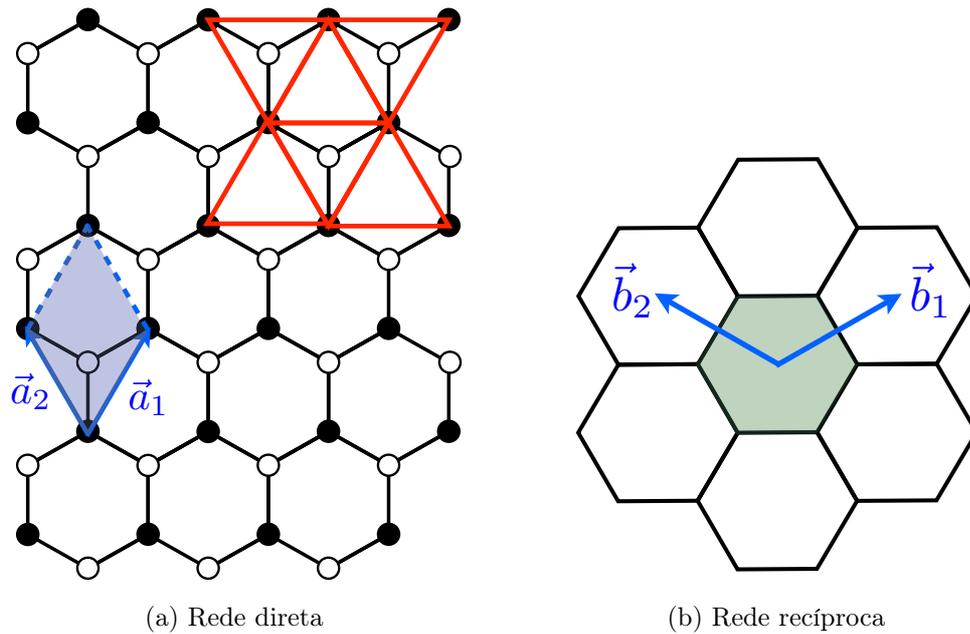


Figura 18: (a) Rede do grafeno formada por triângulos vermelhos, e uma base de 2 átomos (um preto e um branco). Os vetores da rede direta  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_2$  definem uma célula unitária. (b) Rede recíproca hexagonal, com os vetores  $\mathbf{b}_1$  e  $\mathbf{b}_2$  definidos de tal forma que  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$ . O hexágono verde ilustra a primeira Zona de Brillouin.

através de um hamiltoniano do tipo Dirac para o grafeno a baixas energias. Vamos ver nas próximas seções que esta linearidade na relação de dispersão é uma propriedade de grande importância para as aplicações destes materiais.

Por ser bidimensional, com propriedades únicas tanto para estudos fundamentais quanto para aplicações futuras, o grafeno se tornou o sistema mais pesquisado dos últimos anos, mais particularmente a partir de 2004. Sua produção, isolamento, identificação e caracterização neste ano rendeu o prêmio Nobel para Andre Geim e Konstantin Novoselov em 2010 [51]. Uma maneira relativamente simples de se obter o grafeno é pelo método da esfoliação mecânica, na qual usam-se duas fitas adesivas para descamar cristais de grafite reduzindo sua espessura até, eventualmente, obter uma monocamada.

Entre as propriedades notáveis do grafeno estão sua elasticidade e resistência mecânica, alta condutividade térmica, além de ser um condutor flexível e transparente. Outra característica que se destaca é sua mobilidade intrínseca extraordinária. A mobilidade é uma medida do quão fácil é mover as cargas em um material pela aplicação de um campo elétrico. Mobilidades mais altas podem produzir dispositivos mais rápidos e com baixo consumo de energia [5]. Recentemente, foi mostrado que a mobilidade de elétrons em folhas de grafeno e bicamadas de grafeno podem chegar a  $200.000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  a baixas temperaturas [52], valor este que é mais de 100 vezes maior que o observado no silício (1500

$\text{cm}^2/\text{Vs}$ ) e mais de 20 vezes maior que no volume de Arseneto de Gálio ( $8500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ ). Outra grandeza de extrema importância para os nossos estudos é o comprimento de coerência de spins. Mais uma vez, o grafeno se destaca por apresentar comprimentos de relaxação de spins maiores de  $1.5 \mu\text{m}$  [53], dimensão mais que suficiente para a utilização destes materiais em dispositivos spintrônicos.

Uma outra classe de material que merece toda a atenção recebida nas últimas décadas é a dos nanotubos de carbono. Os nanotubos são frequentemente imaginados como folhas de grafeno enroladas, como ilustrado na Fig. 19, apesar de terem obtido um grande destaque antes da popularização do grafeno. A primeira observação de nanotubos de carbono foi reportada em 1952 [54], mas somente em 1991, a partir da observação publicada por Iijima [55], que sua pesquisa ganhou força. Eles são estruturas extremamente prolongadas, isto é, possuem uma razão entre o comprimento e o diâmetro muito alta. Desta forma, como suas circunferências são de escala nanométrica, eles são sistemas que podem ser caracterizados como “quasi-unidimensionais”. Em 2009, um grupo de Pequim divulgou a produção controlada de nanotubos de carbono de parede única de até  $18,5 \text{ cm}$  de comprimento [56]. Esta característica torna os nanotubos metálicos muito úteis para a utilização em contatos elétricos. Além disso, são materiais bastante leves, que exibem forças de tensão e elasticidades extraordinárias [57] e condutividades térmicas ao longo do tubo muito elevadas [58]. Estas são apenas algumas das qualidades peculiares dos nanotubos de carbono.

Para o nosso estudo, as propriedades elétricas e magnéticas chamam ainda mais a atenção. Os nanotubos também possuem um tempo de relaxação de spins relativamente alto. Há indícios de que ele diminui com a redução do diâmetro do tubo devido a um aumento da interação spin-órbita [59]. Ainda assim, em nossas aplicações vamos desprezar este efeito por ser pequeno comparado com outras escalas de energia do sistema. Outra característica do nanotubo importante para a fabricação de dispositivos eletrônicos é sua mobilidade, que, assim como o grafeno, também é muito alta. Medidas em nanotubos de carbono mostraram que sua mobilidade chega a  $100.000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  em temperatura ambiente [60].

Um terceiro tipo de sistema a base de carbono que também possui características similares às citadas acima são as nanofitas de grafeno. O grafeno bidimensional é um sistema semiconductor de gap nulo, o que impede a sua utilização em algumas aplicações na qual a existência de um gap semiconductor é necessária. As nanofitas de grafeno, por outro lado, possuem condições de contorno que geram um confinamento quântico transversal,

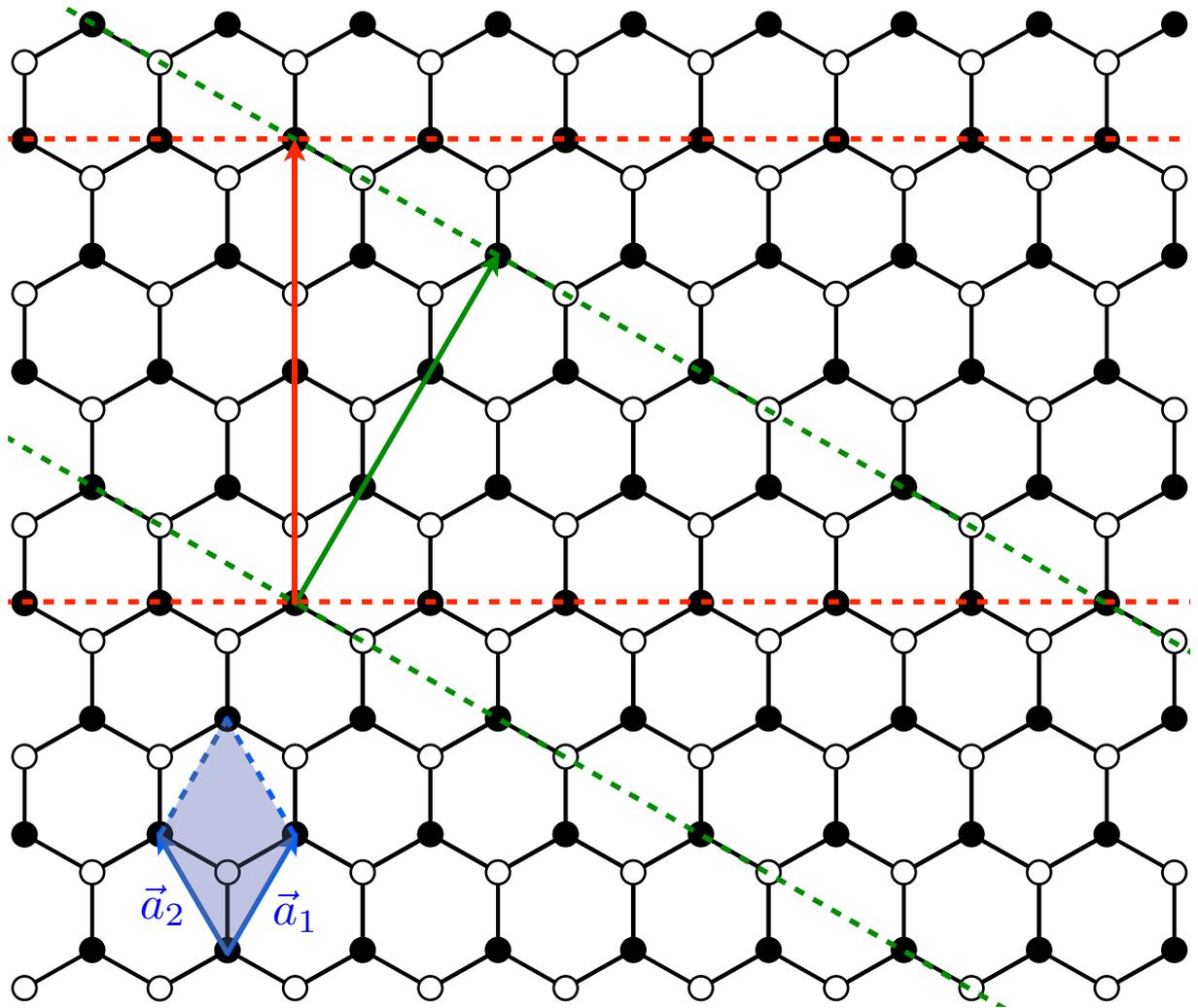


Figura 19: Rede do grafeno com os vetores  $\mathbf{a}_1$  e  $\mathbf{a}_2$ , e a célula primitiva correspondente, como ilustrado na Fig. 18a. As setas vermelhas e verde indicam direções de enrolamento, que formam a circunferência de nanotubos armchair  $(N, N)$ , e zigzag  $(N, 0)$ , respectivamente.

o que leva à abertura de gaps em determinadas circunstâncias. Além disso, as nanofitas zigzag possuem estados de borda que dão origem a um ordenamento magnético quando as bordas são perfeitas [61, 62]. Elas podem ser obtidas experimentalmente cortando-se uma folha de grafeno (através de litografia de feixes de elétrons, por exemplo [63]), ou desenrolando um nanotubo de carbono de parede única [64].

Nesta curta introdução aos materiais a base de carbono, tentamos dar uma ideia do quão promissores são estes sistemas para a aplicação na spintrônica, e também na eletrônica usual. A busca por dispositivos de memórias de altas velocidades, com grande integração e facilidade de manipulação, além de baixo consumo de energia motiva o estudo das propriedades eletrônicas destas nanoestruturas. Neste capítulo, apresentamos três aplicações onde estes materiais apresentam características bastante promissoras para a spintrônica.

## 5.1 Nanotubos de carbono: guias de onda de spins

Como uma primeira aplicação das correntes de spins em materiais a base de carbono, consideramos um sistema composto por um nanotubo de carbono de parede única contendo um único átomo magnético substitucional [65, 66] posicionado no sítio 0, como mostra a Fig. 20. Como exemplo, vamos utilizar um nanotubo armchair (4,4), porém, os resultados encontrados são bastante gerais e devem estar presentes em qualquer NT metálico. Para que a estrutura eletrônica do sistema dopado seja bem descrita, os parâmetros do hamiltoniano de ligações fortes utilizado na nossa abordagem podem, por exemplo, ser obtidos a partir de cálculos de primeiros princípios [67, 68]. Vamos supor que as impurezas magnéticas que dopam o tubo são átomos de Mn, apesar de outras impurezas magnéticas substitucionais poderem ser empregadas sem alterar significativamente as conclusões obtidas aqui [66]. Em nossos cálculos, fixamos a energia de Fermi em  $\epsilon_F = 0$ , a energia atômica nos sítios de carbono  $\bar{\epsilon}_0 = 0$ , e utilizamos as integrais de transferência entre átomos de carbono primeiros vizinhos como  $t_{C,C} = 2.7$  eV e entre sítios de carbono e da impureza  $t_{Mn,C} = 1.0$  eV. O estado fundamental é determinado de forma autoconsistente. A autoconsistência magnética é feita fixando-se o número de elétrons  $d$  no sítio do Mn como  $n_0 = 1$  e  $U_0 = 5$  eV. Este valor de interação eletrônica é razoável dentro de uma descrição de um orbital por sítio; ele garante a existência de um momento magnético no sítio do Mn  $\mathbf{m}_0 \sim 0.6\mu_B$  por orbital, que é compatível com resultados de cálculos ab-initio [66]. Supomos também um deslocamento Zeeman local entre as bandas de spins  $\uparrow$  e  $\downarrow$  de  $\delta_0 = 1$  meV, que corresponde a um campo magnético de

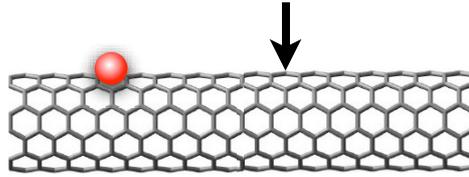


Figura 20: Esquema do nanotubo de carbono com uma única impureza magnética embebida em um sítio que chamaremos de 0. A seta representa a posição onde o spin eletrônico da Fig. 21 é medido.

aproximadamente 10T. O acoplamento spin-órbita, que já foi mostrado possuir um papel importante no caso de impurezas magnéticas adsorvidas [69], é desprezado no caso de impurezas substitucionais por ser muito pequeno quando comparado com outras escalas relevantes de energia.

Para calcular a susceptibilidade magnética transversa obtida na Eq. 3.135, utilizamos expressões analíticas para os propagadores monoelétrônicos no nanotubo de carbono [70], que são deduzidos no apêndice A. Essas expressões nos permite realizar as integrais necessárias para calcular a variação na densidade de spins em função do tempo, dada pela Eq. 3.53, com grande precisão numérica. Como já mostramos no capítulo 4, essa abordagem fornece uma maneira alternativa de se analisar a propagação do fluxo de spins pelo sistema. No caso, estamos interessados apenas nas componentes transversas da densidade local de spins  $\delta\langle S_i^+(t) \rangle$ .

É instrutivo começar calculando a função resposta  $\chi_{i0}(\omega)$ , no domínio das frequências, obtida pela Eq. 3.135 em conjunto com a Eq. 3.108. Um resultado típico é mostrado na Fig. 21(a) para o nanotubo armchair (4,4) dopado com uma única impureza de Mn. Ela ilustra os valores de  $|\chi_{i0}(\omega)|$  calculados para um sítio  $i$  distando  $x_i = 3a_0$  do átomo de Mn na direção axial, onde  $a_0 \approx 2.46\text{\AA}$  representa o parâmetro de rede do grafeno (como indicado pela seta na Fig. 20).  $|\chi_{i0}(\omega)|$  é proporcional à amplitude de precessão da perturbação de spins no sítio  $i$  devido a um campo magnético tranverso dependente do tempo aplicado no sítio 0. Na Fig. 21(a), pode-se ver o pico característico da susceptibilidade em função da frequência  $\omega$ , refletindo a existência de uma ressonância próxima à frequência de Larmor, como esperado.

Para investigar a propagação do pulso de spins no nanotubo de carbono, é interessante calcular a variação na densidade de spins em função do tempo, ao invés da frequência. Consideramos a resposta a um pulso de campo magnético tranverso gaussiano, dado pela Eq. 3.46. A Fig. 21(b) mostra como esse pulso magnético aplicado no sítio da impureza afeta o balanço de spins do NT medido no mesmo sítio indicado pela seta na Fig. 20. Os

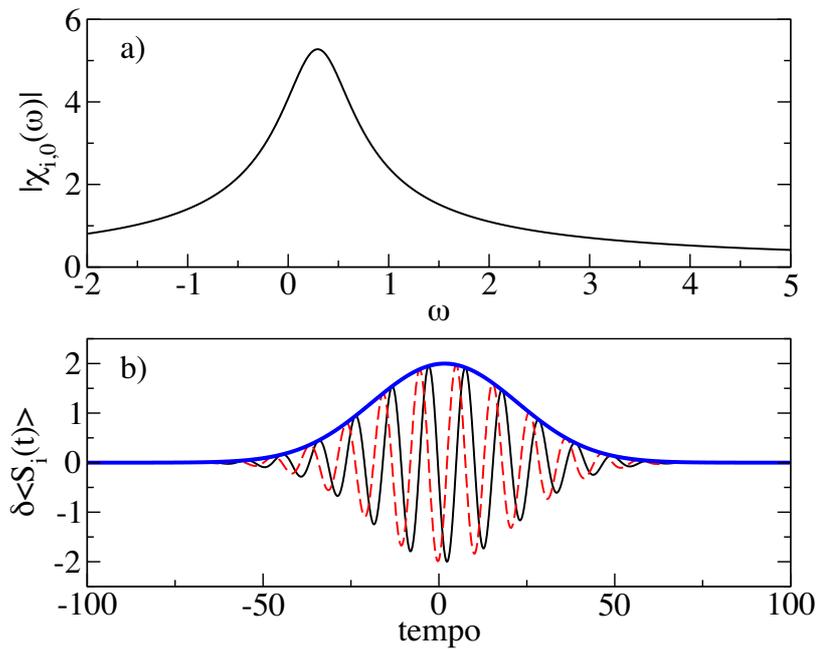


Figura 21: (a) Susceptibilidade transversa de spins  $\chi_{i0}$  (em unidades de  $\hbar/eV$ ) em função da frequência de excitação  $\omega$  (em THz) para um NT (4,4). A distância entre o sítio  $i$  e a impureza é  $x_i = 3a_0$ . (b) As linhas cheias e tracejadas representam as componentes  $\hat{x}$  e  $\hat{y}$  da perturbação de spins  $\delta\langle S_i^+(t) \rangle$ ; a linha cheia mais grossa indica  $|\delta\langle S_i^+(t) \rangle|$ . Spins estão em unidades de  $\hbar g \mu_B h_0$ , onde  $g \simeq 2$  para o elétron,  $\mu_B$  é o magneton de Bohr e  $h_0$  é a amplitude do campo transversal dependente do tempo; o tempo é dado em ps. Os resultados foram gerados para um pulso gaussiano centrado na frequência de ressonância  $\omega = 0.6$  THz e com uma variância de  $\sigma = 20.7$  ps.

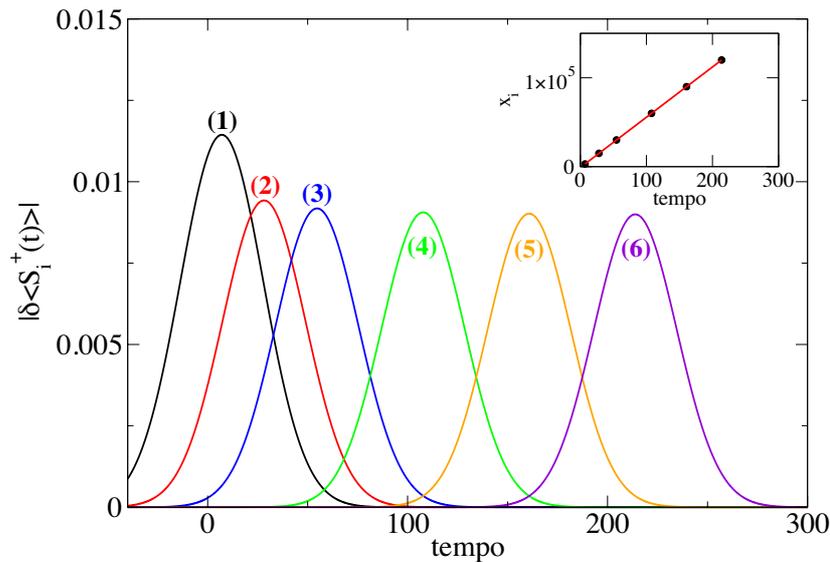


Figura 22: Amplitudes das perturbações transversas de spins (em unidades de  $\hbar g \mu_B h_0$ ) em função do tempo (em ps) à diferentes distâncias  $x_i$  da impureza magnética. As curvas marcadas de (1) a (6) representam as amplitudes das perturbações de spins calculadas em diferentes valores de  $x_i = 0.3, 1.5, 3, 6, 9, \text{ e } 12 \times 10^4 a_0$ , respectivamente. O gráfico menor mostra como as posições  $x_i$  onde a perturbação de spins é observada em função do tempo que a amplitude máxima leva para atingir  $x_i$ .

resultados foram obtidos para um pulso gaussiano centrado na frequência de ressonância  $\omega_0 = 0.6$  THz e com uma largura de  $\sigma = 20.7$  ps. A linha cheia fina e a linha tracejada da Fig. 21(b) representam as componentes de spin  $\delta\langle S_i^x(t)\rangle$  e  $\delta\langle S_i^y(t)\rangle$ , respectivamente, e a linha sólida grossa que as modula é a magnitude da perturbação transversa de spins dada por  $|\delta\langle S_i^+(t)\rangle| \equiv \sqrt{\langle S_i^x \rangle^2 + \langle S_i^y \rangle^2}$ . Para evitar figuras muito congestionadas, a partir de agora usaremos a magnitude para representar a dinâmica de spins no nanotubo.

O fato do spin eletrônico medido em um sítio arbitrário do NT apresentar um movimento de precessão originado por uma perturbação no sítio da impureza é uma clara indicação de uma corrente de spins emanada pelo átomo magnético e que flui pelo nanotubo. Cálculos anteriores sugeriam que a existência dessa corrente é suficiente para induzir um acoplamento magnético dinâmico entre impurezas dispersas no NT, que é muito mais pronunciado e de longo alcance do que o acoplamento de troca, de natureza estática, mediado pelo nanotubo [70, 71, 72, 73]. Para testar como essa precessão se propaga, na Fig. 22 mostramos  $|\delta\langle S_i^+(t)\rangle|$  medido em diferentes posições no nanotubo. As seis linhas numeradas correspondem às perturbações de spins medidas em diferentes sítios ao longo de uma linha paralela ao eixo do NT que contém o sítio 0. As perturbações de spins medidas em outros sítios pertencendo aos mesmos anéis do NT são praticamente idênticas, como ilustram os resultados da Fig. 23. Pequenos desvios são notados nas amplitudes das

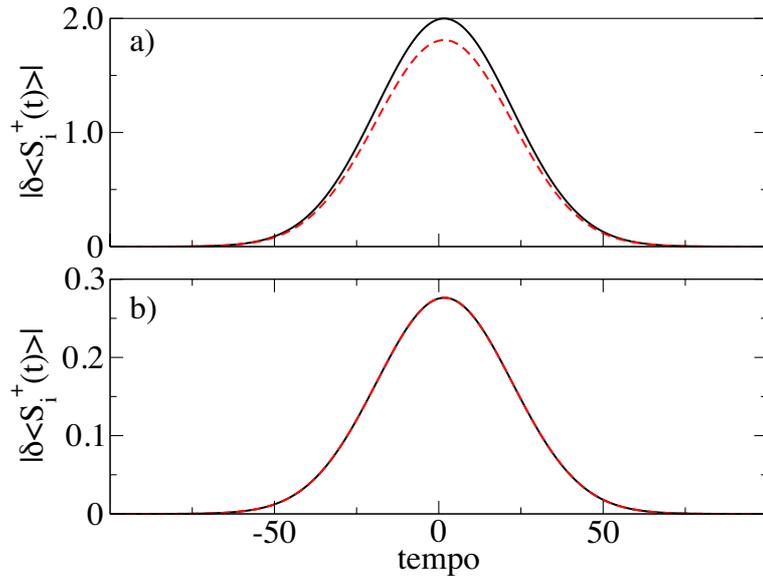


Figura 23: Amplitudes das perturbações transversas de spins (em unidades de  $\hbar g \mu_B \hbar_0$ ) em função do tempo (em ps) calculadas em (a)  $x_i = 3a_0$  e (b)  $x_i = 30a_0$ . A curva preta foi calculada em sítios na mesma direção da impureza, enquanto que as curvas vermelhas foram calculadas para sítios diametralmente opostos.

perturbações de spins calculadas em sítios de um mesmo anel muito próximo da impureza, como mostra a Fig. 23(a). Entretanto, na Fig. 23(b), pode-se ver que em anéis um pouco mais distantes, estes desvios tornam-se imperceptíveis. Isso indica que a excitação inicial, produzida pela perturbação aplicada, que a princípio se propagaria em todas as direções igualmente, decai rapidamente em uma frente de onda cilíndrica que se move pela direção axial do NT com uma velocidade uniforme. Esta velocidade de propagação é encontrada pela inclinação da reta mostrada no gráfico menor da Fig. 22, que ilustra as posições  $x_i$  dos máximos em função do tempo. Encontramos que a velocidade de propagação é  $v = 1.4 \times 10^5$  m/s, que é exatamente igual à velocidade de Fermi do NT, corroborando o que havíamos encontrado na seção 4.3 para a cadeia linear. Isso confirma mais uma vez que os elétrons de condução no nível de Fermi são os portadores da corrente de spins.

A Fig. 22 mostra que a amplitude máxima do pulso  $|\delta\langle S_i \rangle|_{\max}$  decai inicialmente, mas rapidamente atinge um valor assintótico finito, enquanto a sua largura medida a meia altura  $\Delta$  aumenta, mas também atinge um valor constante assintoticamente. A Fig. 24(a) ilustra  $|\delta\langle S_i \rangle|_{\max}$  e  $\Delta$  calculados em função da posição  $x_i$  no caso de um pulso centrado na mesma frequência utilizada para obter a Fig. 21(b). É evidente que tanto  $|\delta\langle S_i \rangle|_{\max}$  quanto  $\Delta$  saturam após o pulso percorrer uma certa distância, e permanecem inalterados para  $x_i > 10^4 a_0$ . Isto é um resultado notável que mostra que a informação

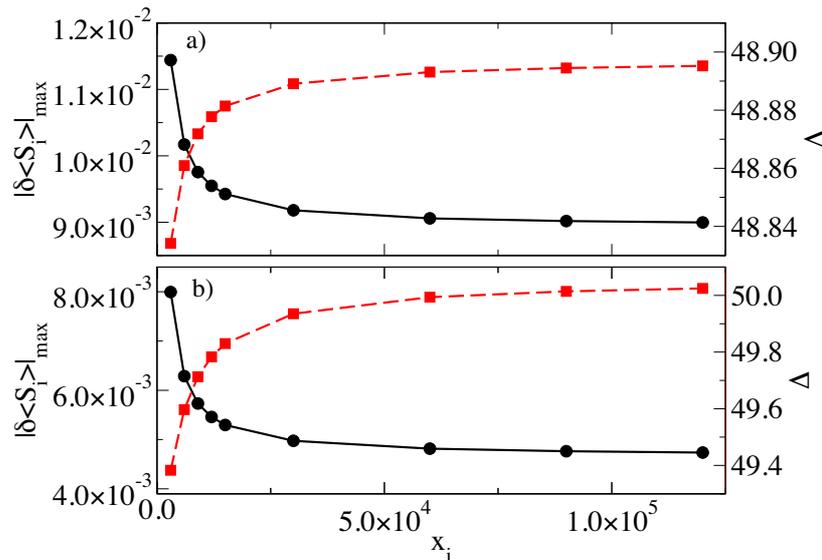


Figura 24: O eixo da esquerda representa os valores da amplitude máxima do pulso de excitação magnética,  $|\delta\langle S_i \rangle|_{\max}$  (em unidades de  $\hbar g \mu_B h_0$ ), medido em um sítio  $i$  e é mostrado pelas linhas cheias com círculos. O eixo da direita representa as larguras  $\Delta$  (in ps) dos pulsos medidos e são ilustrados pela curva tracejada com quadrados. Ambas as quantidades são plotadas em função da separação  $x_i$  (em unidades de  $a_0$ ) da posição da impureza. Os painéis (a) e (b) são para pulsos centrados na ressonância e fora da ressonância, respectivamente.

contida no pulso magnético pode ser transportado por longas distâncias sem distorção. Claro que o valor assintótico de  $|\delta\langle S_i \rangle|_{\max}$  não é o mesmo que o valor medido próximo à impureza, mas ainda possui uma magnitude substancial, indicando que uma fração considerável da energia contida na precessão da magnetização pode ser reutilizada em outra parte do sistema.

Além disso, podemos controlar a fração do pulso original que atinge o regime assintótico selecionando a frequência central do pulso de excitação. A Fig. 24(b) mostra  $|\delta\langle S_i \rangle|_{\max}$  e  $\Delta$  para o caso de um pulso cujo espectro é centrado em uma frequência fora da ressonância  $\omega = 0.24$  THz. Neste caso, o valor assintótico de  $|\delta\langle S_i \rangle|_{\max}$  é bastante reduzido quando comparado com o valor obtido na Fig. 24(a). A existência desta contribuição assintótica que não decai da corrente de spins foi demonstrada recentemente para NT e cadeias de átomos [72, 73] mas aqui mostramos explicitamente que isso pode ser controlado por uma seleção conveniente da frequência de excitação. Todas as características apresentadas até agora indicam que o NT pode carregar informações de correntes de spins contidas em excitações pulsadas sem dispersar sua forma. Isso pode ser explicado pela estrutura eletrônica peculiar exibida pelos nanotubos, que apresentam uma relação de dispersão linear com os vetores de onda eletrônicos nas imediações do nível de Fermi.

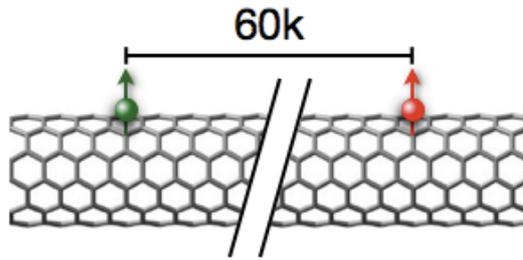


Figura 25: Duas impurezas magnéticas embebidas no nanotubo de carbono, separadas por uma distância  $x_i = 6 \times 10^4 a_0$ .

Neste caso, as velocidades de grupo  $d\omega/dk$  e de fase  $\omega/k$  são as mesmas, o que significa que cada componente de frequência que compõe o pulso irá viajar com a mesma velocidade, garantindo assim uma propagação sem qualquer distorção na forma do pulso. Esta capacidade do nanotubos de carregar informações magnéticas por grandes distâncias sem dispersão e com pouca atenuação indica que eles são excelentes guias de onda de correntes de spins.

Se os nanotubos forem realmente capazes de serem usados como guias para a informação magnética, estas características devem ser testadas na presença de desordens estruturais. Nós simulamos a presença de impurezas substitucionais dispersas de Boro para explorar seus efeitos na propagação de um pulso de perturbação de spins. Nós encontramos que o pulso preserva sua forma e amplitude, exceto quanto se encontra muito próximo da impureza de Boro, onde ele é levemente distorcido. Notamos que a grandes distâncias, entretanto, a forma do pulso é restaurada como se não houvesse impurezas presentes no sistema. Isto sugere que as características de guias de onda de spins relatadas até agora são robustas mesmo na presença de desordem não magnética no NT. Cálculos mais sistemáticos da propagação da corrente de spins na presença de desordem encontram-se em curso.

Por fim, devemos enfatizar que encontrar valores pequenos para a amplitude de precessão em distâncias assintoticamente grandes, como as encontradas no eixo da esquerda da Fig. 24, não implica que a informação magnética esteja perdida. Para explicitar este ponto, nós adicionamos uma segunda impureza magnética a uma grande distância da impureza original ( $x_i = 6 \times 10^4 a_0$ ), como ilustrado na Fig. 25, e olhamos se a excitação produzida na origem pode ser transportada para esta nova posição. A Fig. 26 mostra a perturbação de spins  $|\delta\langle S^+(t) \rangle|$  medidas em ambas as impurezas. A linha cheia mostra a precessão da magnetização na origem, enquanto a linha tracejada representa a perturbação de spins em função do tempo medida na segunda impureza. Ambas as linhas possuem picos igualmente espaçados em intervalos de tempo  $\Delta t = 2x_i/v$ , mas que estão

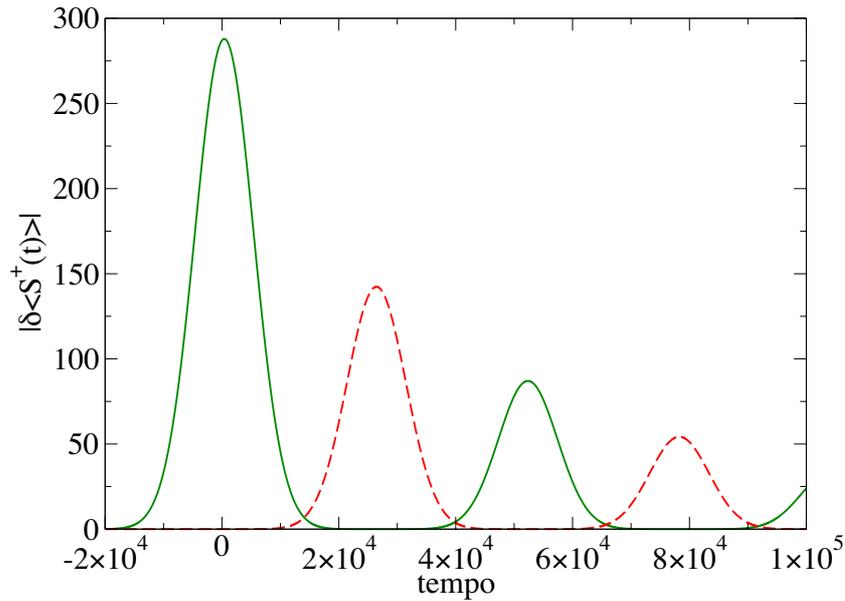


Figura 26: Amplitude do pulso de excitação magnética em função do tempo para o caso de duas impurezas magnéticas separadas por uma grande distância ( $x_i = 6 \times 10^4 a_0$ ), como mostrado na Fig. 25. A linha cheia mostra a perturbação de spins calculada na impureza onde a excitação é induzida, enquanto a linha tracejada é calculada na segunda impureza.

deslocados entre si por  $\Delta t/2$ . O primeiro pico da linha cheia na Fig. 26 representa a precessão induzida diretamente pelo campo externo na origem. Esta precessão gera um pulso de corrente de spins, que se propaga e excita a segunda impureza após percorrer uma distância  $x_i$  em um intervalo de tempo  $\Delta t/2$ . O primeiro pico da linha tracejada evidencia esta excitação. O pulso subsequente da linha cheia é visto após a corrente de spins emitida pela segunda impureza percorrer o caminho de volta e re-excitar a impureza localizada na origem. Este processo é repetido indefinidamente, cada vez com menor amplitude. Esta redução é inevitável, pois uma fração da energia é perdida na corrente que não é reabsorvida pelas impurezas, assim como acontecia no caso da cadeia semi-infinita visto na seção 4.3. Entretanto, o fato de um pulso produzido na origem ser capaz de excitar uma segunda impureza magnética situada a grandes distâncias confirma que os nanotubos de carbono são excelentes guias de ondas de spins, particularmente os de diâmetros grandes, onde a interação spin-órbita é relativamente pequena.

Em resumo, nós mostramos nesta seção que os nanotubos metálicos são excelentes guias de ondas de spins e são capazes de transportar informação magnética através de longas distâncias com mínima dispersão e com pouca perda. Vimos que perturbações de spins induzidas por excitações magnéticas localizadas se propagam pela extensão do NT metálico com velocidades da ordem de  $10^5$  m/s. Além disso, mostramos que a energia armazenada em uma precessão magnética pode ser utilizada em outras partes do sistema,

quando a corrente de spins que viaja através do NT interage com outros objetos magnéticos. Estas características fazem do nanotubo de carbono um componente ideal para dispositivos de memória de resposta rápida. Os testes experimentais de nossas previsões requerem a geração e detecção de correntes de spins. No nosso caso, uma possibilidade seria excitar  $\mathbf{m}_0$  com um pulso de laser, e monitorar um segundo spin localizado em outro ponto do nanotubo com a ponta de um STM. A precessão deste segundo spin deve modular a corrente no STM e, dessa forma, acreditamos ser possível observar a magnetização da segunda impureza sendo excitada pela corrente de spins que flui através do NT.

## 5.2 Transistor de correntes de spins a base de grafeno

A eletrônica usual utiliza bastante os transistores, que são dispositivos capazes de controlar a corrente que flui através deles. Analogamente, na spintrônica, a geração e manipulação de correntes spin polarizadas também é de grande interesse. O grande desafio atual para produção de transistores de spins é projetar estruturas nas quais: *(i)* o comprimento de coerência de spins seja relativamente grande (pelo menos comparável com o tamanho do sistema); *(ii)* as correntes spin polarizadas possam ser injetadas de maneira eficiente da região magnética para a região não magnética. A possibilidade de gerar e controlar o fluxo de correntes de spins na ausência de correntes de cargas também é de grande interesse nesta área. Pretendemos mostrar que o grafeno possui as propriedades ideais para superar estas as limitações e propomos que ele pode ser utilizado como um transistor de spins que permite o controle do transporte de spins através de um potencial *eletrostático* de porta. Além disso, nossa proposta envolve sistemas nanoscópicos que funcionam com altas velocidades e na ausência de uma diferença de potencial aplicada nos contatos, que pode, em princípio, pavimentar o caminho na direção da construção de transistores que combinam velocidades de processamento cada vez maiores, alta integração e consumo de energia extremamente baixo.

A primeira dificuldade pode ser superada com o uso do grafeno, tendo em vista que os comprimentos de coerência de spin nestes materiais são extremamente longos (maiores que  $1\ \mu\text{m}$ , em temperatura ambiente) [53, 74, 75, 76, 77] comparados com os observados em estruturas metálicas convencionais. De fato, evidências experimentais recentes confirmam estas previsões e indicam possibilidades de aumentar ainda mais este comprimento [78]. O segundo obstáculo surge primeiramente devido à resistência de contato inerente que existe entre as regiões M e NM. Ela possui uma parte independente de spins, geralmente referida como resistência de fundo, somada a uma contribuição que depende do spin eletrônico.

O contraste da condutância entre diferentes canais de spin pode severamente reduzido dependendo do valor de resistência de fundo, acarretando, portanto, uma polarização de spins relativamente baixa na corrente injetada.

Apesar da injeção e detecção de correntes de cargas spin polarizadas terem sido demonstradas recentemente em temperatura ambiente [79, 80], as correntes de spins bombeadas não necessitam de uma corrente de cargas líquida, e podem representar uma solução para o problema de injeção de spins. Neste caso, o fluxo de spins é produzido sem a necessidade de uma voltagem aplicada e, como vimos na seção 5.1, ele pode ser usado para excitar outras unidades magnéticas também em contato com o metal NM. Além disso, mostramos que nanotubos de carbono são capazes de carregar correntes de spins (geradas pela precessão de momentos magnéticos) por grandes distâncias com pouca dispersão e com graus de atenuação ajustáveis. Devido à semelhança entre suas relações de dispersão, características similares são esperadas para a propagação de correntes de spins em grafeno. [81, 82]

O grafeno parece ser um excelente candidato a componente NM de transistores de spins. A possibilidade de dopá-lo com metais de transição [66, 83, 84, 85] e de conectá-lo a metais ferromagnéticos [86, 87] indicam que é relativamente simples criar uma região magnética no grafeno [88]. Nosso objetivo é mostrar que uma corrente de spins bombeada através do grafeno (pela precessão de uma magnetização conectada a ele) pode ser modulada mediante a aplicação de um potencial de porta eletrostático em uma região do grafeno. Em outras palavras, propomos que o grafeno pode ser usado como um transistor eficiente de corrente de spins controlado por um potencial de porta. Nossa abordagem combina as características do bombeamento de spins quântico apresentado no capítulo 3 com as características do grafeno de ser um bom condutor de informação magnética.

O sistema considerado é composto por duas regiões: uma magnética (M) e outra não magnética (NM). A parte NM é uma nanofita de grafeno infinita de largura  $W$ . Como nossos resultados não são essencialmente dependentes da forma da tira (contanto que sejam metálicas), optamos por trabalhar as que possuem bordas armchair. Há várias possibilidades de realizar a região magnética. A mais óbvia seria promover a interação do grafeno com algum objeto magnético. Impurezas magnéticas substitucionalmente inseridas na estrutura hexagonal do grafeno apresentam momentos magnéticos consideráveis [66, 83] e serão usadas aqui para representar a parte M do sistema. Outros objetos como nanopartículas magnéticas ou substratos ferromagnéticos também podem ser utilizados, mas, do ponto de vista teórico, os átomos substitucionais são mais fáceis de descrever e

funcionam para ilustrar a essência do fenômeno que queremos demonstrar. Consideramos quatro configurações diferentes que são representadas, esquematicamente, nos destaques da Fig. 27. Em todas elas, há uma unidade magnética posicionada à esquerda da região submetida a um potencial de porta (representada pela faixa cinza) responsável pela geração da corrente de spins que flui através do sistema. A observação do distúrbio na densidade de spins causado pela passagem desta corrente é feita em um sítio  $i$  no centro da tira, à direita da região cinza. Na configuração (a), a unidade magnética é composta por um único átomo colocado no sítio  $j$  (localizado também no centro da tira) e o sítio  $i$  é um átomo de carbono da tira de grafeno; a configuração (b) é essencialmente idêntica, exceto pelo fato de colocarmos um átomo magnético de prova no sítio  $i$ . As configurações (c) e (d) são respectivamente semelhantes às (a) e (b), porém a unidade geradora é composta por uma linha de átomos magnéticos. Embora uma linha de impurezas magnéticas seja difícil de ser realizada, ela serve aqui apenas para testar como o comportamento do transistor é afetado pelo tamanho do material magnético responsável por gerar a corrente de spins.

Uma questão importante a ser levantada envolve o paradoxo de Klein, que prevê transmissão total através de uma barreira de potencial quando partículas sem massa incidem perpendicularmente sobre ela [89]. Como já foi dito, a dinâmica dos elétrons com baixas energias do grafeno pode ser descrita através de um hamiltoniano de Dirac, tornando o sistema eletrônico análogo à partículas sem massa. Entretanto, no caso de uma nanofita de grafeno, foi mostrado que este fenômeno ocorre apenas no centro de fitas simétricas [90], o que não é o nosso caso.

Como mencionamos anteriormente, a corrente de spins bombeada é gerada pela precessão de uma magnetização em contato com um meio metálico. Supomos que a magnetização está originalmente em equilíbrio, apontando em uma direção  $\hat{\mathbf{z}}$  arbitrária, e é posta para precessionar por um campo transversal dependente do tempo  $\mathbf{b}_\perp(t)$ , como mostrado na Eq. 3.24. Para determinar como o grafeno transporta a corrente de spins, vamos analisar como esta excitação perturba o balanço na densidade de spins local no grafeno NM.

Os parâmetros que caracterizam o hamiltoniano foram escolhidos baseados em cálculos de primeiros princípios [67, 68]. Apesar de apresentarmos resultados para impurezas de Mn, outros átomos magnéticos substitucionais podem ser utilizados [66]. Em nossos cálculos, consideramos uma tira de grafeno de largura  $W = 8$  átomos, fixamos a energia de Fermi  $\epsilon_F = 0$ , e, por simplicidade, utilizamos  $t_{ij} = 2.7$  eV para a integral de transferência

entre sítios primeiros vizinhos. Como estamos considerando integrais de transferência iguais entre quaisquer átomos primeiros vizinhos (sejam eles C-C, C-Mn, ou Mn-Mn), necessitamos de um valor de  $U = 20$  eV para obter o mesmo valor de momento magnético do Mn obtido no caso anterior ( $\mathbf{m}_0 \sim 0.6\mu_B$ ). O número de elétrons  $d$  nos sítios de Mn foi escolhido como sendo  $n_0 = 1$ , e consideramos um deslocamento local na energia Zeeman de 1 meV. O acoplamento spin-órbita novamente será desprezado por ser relativamente muito pequeno quando comparado com outras escalas relevantes de energia, como, por exemplo, a largura de banda.

Na seção 5.1, investigamos a perturbação de spins em nanotubos de carbono em função do tempo e identificamos que excitações magnéticas pulsadas viajam por estes materiais com a velocidade de Fermi, pouca deformação e com graus ajustáveis de atenuação, o que foi atribuído à distinta relação de dispersão eletrônica exibida pelos nanotubos. O grafeno apresenta linearidade similar em sua relação de dispersão e se comporta exatamente da mesma forma. Entretanto, ao invés de estudarmos as excitações de spins no domínio do tempo, vamos agora nos focar na resposta em função da frequência. A quantidade chave para nós será novamente  $|\chi_{ij}(\omega)|$ , que é proporcional à amplitude da perturbação de spins no sítio  $i$  devido a um campo magnético transversal dependente do tempo aplicado no sítio  $j$ . Em outras palavras, ela corresponde à amplitude de precessão adquirida pelo spin eletrônico localizado em um sítio arbitrário  $i$  devido a uma perturbação harmônica de frequência  $\omega$  produzida no sítio magnético  $j$ . Para a nanofita, esta quantidade também apresenta o pico ressonante próximo à frequência de Larmor  $\omega_0$ , como esperado. Sem nenhuma perda de generalidade, vamos utilizar este valor como sendo a frequência de excitação.

O fato do spin eletrônico em sítios arbitrários do grafeno serem afetados pela perturbação que age nas impurezas magnéticas indica a existência de uma corrente de spins, bombeada pela precessão dos momentos magnéticos, que viaja através do grafeno. A facilidade de se aplicar um potencial de porta no grafeno [62] motiva a investigação sobre a possibilidade de modular a corrente de spins bombeada através destes materiais. Simulamos o efeito de uma voltagem de porta considerando uma região de comprimento  $L$  na tira de grafeno submetida a um potencial eletrostático  $V_g$ , representada pela faixa cinza nos destaques da Fig. 27. A Fig. 27 mostra os resultados calculados para a perturbação na densidade de spins no sítio  $i$  em função de  $V_g$  para as quatro diferentes configurações. Resultados para  $V_g < 0$  não são mostrados, pois a perturbação de spins é par com respeito à  $V_g$ . É instrutivo analisar os resultados para  $V_g = 0$ . Valores consideráveis são obtidos nos quatro casos, mostrando que o grafeno, similarmente aos nanotubos de carbono é de

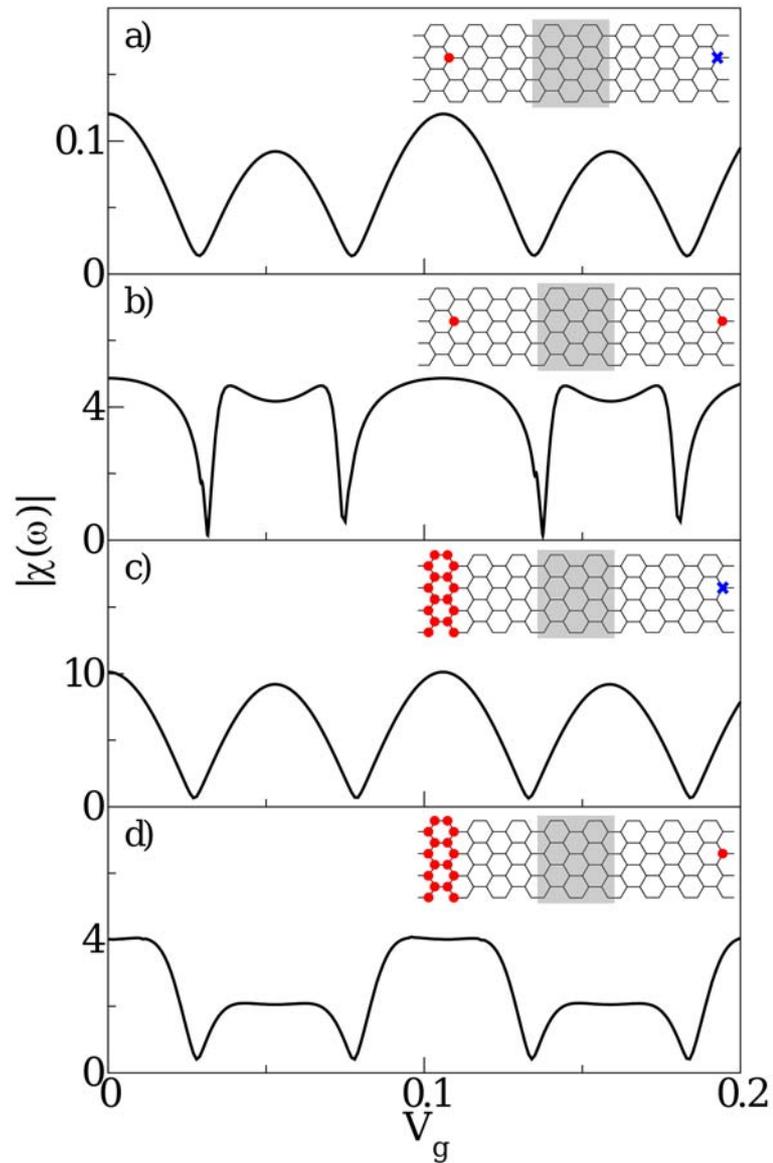


Figura 27: Perturbação de spins, representada pela susceptibilidade transversa de spins  $|\chi_{ij}(\omega)|$  (em unidades de  $\hbar/eV$ ), em função da voltagem de porta  $V_g$  (em unidades de eV). Quatro configurações diferentes são consideradas. Os *insets* ilustram estas configurações. Os círculos vermelhos representam os átomos magnéticos, a cruz azul mostra a posição onde a perturbação de spins é medida, na ausência de um objeto magnético de prova. A área cinza indica a região na qual o potencial de porta  $V_g$  é aplicado. Na configuração (a), temos um único átomo magnético; Na configuração (b), dois átomos magnéticos idênticos separados por uma distância  $D$ ; Em (c) temos uma linha de átomos magnéticos disposta perpendicularmente ao eixo da tira; Em (d) temos uma linha de átomos magnéticos e um outro átomo magnético (de prova) colocado a uma distância  $D$  da linha de impurezas. Os resultados apresentados nos painéis (b) e (d) foram divididos por  $10^2$  e  $10^4$ , respectivamente.

fato um bom condutor para a corrente de spins. Note que os resultados apresentados nos painéis (b) e (d) foram divididos por  $10^2$  e  $10^4$ , respectivamente. A grande diferença nas intensidades encontradas deve-se ao fato da amplitude da perturbação de spins ser muito amplificada pela presença de um momento magnético local na posição onde estamos fazendo a observação.

A confecção de um transistor requer um controle da corrente que o atravessa, algo que geralmente é feito variando o potencial de porta. Todos os resultados apresentados na Fig. 27 mostram oscilações em  $|\chi_{ij}(\omega)|$  em função de  $V_g$ , que alternam entre valores consideráveis (ligado) e relativamente pequenos (desligado) com a mesma periodicidade  $\Delta = 0.106$  eV. Isso significa que uma pequena variação de  $V_g$  é capaz de controlar se uma unidade magnética na posição de prova será ou não excitada pela corrente de spins gerada remotamente, do outro lado da região onde o potencial de porta é aplicado.

Para mapear como as perturbações de spins estão espacialmente distribuídas, vale a pena investigar suas dependências com a posição. Para valores fixos de  $V_g$  do caso ilustrado no *inset* da Fig. 27(c), nós investigamos a maneira como a corrente de spins bombeada afeta o balanço de spins ao longo do percurso paralelo à tira, conectando os sítios  $j$  e  $i$ , calculando  $|\chi_{ij}(\omega)|$  em função da posição de medida  $i$ . A Fig. 28 mostra estes resultados. O fundo branco (cinza) representa a região sem (com) potencial de porta. A Fig. 28(a) mostra resultados para três valores diferentes de potencial:  $V_g = 0, \Delta, 2\Delta$ , todos correspondendo à picos na Fig. 27(c). A perturbação de spins fora da região do potencial é indistinguível nos três casos, confirmando a transmissão completa através do potencial. A diferença aparece apenas dentro da região na qual o potencial é aplicado, onde surgem características oscilatórias quando aumentamos o valor correspondente de  $V_g$ . A linha preta associada à  $V_g = 0$  apresenta um decaimento monotônico pois, neste caso, o período de oscilação subjacente ( $\pi/k_F$ ) devido às interferências quânticas é comensurável com a rede [70, 71, 91, 92]. Pela mesma razão, esta monotonicidade é encontrada em toda a região onde o potencial não é aplicado. Quando a voltagem de porta é aumentada para  $V_g = \Delta$  e  $V_g = 2\Delta$ , saímos de um regime comensurável e entramos em uma região onde são vistos padrões claramente oscilatórios. Apesar das mudanças em  $V_g$ , o efeito total na transmissão é idêntico ao caso  $V_g = 0$ , já que cabem exatamente números pares de meio comprimento de onda dentro do comprimento  $L$  da região de potencial.

Na Fig. 28(b), apresentamos a distribuição espacial da perturbação na densidade de spins, ao longo do mesmo percurso, para três valores de  $V_g$  correspondendo à mínimos mostrados na Fig. 27(c). Para  $V_g^0 = 0.027$ eV encontramos um decaimento monotônico

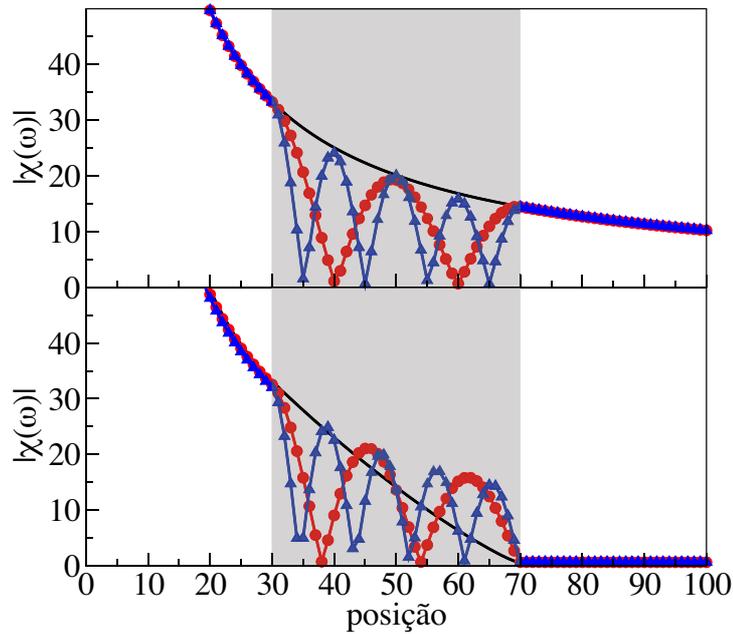


Figura 28: Perturbação de spins, representada pela susceptibilidade transversa de spins  $|\chi_{ij}(\omega)|$  (em unidades de  $\hbar/eV$ ), em função da posição (em unidades de  $a_0 = 2.46 \text{ \AA}$ ) para diferentes valores de  $V_g$ . Todos os resultados foram calculados para o caso ilustrado no painel (c) da Fig. 27. A área cinza representa a região com potencial de porta aplicado. (a)  $V_g = 0$  (linha preta);  $V_g = 0.106 \text{ eV}$  (linha vermelha com círculos);  $V_g = 0.212 \text{ eV}$  (linha azul com triângulos). (b)  $V_g = 0.027 \text{ eV}$  (linha preta);  $V_g = 0.133 \text{ eV}$  (linha vermelha com círculos);  $V_g = 0.239 \text{ eV}$  (linha azul com triângulos).

da perturbação de spins que vai a zero após a região cinza, significando que a corrente de spins bombeada foi bloqueada e é incapaz de prosseguir através da área com potencial aplicado. Apesar de não haver efeito de comensurabilidade para  $V_g \neq 0$ , valores pequenos de  $V_g$  induzem oscilações com período muito longo comparado com  $L$ . Os períodos correspondendo a valores subsequentes de  $V_g$  ( $V_g^0 + \Delta$  e  $V_g^0 + 2\Delta$ ) são bem menores, e as oscilações na região cinza tornam-se aparentes. Entretanto, neste caso,  $L$  coincide com números ímpares de meio comprimento de onda, que resulta em valores quase nulos de  $|\chi_{ij}(\omega)|$  à direita da região submetida ao potencial de porta.

Os resultados mostrados na Fig. 28 podem ser facilmente interpretados em termos de padrões de interferência criados pelo potencial de porta. Apesar das correntes de spins bombeadas viajarem sem a necessidade de correntes de carga, elas são carregadas pelos elétrons. O efeito de um potencial de porta é causar uma mudança no comprimento de onda com o qual os elétrons viajam dentro desta região. Dependendo de como este comprimento característico se compara com o comprimento  $L$  desta região, é possível encontrarmos interferências construtivas ou destrutivas, levando à transmissão ou reflexão total da corrente de spins. Isto é uma assinatura clara da interferência quântica e é

diretamente análoga a um interferômetro de Fabry-Perot que possui certas energias de ressonância para transmissão total e outras onde a corrente é completamente bloqueada.

Concluindo, nós mostramos nesta seção, com a abordagem completamente quântica desenvolvida no capítulo 3, que correntes de spins podem ser bombeadas no grafeno quando ele está em contato com uma região magnética da qual a magnetização é posta para precessionar. Estas correntes de spins não requerem nenhuma diferença de potencial aplicada nos contatos para serem bombeada através do grafeno, e não dependem de nenhuma corrente de cargas líquida. Além disso, as correntes bombeadas são perfeitamente controláveis com a introdução de um potencial de porta simples que modula a transmissão como resultado de interferências quânticas. As ideias apresentadas aqui podem ser úteis para superar algumas limitações apresentadas por dispositivos convencionais e, possivelmente, motivar tentativas de produzir transistores baseados no controle de correntes puras de spins.

### 5.3 Grafeno como uma lente não magnética

Uma das características eletrônicas interessantes do grafeno, já mencionadas em seções anteriores, é a relação de dispersão linear para elétrons no entorno do nível de Fermi. Esta característica faz os pacotes de onda se propagarem sem dispersão, pois possuem velocidade de fase igual à velocidade de grupo. Isto sugere que elétrons no entorno do nível de Fermi devem evoluir de maneira parecida com ondas clássicas, e algumas analogias com sistemas ópticos foram feitas na tentativa de alargar a aplicabilidade do grafeno [93, 94]. A corrente de spins criada pela precessão de um momento magnético, em geral, é emitida para todas as direções. Sendo assim, a perturbação de spins, inicialmente localizada em uma pequena região, acaba se espalhando pelo substrato metálico. É de interesse, portanto, investigar formas de redirecionar esta corrente e tentar reaproveitar parte dessa energia que, de outra forma, seria perdida. Com base em uma analogia óptica, veremos que é possível construir lentes baseadas no grafeno inteiramente não magnéticas, mas que ainda assim são capazes de concentrar correntes de spins em uma região focal.

Na seção anterior, mostramos que um potencial de porta aplicado ao grafeno pode ser utilizado para manipular a propagação de correntes de spins nestes sistemas. A intensidade do potencial de porta define a velocidade com a qual os elétrons se propagam pelo material e, conseqüentemente, podemos visualizar uma forma de projetar índices de refração com dependências espaciais para os elétrons que se propagam no grafeno. Tanto

o fenômeno de refração como de difração afetam a direção de propagação de uma onda e são capazes de induzir padrões de focalização. Nesta seção, vamos utilizar a teoria desenvolvida para a corrente de spins para mostrar como podemos conseguir focalizar o fluxo de momento angular dividindo uma grande região do grafeno em duas partes, sendo uma delas submetida a uma voltagem de porta.

Consideramos uma folha de grafeno e, da mesma forma que fizemos na seção 5.2, utilizamos uma linha de átomos magnéticos substitucionais inseridos na rede hexagonal, como ilustrado esquematicamente na Fig. 29. Chamamos a atenção, novamente, para o fato de que, embora seja difícil de construir uma linha perfeita de impurezas, aqui ela tem o propósito de (a) testar como a resposta do sistema depende do tamanho do material magnético responsável pela geração da corrente de spins e (b) induzir correntes de spins que rapidamente comportam-se como ondas planas. O sistema é dividido em duas regiões, uma contendo a linha de átomos magnéticos, e outra que é submetida a uma voltagem de porta  $V_g$ , que efetivamente controla a densidade eletrônica nesta região. A Fig. 29(a) mostra um diagrama esquemático do sistema em questão. Note que a interface entre a região com potencial de porta (cinza) e sem potencial (branco) é circular, com raio  $R$ . O problema em considerar esta configuração do ponto de vista teórico é a dificuldade computacional necessária para descrever um número elevado de sítios representando o grafeno. A inclusão das impurezas magnéticas e a presença do potencial de porta quebram a simetria translacional ao longo do grafeno. Por esta razão, escolhemos trabalhar com tiras de grafeno de largura finita com condições periódicas de contorno (CPC) na lateral, onde a célula unitária repetida é a parte delimitada pelas duas linhas pontilhadas horizontais da Fig. 29(a). A estrutura eletrônica é determinada no espaço real. Note que uma interface plana é facilmente obtida tomando-se o limite  $R \rightarrow \infty$ , como mostrado na Fig. 29(b).

Os parâmetros que vamos utilizar são os mesmos empregados na seção 5.2: a energia de Fermi é fixada em  $\epsilon_F = 0$ , e, por simplicidade, consideramos a integral de transferência entre primeiros vizinhos apenas, quaisquer que sejam os sítios envolvidos ( $t_{ij} = t = 2.7\text{eV}$ ,  $\forall i, j$  primeiros vizinhos). Isto requer, dentro de uma descrição de uma descrição com um orbital por sítio, um valor grande de  $U$  para se obter um momento magnético apreciável. Desta forma, para obter o valor do momento magnético de  $\mathbf{m}_0 \sim 0.6\mu_B$  encontrado na seção 5.1, a autoconsistência é feita com  $U = 20$  eV, e o número de elétrons nos sítios magnéticos é escolhido como sendo  $n_0 = 1$ , o que simula impurezas substitucionais de Mn. Supomos ainda um deslocamento de energia Zeeman local de 1 meV. Desprezaremos o acoplamento spin-órbita no grafeno, por ser muito pequeno quando

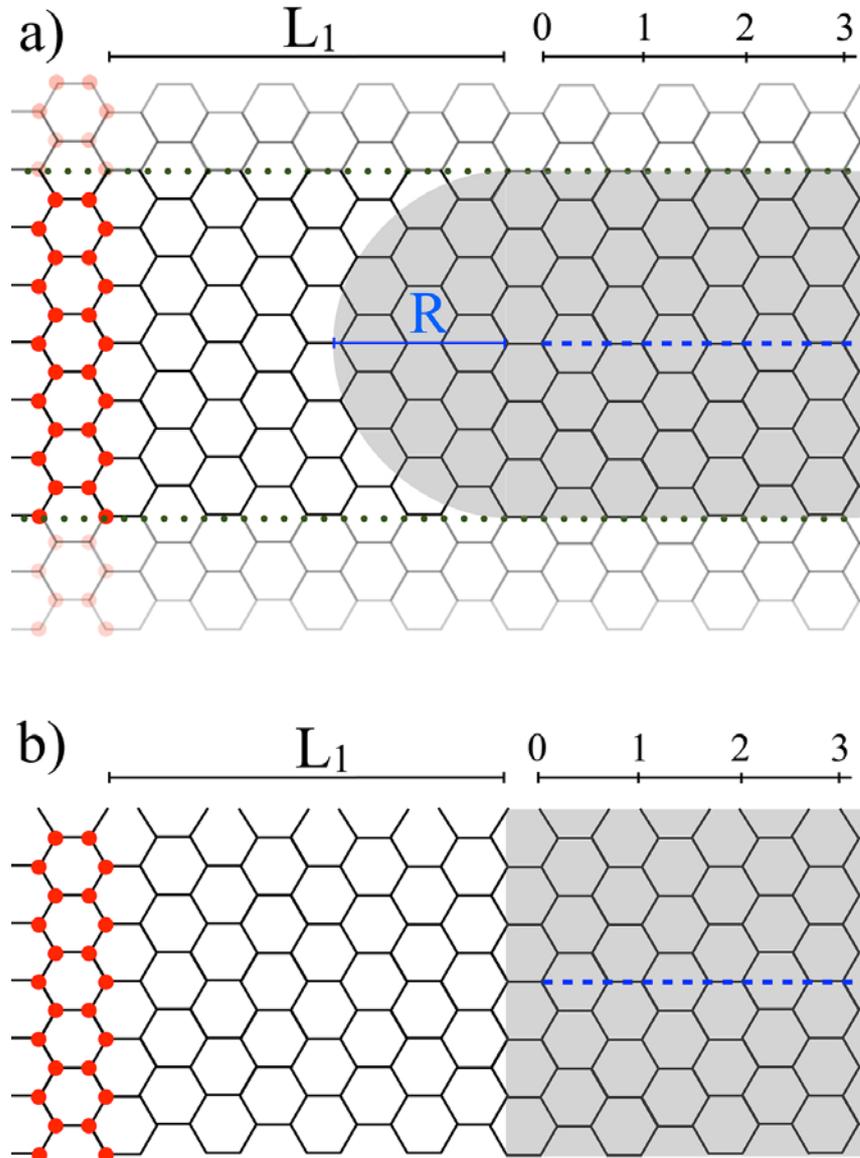


Figura 29: Diagrama esquemático representando a estrutura estudada. (a) Uma folha infinita de grafeno sobre o efeito de uma voltagem de porta que age apenas em uma região limitada do espaço (representada pela área cinza). A região com potencial de porta possui uma interface com curvatura definida pelo raio  $R$  que encontra-se a uma distância  $L_1$  das impurezas magnéticas. A seção delimitada pelas duas linhas pontilhadas horizontais é a célula unitária utilizada para representar o sistema com condições periódicas de contorno. (b) Interfaces planas são facilmente levadas em conta tomando o limite  $R \rightarrow \infty$ . As linhas tracejadas representam as posições onde a perturbação de spins é calculada na Fig. 30.

comparado com outras escalas relevantes de energia.

Definimos a resposta  $\chi_i(\omega) = \sum_j \chi_{ij}(\omega)$ , onde  $j$  varre os sítios magnéticos, e calculamos  $|\chi_i(\omega)|$  em função da frequência. No caso,  $|\chi_i(\omega)|$  é proporcional à amplitude da perturbação local de spins no sítio  $i$  devido a um campo magnético transversal harmônico aplicado na linha magnética. Os propagadores monoelétrônicos necessários para calcular esta função resposta foram obtidos pelo método iterativo de camadas adicionadas [95, 96] e escolhemos a frequência de Larmor como sendo a frequência de excitação.

A Fig. 30(a) mostra os resultados obtidos para  $|\chi_i(\omega)|$  em função de  $i$  ao longo da linha tracejada horizontal ilustrada na Fig. 29(b). Esta configuração corresponde à interface plana ( $R \rightarrow \infty$ ) separando as duas regiões distintas, uma das quais sob a ação de uma voltagem de gate  $V_g = 2.4$  eV. A amplitude da precessão de spins evidentemente oscila em função da posição  $i$  ao longo da tira, e isto pode ser atribuído à polarização de spins induzida pela presença das impurezas magnéticas em contato com o meio condutor. É possível notar um decaimento ao longo do eixo da tira, que tem sua origem na parte imaginária,  $\eta = 1 \times 10^{-4}$ , adicionada à energia que utilizamos nos cálculos numéricos dos propagadores monoelétrônicos pelo método iterativo. O *inset* da Fig. 30(a) mostra que a resposta dos spins é bastante homogênea quando medida ao longo da direção perpendicular ao eixo da tira, na posição 5 do eixo ilustrado na Fig. 29(b). Isto mostra que a perturbação na densidade local de spins, causada pela corrente de spins bombeada, flui como uma onda plana através do sistema.

Entretanto, quando a interface plana é substituída pela semi-circular, a situação modifica-se drasticamente. Os resultados obtidos são apresentados na Fig. 30(b), para um raio  $R = 3a_0$ , onde  $a_0$  é o parâmetro de rede do grafeno. Este valor relativamente pequeno  $R$  foi escolhido apenas por uma questão computacional. Como estamos considerando uma linha de impurezas magnéticas, o efeito torna-se ainda mais pronunciado quando aumentamos a largura da tira e o raio  $R$ . A região sujeita ao potencial de porta é a mesma utilizada na Fig. 30(a), porém a intensidade da amplitude das oscilações praticamente dobra em comparação com os resultados obtidos com a interface plana. Uma evidência mais convincente de que a corrente de spins está sendo focalizada pela interface curva é mostrada no *inset* da Fig. 30(b), que ilustra  $|\chi_i(\omega)|$  calculada ao longo de uma linha perpendicular ao eixo da tira, na posição  $i = 5$  do eixo ilustrado na Fig. 29(a). Podemos ver claramente que há um máximo na região central da tira, indicando que os picos vistos em função da posição axial não estão distribuídos homogênea-mente ao longo de sua largura, mas sim concentrados em uma pequena região do espaço que age como

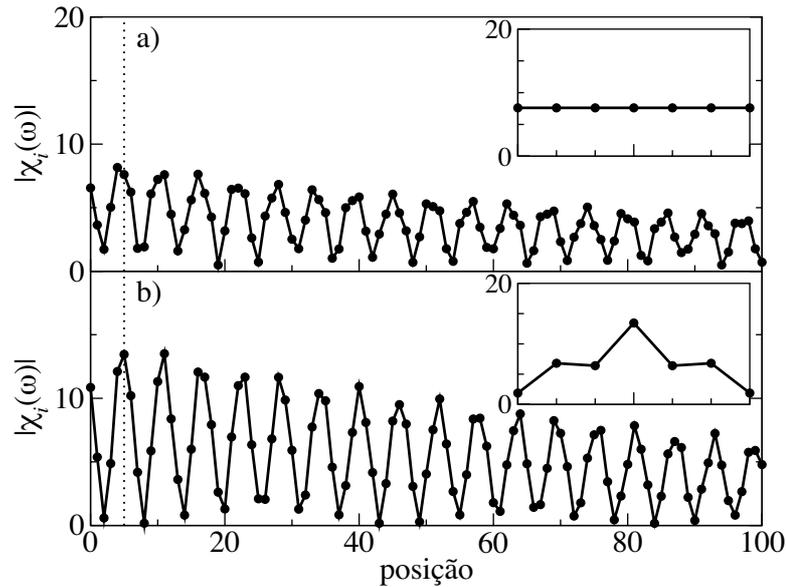


Figura 30: Magnitude da susceptibilidade transversa de spins na frequência de ressonância calculada em diferentes posições. O eixo horizontal dos gráficos principais correspondem às localizações marcadas pelas linhas tracejadas horizontais da Fig. 29. Os *insets* ilustram a susceptibilidade de spins calculadas ao longo de linhas verticais nas posições 5 do eixo ilustrado na Fig. 29. As linhas pontilhadas verticais indicam as posições onde os *insets* foram calculados. Todos os gráficos foram calculados para  $V_g = 2.4$  eV. (a) Resultados para a interface plana ( $R \rightarrow \infty$ ). (b) Resultados para a interface curva ( $R = 3a_0$ ).

um foco da corrente de spins.

Este efeito de focalização fica ainda mais evidente na Fig. 31, onde gráficos bidimensionais com código de cores representando a amplitude de precessão em função da posição na fita de grafeno são mostrados. O painel de cima corresponde à interface plana e quase não possui estruturas. Isso confirma nossa afirmação de que a amplitude de precessão é quase homogênea para a superfície plana. Para o caso da interface curva, entretanto, o painel de baixo da Fig. 31 mostra uma região onde a susceptibilidade transversa de spins alcança um máximo local que age como um centro onde a corrente de spins é focalizada. Quando comparamos os painéis de cima e de baixo da Fig. 31, observamos que a energia da precessão, que seria espalhada homogêneamente pela largura da tira no caso da superfície plana, é redirecionada na direção do foco no caso da interface curva. Como resultado, com uma superfície plana, uma grande parte da informação magnética contida no movimento de precessão dos spins eletrônicos não seria medida e estaria perdida. Variando a combinação de voltagem de porta e a geometria da interface que separa as duas partes da folha de grafeno, podemos minimizar esta perda de informação. Finalmente, vale ressaltar que os resultados que mostramos aqui são robustos e permanecem qualitativamente os mesmos para uma grande variedade de diâmetros e voltagens de porta.

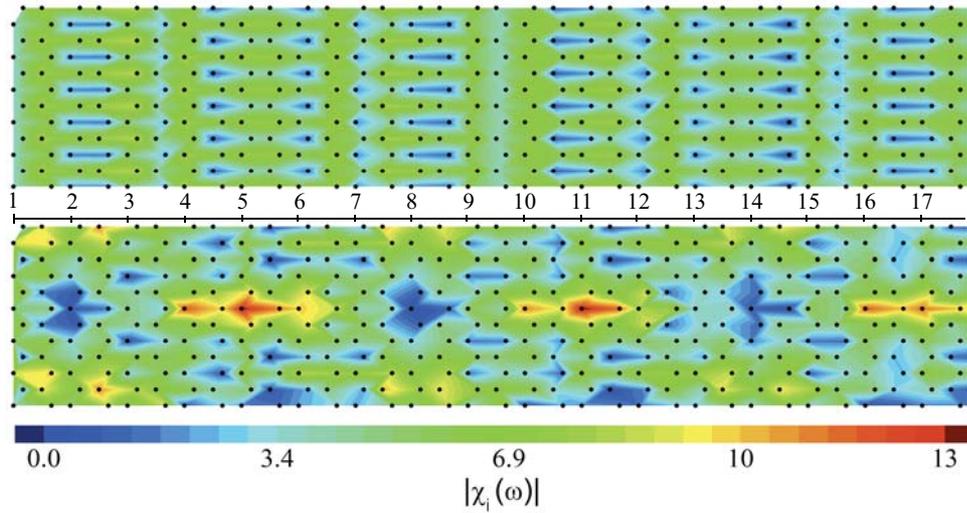


Figura 31: Gráfico de código de cores da susceptibilidade de spins em função da posição na área sujeita a um potencial de porta ilustrada pelas áreas cinzas na Fig. 29. O painel de cima (baixo) corresponde à interface plana (curva) com parâmetros especificados na legenda da Fig. 30.

Isto abre novas possibilidades para utilizar a energia contida na precessão de momentos magnéticos como fontes de informação magnética. O fato de lentes poderem ser utilizadas para concentrar correntes de spins em uma pequena região do espaço é relevante para amplificar sinais de spins que seriam muito fracos sem o uso delas.

Resumindo, nesta seção propomos que as correntes de spins originadas da precessão de uma magnetização em contato com uma folha de grafeno pode ser redirecionada de maneira controlada em direção a uma região focal, o que poderia reduzir a perda da informação magnética guardada na dinâmica dos spins de tais sistemas. Além disso, medindo a corrente de spins na região focal, pode-se melhorar a sensibilidade de qualquer dispositivo de bombeamentos de spins deste tipo.

## 6 *Conclusões e perspectivas*

Neste trabalho de tese, desenvolvemos uma abordagem quântica, baseada na teoria de resposta linear, para descrever o fenômeno do bombeamento de spins causado pela precessão da magnetização de uma unidade magnética, em contato com um meio metálico não magnético. O estudo deste fenômeno é motivado pela possibilidade dele vir a ser utilizado em dispositivos spintrônicos. Nossa discussão é inteiramente baseada no modelo de elétrons itinerantes que é apropriado para descrever sistemas metálicos. Mostramos que a corrente de spins nesses sistemas pode ser calculada através de susceptibilidades magnéticas transversas generalizadas. O formalismo desenvolvido foi utilizado para investigar a dinâmica de spins em diversos sistemas de interesse.

Estabelecemos uma comparação entre a teoria formulada neste trabalho e a abordagem semi-clássica proposta por Tserkovnyak e colaboradores [1]. Para ilustrar esta comparação, consideramos um sistema simples e encontramos que elas possuem um excelente acordo em alguns aspectos. Nosso formalismo, entretanto, permite calcular a distribuição espacial da corrente de spins e mostramos que efeitos de interferência quântica têm um papel bastante relevante nesta grandeza. Apesar dos cálculos numéricos terem sido efetuados para sistemas relativamente simples, é possível que as variações espaciais encontradas estejam presentes também em sistemas mais realistas. Por exemplo, em um filme ultrafino ferromagnético adsorvido à um substrato metálico que é excitado por ressonância ferromagnética. Neste caso, os spins de cada camada do ferromagneto precessionam em fase e podem ser vistos como um spin gigante embebido em uma estrutura unidimensional. A corrente de spins bombeada para o substrato também irá variar apenas na direção perpendicular à interface, e será constante ao longo de um determinado plano. Há, portanto, uma analogia entre esta circunstância e os casos unidimensionais explorados no presente trabalho. Estudamos também a influência de uma superfície sobre a distribuição espacial da corrente de spins e mostramos que ela exibe um comportamento linear, em acordo com as previsões de Valet e Fert [49].

Empregamos a nossa teoria para estudar a propagação de correntes de spins em algu-

mas nanoestruturas a base de carbono. Mostramos que nanotubos de carbono metálicos são excelentes guias de onda de correntes de spins e são capazes de transportar informações magnéticas através de longas distâncias, com pouca dispersão e com atenuação controlável. Investigamos a propagação de um pulso de corrente de spins através de nanotubos metálicos e mostramos que esta excitação viaja com a velocidade de Fermi deste material e é capaz de excitar outras impurezas magnéticas presentes no meio [2]. Estudamos também a influência de um potencial de porta eletrostático na propagação de correntes de spins bombeadas através de uma tira de grafeno. Mostramos que estes sistemas funcionam como transistores de correntes de spins, ou seja, podemos controlar a perturbação na densidade de spins que atravessa uma região da tira submetida a um potencial eletrostático, permitindo ou bloqueando a passagem desta perturbação [3]. Finalmente, em analogia com sistemas ópticos, propomos que correntes de spins bombeadas através do grafeno podem ser focalizadas mediante a utilização de um potencial de porta com perfil apropriado. Nossos resultados confirmam o grande potencial que os materiais a base de carbono possuem para serem empregados em dispositivos spintrônicos de alta velocidade, baixo consumo de energia e grande integração.

Apesar de já termos avançado no entendimento de várias características da dinâmica de spins em nanoestruturas, ainda há muitos aspectos de interesse que necessitam ser investigados. Do ponto de vista prático torna-se necessário, por exemplo, avaliar os efeitos de heterogeneidades (defeitos e impurezas) na propagação da corrente de spins em nanoestruturas. Um estudo mais detalhado sobre a influência da desordem na propagação da corrente de spins em nanotubos de carbono e nanofitas de grafeno está em curso. Uma outra questão fundamental é o efeito da correlação eletrônica na propagação das correntes de spins. Utilizando o modelo de Hubbard, pretendemos incluir a interação eletrônica efetiva em uma região da nanoestrutura e analisar as alterações que ela provoca na propagação de um pulso de corrente de spins que atravessa essa região. Temos a intenção de explorar, também, a propagação da corrente de spins emitida por uma unidade magnética extensa em contato com uma nanofita de grafeno quando diferentes modos transversos são excitados. Suspeitamos que apenas o modo uniforme se propaga através de longas distâncias nestas estruturas. Outro assunto de interesse é o tunelamento de uma corrente de spins através de uma região semicondutora. É possível variar o diâmetro de um nanotubo de carbono com a introdução de um defeito estrutural constituído por um pentágono e um heptágono e, dessa forma, criar um trecho semicondutor em um nanotubo metálico. Pretendemos investigar o que acontece com corrente de spins propagando-se no tubo metálico ao encontrar um trecho semicondutor como esse.

Além disso, temos a perspectiva de estudar como que a dinâmica de spins em nanofitas de grafeno é influenciada pela aplicação de tensões não uniformes. Observações recentes [14] mostram que a presença dessas tensões pode ser interpretada como se tira estivesse submetida a um campo magnético fictício de alta intensidade. Podemos tratar esse problema utilizando a aproximação de Peierls, que modifica a função de onda eletrônica por uma fase que depende do potencial vetor magnético [15-17].

Planejamos ainda iniciar a implementação de cálculos numéricos da corrente de spins baseados em uma descrição multi-orbital da estrutura eletrônica do sistema onde ela se propaga. As expressões analíticas já foram obtidas nesta tese, porém, as aplicações numéricas ainda precisam ser desenvolvidas. Este passo é essencial para futuros desenvolvimentos do estudo da dinâmica de spins na presença de interação spin-órbita, que pode ser relevante na dissipação da corrente de spin em nanotubos de carbono com diâmetros relativamente pequenos e outras nanoestruturas tais como filmes ferromagnéticos ultrafinos depositados em substratos metálicos não magnéticos. O papel da interação spin-órbita na dissipação de excitações magnéticas nestes sistemas é, sem dúvida, de importância fundamental. Com a inclusão deste efeito, seremos capazes de calcular as duas contribuições para o amortecimento (de spin-órbita e de bombeamento de spins) e avaliar suas importâncias relativas. Um formalismo que permite incluir a interação spin-órbita no cálculo da susceptibilidade transversa magnética em sistemas metálicos foi desenvolvido recentemente [31]. A presença desta interação introduz um mecanismo explícito de dissipação para a corrente de spins e a sua inclusão no cálculo dessa grandeza é uma tarefa bastante árdua. Do ponto de vista teórico, a própria definição da corrente de spin, nesse caso, precisa ser feita com um certo cuidado [98]. Os estudos nesta direção já estão sendo realizados.

Além da importância direta na dinâmica do spin, a interação spin-órbita é responsável também pelo efeito Hall de spin (SHE), no qual uma corrente elétrica fluindo em um paramagneto dá origem ao aparecimento de uma corrente de spin perpendicular à direção de propagação da corrente elétrica. O fenômeno inverso, denominado efeito Hall de spin inverso (ISHE), também é previsto: quando uma corrente de spins flui através de um meio condutor não magnético, ela dá origem ao aparecimento de uma corrente elétrica. Este efeito pode ser usado para detectar a presença de uma corrente de spin nesse meio [46, 30] e é de crucial importância para a interpretação de alguns experimentos de ressonância ferromagnética [45]. Pretendemos estudar este fenômeno para tentar obter uma teoria microscópica que descreva este fenômeno. A obtenção da componente DC da corrente de spins dentro da formulação quântica é muito importante para a descrição do efeito Hall

de spins. Temos a intenção de estender nossa teoria até segunda ordem na intensidade do campo externo aplicado, para obter esta componente.

## *APÊNDICE A – Expressões analíticas para propagadores monoelétrônicos em nanotubos carbono*

Uma maneira de se calcular os propagadores monoelétrônicos para sistemas infinitos e semi-infinitos é através de métodos iterativos, utilizando a equação de Dyson. Esta é a base do método de dizimação e do empilhamento de camadas (*add-layer*). Porém, há um custo computacional que pode se tornar proibitivo dependendo do tamanho e do número de camadas do sistema. Problemas que envolvem funções de Green são muito facilitados pela existência de fórmulas analíticas para calculá-las, como acontece no caso de cadeias unidimensionais. Além disso, expressões analíticas fornecem uma descrição física mais clara da propagação do elétron pelo sistema.

As propriedades eletrônicas de nanotubos de carbono podem ser razoavelmente bem descritas, dentro de certos limites, utilizando-se um modelo de ligações fortes com apenas um orbital por sítio. Isto nos permite obter fórmulas analíticas para os propagadores monoelétrônicos envolvendo dois sítios arbitrários de nanotubos de carbonos aquirais, tanto armchair quanto zigzag. Neste apêndice, seguiremos os passos da Ref. [97] para obter estas expressões.

### **A.1 Grafeno**

Nanotubos de carbono podem ser imaginados como folhas de grafeno submetidas a condições de contorno apropriadas. Sendo assim, é conveniente calcular a relação de dispersão e os autoestados do grafeno antes de obtermos as expressões analíticas para os propagadores monoelétrônicos nos nanotubos. Tendo em vista que a estrutura cristalina do grafeno é descrita por uma rede de Bravais triangular com uma base de 2 átomos inequivalentes, identificados como 1 e 2, reescrevemos o hamiltoniano de ligações fortes

dado pela Eq. 2.37 como

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_{\mathbf{r}} \left[ \left( \sum_{s=1}^2 |\mathbf{r}, s\rangle \epsilon_0 \langle \mathbf{r}, s| \right) \right. \\ \left. + |\mathbf{r}, 1\rangle t_0 \left( \langle \mathbf{r}, 2| + \langle \mathbf{r} - \mathbf{a}_1, 2| + \langle \mathbf{r} - \mathbf{a}_2, 2| \right) \right. \\ \left. + |\mathbf{r}, 2\rangle t_0 \left( \langle \mathbf{r}, 1| + \langle \mathbf{r} + \mathbf{a}_1, 1| + \langle \mathbf{r} + \mathbf{a}_2, 1| \right) \right] , \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

onde  $\epsilon_0$  é a energia de sítio e  $t_0$  é o hopping apenas entre primeiros vizinhos. Usando o teorema de Bloch, podemos obter a função de onda no espaço recíproco como uma combinação linear dos estados em cada tipo de sítio, i.e.,

$$\begin{aligned} |\mathbf{k}, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r}, 1\rangle , \\ |\mathbf{k}, 2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r}, 2\rangle . \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Nestas expressões,  $N_c$  é um fator de normalização representando o número de células unitárias (mostrada na Fig. 18a). A função de onda geral do sistema é dada pela combinação linear destes dois estados:

$$|\mathbf{k}, \alpha\rangle = \frac{A_1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r}, 1\rangle + \frac{A_2}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r}, 2\rangle , \quad (\text{A.3})$$

onde  $A_1^2 + A_2^2 = 1$ . Nesta base, os elementos do hamiltoniano podem ser escritos como

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}, 1 | \hat{H} | \mathbf{k}, 1 \rangle &= \epsilon_0 = \langle \mathbf{k}, 2 | \hat{H} | \mathbf{k}, 2 \rangle , \\ \langle \mathbf{k}, 2 | \hat{H} | \mathbf{k}, 1 \rangle &= t_0 (1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2}) \equiv t(\mathbf{k}) , \\ \langle \mathbf{k}, 1 | \hat{H} | \mathbf{k}, 2 \rangle &= t_0 (1 + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2}) = t^*(\mathbf{k}) . \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

O autoestado deste hamiltoniano é encontrado utilizando a equação de Schödinger independente do tempo,

$$\hat{H} |\mathbf{k}, \alpha\rangle = \epsilon(\mathbf{k}) |\mathbf{k}, \alpha\rangle , \quad (\text{A.5})$$

ou ainda

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 & t^*(\mathbf{k}) \\ t(\mathbf{k}) & \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} = \epsilon(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} . \quad (\text{A.6})$$

Para diagonalizar este hamiltoniano, encontramos inicialmente os autovalores através da equação

$$\begin{vmatrix} \epsilon_0 - \epsilon(\mathbf{k}) & t^*(\mathbf{k}) \\ t(\mathbf{k}) & \epsilon_0 - \epsilon(\mathbf{k}) \end{vmatrix} = 0 . \quad (\text{A.7})$$

Obtemos então os autovalores

$$\begin{aligned}\epsilon_{\pm}(\mathbf{k}) &= \epsilon_0 \pm \sqrt{|t(\mathbf{k})|^2} \\ &= \epsilon_0 \pm |t_0| \sqrt{3 + 2 \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 + 2 \cos \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 + 2 \cos \mathbf{k} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)} .\end{aligned}\quad (\text{A.8})$$

Esta é a **relação de dispersão** do grafeno. Para encontrar os autovetores, substituímos os autovalores na Eq. A.6 e calculamos os autovetores correspondentes:

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} \epsilon_0 & t^*(\mathbf{k}) \\ t(\mathbf{k}) & \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} &= \epsilon_0 \pm \sqrt{|t(\mathbf{k})|^2} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix} \\ \epsilon_0 A_1 + t^*(\mathbf{k}) A_2 &= \epsilon_0 A_1 \pm \sqrt{|t(\mathbf{k})|^2} A_2 .\end{aligned}\quad (\text{A.9})$$

Portanto, os autoestados do grafeno são da forma mostrada na Eq. A.3, com

$$A_2 = \pm \frac{t(\mathbf{k})}{|t(\mathbf{k})|} A_1 \equiv \pm e^{i\phi} A_1 , \quad (\text{A.10})$$

onde

$$e^{i\phi} = \frac{t(\mathbf{k})}{|t(\mathbf{k})|} . \quad (\text{A.11})$$

Normalizando os autovetores, suas componentes podem ser escritas como

$$\begin{aligned}A_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} , \\ A_2 &= \pm \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2}} .\end{aligned}\quad (\text{A.12})$$

Assim, os autoestados podem ser escritos como

$$|\mathbf{k}, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (|\mathbf{r}, 1\rangle \pm e^{i\phi} |\mathbf{r}, 2\rangle) , \quad (\text{A.13})$$

com autoenergias  $\epsilon_{\pm}(\mathbf{k})$  dadas pela Eq. A.8. Estes autovetores formam uma base ortonormal na qual o hamiltoniano é diagonal, i.e.,

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=\pm} |\mathbf{k}, \alpha\rangle \epsilon_{\pm}(\mathbf{k}) \langle \mathbf{k}, \alpha| . \quad (\text{A.14})$$

Com este conjunto completo de estados, podemos escrever a função de Green retardada como

$$\hat{G} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \left( \epsilon + i\eta - \hat{H} \right)^{-1} = \lim_{\eta \rightarrow 0} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=\pm} \frac{|\mathbf{k}, \alpha\rangle \langle \mathbf{k}, \alpha|}{\epsilon + i\eta - \epsilon_{\pm}(\mathbf{k})} . \quad (\text{A.15})$$

Por simplicidade, o limite será omitido nas expressões seguintes, mas a função de Green retardada  $\hat{G}(\epsilon)$  deve ser sempre vista como  $\lim_{\eta \rightarrow 0} \hat{G}(\epsilon + i\eta)$ . Os propagadores entre sítios

da rede são dados por

$$\langle \mathbf{r}, s | \hat{G} | \mathbf{r}', s' \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=\pm} \frac{\langle \mathbf{r}, s | \mathbf{k}, \alpha \rangle \langle \mathbf{k}, \alpha | \mathbf{r}', s' \rangle}{\epsilon - \epsilon_{\pm}(\mathbf{k})}. \quad (\text{A.16})$$

Abrindo a soma em  $\alpha$  e utilizando a relação de dispersão (dada pela Eq. A.8),

$$\langle \mathbf{r}, s | \hat{G} | \mathbf{r}', s' \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{\langle \mathbf{r}, s | \mathbf{k}, + \rangle \langle \mathbf{k}, + | \mathbf{r}', s' \rangle}{(\epsilon - \epsilon_0) - |t(\mathbf{k})|} + \frac{\langle \mathbf{r}, s | \mathbf{k}, - \rangle \langle \mathbf{k}, - | \mathbf{r}', s' \rangle}{(\epsilon - \epsilon_0) + |t(\mathbf{k})|} \right\}. \quad (\text{A.17})$$

Estamos interessados na representação da rede direta da função de Green. Para isso, obtemos a projeção dos autoestados, escritos na Eq. A.13, em cada tipo de sítio da rede como

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}, 1 | \mathbf{k}, \pm \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2N_c}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \\ \langle \mathbf{r}, 2 | \mathbf{k}, \pm \rangle &= \pm \frac{1}{\sqrt{2N_c}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} + i\phi}. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Para obter a função de Green, substituímos estas projeções na Eq. A.17. Vamos separar o resultado em 3 combinações de  $s$  e  $s'$ :

- Se  $s = s'$ :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}, s | \hat{G} | \mathbf{r}', s \rangle &= \frac{1}{2N_c} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(\epsilon - \epsilon_0) - |t(\mathbf{k})|} + \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(\epsilon - \epsilon_0) + |t(\mathbf{k})|} \right\} \\ &= \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - |t(\mathbf{k})|^2} (\epsilon - \epsilon_0). \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

- Se  $s = 1$  e  $s' = 2$ :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}, 1 | \hat{G} | \mathbf{r}', 2 \rangle &= \frac{1}{2N_c} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-i\phi}}{(\epsilon - \epsilon_0) - |t(\mathbf{k})|} - \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{-i\phi}}{(\epsilon - \epsilon_0) + |t(\mathbf{k})|} \right\} \\ &= \frac{1}{2N_c} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - |t(\mathbf{k})|^2} 2 \frac{t^*(\mathbf{k})}{|t(\mathbf{k})|} |t(\mathbf{k})| \\ &= \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - |t(\mathbf{k})|^2} t^*(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

onde utilizamos a Eq. A.11.

- Se  $s = 2$  e  $s' = 1$ :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}, 2 | \hat{G} | \mathbf{r}', 1 \rangle &= \frac{1}{2N_c} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{i\phi}}{(\epsilon - \epsilon_0) - |t(\mathbf{k})|} - \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{i\phi}}{(\epsilon - \epsilon_0) + |t(\mathbf{k})|} \right\} \\ &= \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - |t(\mathbf{k})|^2} t(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Juntando os resultados acima, obtemos

$$\langle \mathbf{r}, s | \hat{G} | \mathbf{r}', s' \rangle = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - |t(\mathbf{k})|^2} \begin{cases} (\epsilon - \epsilon_0) & , s = s' \\ t^*(\mathbf{k}) & , s = 1 \text{ e } s' = 2 \\ t(\mathbf{k}) & , s = 2 \text{ e } s' = 1 \end{cases} . \quad (\text{A.22})$$

Utilizando a expressão explícita de  $t(\mathbf{k})$ , definida na Eq. A.4, podemos reescrever a equação acima como

$$\langle \mathbf{r}, s | \hat{G} | \mathbf{r}', s' \rangle = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - |t(\mathbf{k})|^2} \begin{cases} (\epsilon - \epsilon_0) & , s = s' \\ t_0(1 + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1 \Delta s} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2 \Delta s}) & , s \neq s' \end{cases} , \quad (\text{A.23})$$

onde  $\Delta s = s - s'$ .

Utilizando os vetores  $\mathbf{r} = l\mathbf{a}_1 + j\mathbf{a}_2$  e  $\mathbf{r}' = l'\mathbf{a}_1 + j'\mathbf{a}_2$ , e definindo  $k_1$  ( $k_2$ ) como a componente de  $\mathbf{k}$  na direção de  $\mathbf{a}_1$  ( $\mathbf{a}_2$ ), podemos escrever explicitamente

$$\langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle = \frac{1}{N_c} \sum_{k_1, k_2} \frac{e^{i(k_1 a \Delta l + k_2 a \Delta j)}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - |t(k_1, k_2)|^2} \begin{cases} (\epsilon - \epsilon_0) & , s = s' \\ t_0(1 + e^{ik_1 a \Delta s} + e^{ik_2 a \Delta s}) & , s \neq s' \end{cases} , \quad (\text{A.24})$$

onde  $\Delta l = l - l'$  e  $\Delta j = j - j'$ . Tomamos  $a = 1$  a partir de agora para facilitar os cálculos.

## A.2 Nanotubos infinitos

Nanotubos são folhas de grafeno enroladas em uma determinada direção. Vamos tratar aqui apenas os dois casos aquirais, que são conhecidos como armchair e zigzag. O nanotubo armchair é enrolado na direção  $(N, N)$ , enquanto o zigzag é enrolado na direção  $(N, -N)$ . Este último é mais comumente obtido através da direção  $(N, 0)$ , porém, para tratarmos os dois casos juntos, vamos utilizar a quantização  $(N, -N)$ .

É conveniente definir vetores perpendiculares na rede direta, nas direções circunferencial e longitudinal do tubo. Desta forma, as somas que precisam ser feitas no cálculo das funções de Green serão desacopladas e podem ser feitas separadamente. Na direção circunferencial, a função de onda deve ter condições periódicas de contorno, o que resultará em uma quantização dos vetores de onda nesta direção. Já na direção longitudinal, como consideramos um nanotubo infinito, haverá um contínuo de vetores de onda.

Vamos definir os vetores perpendiculares

$$\mathbf{a}_A = \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2 , \text{ e} \quad (\text{A.25a})$$

$$\mathbf{a}_Z = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2 , \quad (\text{A.25b})$$

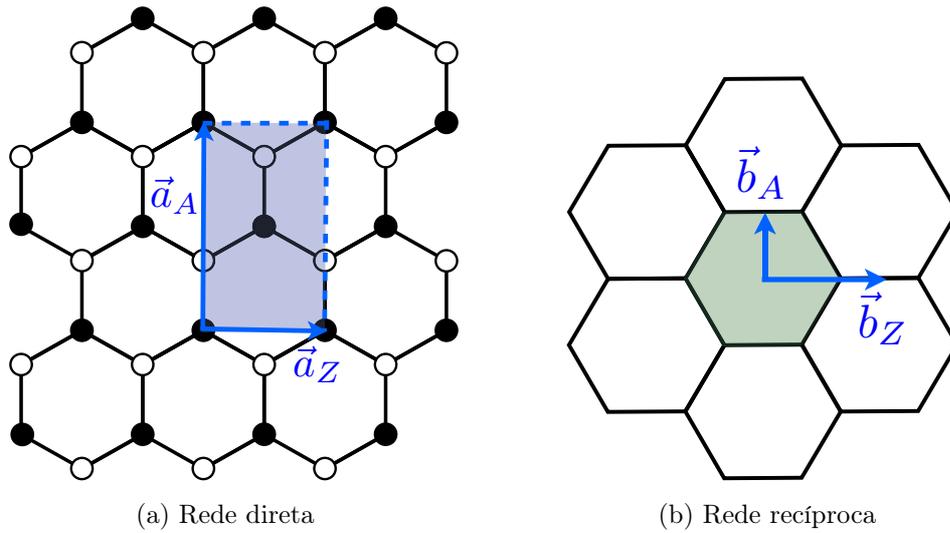


Figura 32: (a) Célula com 4 sítios definida por  $\mathbf{a}_A$  e  $\mathbf{a}_Z$ . (b) Vetores definidos por  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = \delta_{ij}$ , com  $i, j = A, Z$ .

que estabelecem as direções de quantização para um nanotubo armchair e zigzag, respectivamente. A Fig. 32a mostra a célula definida por estes vetores na rede direta, e a Fig. 32b mostra os vetores recíprocos correspondentes. Note que os vetores  $\mathbf{b}_A$  e  $\mathbf{b}_Z$  não são vetores da rede recíproca.

Desta forma, um nanotubo armchair  $(N, N)$  possui um vetor circunferencial  $\mathbf{C}_A = N\mathbf{a}_A$ , enquanto em um nanotubo zigzag  $(N, -N)$  o vetor circunferencial é dado por  $\mathbf{C}_Z = N\mathbf{a}_Z$ . Obrigando a função de onda, dada pela Eq. A.13, ser periódica na direção circunferencial, encontramos a condição

$$e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{C}} = 1, \quad (\text{A.26})$$

ou ainda

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{C} = 2\pi n, \quad (\text{A.27})$$

Para os nanotubos armchair, esta relação se torna

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{C}_A \equiv Nk_A = N(k_1 + k_2) = 2\pi n, \quad (\text{A.28})$$

onde  $k_A$  é a componente de  $\mathbf{k}$  na direção de  $\mathbf{a}_A$ . Analogamente, para os nanotubos zigzag, devemos ter

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{C}_Z \equiv Nk_Z = N(k_1 - k_2) = 2\pi n. \quad (\text{A.29})$$

As Eqs. A.28 e A.29 nos mostra que os vetores de onda na direção circunferencial,  $k_A$

e  $k_Z$ , devem ser quantizados da forma

$$k_C = \frac{2\pi}{N}n, \quad (\text{A.30})$$

onde  $n = 1, 2, 3, \dots, N$  para que a soma seja restrita à primeira Zona de Brillouin. Através das Eqs. A.28 e A.29, obtemos também a relação entre  $\{k_1, k_2\}$  e  $\{k_A, k_Z\}$

$$\begin{aligned} k_1 &= \frac{1}{2}(k_A + k_Z), \text{ e} \\ k_2 &= \frac{1}{2}(k_A - k_Z). \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Note que a célula no espaço real definida por  $\{\mathbf{a}_A, \mathbf{a}_Z\}$  tem área dada por

$$\begin{aligned} |\mathbf{a}_A \times \mathbf{a}_Z| &= |(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \times (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)| \\ &= 2|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|. \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Portanto, o número de células  $N_c$  definidas por  $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$  é o dobro do número de células  $N'_c$  definidas por  $\{\mathbf{a}_A, \mathbf{a}_Z\}$ . Com esta definição,  $t(\mathbf{k})$  pode ser escrito como

$$\begin{aligned} t\left(\frac{k_A}{2}, \frac{k_Z}{2}\right) &= t_0 [1 + e^{ik_1} + e^{ik_2}] \\ &= t_0 \left[1 + e^{i\frac{k_A}{2}} \left(e^{i\frac{k_Z}{2}} + e^{-i\frac{k_Z}{2}}\right)\right] \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

Utilizando as Eqs. A.31 e A.33 para reescrever a função de Green da Eq. A.24 em termos dos momentos  $k_A$  e  $k_Z$ , obtemos

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= \frac{1}{2N'_c} \sum_{k_A, k_Z} \frac{e^{i\left[\frac{k_A}{2}(\Delta l + \Delta j) + \frac{k_Z}{2}(\Delta l - \Delta j)\right]}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - \left|t\left(\frac{k_A}{2}, \frac{k_Z}{2}\right)\right|^2} \\ &\times \begin{cases} (\epsilon - \epsilon_0) & , s = s' \\ t_0 \left[1 + e^{i\frac{k_A}{2}\Delta s} \left(e^{i\frac{k_Z}{2}\Delta s} + e^{-i\frac{k_Z}{2}\Delta s}\right)\right] & , s \neq s' \end{cases}, \end{aligned} \quad (\text{A.34})$$

onde

$$\begin{aligned} \left|t\left(\frac{k_A}{2}, \frac{k_Z}{2}\right)\right|^2 &= t_0^2 [3 + 2 \cos(k_1) + \cos(k_2) + 2 \cos(k_1 - k_2)] \\ &= t_0^2 \left[1 + 4 \cos\left(\frac{k_A}{2}\right) \cos\left(\frac{k_Z}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_Z}{2}\right)\right]. \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

Na direção de quantização (circunferencial), devemos somar os  $N$  modos transversais:

$$\frac{1}{N} \sum_{k_C} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N, \quad (\text{A.36})$$

onde  $k_C$  é dado pela Eq. A.30. Já na direção longitudinal do tubo infinito, a componente do momento será contínua. Desta forma, a soma passa para uma integral da forma

$$\frac{1}{N_L} \sum_{k_L} \rightarrow \frac{1}{4\pi} \int_{-2\pi}^{2\pi} dk_L, \quad (\text{A.37})$$

onde  $N'_c = NN_L$ . O período de  $4\pi$  pode ser visto pela relação de dispersão obtida em termos de  $k_A$  e  $k_Z$  na Eq. A.35. Desta forma, levando em conta que agora temos metade do número de células mas que cada uma contém 4 átomos, i.e., temos a mesma informação duplicada em cada célula nova, teremos que

$$\frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} = \frac{2}{2NN_L} \sum_{k_C, k_L} \rightarrow \frac{1}{4\pi N} \int_{-2\pi}^{2\pi} dk_L, \quad (\text{A.38})$$

Podemos agora escrever a função de Green para cada tipo de nanotubo. São elas:

- Armchair:

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= \frac{1}{4\pi N} \sum_{n=1}^N \int_{-2\pi}^{2\pi} dk_Z \frac{e^{i\left[\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j) + \frac{k_Z}{2}(\Delta l - \Delta j)\right]}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - \left|t\left(\frac{\pi n}{N}, \frac{k_Z}{2}\right)\right|^2} \\ &\times \begin{cases} (\epsilon - \epsilon_0) & , s = s' \\ t_0 \left[1 + e^{i\frac{\pi n}{N}\Delta s} \left(e^{i\frac{k_Z}{2}\Delta s} + e^{-i\frac{k_Z}{2}\Delta s}\right)\right] & , s \neq s' \end{cases} \\ &= \frac{1}{2\pi N} \sum_{n=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} dk'_Z \frac{e^{i\left[\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j) + k'_Z(\Delta l - \Delta j)\right]}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - \left|t\left(\frac{\pi n}{N}, k'_Z\right)\right|^2} \\ &\times \begin{cases} (\epsilon - \epsilon_0) & , s = s' \\ t_0 \left[1 + e^{i\frac{\pi n}{N}\Delta s} \left(e^{ik'_Z\Delta s} + e^{-ik'_Z\Delta s}\right)\right] & , s \neq s' \end{cases}, \end{aligned} \quad (\text{A.39})$$

onde fizemos a mudança de variáveis  $k'_Z = \frac{k_Z}{2}$ .

- Zigzag:

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= \frac{1}{2\pi N} \sum_{n=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} dk_A \frac{e^{i\left[k_A(\Delta l + \Delta j) + \frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)\right]}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - \left|t\left(k_A, \frac{\pi n}{N}\right)\right|^2} \\ &\times \begin{cases} (\epsilon - \epsilon_0) & , s = s' \\ t_0 \left[1 + 2e^{ik_A\Delta s} \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right)\right] & , s \neq s' \end{cases}. \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Para calcular as funções de Green, precisamos resolver integrais da forma

$$I(D) = \frac{1}{2\pi N} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{e^{ikD}}{f(k)}, \quad (\text{A.41})$$

onde  $f(k)$  é par e periódica, com período  $2\pi$ . Para cada tipo de nanotubo, as funções

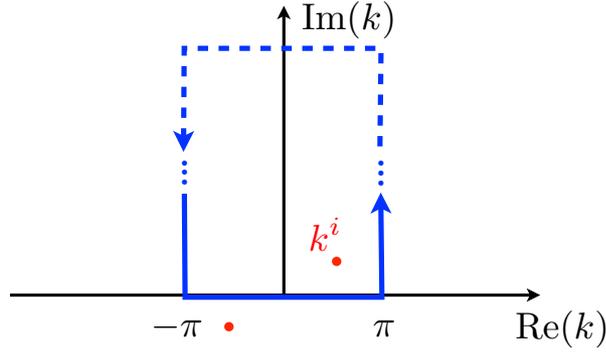


Figura 33: Circuito no plano complexo para resolver a integral dada pela Eq. A.41, com  $D \geq 0$ .

$f(k)$  são dadas por

$$f_A(k_Z) = (\epsilon - \epsilon_0)^2 - t_0^2 \left[ 1 + 4 \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) \cos(k_Z) + 4 \cos^2(k_Z) \right], \quad (\text{A.42a})$$

$$f_Z(k_A) = (\epsilon - \epsilon_0)^2 - t_0^2 \left[ 1 + 4 \cos(k_A) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi n}{N}\right) \right]. \quad (\text{A.42b})$$

Para resolver esta integral, vamos utilizar o teorema dos resíduos. Para  $D \geq 0$ , fechamos um circuito no semi-plano complexo superior (onde  $e^{ikD} \rightarrow 0$  para  $\text{Im}(k) \rightarrow +\infty$ ), como mostra a Fig. 33. Desta forma,

$$I(D) + I_{\uparrow} + I_{\leftarrow} + I_{\downarrow} = \frac{2\pi i}{2\pi N} \sum_i \text{Res} \left[ \frac{e^{ikD}}{f(k)}, k^i \right]. \quad (\text{A.43})$$

Como a função a ser integrada tem período  $2\pi$ , o integrando em  $k = -\pi + i\text{Im}(k)$  é igual ao integrando em  $k = \pi + i\text{Im}(k)$ . Como os caminhos são invertidos,  $I_{\uparrow} = -I_{\downarrow}$  e estas integrais se cancelam. A integral  $I_{\leftarrow}$  é nula quando consideramos o contorno no infinito, pois a exponencial tende a 0 rapidamente. Portanto, obtemos que

$$\begin{aligned} I(D) &= \frac{2\pi i}{2\pi N} \sum_i \text{Res} \left[ \frac{e^{ikD}}{f(k)}, k^i \right] \\ &= \frac{i}{N} \sum_i \frac{e^{ik^i D}}{\left. \frac{df(k)}{dk} \right|_{k^i}}. \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

Para  $D < 0$ , o circuito de integração é fechado no semi-plano complexo inferior (onde  $e^{-ik|D|} \rightarrow 0$  para  $\text{Im}(k) \rightarrow -\infty$ ), como mostrado na Fig. 34. Como o circuito é fechado no sentido horário, há um sinal negativo no cálculo do resíduo. Além disso, devido à função  $f(k)$  ser par, ela possui polos em  $k^i$  e em  $k^i = -k^i$  e sua derivada  $f'(k)$  é ímpar, i.e.,

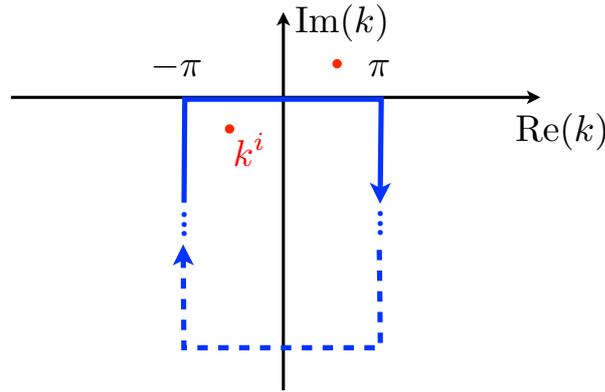


Figura 34: Circuito no plano complexo para resolver a integral dada pela Eq. A.41, com  $D \geq 0$ .

$f'(-k) = -f'(k)$ . Desta forma,

$$\begin{aligned} I(-|D|) &= -\frac{i}{N} \sum_i \frac{e^{-ik^i|D|}}{\left. \frac{df(k)}{dk} \right|_{k^i}} \\ &= \frac{i}{N} \sum_i \frac{e^{ik^i|D|}}{\left. \frac{df(k)}{dk} \right|_{k^i}} = I(|D|). \end{aligned} \quad (\text{A.45})$$

Portanto, a integral  $I(D)$  é simétrica sobre a troca  $D \rightarrow -D$ , e podemos considerar sempre  $D$  positivo. A parte imaginária da energia  $\eta$ , mostrada explicitamente na Eq. A.15, assegura que os polos  $k_i$  serão deslocados do eixo imaginário (e  $k^i = -k^i$  em sentido oposto). As equações que definem os zeros das funções  $f(k)$  dadas pelas Eqs. A.42 são, respectivamente,

$$f_A(k_Z) = 0 \rightarrow \cos(k_Z) = -\frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(\epsilon - \epsilon_0)^2}{t_0^2} - \sin^2\left(\frac{\pi n}{N}\right)}, \quad \text{e} \quad (\text{A.46a})$$

$$f_Z(k_A) = 0 \rightarrow \cos(k_A) = \frac{1}{4 \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right)} \left[ \frac{(\epsilon - \epsilon_0)^2}{t_0^2} - 4 \cos^2\left(\frac{\pi n}{N}\right) - 1 \right]. \quad (\text{A.46b})$$

A segunda expressão não é válida para  $\frac{n}{N} = \frac{1}{2}$ , que ocorre para nanotubos zigzag com  $N$  par. Neste caso, a função  $f_Z(k_A)$  perde a dependência em  $k_A$  e apenas possui polos nas energias que satisfazem  $(\epsilon - \epsilon_0)^2 - t_0^2 = 0$ . Para um nanotubo armchair, há dois polos que precisam ser considerados, como mostra a Eq. A.46a.

Cada solução da Eq. A.46 é da forma  $\cos[k_n(\epsilon)] = w(n, \epsilon)$ . Para cada  $n$  e  $\epsilon$  fixos, a equação  $k_n(\epsilon) = \cos^{-1}[w(n, \epsilon)]$  admite uma solução com parte real entre 0 e  $\pi$  e outra entre  $-\pi$  e 0. Um dos polos possui parte imaginária positiva, que contribuirá à  $I(|D|)$ , e outro possui parte imaginária negativa, contribuindo para  $I(-|D|)$ .

Para resolver as integrais, precisaremos das derivadas das funções  $f(k)$  dadas pela Eq. A.42.

$$f'_A(k_Z) = 4t_0^2 \left[ \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) + 2 \cos(k_Z) \right] \text{sen}(k_Z) , \quad (\text{A.47a})$$

$$f'_Z(k_A) = 4t_0^2 \text{sen}(k_A) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) . \quad (\text{A.47b})$$

Utilizando agora a Eq. A.44 para resolver as integrais que envolvem  $k$  das Eqs. A.39 e A.40, podemos escrever

$$\begin{aligned} I_n^A(D) &= \frac{1}{2\pi N} \int_{-\pi}^{\pi} dk_Z \frac{e^{ik_Z D}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - t_0^2 \left[ 1 + 4 \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) \cos(k_Z) + 4 \cos^2(k_Z) \right]} \\ &= \frac{i}{4Nt_0^2} \sum_{i=1}^2 \frac{e^{ik_n^i(\epsilon)|D|}}{\left[ \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) + 2 \cos k_n^i(\epsilon) \right] \text{sen} k_n^i(\epsilon)} , \end{aligned} \quad (\text{A.48a})$$

e

$$\begin{aligned} I_n^Z(D) &= \frac{1}{2\pi N} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A \frac{e^{ik_A D}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - t_0^2 \left[ 1 + 4 \cos(k_A) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi n}{N}\right) \right]} \\ &= \frac{i}{4Nt_0^2} \frac{e^{ik_n(\epsilon)|D|}}{\text{sen} k_n(\epsilon) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right)} . \end{aligned} \quad (\text{A.48b})$$

Agora que as integrais já foram calculadas, basta escrever a forma final dos propagadores para cada tipo de nanotubo.

### A.2.1 Nanotubos Armchair

Levando em conta a Eq. A.48a, podemos reescrever a Eq. A.39 da forma

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s \rangle &= (\epsilon - \epsilon_0) \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j)} I_n^A(\Delta l - \Delta j) \\ &= \frac{i(\epsilon - \epsilon_0)}{4Nt_0^2} \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j)} \sum_{i=1}^2 \frac{e^{ik_n^i(\epsilon)|\Delta l - \Delta j|}}{\left[ \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) + 2 \cos k_n^i(\epsilon) \right] \text{sen} k_n^i(\epsilon)} , \end{aligned} \quad (\text{A.49})$$

para  $s = s'$ , e

$$\begin{aligned}
\langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= t_0 \sum_{n=1}^N e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l + \Delta j)} \left\{ I_n^A(\Delta l - \Delta j) \right. \\
&\quad \left. + e^{i \frac{\pi n}{N} \Delta s} [I_n^A(\Delta l - \Delta j + \Delta s) + I_n^A(\Delta l - \Delta j - \Delta s)] \right\} \\
&= \frac{i}{4Nt_0} \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^2 \left\{ e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l + \Delta j)} \frac{e^{ik_n^i(\epsilon) |\Delta l - \Delta j|}}{[\cos(\frac{\pi n}{N}) + 2 \cos k_n^i(\epsilon)] \text{sen } k_n^i(\epsilon)} \right. \\
&\quad \left. + e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l + \Delta j + \Delta s)} \frac{[e^{ik_n^i(\epsilon) |\Delta l - \Delta j + \Delta s|} + e^{ik_n^i(\epsilon) |\Delta l - \Delta j - \Delta s|}]}{[\cos(\frac{\pi n}{N}) + 2 \cos k_n^i(\epsilon)] \text{sen } k_n^i(\epsilon)} \right\}, \tag{A.50}
\end{aligned}$$

para  $s \neq s'$ .

## A.2.2 Nanotubos Zigzag

Da mesma forma, a função de Green para o nanotubo zigzag, dada pela Eq. A.40, pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
\langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s \rangle &= (\epsilon - \epsilon_0) \sum_{n=1}^N e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l - \Delta j)} I_n^Z(\Delta l + \Delta j) \\
&= \frac{i(\epsilon - \epsilon_0)}{4Nt_0^2} \sum_{n=1}^N e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l - \Delta j)} \frac{e^{ik_n(\epsilon) |\Delta l + \Delta j|}}{\text{sen } k_n(\epsilon) \cos(\frac{\pi n}{N})}, \tag{A.51}
\end{aligned}$$

para  $s = s'$ . No caso em que  $s \neq s'$ , teremos

$$\begin{aligned}
\langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= t_0 \sum_{n=1}^N e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l - \Delta j)} \left[ I_n^Z(\Delta l + \Delta j) + 2I_n^Z(\Delta l + \Delta j + \Delta s) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) \right] \\
&= \frac{i}{4Nt_0} \sum_{n=1}^N \frac{e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l - \Delta j)}}{\text{sen } k_n(\epsilon) \cos(\frac{\pi n}{N})} \left[ e^{ik_n(\epsilon) |\Delta l + \Delta j|} + 2e^{ik_n(\epsilon) |\Delta l + \Delta j + \Delta s|} \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) \right]. \tag{A.52}
\end{aligned}$$

Nos nanotubos zigzag com  $N$  par, há um cuidado a mais que deve ser tomado. Quando  $n = \frac{N}{2}$ , o denominador da integral A.48b perde a dependência em  $k_A$ . Isso corresponde à duas bandas sem dispersão em  $\epsilon = \epsilon_0 \pm t_0$ . A integral que precisa ser resolvida neste caso fica da forma

$$I_{N/2}^Z(D) = \frac{1}{2\pi N} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A \frac{e^{ik_A D}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - t_0^2} = \frac{1}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - t_0^2} \begin{cases} \text{sen}(\pi D) / (\pi N D) & , D \neq 0 \\ 1/N & , D = 0 \end{cases}. \tag{A.53}$$

Como  $D$  é um número inteiro,  $\text{sen}(\pi D) = 0$ , e esta integral apenas contribui para a função

de Green quando  $D = 0$ . Assim, a contribuição para a função de Green obtida nas Eqs. A.51 e A.52 não é nula apenas nos casos em que  $\Delta l = -\Delta j$ , ou  $l + j = l' + j'$ , que equivale a sítios localizados em um mesmo anel do tubo. Esta contribuição é dada por

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle_{n=\frac{N}{2}} &= e^{i\frac{\pi}{2}(2\Delta l)} I_{N/2}^Z(0) \\ &= \frac{1}{N} \frac{e^{i\pi\Delta l}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - t_0^2} \begin{cases} \epsilon - \epsilon_0 & , s = s' \\ t_0 & , s \neq s' \end{cases} . \end{aligned} \quad (\text{A.54})$$

### A.3 Nanotubos semi-infinitos

As funções de Green analíticas de nanotubos infinitos, calculadas nas seções anteriores, são de grande utilidade para a descrição de muitos sistemas físicos. O tratamento que utilizamos para calculá-las é facilmente estendido para o cálculo das funções de Green de nanotubos semi-infinitos. Elas são de extrema importância para o cálculo de transporte nos quais os contatos são nanotubos, ou ainda em heterojunções, onde um sistema composto é formado pela conexão de nanotubos de diferentes diâmetros ou quiralidades.

Como o grafeno semi-infinito em uma das direções não tem simetria de translação, não podemos utilizar o teorema de Bloch como fizemos para obter a Eq. A.13. Entretanto, podemos utilizar uma combinação linear destes autoestados de maneira conveniente, obtendo estados com densidade eletrônica nula ao longo de uma linha do grafeno. Desta forma, simulamos duas folhas de grafeno semi-infinitas, e basta enrolá-las para obter as funções de Green de nanotubos semi-infinitos.

Escrevendo os autoestados da Eq. A.13 em termos dos vetores de onda circunferencial e longitudinal definidos nas seções anteriores, teremos que

$$\begin{aligned} \left| \frac{k_A}{2}, \frac{k_Z}{2}, \pm \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i(k_1 l + k_2 j)} (|\mathbf{r}, 1\rangle \pm e^{i\phi} |\mathbf{r}, 2\rangle) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\left[\frac{k_A}{2}(l+j) + \frac{k_Z}{2}(l-j)\right]} (|\mathbf{r}, 1\rangle \pm e^{i\phi} |\mathbf{r}, 2\rangle) \end{aligned} \quad (\text{A.55})$$

são autoestados de  $\hat{H}$  com autovalores  $\epsilon_{\pm}(k_A, k_Z)$ . A fase  $e^{i\phi}$ , dada pela Eq. A.11, pode ser reescrita utilizando a definição de  $t(\mathbf{k})$  da Eq. A.4 e seu módulo, calculado em A.35,

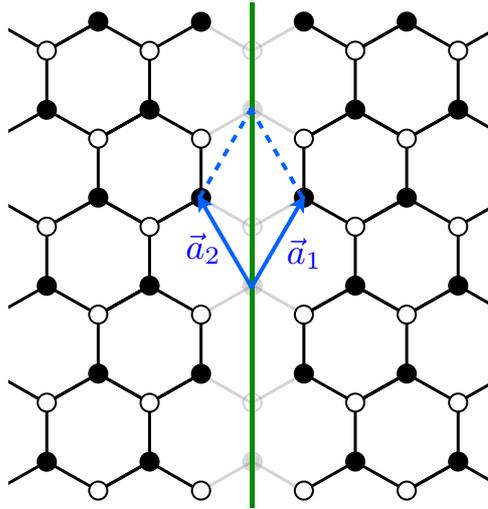


Figura 35: Nanotubos armchair semi-infinitos definidos pela função de onda da Eq. A.59.

como

$$\begin{aligned}
 e^{i\phi\left(\frac{k_A}{2}, \frac{k_Z}{2}\right)} &= \frac{t_0 \left[ 1 + e^{i\left(\frac{k_A+k_Z}{2}\right)} + e^{i\left(\frac{k_A-k_Z}{2}\right)} \right]}{\left| t\left(\frac{k_A}{2}, \frac{k_Z}{2}\right) \right|} \\
 &= \frac{1 + 2e^{i\frac{k_A}{2}} \cos \frac{k_Z}{2}}{\sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{k_A}{2}\right) \cos\left(\frac{k_Z}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{k_Z}{2}\right)}}.
 \end{aligned} \tag{A.56}$$

É fácil notar que

$$\left| \frac{k_A}{2}, -\frac{k_Z}{2}, \pm \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\left[\frac{k_A}{2}(l+j) - \frac{k_Z}{2}(l-j)\right]} (|\mathbf{r}, 1\rangle \pm e^{i\phi} |\mathbf{r}, 2\rangle), \tag{A.57}$$

e

$$\left| -\frac{k_A}{2}, \frac{k_Z}{2}, \pm \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\left[-\frac{k_A}{2}(l+j) + \frac{k_Z}{2}(l-j)\right]} (|\mathbf{r}, 1\rangle \pm e^{-i\phi} |\mathbf{r}, 2\rangle) \tag{A.58}$$

também são autoestados com mesmos autovalores. Portanto, uma combinação linear destes estados também será autovetor com mesma energia.

### A.3.1 Nanotubos armchair semi-infinitos

Nos nanotubos armchair,  $k_A = \frac{2\pi n}{N}$  e queremos construir um conjunto de autoestados ortonormais de tal forma que a densidade de probabilidade seja nula na linha  $l = j$  para  $s = 1$  e  $2$ .

Não é difícil de prever que o estado desejado é da forma

$$\begin{aligned}
\left| \Psi_n \left( \frac{k_Z}{2} \right), \pm \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left| \frac{\pi n}{N}, \frac{k_Z}{2}, \pm \right\rangle - \left| \frac{\pi n}{N}, -\frac{k_Z}{2}, \pm \right\rangle \right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{4N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\frac{\pi n}{N}(l+j)} \left[ e^{i\frac{k_Z}{2}(l-j)} - e^{-i\frac{k_Z}{2}(l-j)} \right] (|\mathbf{r}, 1\rangle \pm e^{i\phi} |\mathbf{r}, 2\rangle) \\
&= \frac{i}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\frac{\pi n}{N}(l+j)} \operatorname{sen} \left[ \frac{k_Z}{2}(l-j) \right] (|\mathbf{r}, 1\rangle \pm e^{i\phi} |\mathbf{r}, 2\rangle) .
\end{aligned} \tag{A.59}$$

A projeção destes estados nos sítios da rede são

$$\left\langle \mathbf{r}, 1 \left| \Psi_n \left( \frac{k_Z}{2} \right), \pm \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{N_c}} e^{i\frac{\pi n}{N}(l+j)} \operatorname{sen} \left[ \frac{k_Z}{2}(l-j) \right] , \tag{A.60a}$$

$$\left\langle \mathbf{r}, 2 \left| \Psi_n \left( \frac{k_Z}{2} \right), \pm \right\rangle = \pm \frac{i}{\sqrt{N_c}} e^{i\frac{\pi n}{N}(l+j)} e^{i\phi} \operatorname{sen} \left[ \frac{k_Z}{2}(l-j) \right] . \tag{A.60b}$$

Logo, estes estados possuem densidade de estados eletrônica  $|\langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(\frac{k_Z}{2}), \pm \rangle|^2$  nula na linha  $j = l$ , que define a superfície do nanotubo armchair.

A função de Green é calculada por uma expressão equivalente à Eq. A.17, apenas trocando  $|\mathbf{k}, \pm\rangle$  por  $|\Psi(\mathbf{k}), \pm\rangle$ , com  $\mathbf{k} = (\frac{k_A}{2}, \frac{k_Z}{2})$ :

$$\langle \mathbf{r}, s | \hat{G} | \mathbf{r}', s' \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{\langle \mathbf{r}, s | \Psi(\mathbf{k}), + \rangle \langle \Psi(\mathbf{k}), + | \mathbf{r}', s' \rangle}{(\epsilon - \epsilon_0) - |t(\mathbf{k})|} + \frac{\langle \mathbf{r}, s | \Psi(\mathbf{k}), - \rangle \langle \Psi(\mathbf{k}), - | \mathbf{r}', s' \rangle}{(\epsilon - \epsilon_0) + |t(\mathbf{k})|} \right\} . \tag{A.61}$$

As projeções que precisamos calcular para a função de Green do nanotubo armchair semi-infinito serão, para  $s = s'$ ,

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(k_Z), \pm \rangle \langle \Psi_n(k_Z), \pm | \mathbf{r}', s \rangle &= \frac{1}{4N_c} e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j)} \left[ e^{ik_Z(\Delta l - \Delta j)} - e^{ik_Z(\Sigma l - \Sigma j)} \right. \\
&\quad \left. + e^{-ik_Z(\Delta l - \Delta j)} - e^{-ik_Z(\Sigma l - \Sigma j)} \right] ,
\end{aligned} \tag{A.62}$$

onde  $\Sigma l = l + l'$  e  $\Sigma j = j + j'$ ; e para  $s \neq s'$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(k_Z), \pm \rangle \langle \Psi_n(k_Z), \pm | \mathbf{r}', s' \rangle &= \pm \frac{1}{4N_c} e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j)} e^{i\phi \Delta s} \left[ e^{ik_Z(\Delta l - \Delta j)} - e^{ik_Z(\Sigma l - \Sigma j)} \right. \\
&\quad \left. + e^{-ik_Z(\Delta l - \Delta j)} - e^{-ik_Z(\Sigma l - \Sigma j)} \right] .
\end{aligned} \tag{A.63}$$

Note que, para  $s = s'$ ,

$$\langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(k_Z), + \rangle \langle \Psi_n(k_Z), + | \mathbf{r}', s \rangle = \langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(k_Z), - \rangle \langle \Psi_n(k_Z), - | \mathbf{r}', s \rangle , \tag{A.64}$$

enquanto que para  $s \neq s'$ ,

$$\langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(k_Z), + \rangle \langle \Psi_n(k_Z), + | \mathbf{r}', s \rangle = - \langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(k_Z), - \rangle \langle \Psi_n(k_Z), - | \mathbf{r}', s \rangle . \quad (\text{A.65})$$

Logo, podemos reescrever a Eq. A.61 da forma

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r}, s | \hat{G} | \mathbf{r}', s' \rangle &= \frac{N_c}{2\pi N} \sum_{n=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} dk_Z \frac{\langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(k_Z), + \rangle \langle \Psi_n(k_Z), + | \mathbf{r}', s' \rangle}{f_A(k_Z)} \\ &\times \begin{cases} 2(\epsilon - \epsilon_0) & , s = s' \\ 2 \left| t \left( \frac{\pi n}{N}, k_Z \right) \right| & , s \neq s' \end{cases} , \end{aligned} \quad (\text{A.66})$$

onde já fizemos a mudança  $\frac{k_Z}{2} \rightarrow k_Z$ . O denominador é dado pela função  $f_A(k_Z)$ , mostrada na Eq. A.42a, pois as autoenergias são as mesmas do nanotubo infinito. Sendo assim, as integrais que temos que resolver são da forma explicitada na Eq. A.48a. Particularmente, para o caso em que  $s = s'$ , teremos

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s \rangle &= \frac{\epsilon - \epsilon_0}{4\pi N} \sum_{n=1}^N e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l + \Delta j)} \int_{-\pi}^{\pi} dk_Z \frac{e^{ik_Z (\Delta l - \Delta j)} - e^{ik_Z (\Sigma l - \Sigma j)} + (c.c.)}{f_A(k_Z)} \\ &= (\epsilon - \epsilon_0) \sum_{n=1}^N e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l + \Delta j)} [I_n^A(\Delta l - \Delta j) - I_n^A(\Sigma l - \Sigma j)] . \end{aligned} \quad (\text{A.67})$$

As duas integrais que aparecem devido aos termos conjugados no numerador são iguais aos dois anteriores, já que  $I_n^A(|D|) = I_n^A(-|D|)$ . Elas só acrescentam um fator 2 multiplicando a função de Green. Note que, se chamarmos a função de Green do nanotubo armchair infinito, dado pela Eq. A.49, de uma função da forma  $G_A^b(\Delta l - \Delta j)$ , a função de Green do nanotubo semi-infinito,  $G_A^s$ , será

$$G_A^s = G_A^b(\Delta l - \Delta j) - G_A^b(\Sigma l - \Sigma j) . \quad (\text{A.68})$$

Desta forma, a função de Green para  $s = s'$  pode ser escrita como

$$\langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s \rangle = \frac{i(\epsilon - \epsilon_0)}{4Nt_0^2} \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^2 e^{i \frac{\pi n}{N} (\Delta l + \Delta j)} \left[ \frac{e^{ik_n^i(\epsilon)|\Delta l - \Delta j|} - e^{ik_n^i(\epsilon)|\Sigma l - \Sigma j|}}{[\cos(\frac{\pi n}{N}) + 2 \cos k_n^i(\epsilon)] \text{sen } k_n^i(\epsilon)} \right] . \quad (\text{A.69})$$

Para o caso  $s \neq s'$ , utilizando a Eq. A.11 para lembrar que

$$\left| t \left( \frac{\pi n}{N}, k_Z \right) \right| e^{i\phi \Delta s} = \begin{cases} t \left( \frac{\pi n}{N}, k_Z \right) & , \Delta s = 1 \\ t^* \left( \frac{\pi n}{N}, k_Z \right) & , \Delta s = -1 \end{cases} = t_0 [1 + e^{i \frac{\pi n}{N} \Delta s} (e^{ik_Z \Delta s} + e^{-ik_Z \Delta s})] , \quad (\text{A.70})$$

a Eq. A.66 se torna

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= \frac{1}{4\pi N} \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j)} \int_{-\pi}^{\pi} dk_Z \frac{e^{ik_Z(\Delta l - \Delta j)} - e^{ik_Z(\Sigma l - \Sigma j)} + (c.c.)}{f_A(k_Z)} \\ &\quad \times t_0 [1 + e^{i\frac{\pi n}{N}\Delta s} (e^{k_Z\Delta s} + e^{-k_Z\Delta s})] . \end{aligned} \quad (\text{A.71})$$

Novamente, podemos ver que os termos conjugados dão origem aos mesmos termos já existentes. Teremos, portanto,

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= t_0 \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j)} \{ I_n^A(\Delta l - \Delta j) - I_n^A(\Sigma l - \Sigma j) \\ &\quad + e^{i\frac{\pi n}{N}\Delta s} [I_n^A(\Delta l - \Delta j + \Delta s) + I_n^A(\Delta l - \Delta j - \Delta s) \\ &\quad - I_n^A(\Sigma l - \Sigma j + \Delta s) - I_n^A(\Sigma l - \Sigma j - \Delta s)] \} . \end{aligned} \quad (\text{A.72})$$

Comparando com a Eq. A.50, podemos notar que a Eq. A.68 continua válida. Portanto, a função de Green entre sítios de diferentes subredes de um nanotubo armchair semi-infinito será

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= \frac{i}{4Nt_0} \sum_{n=1}^N \sum_{i=1}^2 \left\{ e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j)} \frac{e^{ik_n^i(\epsilon)|\Delta l - \Delta j|} - e^{ik_n^i(\epsilon)|\Sigma l - \Sigma j|}}{[\cos(\frac{\pi n}{N}) + 2\cos k_n^i(\epsilon)] \text{sen } k_n^i(\epsilon)} \right. \\ &\quad + e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l + \Delta j + \Delta s)} \left[ \frac{e^{ik_n^i(\epsilon)|\Delta l - \Delta j + \Delta s|} + e^{ik_n^i(\epsilon)|\Delta l - \Delta j - \Delta s|}}{[\cos(\frac{\pi n}{N}) + 2\cos k_n^i(\epsilon)] \text{sen } k_n^i(\epsilon)} \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{e^{ik_n^i(\epsilon)|\Sigma l - \Sigma j + \Delta s|} + e^{ik_n^i(\epsilon)|\Sigma l - \Sigma j - \Delta s|}}{[\cos(\frac{\pi n}{N}) + 2\cos k_n^i(\epsilon)] \text{sen } k_n^i(\epsilon)} \right] \right\} , \end{aligned} \quad (\text{A.73})$$

### A.3.2 Nanotubos zigzag semi-infinitos

Analogamente aos passos que fizemos antes, vamos formar uma superposição entre os estados dados pelas Eq. A.55 e A.58, de forma a obter um nanotubo zigzag semi-infinito. Neste caso  $k_Z = \frac{2\pi n}{N}$ , e queremos uma base ortonormal de estados com densidade nula em  $j = -l$  e  $s = 1$ .

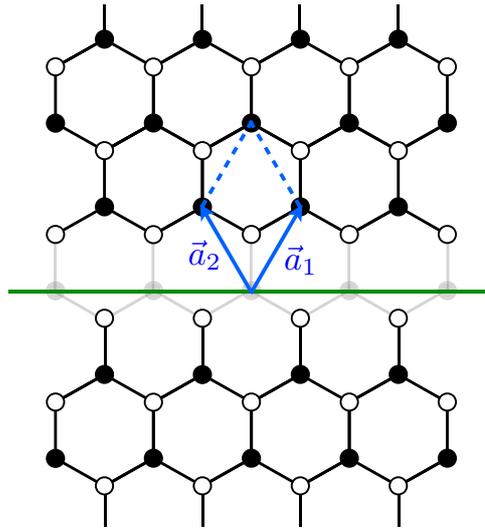


Figura 36: Superfícies dos nanotubos zigzag semi-infinitos definidas pela Eq. A.74.

A combinação linear que possui esta propriedade é

$$\begin{aligned}
 \left| \Psi_n \left( \frac{k_A}{2} \right), \pm \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left| \frac{k_A}{2}, \frac{\pi n}{N}, \pm \right\rangle - \left| -\frac{k_A}{2}, \frac{\pi n}{N}, \pm \right\rangle \right\} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{4N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\frac{\pi n}{N}(l-j)} \left\{ \left[ e^{i\frac{k_A}{2}(l+j)} - e^{-i\frac{k_A}{2}(l+j)} \right] |\mathbf{r}, 1\rangle \right. \\
 &\quad \left. \pm \left[ e^{i\frac{k_A}{2}(l+j)} e^{i\phi} - e^{-i\frac{k_A}{2}(l+j)} e^{-i\phi} \right] |\mathbf{r}, 2\rangle \right\} \\
 &= \frac{i}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{r}} e^{i\frac{\pi n}{N}(l-j)} \left\{ \text{sen} \left[ \frac{k_A}{2}(l+j) \right] |\mathbf{r}, 1\rangle \pm \text{sen} \left[ \frac{k_A}{2}(l+j) + \phi \right] |\mathbf{r}, 2\rangle \right\}.
 \end{aligned} \tag{A.74}$$

As projeções destes estados nos sítios de cada subrede são

$$\left\langle \mathbf{r}, 1 \left| \Psi_n \left( \frac{k_A}{2} \right), \pm \right\rangle = \frac{i}{\sqrt{N_c}} e^{i\frac{\pi n}{N}(l-j)} \text{sen} \left[ \frac{k_A}{2}(l+j) \right], \tag{A.75a}$$

$$\left\langle \mathbf{r}, 2 \left| \Psi_n \left( \frac{k_A}{2} \right), \pm \right\rangle = \pm \frac{i}{\sqrt{N_c}} e^{i\frac{\pi n}{N}(l-j)} \text{sen} \left[ \frac{k_A}{2}(l+j) + \phi \right]. \tag{A.75b}$$

Logo, a densidade eletrônica  $|\langle \mathbf{r}, 1 | \Psi_n \left( \frac{k_A}{2} \right), \pm \rangle|^2$  é nula na linha  $j = -l$ . Como pode ser visto na Fig. 36, as superfícies dos nanotubos zigzag definidas desta forma não são simétricas. Na parte inferior da figura, a superfície possui sítios com apenas 1 ligação, chamados de *dangling bonds*. Vamos utilizar apenas a superfície da parte superior da figura, onde  $l + j \geq 0$ .

A função de Green neste caso também é calculada pela Eq. A.61, porém as projeções

dos autoestados que precisaremos serão

$$\langle \mathbf{r}, 1 | \Psi_n(k_A), \pm \rangle \langle \Psi_n(k_A), \pm | \mathbf{r}', 1 \rangle = \frac{1}{4N_c} e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} \left[ e^{ik_A(\Delta l + \Delta j)} - e^{ik_A(\Sigma l + \Sigma j)} \right. \\ \left. + e^{-ik_A(\Delta l + \Delta j)} - e^{-ik_A(\Sigma l + \Sigma j)} \right], \quad (\text{A.76})$$

$$\langle \mathbf{r}, 2 | \Psi_n(k_A), \pm \rangle \langle \Psi_n(k_A), \pm | \mathbf{r}', 2 \rangle = \frac{1}{4N_c} e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} \left[ e^{ik_A(\Delta l + \Delta j)} - e^{ik_A(\Sigma l + \Sigma j)} e^{2i\phi} \right. \\ \left. + e^{-ik_A(\Delta l + \Delta j)} - e^{-ik_A(\Sigma l + \Sigma j)} e^{-2i\phi} \right], \text{ e} \quad (\text{A.77})$$

$$\langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(k_A), \pm \rangle \langle \Psi_n(k_A), \pm | \mathbf{r}', s' \rangle = \pm \frac{1}{4N_c} e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} \left[ e^{ik_A(\Delta l + \Delta j)} e^{i\phi \Delta s} - e^{ik_A(\Sigma l + \Sigma j)} e^{i\phi} \right. \\ \left. + e^{-ik_A(\Delta l + \Delta j)} e^{-i\phi \Delta s} - e^{-ik_A(\Sigma l + \Sigma j)} e^{-i\phi} \right]. \quad (\text{A.78})$$

Como pode ser visto pelas Eqs. A.76 e A.77, além da simetria entre as superfícies ter sido quebrada, a simetria entre os propagadores locais  $s = s' = 1$  e  $s = s' = 2$  também foi quebrada. Como as relações mostradas nas Eqs. A.64 e A.65 continuam válidas, temos que

$$\langle \mathbf{r}, s | \hat{G} | \mathbf{r}', s' \rangle = \frac{N_c}{2\pi N} \sum_{n=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} dk_A \frac{\langle \mathbf{r}, s | \Psi_n(k_A), + \rangle \langle \Psi_n(k_A), + | \mathbf{r}', s' \rangle}{f_Z(k_A)} \\ \times \begin{cases} 2(\epsilon - \epsilon_0) & , s = s' \\ 2 \left| t(k_A, \frac{\pi n}{N}) \right| & , s \neq s' \end{cases}. \quad (\text{A.79})$$

Substituindo as projeções para  $s = s' = 1$ , obtemos

$$\langle l, j, 1 | \hat{G} | l', j', 1 \rangle = \frac{(\epsilon - \epsilon_0)}{4\pi N} \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A \frac{e^{ik_A(\Delta l + \Delta j)} - e^{ik_A(\Sigma l + \Sigma j)} + (c.c.)}{f_Z(k_A)} \\ = (\epsilon - \epsilon_0) \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} [I_n^Z(\Delta l + \Delta j) - I_n^Z(\Sigma l + \Sigma j)]. \quad (\text{A.80})$$

Utilizando a Eq. A.48b e comparando com a Eq. A.51, ficamos com

$$\langle l, j, 1 | \hat{G} | l', j', 1 \rangle = \frac{i(\epsilon - \epsilon_0)}{4Nt_0^2} \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} \left[ \frac{e^{ik_n(\epsilon)|\Delta l + \Delta j|} - e^{ik_n(\epsilon)|\Sigma l + \Sigma j|}}{\text{sen } k_n(\epsilon) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right)} \right], \quad (\text{A.81})$$

Para  $s = s' = 2$ , o propagador será da forma

$$\langle l, j, 2 | \hat{G} | l', j', 2 \rangle = \frac{(\epsilon - \epsilon_0)}{4\pi N} \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A \frac{e^{ik_A(\Delta l + \Delta j)} - e^{ik_A(\Sigma l + \Sigma j)} e^{2i\phi} + (c.c.)}{f_Z(k_A)}. \quad (\text{A.82})$$

Como pode ser visto, há uma mudança na integral devido ao fator

$$\begin{aligned} e^{2i\phi} &= \left[ \frac{t(\mathbf{k})}{|t(\mathbf{k})|} \right]^2 = \frac{t(\mathbf{k})}{t^*(\mathbf{k})} \\ &= \frac{1 + 2e^{i\frac{k_A}{2}} \cos \frac{k_Z}{2}}{1 + 2e^{-i\frac{k_A}{2}} \cos \frac{k_Z}{2}} \end{aligned} \quad (\text{A.83})$$

Portanto, a integral que precisaremos resolver será

$$\begin{aligned} I_n^{I'Z}(D) &= \frac{1}{2\pi N} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A \frac{e^{ik_A D}}{(\epsilon - \epsilon_0)^2 - t_0^2 \left[ 1 + 4 \cos(k_A) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\pi n}{N}\right) \right]} \\ &\quad \times \frac{1 + 2e^{ik_A} \cos \frac{\pi n}{N}}{1 + 2e^{-ik_A} \cos \frac{\pi n}{N}}. \end{aligned} \quad (\text{A.84})$$

O novo fator multiplicativo no denominador se anula para certos valores de  $k_A$  (dependendo de  $n$ ), mas isto não necessariamente dará origem à novos polos do integrando, já que pra estes mesmos valores o numerador também se anula. Isto pode ser mais facilmente visto escrevendo este fator como

$$e^{2i\phi} = \frac{1 + 2 \cos k_A \cos \frac{\pi n}{N} + 2i \operatorname{sen} k_A \cos \frac{\pi n}{N}}{1 + 2 \cos k_A \cos \frac{\pi n}{N} - 2i \operatorname{sen} k_A \cos \frac{\pi n}{N}}. \quad (\text{A.85})$$

Para o denominador se anular, devemos ter  $\cos \frac{\pi n}{N} \neq 0$  e, portanto,  $\operatorname{sen} k_A = 0$ . Isto mostra que o numerador se anula para os mesmos valores de  $k_A$  que o denominador. Chamando este valor de  $k_A^0$ , podemos expandir as funções analíticas  $t(k_A)$  e  $t^*(k_A)$  em série de Taylor da forma

$$\frac{t(k_A)}{t^*(k_A)} = \frac{\cancel{t^*(k_A^0)} + [t(k_A)]'_{k_A^0} (k_A - k_A^0) + \dots}{\cancel{t^*(k_A^0)} + [t^*(k_A)]'_{k_A^0} (k_A - k_A^0) + \dots}. \quad (\text{A.86})$$

Como  $[t^*(k_A)]' = -[t(k_A)]'$ ,

$$\lim_{k_A \rightarrow k_A^0} \frac{t(k_A)}{t^*(k_A)} = -1, \quad (\text{A.87})$$

e, portanto, não haverá novos polos na integral. Além disso, como  $e^{2i\phi}$  é uma função de período  $2\pi$  e é limitada, as considerações que fizemos antes para a integração no eixo complexo continuam valendo: as integrais  $I_{\uparrow} = -I_{\downarrow}$  e  $I_{\leftarrow}$  se anulam pois a exponencial no numerador tende a zero. Logo, este termo aparecerá apenas como um fator multiplicativo,

calculado no polo do integrando e a integral A.84 será dada por

$$I_n^Z(D) = \frac{i}{4Nt_0^2} \frac{e^{ik_n(\epsilon)|D|} t(k_n(\epsilon))}{\text{sen } k_n(\epsilon) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right) t^*(k_n(\epsilon))}. \quad (\text{A.88})$$

A função de Green dada pela Eq. A.82 se torna então

$$\begin{aligned} \langle l, j, 2 | \hat{G} | l', j', 2 \rangle &= (\epsilon - \epsilon_0) \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} [I_n^Z(\Delta l + \Delta j) - I_n^Z(\Sigma l + \Sigma j)] \\ &= \frac{i(\epsilon - \epsilon_0)}{4Nt_0^2} \sum_{n=1}^N \frac{e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)}}{\text{sen } k_n(\epsilon) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right)} \left[ e^{ik_n(\epsilon)|\Delta l + \Delta j|} - e^{ik_n(\epsilon)|\Sigma l + \Sigma j|} \frac{t(k_n(\epsilon))}{t^*(k_n(\epsilon))} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.89})$$

Utilizando uma relação equivalente à Eq. A.70 agora para o nanotubo zigzag, o propagador para o caso  $s \neq s'$  pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= \frac{t_0}{2\pi N} \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A \left\{ \frac{e^{ik_A(\Delta l + \Delta j)} [1 + 2e^{ik_A \Delta s} \cos\frac{\pi n}{N}]}{f_Z(k_A)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{e^{ik_A(\Sigma l + \Sigma j)} [1 + 2e^{ik_A} \cos\frac{\pi n}{N}]}{f_Z(k_A)} \right\} \\ &= t_0 \sum_{n=1}^N e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)} \left[ I_n^Z(\Delta l + \Delta j) + 2I_n^Z(\Delta l + \Delta j + \Delta s) \cos\frac{\pi n}{N} \right. \\ &\quad \left. - I_n^Z(\Sigma l + \Sigma j) - 2I_n^Z(\Sigma l + \Sigma j + 1) \cos\frac{\pi n}{N} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.90})$$

Finalmente, temos que

$$\begin{aligned} \langle l, j, s | \hat{G} | l', j', s' \rangle &= \frac{i}{4Nt_0} \sum_{n=1}^N \frac{e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)}}{\text{sen } k_n(\epsilon) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right)} \left[ e^{ik_n(\epsilon)|\Delta l + \Delta j|} + 2e^{ik_n(\epsilon)|\Delta l + \Delta j + \Delta s|} \cos\frac{\pi n}{N} \right. \\ &\quad \left. - e^{ik_n(\epsilon)|\Sigma l + \Sigma j|} - 2e^{ik_n(\epsilon)|\Sigma l + \Sigma j + 1|} \cos\frac{\pi n}{N} \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.91})$$

Novamente aqui temos que lembrar que para nanotubos zigzag com  $N$  par, o denominador da integral  $I_n^Z(D)$  perde a dependência em  $k_A$  quando  $n = \frac{N}{2}$ . Neste caso, vimos que temos que adicionar a contribuição obtida na Eq. A.54 quando  $D = 0$ . Isto acontecerá quando  $\Delta l + \Delta j = 0$  e  $\Sigma l + \Sigma j \neq 0$ . Como já foi visto, esta condição equivale a dois sítios em um mesmo anel, mas neste caso diferente do anel de superfície. Neste caso, as duas contribuições, devido às integrais  $I_n^Z(\Delta l + \Delta j = 0)$  e  $I_n^Z(\Sigma l + \Sigma j = 0)$ , se cancelam.

Este caso do anel de superfície, porém, apresenta um outro problema quando  $s =$

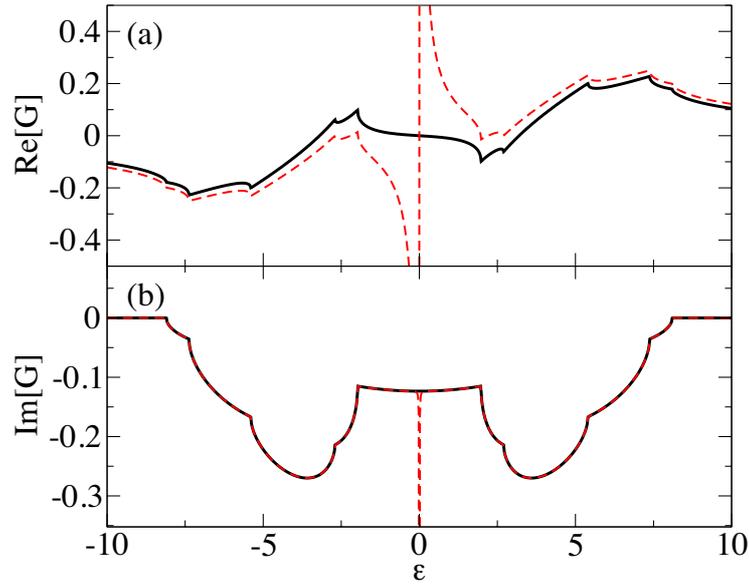


Figura 37: Função de Green local para  $l = j = 0$  e  $s = 2$  (sítio de superfície) calculada pela expressão analítica da Eq. A.89 (linha preta cheia) e pelo método recursivo (linha vermelha tracejada).

$s' = 2$  (que são os sítios de superfície): se  $N$  é par, a função de Green obtida no caso recursivo apresenta um pico em  $\epsilon - \epsilon_0 = 0$ , que a função analítica obtida na Eq. A.89 não apresenta (vide Fig. 37). Este pico sem dispersão sugere que há um estado localizado no nanotubo semi-infinito, e este estado não está sendo levado em conta na função de Green. Para resolver este problema, chamamos a atenção para o fato de que o estado da Eq. A.74 foi construído de forma a possuir densidade eletrônica nula na linha  $j = -l$  e  $s = 1$ . Isto é suficiente para gerar os propagadores corretos na maioria dos casos semi-infinitos. Entretanto, estes estados não formam necessariamente um conjunto completo de autovetores de um hamiltoniano de um nanotubo semi-infinito. Como este é um estado localizado que não aparece no nanotubo infinito, isto nos leva a crer que ele esteja na superfície do tubo. Para verificar isto, vamos primeiro escrever os autoestados do grafeno em cada sítio. Invertendo a Eq. A.13, obtemos

$$|\mathbf{r}, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (|\mathbf{k}, +\rangle + |\mathbf{k}, -\rangle) \quad (\text{A.92a})$$

$$|\mathbf{r}, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\phi} (|\mathbf{k}, +\rangle - |\mathbf{k}, -\rangle) \quad (\text{A.92b})$$

Utilizando a quantização dos nanotubos zigzag,  $k_Z = \frac{2\pi n}{N}$ , e calculando a função local

para sítios em um mesmo anel ( $j = -l$ ), temos que  $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{-i\frac{2\pi n}{N}l}$ . Desta forma,

$$|l, -l, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi N}} \sum_{n=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} dk_A e^{-i\frac{2\pi n}{N}l} \left( \left| k_A, \frac{\pi n}{N}, + \right\rangle + \left| k_A, \frac{\pi n}{N}, - \right\rangle \right), \quad (\text{A.93})$$

$$|l, -l, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi N}} \sum_{n=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} dk_A e^{-i\frac{2\pi n}{N}l} e^{-i\phi} \left( \left| k_A, \frac{\pi n}{N}, + \right\rangle - \left| k_A, \frac{\pi n}{N}, - \right\rangle \right). \quad (\text{A.94})$$

Construindo estados de superfície deslocalizados utilizando o teorema de Bloch, teremos

$$|x_s^m\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{i\frac{2\pi m}{N}l} |l, -l, s\rangle, \quad (\text{A.95})$$

com  $m = 1, 2, \dots, N$  para estados com diferentes modos transversais. Note que, em um nanotubo semi-infinito, os estados  $|x_1^m\rangle$  devem ser nulos, pois  $|l, -l, 1\rangle = 0$ . Podemos então escrever o estado  $|x_2^m\rangle$ , utilizando a Eq. A.94, da forma

$$\begin{aligned} |x_2^m\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi N}} \sum_{l,n=1}^N \int_{-\pi}^{\pi} dk_A e^{i\frac{2\pi(m-n)l}{N}} e^{-i\phi} \left( \left| k_A, \frac{\pi n}{N}, + \right\rangle - \left| k_A, \frac{\pi n}{N}, - \right\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A e^{-i\phi} \left( \left| k_A, \frac{\pi m}{N}, + \right\rangle - \left| k_A, \frac{\pi m}{N}, - \right\rangle \right). \end{aligned} \quad (\text{A.96})$$

Aplicando o hamiltoniano neste estado,

$$\begin{aligned} \hat{H}|x_2^m\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A e^{-i\phi} \left( \hat{H} \left| k_A, \frac{\pi m}{N}, + \right\rangle - \hat{H} \left| k_A, \frac{\pi m}{N}, - \right\rangle \right) \\ &= \epsilon_0 |x_2^m\rangle + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A t^* \left( k_A, \frac{\pi m}{N} \right) \left[ \left| k_A, \frac{\pi m}{N}, + \right\rangle + \left| k_A, \frac{\pi m}{N}, - \right\rangle \right], \end{aligned} \quad (\text{A.97})$$

onde utilizamos a relação de dispersão obtida na Eq. A.8 e a Eq. A.11 para a fase  $e^{-i\phi}$ . O estado sem dispersão é o estado em que  $m = \frac{N}{2}$ , no qual  $t^* \left( k_A, \frac{\pi m}{N} \right) = t_0$ . O hamiltoniano aplicado neste estado será

$$\begin{aligned} \hat{H}|x_2^{N/2}\rangle &= \epsilon_0 |x_2^{N/2}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} dk_A \left[ \left| k_A, \frac{\pi}{2}, + \right\rangle + \left| k_A, \frac{\pi}{2}, - \right\rangle \right] \\ &= \epsilon_0 |x_2^{N/2}\rangle + t_0 |x_1^{N/2}\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.98})$$

Como  $|x_1^{N/2}\rangle = 0$ ,  $|x_2^{N/2}\rangle$  é um autoestado do hamiltoniano, com energia  $\epsilon_0$ . Este autoestado não pode ser escrito da forma A.74 e, portanto, não estava sendo levado em conta em nossa função de Green obtida na Eq. A.89. Para adicionar a contribuição deste estado, notamos que

$$(\epsilon - \hat{H})^{-1} |x_2^{N/2}\rangle = (\epsilon - \epsilon_0)^{-1} |x_2^{N/2}\rangle, \quad (\text{A.99})$$

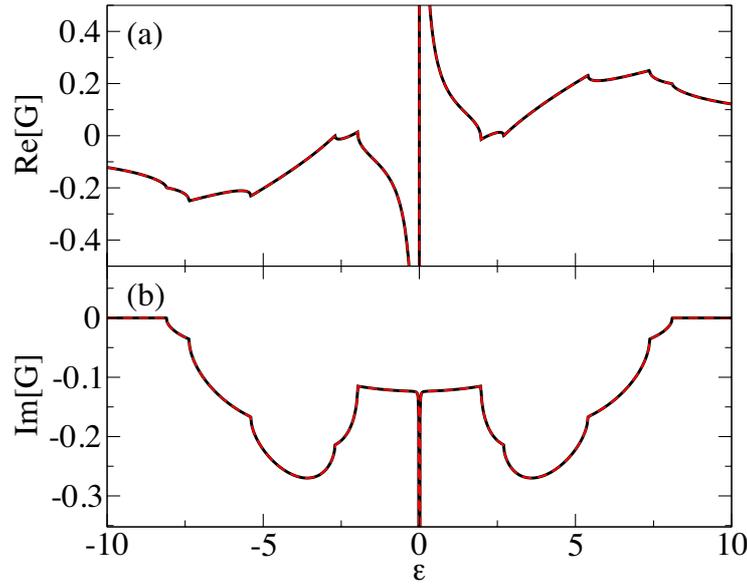


Figura 38: Função de Green local para  $l = j = 0$  e  $s = 2$  (sítio de superfície) calculada pela expressão analítica corrigida obtida na Eq. A.101 (linha preta cheia) e pelo método recursivo (linha vermelha tracejada).

de forma que a contribuição deste estado para a função de Green será

$$\begin{aligned} \hat{G}^s &= \frac{|x_2^{N/2}\rangle\langle x_2^{N/2}|}{\epsilon - \epsilon_0} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i,i'=1}^N e^{i\pi(l-l')} \frac{|l, -l, 2\rangle\langle l', -l', 2|}{\epsilon - \epsilon_0}, \end{aligned} \quad (\text{A.100})$$

onde utilizamos a relação  $|x_2^{N/2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{i\pi l} |l, -l, 2\rangle$  obtida da Eq. A.95. A função de Green para  $s = s' = 2$  corrigida pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \langle l, j, 2 | \hat{G} | l', j', 2 \rangle &= \frac{i(\epsilon - \epsilon_0)}{4Nt_0^2} \sum_{n=1}^N \frac{e^{i\frac{\pi n}{N}(\Delta l - \Delta j)}}{\text{sen } k_n(\epsilon) \cos\left(\frac{\pi n}{N}\right)} \left[ e^{ik_n(\epsilon)|\Delta l + \Delta j|} - e^{ik_n(\epsilon)|\Sigma l + \Sigma j|} \frac{t(k_n(\epsilon))}{t^*(k_n(\epsilon))} \right] \\ &+ \frac{1}{N} e^{i\pi(l-l')} \frac{\delta_{j,-l} \delta_{j',-l'}}{\epsilon - \epsilon_0}. \end{aligned} \quad (\text{A.101})$$

As funções de Green obtidas pelo método recursivo e pela Eq. A.101 são mostradas na Fig. 38. O acordo entre as curvas é perfeito.

## *APÊNDICE B – Corrente de spins em multicamadas*

Multicamadas possuem simetria de translação ao longo de seus planos atômicos. Sendo assim, é conveniente trabalhar em uma representação mista envolvendo um índice de plano e um vetor de onda paralelo a estes planos. Para isso, é conveniente reescrever a posição arbitrária  $\mathbf{R}_i$  de um sítio  $i$  da rede em termos da posição do plano atômico  $l$  onde o sítio está situado e um vetor  $\mathbf{R}_\parallel$  que especifica a posição deste sítio dentro do plano  $l$ . Ou seja,  $\{\mathbf{R}_i\} \rightarrow \{l, \mathbf{R}_\parallel\}$  e, conseqüentemente,

$$\sum_i \rightarrow \sum_l \sum_{\mathbf{R}_\parallel} . \quad (\text{B.1})$$

Nestes casos, é útil trabalhar no espaço recíproco ao longo dos planos para tirar vantagem da simetria de translação bidimensional existente, realizando transformadas de Fourier nas variáveis de posição paralelas aos planos atômicos. Definimos a transformada de Fourier e sua inversa como

$$F_l(\mathbf{k}_\parallel) = \sum_{\mathbf{R}_\parallel} e^{i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_\parallel} f_l(\mathbf{R}_\parallel) \quad (\text{B.2})$$

$$f_l(\mathbf{R}_\parallel) = \frac{1}{N_\parallel} \sum_{\mathbf{k}_\parallel} e^{-i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{R}_\parallel} F_l(\mathbf{k}_\parallel), \quad (\text{B.3})$$

onde  $N_\parallel$  é o número de células unitárias no plano  $l$ . Vamos reescrever a teoria que foi desenvolvida no capítulo 3 utilizando esta representação, que é a mais adequada para tratar sistemas de multicamadas.

### B.1 Operador corrente de spins

Inicialmente, iremos calcular o operador associado à corrente de spins que emana de um volume  $V$  delimitado por dois planos atômicos, na representação mista. Desta forma,

trocando os índices  $\{i\} \rightarrow \{l_i, \mathbf{R}_{i\parallel}\}$  e  $\{j\} \rightarrow \{l_j, \mathbf{R}_{j\parallel}\}$  na Eq. 3.21, teremos

$$I_S^+ = i \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mathbf{R}_{i\parallel} \mathbf{R}_{j\parallel}} \sum_{\mu\nu} \left\{ t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{R}_{j\parallel} - \mathbf{R}_{i\parallel}) c_{l_1 \mu \uparrow}^\dagger(\mathbf{R}_{i\parallel}) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{R}_{j\parallel}) \right. \\ \left. - t_{l_2 l_1}^{\nu\mu}(\mathbf{R}_{i\parallel} - \mathbf{R}_{j\parallel}) c_{l_2 \nu \uparrow}^\dagger(\mathbf{R}_{j\parallel}) c_{l_1 \mu \downarrow}(\mathbf{R}_{i\parallel}) \right\}, \quad (\text{B.4})$$

onde  $\mathbf{R}_{i\parallel}$  ( $\mathbf{R}_{j\parallel}$ ) é a posição de um sítio do plano  $l_i$  ( $l_j$ ). Note que, como temos simetria de translação bidimensional, a integral de transferência  $t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}$  só depende da posição relativa  $\mathbf{R}_{j\parallel} - \mathbf{R}_{i\parallel}$  na direção dos planos.

Utilizando as definições da transformada de Fourier mostradas nas Eqs. B.2 e B.3 para o operador de criação  $c_{l_1 \mu \sigma}^\dagger = c_{l_1 \mu \sigma}^\dagger(\mathbf{R}_{i\parallel})$ , teremos

$$c_{l_1 \mu \sigma}^\dagger(\mathbf{R}_{i\parallel}) = \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} e^{-i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{i\parallel}} c_{l_1 \mu \sigma}^\dagger(\mathbf{k}_{\parallel}), \quad (\text{B.5})$$

e, portanto, pelo o conjugado da equação acima,

$$c_{l_2 \nu \sigma}(\mathbf{R}_{j\parallel}) = \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{j\parallel}} c_{l_2 \nu \sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}). \quad (\text{B.6})$$

Podemos ainda calcular os comutadores dos operadores na representação mista, que serão dados por

$$[c_{l_1 \mu \sigma}^\dagger(\mathbf{k}_{\parallel}), c_{l_2 \nu \sigma'}(\mathbf{k}'_{\parallel})] = N_{\parallel} \delta_{\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{k}'_{\parallel}} \delta_{l_1 l_2} \delta_{\mu\nu} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \text{e} \quad (\text{B.7a})$$

$$[c_{l_1 \mu \sigma}^\dagger(\mathbf{k}_{\parallel}), c_{l_2 \nu \sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_{\parallel})] = [c_{l_1 \mu \sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}), c_{l_2 \nu \sigma'}(\mathbf{k}'_{\parallel})] = 0, \quad (\text{B.7b})$$

Substituindo as Eqs. B.5 e B.6 no primeiro termo da Eq. B.4 (o segundo termo é completamente análogo), obtemos

$$I_S^{+(1)} = \frac{i}{N_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{k}'_{\parallel}} \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{R}_{j\parallel}} e^{i(\mathbf{k}'_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel}) \cdot \mathbf{R}_{j\parallel}} \sum_{\mathbf{R}'_{\parallel}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}'_{\parallel}} t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{R}'_{\parallel}) c_{l_1 \mu \uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}'_{\parallel}), \quad (\text{B.8})$$

onde  $\mathbf{R}'_{\parallel} = \mathbf{R}_{j\parallel} - \mathbf{R}_{i\parallel}$ . Utilizando a definição da transformada inversa, dada pela Eq. B.2, podemos ainda reescrever a equação acima como

$$I_S^{+(1)} = \frac{i}{N_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{k}'_{\parallel}} \delta_{\mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}} t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_1 \mu \uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}'_{\parallel}) \\ = \frac{i}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu} t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_1 \mu \uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel}), \quad (\text{B.9})$$

onde

$$t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \sum_{\mathbf{R}'_{\parallel}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}'_{\parallel}} t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{R}'_{\parallel}) . \quad (\text{B.10})$$

Finalmente, juntando com o termo análogo para  $I_S^{+(2)}$ , o operador corrente de spins da Eq. B.4 pode ser reescrito na representação mista como

$$I_S^+ = \frac{i}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu} \left[ t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel}) - t_{l_2 l_1}^{\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_2 \nu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_1 \mu \downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right] . \quad (\text{B.11})$$

Para facilitar a notação, vamos definir novos operadores de spins “generalizados” na representação mista, da forma

$$\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}) = c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{q}_{\parallel}) . \quad (\text{B.12})$$

Assim, podemos reescrever o operador B.11 como

$$I_S^+ = i \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu} \left[ t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}) - t_{l_2 l_1}^{\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \tilde{S}_{l_2 l_1}^{+\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}) \right] . \quad (\text{B.13})$$

## B.2 Resposta linear para a corrente de spins

Da mesma forma que fizemos anteriormente, vamos aplicar um campo magnético com polarização circular, transversal à direção de equilíbrio da magnetização. No caso de multicamadas, entretanto, vamos considerar que o campo é aplicado em camadas magnéticas inteiras, com dependência periódica no espaço. Por simplicidade, vamos supor um campo magnético harmônico de frequência  $\omega$  e com uma periodicidade definida por um vetor de onda  $\mathbf{q}_{\parallel}$ , da forma

$$\mathbf{h}_{\perp}(\mathbf{R}_{\parallel}, t) = h_0 \left[ \cos(\omega t + \mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel}) \hat{\mathbf{x}} - \sin(\omega t + \mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel}) \hat{\mathbf{y}} \right] , \quad (\text{B.14})$$

onde  $\mathbf{R}_{\parallel} \in l'$ . Vamos considerar também um sistema composto por apenas uma camada magnética  $l'$ , cuja densidade de spins interage com este campo. Assim, o hamiltoniano de interação que descreve esta interação é

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\perp} &= \sum_{\mathbf{R}_{\parallel}} g \mu_B \mathbf{h}_{\perp}(\mathbf{R}_{\parallel}, t) \cdot \hat{\mathbf{S}}_{l'}(\mathbf{R}_{\parallel}, t) \\ &= \sum_{\mathbf{R}_{\parallel}} \frac{g \mu_B h_0}{2} \left[ e^{i(\omega t + \mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel})} S_{l'}^+(\mathbf{R}_{\parallel}, t) + e^{-i(\omega t + \mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel})} S_{l'}^-(\mathbf{R}_{\parallel}, t) \right] . \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Note que a transformada do operador de levantamento de spins é dada por

$$\begin{aligned}
S_{\nu'}^+(\mathbf{q}_{\parallel}) &= \sum_{\mathbf{R}_{\parallel}} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel}} S_{\nu'}^+(\mathbf{R}_{\parallel}) \\
&= \sum_{\mathbf{R}_{\parallel}} \sum_{\gamma} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel}} c_{\nu'\gamma\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{R}_{\parallel}) c_{\nu'\gamma\downarrow}(\mathbf{R}_{\parallel}) \\
&= \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\gamma} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} c_{\nu'\gamma\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{\nu'\gamma\downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}) ,
\end{aligned} \tag{B.16}$$

onde utilizamos as transformadas dos operadores de criação e aniquilação dadas pelas Eqs. B.5 e B.6, respectivamente. Analogamente, a transformada do operador de abaixamento de spins será

$$\begin{aligned}
S_{\nu'}^{-}(-\mathbf{q}_{\parallel}) &= \sum_{\mathbf{R}_{\parallel}} e^{-i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}_{\parallel}} S_{\nu'}^{-}(\mathbf{R}_{\parallel}) \\
&= \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\gamma} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} c_{\nu'\gamma\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{\nu'\gamma\uparrow}(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) .
\end{aligned} \tag{B.17}$$

Destas duas relações, pode-se obter que a relação entre os operadores de levantamento e abaixamento de spins  $[S_{\nu'}^{-}(\mathbf{q}_{\parallel})]^{\dagger} = S_{\nu'}^{+}(-\mathbf{q}_{\parallel})$ . É importante também chamar a atenção para o fato de que o operador  $\tilde{S}^{\mu}(\mathbf{k})$ , definido na Eq. B.12, é diferente do operador acima. Ele foi definido apenas para facilitar a notação. Note que

$$\begin{aligned}
S_{l_1 l_2}^{+}(\mathbf{q}_{\parallel} = 0) &= \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\gamma} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} c_{l_1 \gamma \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_2 \gamma \downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel}) \\
&= \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\gamma} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\gamma\gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}) .
\end{aligned} \tag{B.18}$$

Com as definições acima, o hamiltoniano de interação fica da forma

$$\hat{H}_{\perp} = \frac{g\mu_B h_0}{2} [e^{i\omega t} S_{\nu'}^{+}(\mathbf{q}_{\parallel}, t) + e^{-i\omega t} S_{\nu'}^{-}(-\mathbf{q}_{\parallel}, t)] . \tag{B.19}$$

Considerando que a interação do campo transversal é pequena comparada ao campo magnético estático, podemos usar a teoria de resposta linear para obter a corrente de spins gerada por este campo oscilatório. A corrente de spins em resposta linear é

$$\langle I_S^{\pm}(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int dt' \Theta(t - t') \langle [I_S^{\pm}(t), \hat{H}_{int}(t')] \rangle . \tag{B.20}$$

Substituindo os operadores da corrente de spins e do hamiltoniano de interação dados

pelas Eqs. B.13 e B.19, respectivamente, ficamos com

$$\begin{aligned} \langle I_S^+(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \frac{ig\mu_B h_0}{2} \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu} \int dt' \Theta(t-t') \times \\ &\times \left\langle \left[ \left\{ t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, t) - t_{l_2 l_1}^{\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \tilde{S}_{l_2 l_1}^{+\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, t') \right\}, \{ e^{i\omega t} S_{l'}^+(\mathbf{q}_{\parallel}, t) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + e^{-i\omega t} S_{l'}^-(\mathbf{-q}_{\parallel}, t') \right\} \right] \right\rangle . \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Como o hamiltoniano tem simetria de rotação no espaço de spins, pode-se mostrar que os termos da forma  $\langle [\tilde{S}^+, S^+] \rangle$  são nulos (basta ver que este termo é um produto interno de estados com diferentes spins). Obtemos dessa forma

$$\begin{aligned} \langle I_S^+(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \frac{ig\mu_B h_0}{2} \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu} e^{-i\omega t} \int dt' \Theta(t-t') e^{i\omega(t-t')} \times \\ &\times \left\langle \left[ \left\{ t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, t) - t_{l_2 l_1}^{\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \tilde{S}_{l_2 l_1}^{+\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, t) \right\}, S_{l'}^-(\mathbf{-q}_{\parallel}, t') \right] \right\rangle , \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

ou ainda, em termos dos operadores de criação e aniquilação,

$$\begin{aligned} \langle I_S^+(t) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \frac{ig\mu_B h_0}{2} \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{k}'_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} e^{-i\omega t} \int dt' \Theta(t-t') e^{i\omega(t-t')} \times \\ &\times \left\{ t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \left\langle \left[ c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}, t) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel}, t), c_{l' \gamma \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_{\parallel}, t') c_{l' \gamma \uparrow}(\mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, t') \right] \right\rangle \right. \\ &\quad \left. - t_{l_2 l_1}^{\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \left\langle \left[ c_{l_2 \nu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}, t) c_{l_1 \mu \downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel}, t), c_{l' \gamma \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_{\parallel}, t') c_{l' \gamma \uparrow}(\mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, t') \right] \right\rangle \right\} . \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Vamos obter a susceptibilidade magnética transversa na representação mista na Eq. B.28.

Por enquanto, usaremos a definição geral

$$\begin{aligned} \chi_{l_1 l_2 l' l'}^{+\mu\nu\gamma\gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, t-t') &= -\frac{i}{\hbar} \Theta(t-t') \times \\ &\times \left\langle \left[ c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}, t) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel}, t), c_{l' \gamma \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_{\parallel}, t') c_{l' \gamma \uparrow}(\mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, t') \right] \right\rangle . \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Note que os sinais do segundo e quarto índices são invertidos. A Eq. B.23 se torna então

$$\begin{aligned} \langle I_S^+(t) \rangle &= \frac{ig\mu_B h_0}{2} \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{k}'_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} e^{-i\omega t} \int dt' e^{i\omega(t-t')} \times \\ &\times \left[ t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \chi_{l_1 l_2 l' l'}^{+\mu\nu\gamma\gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, t-t') \right. \\ &\quad \left. - t_{l_2 l_1}^{\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \chi_{l_2 l_1 l' l'}^{+\nu\mu\gamma\gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, t-t') \right] , \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

Finalmente, reescrevemos a equação acima utilizando a transformada de Fourier no tempo

da susceptibilidade, ficando com

$$\begin{aligned} \langle I_S^+(t) \rangle &= \frac{ig\mu_B h_0}{2} \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{k}'_{\parallel}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} \sum_{\mu\nu\gamma} e^{-i\omega t} \times \\ &\times \left[ t_{l_1 l_2}^{\mu\nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \chi_{l_1 l_2 l' l'}^{+-\mu\nu\gamma\gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \right. \\ &\quad \left. - t_{l_2 l_1}^{\nu\mu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \chi_{l_2 l_1 l' l'}^{+-\nu\mu\gamma\gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \right] , \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

onde

$$\chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \int dt' e^{i\omega t'} \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, t') . \quad (\text{B.27})$$

Precisamos agora obter a susceptibilidade na representação mista e mostrar como calculá-la.

### B.3 Susceptibilidade magnética transversa

A susceptibilidade magnética transversa generalizada foi definida na Eq. 3.29. Omitindo os índices de orbitais, podemos calcular a transformada nos seus 4 índices de sítio como

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{l_i l_j l_k l_l}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, t) &= \sum_{\substack{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j \\ \mathbf{R}_k \mathbf{R}_l}} e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_i + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_j + \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{R}_k + \mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{R}_l)} \chi_{ijkl}(t) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \left\langle \left[ c_{l_i \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1, t) c_{l_j \downarrow}(-\mathbf{k}_2, t), c_{l_k \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_3) c_{l_l \uparrow}(-\mathbf{k}_4) \right] \right\rangle . \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

A susceptibilidade magnética transversa que precisamos calcular foi explicitada na Eq. B.24. Porém, da forma mais geral possível, podemos escrever a susceptibilidade magnética transversa multiorbital generalizada na representação mista como

$$\begin{aligned} \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, t) &= -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \left\langle \left[ c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1, t) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2, t), c_{l_3 \gamma \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_3) c_{l_4 \xi \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_4) \right] \right\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \left\langle \left[ \tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \tilde{S}_{l_3 l_4}^{+\gamma\xi}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \right] \right\rangle , \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

para quaisquer  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3$  e  $\mathbf{k}_4$ , e utilizamos a definição de  $\tilde{S}$  da Eq. B.12. Desta forma, para obtermos a transformada da susceptibilidade generalizada pela susceptibilidade definida na Eq. B.29, devemos fazer

$$\tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, t) = \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, -\mathbf{k}_4, t) . \quad (\text{B.30})$$

Para obter esta susceptibilidade, podemos seguir os mesmos passos que utilizamos na seção 3.3 para obter a susceptibilidade no espaço direto, mas agora os índices  $\{i, j, k, l\}$  são substituídos por  $\{l_1\mathbf{k}_1, l_2\mathbf{k}_2, l_3\mathbf{k}_3, l_4\mathbf{k}_4\}$ . Precisamos escrever sua equação de movimento e utilizar as relações de comutação calculadas nas Eqs. B.7a e B.7b. Calculando então a derivada temporal da susceptibilidade generalizada da Eq. B.29, teremos

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, t) = \delta(t) \langle [\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, t), \tilde{S}_{l_3 l_4}^{-\gamma\xi}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4)] \rangle + \langle \langle [\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}](t); \tilde{S}_{l_3 l_4}^{-\gamma\xi}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \rangle \rangle . \quad (\text{B.31})$$

Podemos obter o primeiro termo por comparação com o que calculamos na Eq. 3.58, apenas notando que haverá um fator  $N_{\parallel}$  devido à relação de comutação mostrada na Eq. B.7a. Desta forma, utilizando os índices correspondentes, teremos

$$\left\langle \left[ \tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \tilde{S}_{l_3 l_4}^{-\gamma\xi}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \right] \right\rangle = N_{\parallel} \langle c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_4 \xi \uparrow}(\mathbf{k}_4) \rangle \delta_{l_2 l_3} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \delta_{\nu \gamma} - N_{\parallel} \langle c_{l_3 \gamma \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_3) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle \delta_{l_1 l_4} \delta_{\mathbf{k}_4 \mathbf{k}_1} \delta_{\mu \xi} . \quad (\text{B.32})$$

Para calcular o segundo termo do lado direito da Eq. B.31, precisaremos do hamiltoniano dado pela Eq. 3.1 reescrito na representação mista. O hamiltoniano de ligações fortes  $\hat{H}_0$  pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \sum_{\substack{l_m l_n \\ \mathbf{R}_m \mathbf{R}_n}} \sum_{\substack{\alpha \beta \\ \sigma}} t_{l_m l_n}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}_n - \mathbf{R}_m) c_{l_m \alpha \sigma}^{\dagger}(\mathbf{R}_m) c_{l_n \beta \sigma}(\mathbf{R}_n) \\ &= \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{l_m l_n} \sum_{\alpha \beta} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} t_{l_m l_n}^{\alpha \beta}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_m \alpha \sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_n \beta \sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}) , \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

onde

$$t_{l_m l_n}^{\alpha \beta}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \sum_{\mathbf{R}'} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{R}'} t_{l_m l_n}^{\alpha \beta}(\mathbf{R}') . \quad (\text{B.34})$$

Já para o hamiltoniano que descreve a interação coulombiana no modelo de Hubbard, precisamos lembrar que estamos considerando camadas magnéticas bidimensionais. Como cada plano magnético é formado pelo mesmo tipo de átomo,  $U_{\alpha\beta\gamma\xi}^m$  só depende do índice de plano. Sendo assim,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{l_m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\alpha \beta \gamma \xi} \sum_{\mathbf{R}_m} U_{\alpha \beta \gamma \xi}^{l_m} c_{l_m \alpha \sigma}^{\dagger}(\mathbf{R}_m) c_{l_m \beta \sigma'}^{\dagger}(\mathbf{R}_m) c_{l_m \xi \sigma'}(\mathbf{R}_m) c_{l_m \gamma \sigma}(\mathbf{R}_m) \\ &= \frac{1}{2} \frac{1}{N_{\parallel}^3} \sum_{\substack{l_m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\alpha \beta \gamma \xi} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2 \\ \mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4}} U_{\alpha \beta \gamma \xi}^{l_m} \delta_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4} c_{l_m \alpha \sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_m \beta \sigma'}^{\dagger}(\mathbf{k}_2) c_{l_m \xi \sigma'}(\mathbf{k}_3) c_{l_m \gamma \sigma}(\mathbf{k}_4) . \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

A conservação do momento em um espalhamento devido à interação coulombiana intrasítio fica explícita devido à  $\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}$ . Já vimos que o termo que envolve o hamiltoniano de Zeeman  $\hat{H}_Z$  gera apenas um deslocamento de  $\omega \rightarrow \omega + \omega_0$  na equação de movimento, e não influencia na relação entre as susceptibilidades RPA e HF. Por este motivo, não vamos considerá-lo aqui.

O comutador de  $\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  com o hamiltoniano de ligações fortes obtido na Eq. B.33 será

$$[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_0] = \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\substack{l_m l_n \\ \sigma}} \sum_{\substack{\alpha\beta \\ \mathbf{k}_{\parallel}}} t_{l_m l_n}^{\alpha\beta}(\mathbf{k}_{\parallel}) \left[ c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2), c_{l_m \alpha \sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_n \beta \sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}) \right]. \quad (\text{B.36})$$

Calculando o comutador acima:

$$\begin{aligned} [c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2), c_{l_m \alpha \sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_n \beta \sigma}(\mathbf{k}_{\parallel})] &= c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_n \beta \sigma}(\mathbf{k}_{\parallel}) \delta_{l_2 l_m} \delta_{\nu \alpha} \delta_{\sigma \downarrow} N_{\parallel} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_{\parallel}} \\ &\quad - c_{l_m \alpha \sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2) \delta_{l_1 l_n} \delta_{\mu \beta} \delta_{\sigma \uparrow} N_{\parallel} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_{\parallel}}. \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

Desta forma

$$[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_0] = \sum_{l_m \alpha} t_{l_2 l_m}^{\nu \alpha}(\mathbf{k}_2) c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_m \alpha \downarrow}(\mathbf{k}_2) - t_{l_m l_1}^{\alpha \mu}(\mathbf{k}_1) c_{l_m \alpha \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2). \quad (\text{B.38})$$

Substituindo este termo na Eq. de movimento, ficaremos com um termo da forma

$$\begin{aligned} &\sum_{l_m \alpha} \left\langle \left\langle t_{l_2 l_m}^{\nu \alpha}(\mathbf{k}_2) c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_m \alpha \downarrow}(\mathbf{k}_2) - t_{l_m l_1}^{\alpha \mu}(\mathbf{k}_1) c_{l_m \alpha \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2); \tilde{S}_{l_3 l_4}^{-\gamma \xi}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \right\rangle \right\rangle \\ &= \sum_{\substack{l_m l_n \\ \alpha \beta}} \left[ t_{l_2 l_n}^{\nu \beta}(\mathbf{k}_2) \delta_{l_m l_1} \delta_{\mu \alpha} - t_{l_m l_1}^{\alpha \mu}(\mathbf{k}_1) \delta_{l_n l_2} \delta_{\nu \beta} \right] \chi_{l_m l_n l_3 l_4}^{+-\alpha \beta \gamma \xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4). \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

O termo envolvendo o hamiltoniano de interação coulombiana é

$$\begin{aligned} [\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{2} \frac{1}{N_{\parallel}^3} \sum_{\substack{l_m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\alpha \beta \gamma \xi} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} U_{\alpha \beta \gamma \xi}^{l_m} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \times \\ &\quad \times \left[ c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2), c_{l_m \alpha \sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_m \beta \sigma'}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_m \xi \sigma'}(\mathbf{k}'_3) c_{l_m \gamma \sigma}(\mathbf{k}'_4) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

onde o comutador pode ser calculado para obter

$$\begin{aligned}
& [c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2), c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3)c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4)] \\
&= c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3)c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4)\delta_{l_2l_m}\delta_{\nu\alpha}\delta_{\sigma\downarrow}N_{\parallel}\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1} \\
&+ c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3)c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4)\delta_{l_2l_m}\delta_{\nu\beta}\delta_{\sigma'\downarrow}N_{\parallel}\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_2} \\
&- c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2)c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4)\delta_{l_1l_m}\delta_{\mu\xi}\delta_{\sigma'\uparrow}N_{\parallel}\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_3} \\
&- c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2)\delta_{l_1l_m}\delta_{\mu\gamma}\delta_{\sigma\uparrow}N_{\parallel}\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_4} .
\end{aligned} \tag{B.41}$$

Assim, substituindo na Eq. B.40 e rearrumando os termos, podemos escrever

$$\begin{aligned}
[\tilde{S}_{l_1l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{2} \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\alpha\beta\gamma} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2 \\ \sigma \\ \mathbf{k}'_3\mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3+\mathbf{k}'_4} \times \\
&\times \left[ U_{\nu\beta\gamma\alpha}^{l_2} c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\beta\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_2\alpha\sigma}(\mathbf{k}'_3)c_{l_2\gamma\downarrow}(\mathbf{k}'_4)\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1} \right. \\
&+ U_{\alpha\nu\gamma\beta}^{l_2} c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_2\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4)c_{l_2\beta\downarrow}(\mathbf{k}'_3)\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_2} \\
&- U_{\alpha\beta\gamma\mu}^{l_1} c_{l_1\beta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_1\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_1\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2)\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_3} \\
&\left. - U_{\alpha\beta\mu\gamma}^{l_1} c_{l_1\alpha\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_1\beta\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_1\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_3)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2)\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_4} \right] ,
\end{aligned} \tag{B.42}$$

Da mesma forma que fizemos antes, vamos agora trocar os índices  $\alpha \rightleftharpoons \beta$  no primeiro e no terceiro termo, além de  $\beta \rightleftharpoons \gamma$  no segundo termo. Porém, agora vamos trocar também  $\mathbf{k}'_1 \rightleftharpoons \mathbf{k}'_2$  e  $\mathbf{k}'_3 \rightleftharpoons \mathbf{k}'_4$  no segundo termo e no terceiro termo. Após todas estas trocas, ficamos com

$$\begin{aligned}
[\tilde{S}_{l_1l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{2} \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\alpha\beta\gamma} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2 \\ \sigma \\ \mathbf{k}'_3\mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3+\mathbf{k}'_4} \times \\
&\times \left[ (U_{\nu\alpha\gamma\beta}^{l_2} + U_{\alpha\nu\beta\gamma}^{l_2}) c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_2\beta\sigma}(\mathbf{k}'_3)c_{l_2\gamma\downarrow}(\mathbf{k}'_4)\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1} \right. \\
&\left. - (U_{\beta\alpha\gamma\mu}^{l_1} + U_{\alpha\beta\mu\gamma}^{l_1}) c_{l_1\alpha\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_1\beta\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_1\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_3)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2)\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_4} \right] .
\end{aligned} \tag{B.43}$$

Novamente, devido à simetria de  $U$  mostrada na Eq. 3.70, obtemos finalmente

$$\begin{aligned}
[\tilde{S}_{l_1l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\alpha\beta\lambda} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2 \\ \sigma \\ \mathbf{k}'_3\mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3+\mathbf{k}'_4} \times \\
&\times \left[ U_{\nu\alpha\lambda\beta}^{l_2} c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_2\beta\sigma}(\mathbf{k}'_3)c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4)\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1} \right. \\
&\left. - U_{\beta\alpha\lambda\mu}^{l_1} c_{l_1\alpha\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_1\beta\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_1\lambda\sigma}(\mathbf{k}'_3)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2)\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_4} \right] ,
\end{aligned} \tag{B.44}$$

onde trocamos os índices  $\gamma \rightarrow \lambda$  para evitar duplicidade ao substituir na equação de movimento.

### B.3.1 Aproximação de fases aleatórias (RPA)

Vamos desacoplar as equações reescrevendo a Eq. B.44 como

$$\begin{aligned}
[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\alpha\beta\lambda} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \sigma \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \times \\
&\times \left[ U_{\beta\alpha\lambda\mu}^{l_1} c_{l_1\beta\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) c_{l_1\alpha\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_1\lambda\sigma}(\mathbf{k}'_3) \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_4} \right. \\
&\left. - U_{\nu\alpha\lambda\beta}^{l_2} c_{l_2\alpha\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\beta\sigma}(\mathbf{k}'_3) \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_1} \right]. \tag{B.45}
\end{aligned}$$

Utilizando a linearização mostrada na Eq. 3.75 para obter este termo na aproximação RPA, ficamos com

$$\begin{aligned}
[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\alpha\beta\lambda} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \sigma \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \times \\
&\times \left\{ U_{\beta\alpha\lambda\mu}^{l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_4} \left[ \langle c_{l_1\beta\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle c_{l_1\alpha\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_1\lambda\sigma}(\mathbf{k}'_3) \right. \right. \\
&\quad - \langle c_{l_1\beta\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\sigma}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\alpha\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \\
&\quad + \langle c_{l_1\alpha\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_1\lambda\sigma}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\beta\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \\
&\quad \left. - \langle c_{l_1\alpha\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle c_{l_1\beta\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\sigma}(\mathbf{k}'_3) \right] \\
&- U_{\nu\alpha\lambda\beta}^{l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_1} \left[ \langle c_{l_2\alpha\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\beta\sigma}(\mathbf{k}'_3) \right. \\
&\quad - \langle c_{l_2\alpha\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\beta\sigma}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \\
&\quad + \langle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\beta\sigma}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_2\alpha\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \\
&\quad \left. - \langle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \rangle c_{l_2\alpha\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\beta\sigma}(\mathbf{k}'_3) \right] \left. \right\}. \tag{B.46}
\end{aligned}$$

Como o hamiltoniano conserva o spin total do sistema, os valores esperados  $\langle c_{\uparrow}^{\dagger}c_{\downarrow} \rangle$  e  $\langle c_{\downarrow}^{\dagger}c_{\uparrow} \rangle$  são nulos. Assim, fazendo a trocando dos índices  $\alpha \rightarrow \eta$  e  $\beta \rightarrow \rho$ , obtemos

$$\begin{aligned}
[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\eta\rho\lambda} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \times \\
&\times \left\{ U_{\rho\eta\lambda\mu}^{l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_4} \left[ \langle c_{l_1\rho\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_1\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \right. \right. \\
&\quad - \langle c_{l_1\rho\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \\
&\quad - \langle c_{l_1\rho\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \\
&\quad \left. + \langle c_{l_1\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_1\lambda\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\rho\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \right] \\
&- U_{\nu\eta\lambda\rho}^{l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_1} \left[ \langle c_{l_2\eta\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\rho\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \right. \\
&\quad - \langle c_{l_2\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \\
&\quad - \langle c_{l_2\eta\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\rho\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \\
&\quad \left. + \langle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_2\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \right] \left. \right\}. \tag{B.47}
\end{aligned}$$

Trocando  $\mathbf{k}'_1 \rightleftharpoons \mathbf{k}'_2$  no quarto termo e  $\mathbf{k}'_3 \rightleftharpoons \mathbf{k}'_4$  no quinto, ficaremos com

$$\begin{aligned}
[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}] &= \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\eta\rho\lambda} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \times \\
&\times \left\{ U_{\rho\eta\lambda\mu}^{l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_4} \left[ \langle c_{l_1\rho\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_1\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \right. \right. \\
&\quad - \langle c_{l_1\rho\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \\
&\quad - \langle c_{l_1\rho\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \\
&\quad \left. + \langle c_{l_1\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\rho\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \right] \\
&- U_{\nu\eta\lambda\rho}^{l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_1} \left[ \langle c_{l_2\eta\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\rho\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \right. \\
&\quad - \langle c_{l_2\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \\
&\quad - \langle c_{l_2\eta\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\rho\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \\
&\quad \left. + \langle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_2\eta\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \right] \left. \right\}. \tag{B.48}
\end{aligned}$$

### B.3.2 Aproximação Hartree-Fock

Para calcular a equação de movimento da susceptibilidade na aproximação Hartree-Fock, utilizaremos a linearização da Eq. 3.86 no hamiltoniano B.35. Com isso, obteremos

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int}^{HF} = & \frac{1}{2} \frac{1}{N_{\parallel}^3} \sum_{\substack{l_m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\alpha\beta\gamma\xi} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} U_{\alpha\beta\gamma\xi}^{l_m} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \times \\
& \times \left[ \langle c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4) \right. \\
& + \langle c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4) \rangle c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \\
& - \langle c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \rangle \delta_{\sigma\sigma'} c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4) \\
& \left. - \langle c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4) \rangle \delta_{\sigma\sigma'} c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \right]. \tag{B.49}
\end{aligned}$$

Notamos que, devido à simetria de  $U$ , o segundo e o quarto termo se igualam ao primeiro e terceiro, respectivamente, ao trocarmos os índices de orbital  $\alpha \rightleftharpoons \beta$  e  $\xi \rightleftharpoons \gamma$ , além de  $\sigma \rightleftharpoons \sigma'$ ,  $\mathbf{k}'_1 \rightleftharpoons \mathbf{k}'_2$  e  $\mathbf{k}'_3 \rightleftharpoons \mathbf{k}'_4$ . Desta forma, ficamos com

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int}^{HF} = & \frac{1}{N_{\parallel}^3} \sum_{\substack{l_m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\alpha\beta\gamma\xi} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} U_{\alpha\beta\gamma\xi}^{l_m} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \left[ \langle c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4) \right. \\
& \left. - \langle c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \rangle \delta_{\sigma\sigma'} c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4) \right]. \tag{B.50}
\end{aligned}$$

Finalmente, trocando  $\alpha \rightleftharpoons \beta$  e  $\mathbf{k}'_1 \rightleftharpoons \mathbf{k}'_2$  no segundo termo, além de utilizar que  $\sigma = \sigma'$ , podemos escrever

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{int}^{HF} = & \frac{1}{N_{\parallel}^3} \sum_{\substack{l_m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\alpha\beta\gamma\xi} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \times \\
& \times (U_{\alpha\beta\gamma\xi}^{l_m} - U_{\beta\alpha\gamma\xi}^{l_m} \delta_{\sigma\sigma'}) \langle c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4). \tag{B.51}
\end{aligned}$$

Na equação de movimento, precisaremos de

$$\begin{aligned}
[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}^{HF}] = & \frac{1}{N_{\parallel}^3} \sum_{\substack{l_m \\ \sigma, \sigma'}} \sum_{\alpha\beta\gamma\xi} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} (U_{\alpha\beta\gamma\xi}^{l_m} - U_{\beta\alpha\gamma\xi}^{l_m} \delta_{\sigma\sigma'}) \times \\
& \times \langle c_{l_m\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_m\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \rangle \left[ c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2), c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4) \right]. \tag{B.52}
\end{aligned}$$

Calculando o comutador acima, obtemos

$$[c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2), c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4)] = c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_m\gamma\sigma}(\mathbf{k}'_4)\delta_{l_m l_2}\delta_{\alpha\nu}\delta_{\sigma\downarrow}N_{\parallel}\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1} \\ - c_{l_m\alpha\sigma}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2)\delta_{l_m l_1}\delta_{\gamma\mu}\delta_{\sigma\uparrow}N_{\parallel}\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_4} . \quad (\text{B.53})$$

Voltando na Eq. B.52 e somando em  $l_m$ ,  $\sigma$ , e  $\alpha$  no primeiro termo e  $\gamma$  no segundo, e unificando os somatórios de orbitais, podemos escrever

$$[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}^{HF}] = \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\beta\gamma\xi} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2 \\ \sigma' \mathbf{k}'_3\mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3+\mathbf{k}'_4} \times \\ \times \left[ (U_{\nu\beta\gamma\xi}^{l_2} - U_{\beta\nu\gamma\xi}^{l_2}\delta_{\sigma'\downarrow}) \langle c_{l_2\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_2\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\gamma\downarrow}(\mathbf{k}'_4)\delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1} \right. \\ \left. - (U_{\gamma\beta\mu\xi}^{l_1} - U_{\beta\gamma\mu\xi}^{l_1}\delta_{\sigma'\uparrow}) \langle c_{l_1\beta\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_1\xi\sigma'}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\gamma\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2)\delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_4} \right] . \quad (\text{B.54})$$

Abrindo a soma em spins, e renomeando alguns índices de orbitais, ficamos com

$$[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}^{HF}] = \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\eta\rho\lambda} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3\mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3+\mathbf{k}'_4} \times \\ \times \left\{ U_{\nu\eta\lambda\rho}^{l_2} \delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1} \left[ \langle c_{l_2\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \right. \right. \\ \left. \left. + \langle c_{l_2\eta\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_2\rho\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \right] \right. \\ \left. - U_{\eta\nu\lambda\rho}^{l_2} \delta_{\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1} \left[ \langle c_{l_2\eta\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_2\rho\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1)c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \right] \right. \\ \left. - U_{\eta\rho\mu\lambda}^{l_1} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_4} \left[ \langle c_{l_1\rho\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_1\lambda\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \right. \right. \\ \left. \left. + \langle c_{l_1\rho\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_1\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \right] \right. \\ \left. + U_{\rho\eta\mu\lambda}^{l_1} \delta_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}'_4} \left[ \langle c_{l_1\rho\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2)c_{l_1\lambda\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1)c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \right] \right\} . \quad (\text{B.55})$$

Trocando  $\rho \rightleftharpoons \lambda$  no terceiro termo e  $\eta \rightleftharpoons \rho$  no último, e usando a simetria da Eq. 3.70, podemos reorganizar os termos da forma

$$\begin{aligned}
[\tilde{S}_{l_1 l_2}^{+\mu\nu}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2), \hat{H}_{int}^{HF}] &= \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\eta\rho\lambda} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \times \\
&\times \left\{ U_{\rho\eta\lambda\mu}^{l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_4} \left[ -\langle c_{l_1\rho\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \right. \right. \\
&\quad - \langle c_{l_1\rho\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \\
&\quad \left. \left. + \langle c_{l_1\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_1\lambda\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\rho\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \right] \right. \\
&\quad - U_{\nu\eta\lambda\rho}^{l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_1} \left[ \langle c_{l_2\eta\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1) c_{l_2\rho\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \right. \\
&\quad - \langle c_{l_2\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \\
&\quad \left. \left. - \langle c_{l_2\eta\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\rho\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \right] \right\}. \tag{B.56}
\end{aligned}$$

Comparando a Eq. B.48, obtida na aproximação RPA, com a Eq. B.56, vemos que o primeiro e o último termo da equação RPA não estão na equação HF. Sendo assim, vamos reescrever a Eq. B.48 fazendo aparecer os operadores  $\tilde{S}_{l_m l_n}^{+\alpha\beta}$ , para facilitar sua substituição na equação de movimento. Primeiramente, vamos escrever os dois termos que não aparecem na Eq. B.56. São eles

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\eta\rho\lambda} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \left[ U_{\rho\eta\lambda\mu}^{l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_4} \langle c_{l_1\rho\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle c_{l_1\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_1\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_3) \right. \\
&\quad \left. - U_{\nu\eta\lambda\rho}^{l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_1} \langle c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1) c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle c_{l_2\eta\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\lambda\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \right]. \tag{B.57}
\end{aligned}$$

Trocando  $\mathbf{k}'_1 \rightleftharpoons \mathbf{k}'_2$  no segundo termo,  $\mathbf{k}'_3 \rightleftharpoons \mathbf{k}'_4$  no primeiro e fazendo aparecer  $\tilde{S}_{l_m l_n}^{+\alpha\beta}$ ,

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\substack{l_m l_n \\ \alpha\beta}} \sum_{\eta\rho\lambda} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \delta_{\alpha\eta} \delta_{\beta\lambda} c_{l_m\alpha\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}'_1) c_{l_n\beta\downarrow}(\mathbf{k}'_4) \times \\
&\times \left[ U_{\rho\eta\lambda\mu}^{l_1} \delta_{l_m l_1} \delta_{l_n l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_3} \langle c_{l_1\rho\downarrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle - U_{\nu\eta\lambda\rho}^{l_2} \delta_{l_m l_2} \delta_{l_n l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_2} \langle c_{l_1\mu\uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1) c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \right] \\
&= \sum_{\substack{l_m l_n \\ \alpha\beta}} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} J_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) \tilde{S}_{l_m l_n}^{+\alpha\beta}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_4), \tag{B.58}
\end{aligned}$$

onde, somando em  $\eta$  e em  $\lambda$ ,

$$\begin{aligned}
J_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) &= \frac{1}{N_{\parallel}^2} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3+\mathbf{k}'_4} \times \\
&\times \sum_{\rho} \left[ U_{\rho\alpha\beta\mu}^{l_1} \delta_{l_m l_1} \delta_{l_n l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_3} \langle c_{l_1 \rho \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle \right. \\
&\left. - U_{\nu\alpha\beta\rho}^{l_2} \delta_{l_m l_2} \delta_{l_n l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_2} \langle c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2 \rho \uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \right]. \quad (\text{B.59})
\end{aligned}$$

Os quatro termos restantes da Eq. B.48, que também aparecem na Eq. B.56, podem ser reescritos como

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\substack{l_m l_n \\ \alpha\beta}} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} \sum_{\eta\rho\lambda} \delta_{\mathbf{k}'_1+\mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3+\mathbf{k}'_4} \delta_{l_1 l_m} \delta_{l_2 l_n} \times \\
&\times \left\{ U_{\rho\eta\lambda\mu}^{l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_4} \delta_{\nu\beta} \left[ -\langle c_{l_1 \rho \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1 \lambda \uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \delta_{\eta\alpha} - \langle c_{l_1 \rho \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1 \lambda \downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \delta_{\eta\alpha} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \langle c_{l_1 \eta \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1 \lambda \uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \delta_{\rho\alpha} \right] \tilde{S}_{l_m l_n}^{+\alpha\beta}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_2) \right. \\
&\left. - U_{\nu\eta\lambda\rho}^{l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_1} \delta_{\mu\alpha} \left[ \langle c_{l_2 \eta \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2 \lambda \downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \delta_{\rho\beta} - \langle c_{l_2 \eta \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2 \rho \uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \delta_{\lambda\beta} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \langle c_{l_2 \eta \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2 \rho \downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \delta_{\lambda\beta} \right] \tilde{S}_{l_m l_n}^{+\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_4) \right\}. \quad (\text{B.60})
\end{aligned}$$

Substituindo os termos das Eqs. B.32, B.39, B.58 e B.60 na equação de movimento, dada pela Eq. B.31, obteremos a equação de movimento na aproximação RPA

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, t) &= \delta(t) D_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \\
&+ \sum_{\substack{l_m l_n \\ \alpha\beta}} K_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \chi_{l_m l_n l_3 l_4}^{+-\alpha\beta\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \\
&+ \sum_{\substack{l_m l_n \\ \alpha\beta}} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} J_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) \chi_{l_m l_n l_3 l_4}^{+-\alpha\beta\gamma\xi}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \\
&+ \sum_{\substack{l_m l_n \\ \alpha\beta}} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} J'_{l_1 l_2 l_m l_n}{}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) \chi_{l_m l_n l_3 l_4}^{+-\alpha\beta\gamma\xi}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \\
&+ \sum_{\substack{l_m l_n \\ \alpha\beta}} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} J''_{l_1 l_2 l_m l_n}{}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) \chi_{l_m l_n l_3 l_4}^{+-\alpha\beta\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4). \quad (\text{B.61})
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
D_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) &= N_{\parallel} \left[ \langle c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_4 \xi \uparrow}(\mathbf{k}_4) \rangle \delta_{l_2 l_3} \delta_{\nu\gamma} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \right. \\
&\left. - \langle c_{l_3 \gamma \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_3) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle \delta_{l_1 l_4} \delta_{\mu\xi} \delta_{\mathbf{k}_4 \mathbf{k}_1} \right], \quad (\text{B.62a})
\end{aligned}$$

$$K_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = t_{l_2 l_n}^{\nu\beta}(\mathbf{k}_2) \delta_{l_m l_1} \delta_{\mu\alpha} - t_{l_m l_1}^{\alpha\mu}(\mathbf{k}_1) \delta_{l_n l_2} \delta_{\nu\beta}, \quad (\text{B.62b})$$

$$J_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) = \frac{1}{N_{\parallel}^2} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \times \\ \times \sum_{\rho} \left[ U_{\rho\alpha\beta\mu}^{l_1} \delta_{l_m l_1} \delta_{l_n l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_3} \langle c_{l_1 \rho \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle \right. \\ \left. - U_{\nu\alpha\beta\rho}^{l_2} \delta_{l_m l_2} \delta_{l_n l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_2} \langle c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2 \rho \uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \right], \quad (\text{B.62c})$$

$$J'_{l_1 l_2 l_m l_n}{}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) = \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\rho\lambda} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_4} \delta_{l_1 l_m} \delta_{l_2 l_n} \delta_{\nu\beta} \times \\ \times \left[ \langle c_{l_1 \rho \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1 \lambda \uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle (U_{\alpha\rho\lambda\mu}^{l_1} - U_{\rho\alpha\lambda\mu}^{l_1}) - \langle c_{l_1 \rho \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_1 \lambda \downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle U_{\rho\alpha\lambda\mu}^{l_1} \right], \quad \text{e} \quad (\text{B.62d})$$

$$J''_{l_1 l_2 l_m l_n}{}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) = \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\eta\rho} \delta_{\mathbf{k}'_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{k}'_4} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_1} \delta_{l_1 l_m} \delta_{l_2 l_n} \delta_{\mu\alpha} \times \\ \left[ \langle c_{l_2 \eta \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2 \rho \uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle U_{\nu\eta\beta\rho}^{l_2} + \langle c_{l_2 \eta \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2 \rho \downarrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle (U_{\nu\eta\beta\rho}^{l_2} - U_{\nu\eta\rho\beta}^{l_2}) \right]. \quad (\text{B.62e})$$

Podemos ainda reescrever a equação de movimento de maneira a juntar os termos definidos acima da forma

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{+-\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, t) = \delta(t) D_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) \\ + \sum_{\substack{l_m l_n \\ \alpha\beta}} \sum_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2} \left[ K_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) + J_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) + J'_{l_1 l_2 l_m l_n}{}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \right. \\ \left. + J''_{l_1 l_2 l_m l_n}{}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \right] \chi_{l_m l_n l_3 l_4}^{+-\alpha\beta\gamma\xi}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4), \quad (\text{B.63})$$

onde

$$K_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = K_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_1} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{q}_2}, \quad (\text{B.64a})$$

$$J_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} J_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) \delta_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{q}_1} \delta_{\mathbf{k}'_4 \mathbf{q}_2} \\ = \sum_{\mathbf{k}'_2 \mathbf{k}'_3} J_{l_1 l_2 l_m l_n}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{q}_2), \quad (\text{B.64b})$$

$$J'_{l_1 l_2 l_m l_n}{}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} J'_{l_1 l_2 l_m l_n}{}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) \delta_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{q}_1} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{q}_2} \\ = \sum_{\mathbf{k}'_2 \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4} J'_{l_1 l_2 l_m l_n}{}^{\mu\nu\alpha\beta}(\mathbf{k}_1, \mathbf{q}_1, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{q}_2} \quad \text{e} \quad (\text{B.64c})$$

$$\begin{aligned}
J''^{\mu\nu\alpha\beta}_{l_1 l_2 l_m l_n}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) &= \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{k}'_3 \mathbf{k}'_4}} J''^{\mu\nu\alpha\beta}_{l_1 l_2 l_m l_n}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{k}'_4) \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_1} \delta_{\mathbf{k}'_4 \mathbf{q}_2} \\
&= \sum_{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \mathbf{k}'_3} J''^{\mu\nu\alpha\beta}_{l_1 l_2 l_m l_n}(\mathbf{k}'_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3, \mathbf{q}_2) \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{q}_1} .
\end{aligned} \tag{B.64d}$$

A equação de movimento na aproximação Hartree-Fock será semelhante à Eq. B.63, apenas sem o termo de  $J$  (que não aparece na Eq. B.56). Portanto, reescrevendo as equações de movimento na forma matricial, teremos

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi(t) = \delta(t) D + (K + J + J' + J'') \chi(t) , \tag{B.65}$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} \chi^0(t) = \delta(t) D + (K + J' + J'') \chi^0(t) , \tag{B.66}$$

que são semelhantes às Eqs. 3.97a e 3.97b. Seguindo os mesmos passos feitos da Eq. 3.98a à 3.101, também encontraremos que a relação matricial entre a susceptibilidade RPA e HF é

$$\chi(\omega) = \chi^0(\omega) + \chi^0(\omega) P \chi(\omega) , \tag{B.67}$$

onde  $DP = J$ . Entretanto, agora estas matrizes serão da forma

$$\sum_{\substack{l_3 l_4 \\ \gamma \xi}} \sum_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} D^{\mu\nu\gamma\xi}_{l_1 l_2 l_3 l_4}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) P^{\gamma\xi\alpha\beta}_{l_3 l_4 l_m l_n}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = J^{\mu\nu\alpha\beta}_{l_1 l_2 l_m l_n}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) . \tag{B.68}$$

Substituindo a Eq. B.62a para a matriz  $D$ , bem como as Eqs. B.64b e B.62c para a matriz  $J$ , ficamos com

$$\begin{aligned}
&\sum_{\substack{l_3 l_4 \\ \gamma \xi}} \sum_{\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_4} N_{\parallel} \left[ \langle c_{l_1 \mu \uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1) c_{l_4 \xi \uparrow}(\mathbf{k}_4) \rangle \delta_{l_2 l_3} \delta_{\nu \gamma} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}_3} \right. \\
&\quad \left. - \langle c_{l_3 \gamma \downarrow}^\dagger(\mathbf{k}_3) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle \delta_{l_1 l_4} \delta_{\mu \xi} \delta_{\mathbf{k}_4 \mathbf{k}_1} \right] P^{\gamma\xi\alpha\beta}_{l_3 l_4 l_m l_n}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \\
&= \sum_{\mathbf{k}'_2 \mathbf{k}'_3} \sum_{\rho} \frac{1}{N_{\parallel}^2} \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{k}'_2, \mathbf{k}'_3 + \mathbf{q}_2} \left[ U^{\rho\alpha\beta\mu}_{l_1} \delta_{l_m l_1} \delta_{l_n l_1} \delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}'_3} \langle c_{l_1 \rho \downarrow}^\dagger(\mathbf{k}'_2) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle \right. \\
&\quad \left. - U^{\rho\alpha\beta\mu}_{l_1} \delta_{l_m l_2} \delta_{l_n l_2} \delta_{\mathbf{k}_2 \mathbf{k}'_2} \langle c_{l_1 \mu \uparrow}^\dagger(\mathbf{k}_1) c_{l_2 \rho \uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle \right] ,
\end{aligned} \tag{B.69}$$

ou ainda, separando os termos

$$\begin{aligned}
& N_{\parallel} \sum_{\xi} \sum_{\mathbf{k}_4} \langle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_4\xi\uparrow}(\mathbf{k}_4) \rangle P_{l_2l_4l_m l_n}^{\nu\xi\alpha\beta}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_4, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \\
& - N_{\parallel} \sum_{\gamma} \sum_{\mathbf{k}_3} \langle c_{l_3\gamma\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_3) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle P_{l_3l_1l_m l_n}^{\gamma\mu\alpha\beta}(\mathbf{k}_3, \mathbf{k}_1, \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \\
& = -\frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\mathbf{k}'_3} \sum_{\rho} \langle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}'_3) \rangle U_{\nu\alpha\beta\rho}^{l_2} \delta_{l_m l_2} \delta_{l_n l_2} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{q}_2+\mathbf{k}'_3} \\
& + \frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\mathbf{k}'_2} \sum_{\rho} \langle c_{l_1\rho\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_2) c_{l_2\nu\downarrow}(\mathbf{k}_2) \rangle U_{\rho\alpha\beta\mu}^{l_1} \delta_{l_m l_1} \delta_{l_n l_1} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{k}'_2, \mathbf{q}_2+\mathbf{k}_1} .
\end{aligned} \tag{B.70}$$

Pelos índices de spin dos operadores de criação e aniquilação, notamos que o primeiro termo do lado esquerdo da equação tem que ser igual ao primeiro termo do lado direito da equação, o mesmo acontecendo para o segundo termo de cada lado. Desta forma, para o primeiro termo, teremos

$$\begin{aligned}
& N_{\parallel} \sum_{\rho\mathbf{k}'} \sum_{l_4} \langle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_4\rho\uparrow}(\mathbf{k}') \rangle P_{l_2l_4l_m l_n}^{\nu\rho\alpha\beta}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}', \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \\
& = -\frac{1}{N_{\parallel}^2} \sum_{\rho\mathbf{k}'} \langle c_{l_1\mu\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_1) c_{l_2\rho\uparrow}(\mathbf{k}') \rangle U_{\nu\alpha\beta\rho}^{l_2} \delta_{l_m l_2} \delta_{l_n l_2} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{q}_2+\mathbf{k}'} .
\end{aligned} \tag{B.71}$$

Para que esta equação seja válida, devemos ter

$$P_{l_2l_4l_m l_n}^{\nu\rho\alpha\beta}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}', \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = -\frac{1}{N_{\parallel}^3} U_{\nu\alpha\beta\rho}^{l_2} \delta_{l_4 l_2} \delta_{l_m l_2} \delta_{l_n l_2} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{q}_2+\mathbf{k}'} . \tag{B.72}$$

Pode-se ver que a expressão obtida para a matriz  $P$  na Eq. B.72 também satisfaz esta relação entre os segundos termos de cada lado na Eq. B.70.

Escrevendo a Eq. B.67 em termos de suas componentes, obtemos que a relação entre as susceptibilidades generalizadas calculadas na aproximação RPA e HF, na representação mista, é

$$\begin{aligned}
& \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \omega) = \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \omega) \\
& - \frac{1}{N_{\parallel}^3} \sum_{\substack{l_m \\ \eta\rho\alpha\beta}} \sum_{\substack{\mathbf{k}'_1 \mathbf{k}'_2 \\ \mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2}} \chi_{l_1 l_2 l_m l_m}^{0\mu\nu\eta\rho}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \omega) U_{\eta\alpha\beta\rho}^{l_m} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{k}'_1, \mathbf{q}_2+\mathbf{k}'_2} \chi_{l_m l_m l_3 l_4}^{\alpha\beta\gamma\xi}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \omega) ,
\end{aligned} \tag{B.73}$$

onde substituímos a expressão de  $P$ , dada pela Eq. B.72. Entretanto, como vimos anteriormente, estas susceptibilidades generalizadas não são as transformadas de Fourier das susceptibilidades no espaço real,  $\tilde{\chi}$ . Para obter a relação entre estas últimas, devemos

trocar o segundo e o quarto índices das susceptibilidades, como mostrado na Eq. B.30. Fazendo isto, ficamos com

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \omega) &= \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \omega) \\ &- \frac{1}{N_{\parallel}^3} \sum_{\substack{l_m, k'_1 k'_2 \\ \eta\rho\alpha\beta}} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_m l_m}^{0\mu\nu\eta\rho}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}'_1, \mathbf{k}'_2, \omega) U_{\eta\alpha\beta\rho}^{l_m} \delta_{\mathbf{q}_1+\mathbf{k}'_1, -\mathbf{q}_2-\mathbf{k}'_2} \tilde{\chi}_{l_m l_m l_3 l_4}^{\alpha\beta\gamma\xi}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \omega) . \end{aligned} \quad (\text{B.74})$$

Podemos simplificar esta relação lembrando que a susceptibilidade na aproximação de Hartree-Fock, obtida na Eq. 3.123, pode ser escrita em termos das funções de Green monoelétrônicas da forma

$$\begin{aligned} \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j, \mathbf{R}_k, \mathbf{R}_l, \omega) &= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \times \\ &\times \left[ \tilde{G}_{l_4 l_1}^{\xi\mu\uparrow}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l, \omega') G_{l_2 l_3}^{\nu\gamma\downarrow}(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j, \omega' + \omega) \right. \\ &- \tilde{G}_{l_2 l_3}^{-\nu\gamma\downarrow}(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j, \omega') G_{l_4 l_1}^{-\xi\mu\uparrow}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l, \omega' - \omega) \\ &+ \tilde{G}_{l_2 l_3}^{\nu\gamma\downarrow}(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j, \omega') G_{l_4 l_1}^{-\xi\mu\uparrow}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l, \omega' - \omega) \\ &\left. - \tilde{G}_{l_4 l_1}^{-\xi\mu\uparrow}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l, \omega') G_{l_2 l_3}^{\nu\gamma\downarrow}(\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j, \omega' + \omega) \right] , \end{aligned} \quad (\text{B.75})$$

devido à simetria de translação dentro das camadas. Portanto, podemos notar que

$$\chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j, \mathbf{R}_k, \mathbf{R}_l, \omega) = \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l, \mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j, \omega) . \quad (\text{B.76})$$

Utilizando as Eqs. B.5 e B.6 para realizar a transformada de Fourier nos quatro índices da susceptibilidade HF, obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4) &= \sum_{\substack{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j \\ \mathbf{R}_k \mathbf{R}_l}} e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}_i + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{R}_j + \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{R}_k + \mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{R}_l)} \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j, \mathbf{R}_k, \mathbf{R}_l) \\ &= \sum_{\substack{\mathbf{R}_i \mathbf{R}_j \\ \mathbf{R}_k \mathbf{R}_l}} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l)} e^{i\mathbf{k}_3 \cdot (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j)} e^{i(\mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{R}_j} e^{i(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{R}_i} \times \\ &\quad \times \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l, \mathbf{R}_k - \mathbf{R}_j) \\ &= N_{\parallel}^2 \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0\mu\nu\gamma\xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3) \delta_{-\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2} \delta_{-\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_4} . \end{aligned} \quad (\text{B.77})$$

onde a susceptibilidade na aproximação de Hartree-Fock pode ser calculada em termos

das funções de Green como

$$\begin{aligned}
\tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0 \mu \nu \gamma \xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3) &= \sum_{\mathbf{R}' \mathbf{R}''} e^{i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{R}' + \mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{R}'')} \chi_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0 \mu \nu \gamma \xi}(\mathbf{R}', \mathbf{R}'') \\
&= \frac{i\hbar}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' f(\omega') \left[ \tilde{G}_{l_4 l_1}^{\xi \mu \uparrow}(\mathbf{k}_1, \omega') G_{l_2 l_3}^{\nu \gamma \downarrow}(\mathbf{k}_3, \omega' + \omega) \right. \\
&\quad - \tilde{G}_{l_2 l_3}^{-\nu \gamma \downarrow}(\mathbf{k}_3, \omega') G_{l_4 l_1}^{-\xi \mu \uparrow}(\mathbf{k}_1, \omega' - \omega) \\
&\quad + \tilde{G}_{l_2 l_3}^{\nu \gamma \downarrow}(\mathbf{k}_3, \omega') G_{l_4 l_1}^{-\xi \mu \uparrow}(\mathbf{k}_1, \omega' - \omega) \\
&\quad \left. - \tilde{G}_{l_4 l_1}^{-\xi \mu \uparrow}(\mathbf{k}_1, \omega') G_{l_2 l_3}^{\nu \gamma \downarrow}(\mathbf{k}_3, \omega' + \omega) \right], \tag{B.78}
\end{aligned}$$

Substituindo a Eq. B.77 na Eq. B.74, obtemos a relação geral entre a susceptibilidade RPA e HF

$$\begin{aligned}
\tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{\mu \nu \gamma \xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \omega) &= N_{\parallel}^2 \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_3 l_4}^{0 \mu \nu \gamma \xi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_3, \omega) \delta_{-\mathbf{k}_3 \mathbf{k}_2} \delta_{-\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_4} \\
&\quad - \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\substack{l_m \\ \eta \rho \alpha \beta}} \sum_{\mathbf{q}_1} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_m l_m}^{0 \mu \nu \eta \rho}(\mathbf{k}_1, -\mathbf{k}_2, \omega) U_{\eta \alpha \beta \rho}^{l_m} \tilde{\chi}_{l_m l_m l_3 l_4}^{\alpha \beta \gamma \xi}(\mathbf{q}_1, \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1 - \mathbf{q}_1, \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4, \omega). \tag{B.79}
\end{aligned}$$

Finalmente, vamos particularizar esta equação para encontrar a susceptibilidade magnética transversa que precisamos para calcular a corrente de spins, que é dada pela Eq. B.24. Lembrando que  $\chi_{l_1 l_2 l' l'}^{\mu \nu \gamma \gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{\mu \nu \gamma \gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, -\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, -\mathbf{k}'_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}, \omega)$  e substituindo os vetores de onda correspondentes

$$\begin{aligned}
\tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{\mu \nu \gamma \gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, -\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, -\mathbf{k}'_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) &= N_{\parallel}^2 \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{0 \mu \nu \gamma \gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, \omega) \delta_{\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{k}'_{\parallel}} \delta_{\mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel} \mathbf{k}_{\parallel}} \\
&\quad - \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\substack{l_m \\ \eta \rho \alpha \beta}} \sum_{\mathbf{q}_1} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_m l_m}^{0 \mu \nu \eta \rho}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega) U_{\eta \alpha \beta \rho}^{l_m} \tilde{\chi}_{l_m l_m l' l'}^{\alpha \beta \gamma \gamma}(\mathbf{q}_1, -\mathbf{q}_1, \mathbf{k}'_{\parallel}, -\mathbf{k}'_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}, \omega), \tag{B.80}
\end{aligned}$$

Para simplificar os cálculos, podemos reescrever a Eq. B.26 incluindo as somas em  $\mathbf{k}'_{\parallel}$  e em  $\gamma$  na susceptibilidade, de forma que

$$\langle I_S^+(t) \rangle = \frac{ig\mu_B h_0}{2} \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\substack{\mathbf{k}_{\parallel} \\ \mu \nu}} \sum_{\substack{l_1 \in V \\ l_2 \notin V}} e^{-i\omega t} \left[ t_{l_1 l_2}^{\mu \nu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{+-\mu \nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) - t_{l_2 l_1}^{\nu \mu}(\mathbf{k}_{\parallel}) \tilde{\chi}_{l_2 l_1 l' l'}^{+-\nu \mu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \right], \tag{B.81}$$

onde

$$\tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{+-\mu \nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel} \gamma} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{+-\mu \nu \gamma \gamma}(\mathbf{k}_{\parallel}, -\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}'_{\parallel}, -\mathbf{k}'_{\parallel} - \mathbf{q}_{\parallel}, \omega). \tag{B.82}$$

Esta função é a transformada de Fourier no tempo de

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{+ - \mu \nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, t) &= -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel} \gamma} \times \\ &\times \left\langle \left[ c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}, t) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel}, t), c_{l' \gamma \downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}'_{\parallel}) c_{l' \gamma \uparrow}(\mathbf{k}'_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) \right] \right\rangle \\ &= -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \left\langle \left[ c_{l_1 \mu \uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_{\parallel}, t) c_{l_2 \nu \downarrow}(\mathbf{k}_{\parallel}, t), S_{l'}^{-}(-\mathbf{q}_{\parallel}) \right] \right\rangle ,\end{aligned}\quad (\text{B.83})$$

com  $S^{-}$  dado pela Eq. B.17.

Para obter a susceptibilidade mostrada na Eq. B.82, somamos a Eq. B.80 em  $\mathbf{k}'_{\parallel}$  e em  $\gamma$ , de modo que

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{\mu \nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) &= N_{\parallel} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{0 \mu \nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega) \delta_{\mathbf{q}_{\parallel} 0} \\ &- \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{l_m} \sum_{\mathbf{q}_1} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_m l_m}^{0 \mu \nu \eta \rho}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega) U_{\eta \alpha \beta \rho}^{l_m} \tilde{\chi}_{l_m l_m l' l'}^{\alpha \beta}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) ,\end{aligned}\quad (\text{B.84})$$

A simetria planar na susceptibilidade exige que as susceptibilidades usuais sejam da forma

$$\chi_{l_m l_m l' l'}^{\alpha \beta}(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) = \chi_{l_m l_m l' l'}^{\alpha \beta}(\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) \delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_{\parallel}} . \quad (\text{B.85})$$

Isso pode ser entendido pela susceptibilidade mostrada na Eq. B.75, que, para o caso  $l_1 = l_2$  e  $l_3 = l_4$ , só dependerá de  $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_l$ . Portanto, sua transformada pro espaço recíproco só pode depender de um vetor de onda  $\mathbf{k}_{\parallel}$ . Logo, a Eq. B.84 fica

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{\mu \nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) &= N_{\parallel} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l' l'}^{0 \mu \nu}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega) \delta_{\mathbf{q}_{\parallel} 0} \\ &- \frac{1}{N_{\parallel}} \sum_{l_m} \tilde{\chi}_{l_1 l_2 l_m l_m}^{0 \mu \nu \eta \rho}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}, \omega) U_{\eta \alpha \beta \rho}^{l_m} \tilde{\chi}_{l_m l_m l' l'}^{\alpha \beta}(\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, \omega) .\end{aligned}\quad (\text{B.86})$$

Esta equação pode ser resolvida da mesma maneira que a Eq. 3.106. Obtemos, portanto, a susceptibilidade magnética transversa generalizada na representação mista e, com ela, calculamos a corrente de spins mostrada na Eq. B.26.

## *Referências*

- [1] Y. Tserkovnyak, A. Brataas e G. E. W. Bauer, Phys. Rev. Letters **88**, 117601 (2002); Phys. Rev. B **66**, 060404 (2002); Phys. Rev. B **66**, 224403 (2003); Phys. Rev. B **67**, 140404 (2003).
- [2] F. S. M. Guimarães, D. F. Kirwan, A. T. Costa, R. B. Muniz, D. L. Mills e M. S. Ferreira, Phys. Rev. B **81**, 153408 (2010).
- [3] F. S. M. Guimarães, A. T. Costa, R. B. Muniz e M. S. Ferreira, Phys. Rev. B **81**, 233402 (2010).
- [4] Moore, G. E., Electronics Magazine. pp. 4. (1965).
- [5] <http://blogs.intel.com/research/2007/08/enforcingmooreslaw.php>.
- [6] [http://blogs.intel.com/research/2008/09/enforcing\\_moores\\_law\\_through\\_t.php](http://blogs.intel.com/research/2008/09/enforcing_moores_law_through_t.php).
- [7] [http://blogs.intel.com/research/2009/12/enforcing\\_moores\\_law\\_part3.php](http://blogs.intel.com/research/2009/12/enforcing_moores_law_part3.php).
- [8] [http://blogs.intel.com/technology/2010/11/enforcing\\_moores\\_law\\_through\\_t.php](http://blogs.intel.com/technology/2010/11/enforcing_moores_law_through_t.php).
- [9] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Moln , M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, e D. M. Treger, Science 294, 1488 - 1495 (2001).
- [10] I. Zutic, J. Fabian, e S. Das Sarma, Rev. Mod. Phys. 76, 323 (2004).
- [11] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich, e J. Chazelas, Phys. Rev. Letters 61, 2472 (1988).
- [12] G. Binasch, P. Gr nberg, F. Saurenbach, e W. Zinn, Phys. Rev. B 39, 4828 (1989).
- [13] M. V. Costache, M. Sladkov, S. M. Watts, C. H. van der Wal, e B. J. van Wees, Phys. Rev. Letters 97, 216603 (2006).
- [14] A. Takeuchi, K. Hosono, e G. Tatara, Phys. Rev. B 81, 144405 (2010).
- [15] J. Lindner, I. Barsukov, C. Raedor, C. Hassel, O. Posth, R. Meckenstock, P. Leeros e D. L. Mills, Phys. Rev. B **80**, 224421 (2009).
- [16] L. Berger, Phys. Rev. B **54**, 9353 (1996).
- [17] J. Slonczewski, J. Magn. Mater. **195**, L261 (1999).
- [18] R. Urban, G. Woltersdorf e B. Heinrich, Phys. Rev. B **87**, 217204 (2001).
- [19] G. Woltersdorf, O. Mosendz, B. Heinrich e C. H. Beck, Phys. Rev. Letters **99**, 246603 (2007).

- [20] S. Datta e B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [21] Y. Tserkovnyak, A. Brataas, G. E. W. Bauer e B. I. Halperin, Rev. Mod. Physics **77**, 1375 (2005).
- [22] M. Zwierzycki, Y. Tserkovnyak, P. J. Kelly e G. E. W. Bauer, Phys. Rev. B **71**, 064420 (2005).
- [23] A. T. Costa, R. B. Muniz e D. L. Mills, Phys. Rev. B **73**, 054426 (2006).
- [24] K. Lenz, T. Tolinski, J. Lindner, E. Kosubek, e K. Baberschke, Phys. Rev. B **69**, 144422 (2004).
- [25] R. Vollmer, M. Etzkorn, P. S. Anil Kumar, H. Ibach. e J. Kirschner Phys. Rev. Letters **91**, 147201 (2001).
- [26] J. Wang e K. S. Chan, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 445801 (2010).
- [27] B. K. Nikolic, L. P. Zarbo, S. Souma, "The Oxford Handbook on Nanoscience and Technology: Frontiers and Advances", Volume I, Capítulo 24, 814-866, editado por A. V. Narlikar e Y. Y. Fu (Oxford University Press, Oxford, 2010); arXiv:0907.4122v1 [cond-mat.mes-hall].
- [28] A. T. Costa, R. B. Muniz e D. L. Mills, Phys. Rev. B **70**, 054406 (2004).
- [29] R. B. Muniz e D. L. Mills, Phys. Rev. B **68**, 224414 (2003).
- [30] E. Saitoh, M. Ueda, H. Miyajima e G. Tatara, Appl. Phys. Lett. **88**, 182509 (2006), H. Y. Inoue, K. Harii, K. Ando, K. Sasage e E. Saitoh, J. Appl. Phys. **102**, 083915 (2007), K. Ando, Y. Kajiwara, S. Takahashi, S. Maekawa, K. Takemoto, M. Takatsu e E. Saitoh, Phys. Rev. B **78**, 014413, (2008), Y. S. Gui, N. Mecking, X. Zhou, G. Williams e C. M. Hu, Phys. Rev. Letters **98**, 107602 (2007) e Phys. Rev. B **76**, 224430 (2007), O. Mosendz. J. E. Pearson, F. Y. Fradin, G. E. Bauer, S. D. Bader e A. Hoffmann, Phys. Rev. Letters **104**, 046601 (2010).
- [31] A. T. Costa, R. B. Muniz, S. Lounis, A. B. Klautau e D. L. Mills, Phys. Rev. B **82**, 014428 (2010).
- [32] A. A. Khajetoorians, S. Lounis, B. Chilian, A. T. Costa, L. Zhou, D. L. Mills, J. Wiebe e R. Wiesendanger, Phys. Rev. Letters **106**, 037207 (2011).
- [33] A. A. Starikov, P. J. Kelly, A. Brataas, Y. Tserkovnyak e G. E. W. Bauer, Phys. Rev. Lett. **105**, 236601 (2010).
- [34] A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions*, Vol. 2 of Cambridge Studies in Magnetism, (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- [35] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).
- [36] M. Büttiker, H. Thomas e A. Prêtre, Z. Phys. B **94**, 133 (1994).
- [37] P. W. Brouwer, Phys. Rev. B **58**, R10 135 (1998).

- [38] Ya. M. Blanter, M. Buttiker, Phys. Rep. 336, 1 (2000); arXiv:cond-mat/9910158v2 [cond-mat.mes-hall].
- [39] M. Moskalets e M. Büttiker, Phys. Rev. B **66**, 205320 (2002).
- [40] Hui Pan, Shengyuan A Yang e Qian Niu, J. Phys.: Condens. Matter **22** 275302 (2010); G. M. M. Wakker, M. Blaauboer, Phys. Rev. B **82**, 205432 (2010).
- [41] G. Woltersdorf, *Spin-pumping and two-magnon scattering in magnetic multilayers*, Tese de doutorado (Martin-Luther-Universität, Halle, 2004).
- [42] B. Heinrich, Y. Tserkovnyak, G. Woltersdorf, A. Brataas, R. Urban e G. E. W. Bauer, Phys. Rev. Letters **90**, 187601 (2003).
- [43] M. V. Costache, S. M. Watts, C. H. van der Wal e B. J. van Wees, Phys. Rev. B **78**, 064423 (2008).
- [44] R. B. Muniz e D. L. Mills, Phys. Rev. B **66**, 174417 (2002).
- [45] A. Azevedo, L. H. Vilela-Leão, R. L. Rodrigues-Suárez, A. F. Lacerda Santos e S. M. Rezende, Phys. Rev. Letters (aceito para publicação).
- [46] J. Hirsch, Phys. Rev. Letters **83**, 1834 (1999).
- [47] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Vol. 7 of Springer Series in Solid State Sciences, (Spinger Verlag, Heidelberg, 2006).
- [48] D. M. Edwards, J. Mathon, R. B. Muniz e M. S. Phan, Phys. Rev. Letters **67**, 493 (1991), e J. Phys.: Condens. Matter **3**, 4941 (1991); P. Bruno e C. Chappert, Phys. Rev. Letters **67**, 1602 (1991), e Phys. Rev. B **46**, 261 (1992).
- [49] T. Valet e A. Fert, Phys. Rev. B **48**, 7099 (1993).
- [50] P.R. Wallace, Physical Review **71**, 622 (1947).
- [51] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva e A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).
- [52] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, D. C. Elias, J. A. Jaszczak e A. K. Geim, Phys. Rev. Letters **100**, 016602 (2008).
- [53] N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc, H. T. Jonkman e B. J. van Wees, Nature **448**, 571 (2007).
- [54] L. V. Radushkevich e V. M. Lukyanovich, Zurn. Fisic. Chim. **26**, 88 (1952).
- [55] S. Iijima, Nature **354**, 56 (1991).
- [56] X. Wang, Q. Li, J. Xie, Z. Jin, J. Wang, Y. Li, K. Jiang e S. Fan, Nano Lett. **9**, 3137-3141 (2009).
- [57] M.-F. Yu, O. Lourie, M. J. Dyer, K. Moloni, T. F. Kelly e R. S. Ruoff, Science **287**, 637-640 (2000).
- [58] E. Pop, D. Mann, Q. Wang, K. Goodson e H. Dai, Nano Lett. **6**, 96-100 (2006).

- [59] Y. G. Semenov, J. M. Zavada e K. W. Kim, *Phys. Rev. B* **82**, 155449 (2010).
- [60] T. Dürkop, S. A. Getty, E. Cobas e M. S. Fuhrer, *Nano Lett.* **4**, 35 (2004).
- [61] K. Wakabayashi, M. Fujita, H. Ajiki e M. Sigrist, *Phys. Rev. B* **59**, 8271-8282 (1999).
- [62] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov e A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
- [63] M. Ishigami, J. H. Chen, W. G. Cullen, M. S. Fuhrer e E. D. Williams, *Nano Lett.* **7**, 1643 (2007).
- [64] M. Terrones, *Nature* **458**, 845 (2009).
- [65] E. J. G. Santos, A. Ayuela, S. B. Fagan, J. Mendes Filho, D. L. Azevedo, A. G. Souza Filho e D. Sanchez-Portal, *Phys. Rev. B* **78**, 195420 (2008).
- [66] A. V. Krasheninnikov, P. O. Lehtinen, A. S. Foster, P. Pyykko e R. M. Nieminen, *Phys. Rev. Letters* **102**, 126807 (2009).
- [67] S. Latil, S. Roche, D. Mayou e J. C. Charlier, *Phys. Rev. Letters* **92**, 256805 (2004).
- [68] C. G. Rocha, A. Wall, A. R. Rocha e M. S. Ferreira, *J. Phys.: Cond. Matter* **19**, 346201 (2007).
- [69] A. H. Castro Neto e F. Guinea, *Phys. Rev. Letters* **103**, 026804 (2009).
- [70] A. T. Costa, D. F. Kirwan e M. S. Ferreira, *Phys. Rev. B* **72**, 085402 (2005).
- [71] D. F. Kirwan, V. M. de Menezes, C. G. Rocha, A. T. Costa, R. B. Muniz, S. B. Fagan e M. S. Ferreira, *Carbon* **47**, 2533 (2009).
- [72] A. T. Costa, R. B. Muniz e M. S. Ferreira, *New J. Phys.* **10**, 063008 (2008).
- [73] A. T. Costa, R. B. Muniz, M. S. Ferreira e D. L. Mills, *Phys. Rev. B* **78**, 214403 (2008).
- [74] O. V. Yazyev, *Nano Lett.* **8**, 1011 (2008).
- [75] C. L. Kane e E. J. Mele, *Phys. Rev. Letters* **95**, 226801 (2005).
- [76] N. M. R. Peres, F. Guinea e A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **72**, 174406 (2005).
- [77] M. Wimmer, I. Adagideli, S. Berber, D. Tomanek e K. Richter, *Phys. Rev. Letters* **100**, 177207 (2008).
- [78] M. B. Lundeberg, J. A. Folk, *Nat. Phys.* **5**, 894 (2009).
- [79] S. Cho, Y.-F. Chen e M. S. Fuhrer, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 123105 (2007).
- [80] M. Ohishi, M. Shiraishi, R. Nouchi, T. Nozaki, T. Shinjo e Y. Suzuki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **46**, L605-L607 (2007).
- [81] E. Prada, P. San-Jose e H. Schomerus, *Phys. Rev. B* **80**, 245414 (2009).

- [82] S. H. Chen, B. K. Nikolic e C. R. Chang, Phys. Rev. B **81**, 035428 (2010).
- [83] P. Venezuela, R. B. Muniz, A. T. Costa, D. M. Edwards, S. R. Power e M. S. Ferreira, Phys. Rev. B **80**, 241413(R) (2009).
- [84] Y. Gan, L. Sun e F. Banhart, Small **4**, 587 (2008).
- [85] M. Ushiro, K. Uno, T. Fujikawa, Y. Sato, K. Tohji, F. Watari, W. J. Chun, Y. Koike e K. Asakura, Phys. Rev. B **73**, 144103 (2006).
- [86] O. Cespedes, M. S. Ferreira, S. Sanvito, J. M. D. Coey e M. Kociak, J. Phys.: Condens. Matter **16**, L155 (2004).
- [87] M. S. Ferreira e S. Sanvito, Phys. Rev. B **69**, 035407 (2004).
- [88] P. Esquinazi, D. Spemann, R. Höhne, A. Setzer, K.-H. Han e T. Butz, Phys. Rev. Letters **91**, 227201 (2003).
- [89] M. Katsnelson, K. Novoselov e A. Geim, Nat. Phys. **2**, 620 (2006).
- [90] O. Roslyak, A. Iurov, G. Gumbs e D. Huang, J. Phys.: Cond. Matter **22**, 165301 (2010).
- [91] D. F. Kirwan, C. G. Rocha, A. T. Costa e M. S. Ferreira, Phys. Rev. B **77**, 085432 (2008).
- [92] S. Saremi, Phys. Rev. B **76**, 184430 (2007).
- [93] V. V. Cheianov, V. Falko e B. L. Altshuler, Science **315**, 1252 (2007).
- [94] Ali G. Moghaddam e Malek Zareyan, Phys. Rev. Letters **105**, 146803 (2010).
- [95] J. Mathon, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 2505 (1989).
- [96] A. Umerski, Phys. Rev. B **55**, 5266 (1997).
- [97] D. Kirwan, *Theoretical Studies of Carbon Nanotubes Interacting with Magnetic Atoms*, Tese de doutorado (University of Dublin, Trinity College, Dublin, 2009).
- [98] J. Shi, P. Zhang, D. Xiao, e Q. Niu, Phys. Rev. Letters **96**, 076604 (2006).