

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

**MAGNETOCONDUTIVIDADE E LOCALIZAÇÃO FRACA
DE SISTEMAS MULTIBANDAS COM ANISOTROPIA DE
MASSA E EXPANSÃO $1/N$ NO MODELO DE WEGNER ¹**

Sergio Garcia Magalhães

Tese apresentada ao Instituto de Física da UFRGS, sob orientação da Dra. Alba Theumann, em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Porto Alegre, Janeiro de 1993.

¹Trabalho Financiado pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Agradecimentos

Dra. Alba Theumann, pela orientação;

P. Krebs e Virgínia, pela paciência na edição do texto;

Grazzi, pela ajuda nas correções;

todos que ajudaram a conclusão deste trabalho.

Resumo

O problema da universalidade do Efeito de Localização Fraca (ELF) juntamente com correções em ordem $1/N$ do modelo de Wegner [13] são estudadas em presença de campo magnético utilizando os auto-estados exatos de Landau segundo o método da referência [6]. Inicialmente calculamos a magnetocondutividade de um gás de elétrons com massas anisotrópicas onde os potenciais espalhadores são distribuídos aleatoriamente. Posteriormente, focalizamos um sistema de duas bandas desordenado onde são permitidos espalhamentos intrabandas e interbandas. Este modelo é explorado com e sem campo magnético. Os resultados indicam que a universalidade do ELF nos modelos citados acima se mantém no limite de campo fraco, bastando redefinir uma constante de difusão e um tempo de relaxação efetivos. Num segundo momento, também calculamos correções em ordem $1/N$ à magnetocondutividade no modelo de Wegner em três dimensões pelo método já citado, obtendo que a divergência no limite infravermelho é eliminada pela presença do campo através da frequência de ciclotron. Um ponto importante a respeito deste modelo é a maneira como calculamos a magnetocondutividade dada a complexidade dos diagramas de Feynman que aparecem a ordem $1/N$ neste modelo. Mostramos que, de maneira geral, existem duas formas equivalentes de cálculo daquela quantidade (fórmula de Einstein e Abrikosov). No entanto, pela estrutura de cada uma delas e sob certas circunstâncias bem específicas, como por exemplo, os potenciais aleatórios serem de contato, alguns diagramas que aparecem na expansão perturbativa de uma forma de cálculo (Einstein), são suprimidos em outra (Abrikosov), fato este que pode trazer simplificações, como é o caso concreto do modelo de Wegner em limite de campo fraco. Isto faz com que adotemos a fórmula de Abrikosov como estratégia de cálculo da condutividade em todos os modelos estudados neste trabalho.

Abstract

The problem of the universality of the weak localization Effect (WLE) and corrections in order $1/N$ to Wegner's model are studied in the presence of a magnetic field with a method based on Landau exact eigen-states according to the reference [6]. First, the magnetoconductivity of an anisotropic mass electron gas, in which the scatterer potentials are distributed randomly, was calculated. Second, it was studied a two band disordered system, in which intraband and interband scatterings are allowed. This model is explored with and without magnetic field. The results show that the WLE universality in the models mentioned before remains in the weak field limit, since an effective constant of diffusion and an effective time of relaxation are redefined. After that, it were also calculated corrections in order $1/N$ to the magnetoconductivity in the Wegner's model in three dimensions with the method mentioned before that and the result was the divergence in the infra-red limit is eliminated by the field presence through the cyclotron frequency. Because the complexity of the Feynman diagrams in this model, it is important to highlight the way the magnetoconductivity was calculated. In general it was showed that there are two equivalent ways to calculate that quantity (Einstein and Abrikosov formulas). However, because of their structures and under certain specific circumstances, such as contact random potentials, some diagrams which appear in the perturbative expansion of one kind of calculation (Einstein) are suppressed in the other (Abrikosov). This fact may offer some simplification, as it is the case in the Wegner model in weak field limit. For this, Abrikosov formula was used to calculate the conductivity in all the models studied in this thesis.

Sumário

1	Transição de Localização e Efeito de Localização Fraca	6
1.1	Introdução	6
1.2	Localização e EFL	8
2	Teoria de Perturbação em Sistemas Desordenados	24
2.1	Introdução	24
2.2	As Funções Correlação	25
3	Universalidade em Localização Fraca	43
3.1	Introdução	43
3.2	Anisotropia de Massa	50
3.3	Duas Bandas Equivalentes sem Campo Magnético	60
3.4	Duas Bandas Equivalentes em Campo Magnético	67
4	Magnetocondutividade no Modelo de Wegner em Ordem $1/N$	79
4.1	Introdução	79
4.2	O Modelo de Wegner em Campo Magnético	81
4.3	A Magnetocondutividade	87
5	Conclusões	111
5.1	Discussão Final	111

Capítulo 1

Transição de Localização e Efeito de Localização Fraca

1.1 Introdução

Nos últimos anos, o problema de localização em sistemas desordenados recebeu grande atenção, tanto teórica quanto experimental. Da formulação de uma teoria de escala por Abrahams et al. [16] passando, por exemplo, pela expansão perturbativa a partir do regime metálico, ou a construção de um modelo de sistema desordenado de N elétrons [13], até a emergência do modelo sigma-não linear proposto por Wegner como provável Lagrangeana do problema de localização, realça a extrema fecundidade deste campo de pesquisa.

Do ponto de vista experimental [12], este tema também produziu grande atividade, associada às relativamente recentes facilidades de obtenção em laboratórios de filmes finos, relacionado ao fato de que a transição de localização é crucialmente determinada pela dimensionalidade do sistema. Nestas condições, medidas de condutividade em filmes finos podem ser comparadas com os resultados previstos pela teoria para duas dimensões.

Por outro lado, é conhecido que a presença do campo magnético tem influência relevante no problema de localização [17], provocando modificações importantes na transição. Especificamente, no âmbito de uma expansão perturbativa, a presença do campo magnético tem sido introduzida na forma de uma aproximação semiclássica [11], onde a função de Green de duas Partículas (G_2) no espaço recíproco é calculada sem campo, sendo este introduzido diretamente na G_2 substituindo \vec{p} por $(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})$, onde \vec{A} é o vetor potencial.

Exatamente na expansão perturbativa, encontra-se um dos resultados mais importantes do problema de localização: o Efeito de Localização Fraca (ELF). Este efeito está relacionado com a interferência construtiva das funções de onda dos elétrons, quando espalhados pelas impurezas localizadas aleatoriamente no sistema. Teoricamente, o ELF é calculado expandindo a função de Green de duas partículas, somando a série de diagramas conhecidos como maximamente cruzados [12].

O modelo, entretanto, originalmente utilizado para realizar a expansão perturbativa é uma versão bastante simplificada, onde existem somente elétrons em uma banda sendo espalhados pelas impurezas. A questão que emerge naturalmente é: admitindo a possibilidade de espalhamentos mais complexos, o ELF se manterá inalterado? Dito de outra maneira, significa especular sobre o caráter de universalidade do ELF, no sentido de este independe dos detalhes específicos do sistema. Podemos ir além, e perguntar também a respeito da universalidade da Localização Fraca em *presença do campo magnético*. Nestas condições é bastante discutível se a aproximação semiclássica é capaz de responder satisfatoriamente esta questão, na medida em que introduz o campo magnético ao final dos cálculos. Seria interessante estudar a presença do campo magnético partindo dos auto-estados exatos de Landau, verificando como se comportam estas funções de onda quando espalhadas pelas impurezas, com o objetivo de testar a existência de alguma universalidade do ELF.

Outro modelo importante em teoria de perturbações no problema de localização foi introduzido por Wegner [13]. Trata-se de um sistema de N elétrons em presença de potencial aleatório, cuja qualidade especial reside na organização hierárquica termo por termo da expansão das funções de Green de uma e duas partículas como potências de $1/N$. O modelo reproduz as propriedades esperadas de localização: é condutor quando $N \rightarrow \infty$ e apresenta divergência infravermelha em ordem $1/N$ para duas dimensões. A pergunta, neste caso, é imediata: quais seriam as consequências neste modelo da presença do campo magnético? É possível perceber efeitos de quebra de localização?

Esta tese se organiza, portanto, no sentido de responder, em parte, a estas questões levantadas anteriormente. No restante deste capítulo, introduzimos o problema de localização,

em particular revisitamos o ELF.

No capítulo seguinte, discutimos a estrutura da teoria de perturbação para sistemas desordenados e em particular como calcular a condutividade, mostrando a equivalência da fórmula de Einstein com a função de difusão e a fórmula de Abrikosov, resultado importante, pois como veremos no Capítulo 4, a utilização desta traz convenientes simplificações no cálculo da magnetocondutividade.

No Capítulo 3, estudamos o caráter de universalidade do ELF através de um modelo de gás elétrons com massas anisotrópicas, em presença de campo magnético, utilizando o método da referência [6] que permite incluir o campo desde o início. Depois, olhamos para um modelo de gás com dois tipos de elétrons representados em bandas de energia diferentes, inicialmente sem campo magnético, desta forma permitindo espalhamentos mais complexos entre elétrons e impurezas. Após, trabalhamos sobre o mesmo modelo (com três dimensões), em campo magnético utilizando novamente a referência [6] como princípio de cálculo para magnetocondutividade.

No Capítulo 4, tratamos com um sistema de N tipos de elétrons (introduzido por Wegner [13]) em presença de campo magnético em três dimensões. Realizando uma expansão sobre o parâmetro $1/N$, derivamos de forma alternativa em relação à referência [15], a obtenção de série diagramática para as Funções de Green de uma partícula no limite em que $N = \infty$ e ordem $1/N$ para a função de Green de duas partículas. Aplicando a fórmula de Abrikosov sobre os diagramas correspondendo a correções em ordem $1/N$, mostramos que uma parte destes diagramas se anula, simplificando bastante o cálculo final da magnetocondutividade.

Por fim, o último capítulo é dedicado a discutirmos resultados obtidos nos capítulos anteriores, buscando obter uma interpretação física para o problema da universalidade.

1.2 Localização e EFL

A teoria de localização de Anderson trata como se comportam as funções de onda dos elétrons na presença de um potencial aleatório. A idéia básica é que a presença destes altere profundamente a natureza dos estados eletrônicos [20].

Para ilustrar as afirmações acima, poderíamos pensar num metal com presença de impurezas distribuídas aleatoriamente. Desta maneira, se definimos uma escala l (livre caminho médio), a partir do qual a função de onda perde a coerência de fase, podemos ter tipicamente dois regimes do comportamento:

1) Se $\lambda/l \ll 1$ (λ é o comprimento de onda da função de onda eletrônica), estamos na fase condutora, os elétrons são estendidos e a condutividade é dada pela fórmula de Drude.

2) À medida que aumentamos a concentração de impurezas, isto é, a desordem, a escala l se modifica até que quando $\lambda/l \geq 1$, o módulo ao quadrado da função de onda decai exponencialmente como:

$$|\Psi(\vec{r})|^2 \sim e^{-r/\xi} \quad (1.1)$$

onde ξ é o comprimento de localização. Nestas condições os estados eletrônicos são localizados e o sistema está na fase isolante.

A pergunta agora é: como caracterizar a transição condutora-isolante induzida pela presença do potencial aleatório? Evidentemente, a quantidade utilizada para descrever a transição é a condutividade. Supondo uma lei de potência para a condutividade do tipo [20]:

$$\sigma \sim (E_F - E_c)^t \quad (1.2)$$

na qual E_F é a energia de Fermi e E_c é um parâmetro chamado borda de mobilidade, quando $E_F \gg E_c$, o elétron se comporta essencialmente como uma partícula livre e estamos no regime metálico (condutor); aumentando a taxa de espalhamento dos elétrons pelas impurezas, E_c se aproxima de E_F até a anulação completa da condutividade. A conexão entre a expressão (1.2) e a influência do potencial aleatório sobre os estados eletrônicos consiste em associar E_c com a intensidade da desordem, dada pela razão λ/l (ou $\frac{1}{E_F \tau}$ se definimos o tempo de relaxação $\tau = l/v_F$). Se por exemplo, a concentração de impurezas se modifica, então E_c deve necessariamente se alterar [18].

Se aceitamos que não existe um limite mínimo para l , e portanto para E_c , o sistema

deve mudar continuamente de estado caracterizando uma transição de segunda ordem. Isto nos remete para a obtenção de uma teoria de escala para localização.

O problema é encontrar um parâmetro dependente da escala macroscópica L , que seja adequado para indicar se os estados são localizados ou estendidos. Nesta linha de abordagem, imaginemos um sistema macroscópico composto pela adição de cubos de lado L , onde os estados eletrônicos deste novo sistema seriam combinações lineares dos estados no cubo. A questão é: como caracterizar a mudança na natureza dos estados de um cubo simples à medida que variamos seu lado L ? Para responder a esta pergunta, Thouless [19] introduziu a quantidade $\frac{\Delta E}{\delta\Omega}$, onde ΔE é a variação de energia dos estados no cubo submetido à condição de contorno periódica ou anti-periódica e $\delta\Omega$ é o espaçamento dos níveis de energia dentro do cubo. Se o estado é localizado dentro do cubo, ΔE não é afetado pelas condições de contorno. No limite oposto, quando os estados são estendidos, $\frac{\Delta E}{\delta\Omega}$ se modifica, sensível à presença da condição de contorno. Desta forma, $\frac{\Delta E}{\delta\Omega}$ serve como referência para descrever o problema de transição de estados eletrônicos de localizados para estendidos.

Com base na concepção de Thouless, de colocar o problema em termos de um parâmetro simples, Abrahams et al [16] construíram uma teoria de escala definindo uma condutância adimensional g . Nesta teoria, a condutância é uma referência a partir de onde se pode estabelecer qual o regime de condução elétrica do sistema. De fato, existe uma conexão entre g e $\frac{\Delta E}{\delta\Omega}$ [16], e pode-se mostrar que estas duas quantidades coincidem exatamente na fase condutora.

O comportamento de g é conhecido nos dois limites assintóticos. Quando estamos na região metálica, onde $(K_F l)^{-1} \ll 1$ e $L \gg l$, temos uma dependência da g com a escala do tipo mostrada na equação (1.3):

$$g(L) = \sigma L^{d-2} \tag{1.3}$$

com σ sendo a condutividade e d a dimensão do sistema. Por sua vez, g se comporta na região localizada como:

$$g(L) = e^{-L/\xi} \quad (1.4)$$

O objetivo da teoria é estabelecer como g varia como função de L entre os dois comportamentos limite. Fazendo a suposição que g , numa nova escala, depende somente da própria g em uma escala anterior:

$$g(bL) = f(b, g(L)) \quad (1.5)$$

a variação de g com a escala pode ser dada de forma contínua pela equação:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (1.6)$$

onde $\beta(g)$ depende *unicamente* de g .

Na região metálica, $\beta(g)$ pode ser determinado com o auxílio da equação (1.3). Quando $g \rightarrow \infty$, temos;

$$\beta(g) = d - 2 \quad (1.7)$$

No pólo oposto, em que os estados são localizados, da equação (1.4), encontramos:

$$\beta(g) = \ln(g/g^*) \quad (1.8)$$

Com a hipótese de que $\beta(g)$ é uma função contínua e monótona, Abrahams et al. interpolaram o comportamento da $\beta(g)$, entre os limites dados nas equações (1.7) e (1.8) e obtiveram a forma geral expressa na Fig(1.1).

Podemos observar dois comportamentos bem distintos para duas e três dimensões. Analisando inicialmente o caso $d = 3$, quando os estados se situam na região condutora pela equação (1.3), temos $\beta(g) \geq 0$. Por outro lado, na região isolante, dada a forma de g (ver equação (1.4)), $\beta(g) \leq 0$. Desta maneira existe um g crítico obtido pela condição $\beta(g_c) = 0$. Se fixamos a desordem estabelecendo um determinado l , correspondendo a um certo valor g_0 , duas situações podem acontecer:

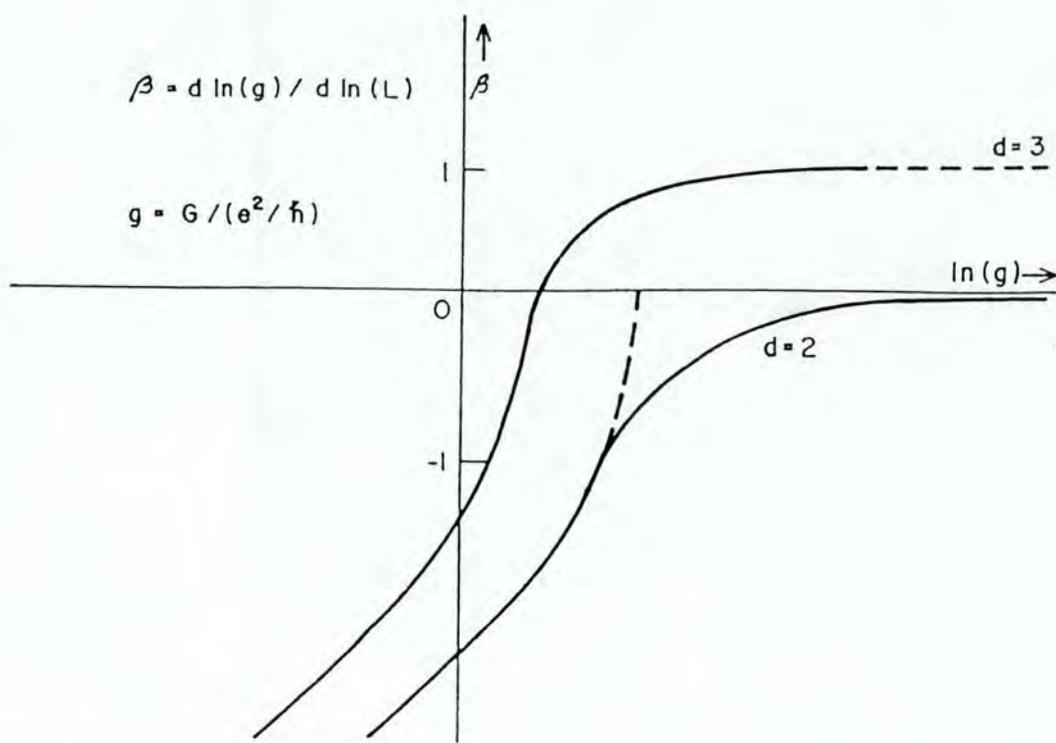


Figura 1.1: O comportamento da $\beta(g)$ em duas e três dimensões

1) Para $g_0 \geq g_c$, aumentamos a escala a partir de l ; g aumenta e o sistema se move ao longo da curva que define $\beta(g)$ em direção ao comportamento metálico;

2) Para $g_0 \leq g_c$, aumentamos novamente a escala partindo do mesmo ponto; g diminui. Neste caso, o sistema se dirige para a região isolante.

Neste sentido, g_c é um ponto fixo instável na teoria, pequenas variações da condutância levam o sistema para uma das situações limite, metálica ou isolante.

Em duas dimensões a situação muda significativamente, $\beta(g) \leq 0$ em qualquer ponto da curva na Fig.(1.1). Desta maneira, a teoria prevê que o sistema permanecerá *sempre* no regime localizado, independente do grau de desordem. Esta previsão é responsável por intensa atividade na área experimental com medidas de condutividade e magnetocondutividade em filmes finos.

Estabelecido qualitativamente o problema de transição através do comportamento de $\beta(g)$, Abrahams et al. [16] propuseram uma expansão perturbativa a partir da fase metálica

da forma:

$$\beta(g) = d - 2 - \frac{a}{g} \quad (1.9)$$

Esta correção pode ser avaliada como correspondendo a processos de retro-espalhamento dos elétrons pelas impurezas. Em termos de diagramas de Feynman, significaria considerar os diagramas conhecidos como maximamente cruzados (ver Fig.(2.1)). Somando a série inteira destes diagramas, os resultados para duas e três dimensões são colocados a seguir:

$$\sigma_{3d} = \frac{ne^2\tau}{m} - \frac{2e^2}{\pi^3} \left[\frac{1}{l} - \frac{1}{L} \right] \quad (1.10)$$

$$\sigma_{2d} = \frac{ne^2\tau}{m} - \frac{e^2}{\hbar\pi^2} \ln \left[\frac{L}{l} \right] \quad (1.11)$$

O efeito físico associado a esta correção ao regime metálico é conhecido como Efeito de Localização Fraca (ELF). No contexto da teoria da escala descrita anteriormente, ele aparece como o mecanismo inicial de transição, retirando o sistema da fase condutora para colocá-lo na direção de transição.

O ELF pode ser interpretado como produto da interferência coerente das funções de onda quando espalhadas pelas impurezas distribuídas aleatoriamente pelo sistema [12]. Pela natureza deste mecanismo, percebe-se que ele está além das fronteiras de abrangência de um tratamento clássico. Desta maneira, um tratamento quântico se faz mais adequado para abordar o problema. Por exemplo, se a presença do campo magnético modifica as funções de onda, estas deveriam ser o novo ponto de partida para os cálculos no ELF.

A situação discutida acima pode ser entendida supondo a existência de caminhos especiais, que produzem as condições de interferência coerente das funções de onda. Estes caminhos são chamados auto-intersectantes. Consideremos estados quânticos associados aos elétrons quando espalhados pelas impurezas. Tomando dois estados com amplitudes A_1 e A_2 , se o espalhamento é incoerente, a probabilidade de se encontrar a partícula em algum ponto do caminho $A \rightarrow B$ (ver caminhos um e dois da Fig.(1.2)), é dado pela equação (1.12).

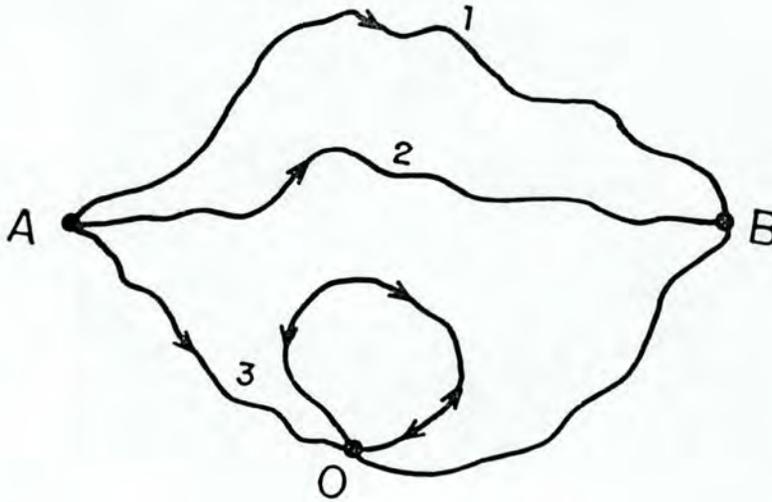


Figura 1.2: Possíveis caminhos entre A e B. O caminho 3 é auto-intersectante.

$$\omega = |A_1|^2 + |A_2|^2 \quad (1.12)$$

Entretanto, no espalhamento coerente com os estados em fase, esta mesma probabilidade é aumentada como:

$$\omega = |A_1|^2 + |A_2|^2 + 2\text{Re}A_1A_2^* \quad (1.13)$$

onde o termo adicional se refere à interferência construtiva das duas amplitudes. Esta situação pode ser ilustrada pelo caminho três da Fig.(1.2). No ponto O, temos uma interferência construtiva das funções de onda. Isto significa, que durante a trajetória de A para B por este caminho especial, o elétron acaba se localizando com maior probabilidade neste ponto. Estes argumentos ilustram o processo de aparição do ELF como tipicamente de correções quânticas.

A interpretação usual do efeito [12] supõe um elétron com função de onda $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, sendo espalhado de forma coerente n vezes pelas impurezas, de tal forma que seu vetor de onda muda de \vec{k} para $-\vec{k}$ pela sequência dada abaixo:

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k}' \rightarrow \vec{k}_2' \rightarrow \dots \vec{k}_{n-1}' \rightarrow -\vec{k}$$

com transferência de momentum em cada um dos passos dada por

$$\vec{g}_1', \vec{g}_2', \dots, \vec{g}_n'$$

Entretanto, esta pode não ser a única maneira de produzir este retro-espalhamento; podemos imaginar uma outra configuração de sequência de espalhamento:

$$\vec{k} \rightarrow \vec{k}_1'' \rightarrow \vec{k}_2'' \rightarrow \dots \vec{k}_{n-1}'' \rightarrow -\vec{k}$$

com novas transferências de momentum

$$\vec{g}_1'', \vec{g}_2'', \dots, \vec{g}_n''$$

O ingrediente essencial para a existência ELF é a existência de uma correlação entre os dois processos de espalhamento conforme está mostrado na Fig.(1.3). A transferência \vec{g}_1' da primeira sequência é igual a \vec{g}_n'' da segunda sequência. Se esta simetria se mantém ao longo da sucessão de espalhamentos, geramos as condições necessárias para a existência do ELF: as funções de onda se encontram em fase no final do espalhamento.

Esta correlação pode ser encontrada nos diagramas maximamente cruzados considerados para o cálculo da correção à condutividade. Um diagrama deste tipo é mostrado na Fig.(1.4). Podemos perceber que ele expressa uma correlação muito particular entre os elétrons (linha de propagadores retardados) e buracos (linha de propagadores avançados). Em última análise, esta característica especial justifica a adoção de diagramas desta classe para os cálculos de correção à condutividade metálica.

Alguns autores [20] têm sugerido a necessidade de introduzir um tempo de relaxação inelástico que limitaria a interferência quântica, desta forma destruindo o ELF. Nestes termos, a situação pode ser entendida da seguinte maneira: existem 2 tempos de relaxação τ e τ_i que representam respectivamente o tempo que o elétron permanece em um auto-

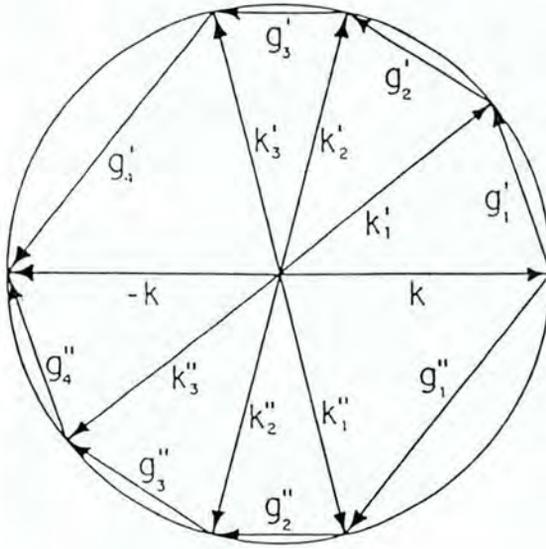


Figura 1.3: Retro-espalhamento por duas seqüências de caminhos que são correlacionadas por uma transferência simétrica de momentum: $\vec{g}_1' = \vec{g}_n''$; $\vec{g}_2' = \vec{g}_{n-1}''$; \dots ; $\vec{g}_n' = \vec{g}_1''$.

estado de momentum e num auto-estado de energia. Durante o tempo τ_i , o elétron sofre variações aleatórias de momentum, mas sem flutuações na evolução temporal da função de onda.

Desta forma no intervalo da escala definida abaixo:

$$L_{TH} = (D\tau_i)^{1/2} \quad (1.14)$$

a partícula se difunde podendo sofrer efeitos de localização; acima desta escala temos destruído completamente a possibilidade destes efeitos. Neste sentido, L_{TH} é um limite definitivo para a existência do ELF.

Por outro lado, a inserção do τ_i é uma maneira de colocar dependência com temperatura numa teoria feita à $T = 0$. A suposição é que $\tau_i \approx T^{-p}$, onde o expoente p depende da forma exata do mecanismo de espalhamento presente no sistema. Com isto, a escala de corte assume também uma dependência com a temperatura;

$$L_{TH} = aT^{-p/2} \quad (1.15)$$

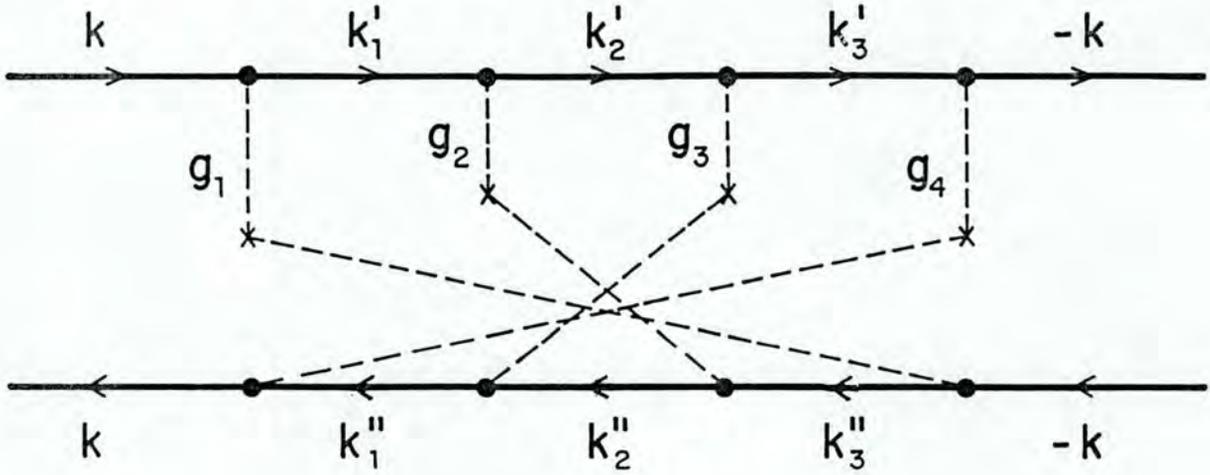


Figura 1.4: Diagrama maximamente cruzado, expressando a correlação entre o par elétron-buraco

Substituindo esta expressão nas equações (1.9) e (1.10), obtemos finalmente a condutividade como função da temperatura;

$$\sigma_{3d}(T) = \sigma_0 + \frac{e^2}{\hbar\pi^3} \frac{1}{a} T^{p/2} \quad (1.16)$$

$$\sigma_{2d}(T) = \sigma_0 + \frac{p}{2} \frac{e^2}{\hbar\pi^2} \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) \quad (1.17)$$

A previsão para duas dimensões foi posteriormente confirmada experimentalmente [20]. Entretanto, a dependência logarítmica com temperatura pode ser obtida também considerando a interação elétron- elétron. Do ponto de vista experimental, medidas de magnetorresistência (mesmo em campo fraco), por que suprimem as correções quânticas, serviriam para definir qual mecanismo físico é responsável pela dependência logarítmica da temperatura: localização ou interação elétron-elétron.

A introdução do campo magnético altera substancialmente a situação. No espalhamento, ele significa a presença de uma fase adicional, atenuando o efeito de interferência constru-

tiva. Na teoria de escala [18], implica na introdução de um novo comprimento $L_H = \sqrt{\frac{ch}{eH}}$, que é interpretado como a distância em que a função de onda adquire uma fase adicional.

Se usamos novamente a imagem colocada na Fig.(1.2), isto significa que agora as amplitudes A_1 e A_2 adquirem uma fase adicional [20]:

$$A_1 \longrightarrow A_1 \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}\right) \quad (1.18)$$

$$A_2 \longrightarrow A_2 \exp\left(-\frac{ie}{\hbar c} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l}\right) \quad (1.19)$$

onde \vec{A} é o potencial vetorial. A diferença de fase entre as duas amplitudes é:

$$\Delta\varphi = \frac{2e}{\hbar c} \oint \vec{A} \cdot d\vec{l} \quad (1.20)$$

Produzindo a diferença adequada, o campo magnético destrói a interferência entre as funções de onda, diminuindo a probabilidade de encontrar a partícula e reduzindo a resistência elétrica do sistema. Logo, espera-se uma magnetorresistência $\Delta R(H) = R(H) - R(0)$ negativa no regime do ELF.

Na expansão perturbativa, a introdução do campo magnético é feita de uma forma semi-clássica [20]. Considerando o livre caminho médio do elétron muito menor que o raio da órbita de Landau, então a função de Green de uma partícula (G1), em presença de campo, pode ser escrita como:

$$G_B(\vec{r} \vec{r}' | E) = \exp\left[\frac{ie}{\hbar} \int_r^{r'} \vec{A}(\vec{l}) \cdot d\vec{l}\right] G_{B=0}(\vec{r} - \vec{r}' | E) \quad (1.21)$$

onde $G_{B=0}(\vec{r} - \vec{r}' | E)$ é a G1 em ausência de campo magnético.

Para introduzir esta aproximação no cálculo da condutividade, devemos inicialmente colocar o problema: o objeto central da teoria é obter as correções quânticas correspondentes ao vértice relacionado com os diagramas maximamente cruzados (ver Fig(2.1)), cuja expressão analítica é dada pela equação integral abaixo:

$$K(\vec{r} \vec{r}' | E \omega) = U\delta(\vec{r} - \vec{r}') + U \int d\vec{r}_1 K^0(\vec{r} \vec{r}_1 | E \omega) K(\vec{r}_1 \vec{r}' | E \omega) \quad (1.22)$$

com $K^0(\vec{r} \vec{r}' | E \omega)$ definido como:

$$K^0(\vec{r} \vec{r}' | E \omega) = G_B(\vec{r} \vec{r}' | E + \omega) G_B(\vec{r} \vec{r}' | \omega) \quad (1.23)$$

A equação (1.22) pode ser resolvida formalmente através de uma equação de autovalores:

$$\int d\vec{r}' K^0(\vec{r} \vec{r}' | E \omega) \psi_\alpha(\vec{r}') = \lambda_\alpha \psi_\alpha(\vec{r}) \quad (1.24)$$

Neste caso $\psi_\alpha(\vec{r})$ deve satisfazer as relações de normalização e completicidade dadas abaixo:

$$\sum_\alpha \psi_\alpha(\vec{r}) \psi_\alpha(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (1.25)$$

$$\int d\vec{r} \psi_\alpha(\vec{r}) \psi_\beta(\vec{r}) = \delta_{\alpha\beta} \quad (1.26)$$

Se $K^0(\vec{r} \vec{r}' | E \omega)$ fosse invariante translacional, poderíamos utilizar a transformada de Fourier. Assim na equação (1.24), as autofunções seriam ondas planas e os autovalores, as componentes de Fourier de $K^0(\vec{r} \vec{r}' | E \omega)$. Desta forma, a equação integral (1.22) se reduziria a uma equação algébrica. A presença do campo magnético implica em perda de invariância translacional; logo, este método de solução não pode ser mais utilizado. Seria necessário outro tipo de transformada para obter a solução exata da equação integral.

Altshuler et al. [11], utilizando a forma da G1 dada em (1.21), reescreveram a equação de autovalores (1.24) como:

$$\int d\vec{r}' K_{B=0}^0(\vec{r} - \vec{r}' | E \omega) \exp\left(\frac{2ie}{\hbar} \int_r^{r'} \vec{A}(\vec{l}) \cdot d\vec{l}\right) \psi_\alpha(\vec{r}') = \lambda_\alpha \psi_\alpha(\vec{r}) \quad (1.27)$$

Expandindo $\vec{A}(\vec{l})$ e $\psi_\alpha(\vec{r}')$ até segunda ordem em \vec{r} , obtem-se:

$$K^0(\vec{q}=0 | E\omega) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} K^0(\vec{q}=0 | E\omega) (-i\vec{\nabla} + \frac{2e}{\hbar} \vec{A})^2 \psi_\alpha(\vec{r}) = \lambda_\alpha \psi_\alpha(\vec{r}) \quad (1.28)$$

Na ordem das expansões realizadas, recai-se numa nova equação de autovalores correspondendo agora à trajetória de uma partícula com carga $2e$ em campo magnético. Isto conduziria à seguinte regra para tratar o problema: em ausência de campo, as correções quânticas têm a forma:

$$\sigma'(\omega) = -\frac{2e^2}{\pi\hbar} D_0 \tau \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{D_0 \tau q^2 - i\omega\tau} \quad (1.29)$$

onde $D_0 = v_F^2 \tau / d$ é a constante de difusão.

Em campo magnético o momentum q^2 deve ser trocado por $\frac{4eH}{c\hbar} (n + \frac{1}{2})$; assim a magnetocondutividade é escrita como:

$$\sigma'(\omega = 0; H) = -\frac{2e^2}{\pi\hbar} D_0 \tau \frac{eH}{\pi\hbar} \sum_{n=0}^{n/4D_0\tau eH} \frac{1}{D_0 \tau (4eH/c\hbar)(n + \frac{1}{2}) + \tau/\tau_i} \quad (1.30)$$

O tempo τ_i foi incluído fenomenologicamente na expressão anterior substituindo a frequência externa ω . A soma sobre n pode ser expressa em termos da função digamma, de tal forma que a magnetocondutividade a duas e três dimensões é [21]:

$$\sigma_{2d}(H) - \sigma_{2d}(0) \simeq \frac{e^2}{\hbar} \ln \frac{eH D_0 \tau_i}{\hbar c} \quad (1.31)$$

$$\sigma(H)_{3d} - \sigma_{3d}(0) \simeq \frac{e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{eH}{\hbar c}} \quad (1.32)$$

Um ponto importante que deve ser notado é que nesta aproximação os efeitos do campo fundamentalmente se concentram no vértice maximamente cruzado e, portanto, *não se consideram efeitos de anisotropia no tensor magnetocondutividade*.

Uma última consideração deve ser feita com relação ao que foi discutido nos parágrafos anteriores. Uma idéia importante relacionada com a aproximação semiclássica é a existência de uma escala L_{TH} que constitui um limite superior, além do qual se suprime os efeitos

de correção quântica. Isto estabelece que existe um campo magnético crítico, obtido da condição $L_H \simeq L_{TH}$, expresso abaixo:

$$H_c = \frac{c \hbar}{e} (D\tau_i) \quad (1.33)$$

acima do qual as correções para a magnetocondutividade devem cessar.

Entretanto, se olhamos para a forma geral das correções quânticas do ELF (ver equação 1.29) para a condutividade, notamos que se faz sentido a introdução de um corte fenomenológico no limite ultravioleta em duas dimensões, o mesmo não cabe para três dimensões cujas correções são convergentes neste limite. Desta forma, podemos especular a respeito de qual seria o comportamento do ELF nesta dimensionalidade, tendo como referência a desigualdade $\omega_c \tau < 1$, (ω_c é a frequência de ciclotron) sem impor uma escala limitante superior.

Evidentemente este tipo de efeito não pode ser encontrado na aproximação semiclássica. Isto nos faz olhar para o problema partindo dos auto-estados exatos de Landau. Na literatura, Houghton et al.[10] têm utilizado estes estados para um gás interagente bidimensional, porém, num limite de campo forte onde os efeitos de localização são considerados suprimidos. Desta forma, os autores não estudam o comportamento em campo dos diagramas maximamente cruzados.

Recentemente, foi realizado um cálculo em três dimensões [6] com os auto-estados exatos de Landau, onde foi encontrada uma magnetocondutividade anisotrópica com a condição $\omega_c \tau < 1$. Os resultados encontrados indicaram que a componente perpendicular $\Delta\sigma'_{\perp}(H) = \sigma'(H) - \sigma'_{\perp}(0)$ crescia refletindo efeitos de quebra de localização fraca. Mas a componente paralela $\Delta\sigma'_{zz}(H)$ mantinha um comportamento na direção oposta, isto é, decrescia. Entretanto, tomando os limites usualmente considerados para o campo magnético $(D_0\tau_i)^{-1} < \omega_c < (D_0\tau)^{-1}$, recuperava-se o comportamento isotrópico da magnetocondutividade, diminuindo o ELF.

Ainda no terreno das expansões, D. Vollhardt e P. Wolfle [23] construíram uma teoria autoconsistente para a função correlação densidade-densidade que permitia ir além da soma de diagramas maximamente cruzados, relacionando o vértice irreduzível do canal partícula-

partícula com a parte redutível do vértice partícula-buraco. Desta forma a constante de difusão D_0 deve ser substituída por uma constante renormalizada $D(\vec{q}, \omega)$ dada abaixo:

$$D(\vec{q}, \omega) = \frac{2iE_F}{m d} \frac{1}{M(\vec{q}, \omega)} \quad (1.34)$$

onde por sua vez, $M(\omega)$ pode ser determinada autoconsistentemente pela equação (1.35);

$$M(0, \omega) = \frac{i}{\tau} - \frac{2}{\tau} \int d\vec{k} \frac{1}{\omega - k^2 D_0 \tau^{-1} M(0, \omega)^{-1}} \quad (1.35)$$

Em ausência de algum mecanismo responsável pela quebra de simetria de inversão temporal, os autores encontraram que $M(\vec{q}, \omega)$ tem divergência no limite infravermelho quando a dimensão $d \leq 2$.

A. Theumann e M. A. Idiart [24] estenderam esta teoria autoconsistente para incluir campo magnético e, portanto, com quebra de inversão temporal. Utilizando o método da [6], *obtiveram a supressão da singularidade para a constante de difusão renormalizada* no limite de campo fraco ($\omega_c \tau < 1$). *Novamente temos um indicativo da influência importante que o campo exerce neste problema de localização.*

Outra abordagem importante no âmbito das expansões perturbativas no problema de localização tem sido feita por Wegner [13] com um modelo de N elétrons em presença de um potencial aleatório. Neste caso, existe um parâmetro natural, $1/N$, que organiza hierarquicamente termo por termo a expansão. No limite que $N \rightarrow \infty$, o modelo apresenta estados estendidos [13]. Posteriormente, foi mostrado por E. Fradkin e M. Ma [14], que em ordem $1/N$, a condutividade em duas dimensões tem também divergência no limite infravermelho, compatível com os resultados encontrados em outras teorias perturbativas. Portanto, este modelo tem as propriedades corretas do problema de localização. Mas, pelo que já foi discutido com relação ao campo magnético, a influência deste parece ser substancial *mesmo quando em baixa intensidade*. Sendo assim, parece natural estudar o modelo de Wegner em presença de campo. O Capítulo 4 é dedicado a esta tarefa, entretanto, na expansão das funções de Green de uma e duas partículas realizamos uma derivação alternativa à Oppermann [15] de diagramas buscando a mesma topologia das

teorias perturbativas citadas. Isto permite estabelecer uma conexão imediata destas teorias com o modelo de Wegner.

Com o estudo das correções quânticas no regime do ELF (diagramas maximamente cruzados) para elétrons em uma banda [6] e em modelos mais refinados (Capítulo 3), juntamente com a teoria autoconsistente [24] e finalmente com cálculos no modelo de Wegner (Capítulo 4), todos em presença de campo magnético, é possível obter um panorama amplo da influência do campo em teorias de perturbação para o problema de localização em três dimensões. Esta dimensionalidade é especial no sentido que torna desnecessária a inclusão de τ_i ; desta forma a teoria é construída de primeiros princípios sem a intervenção de qualquer quantidade externa à própria teoria.

Capítulo 2

Teoria de Perturbação em Sistemas Desordenados

2.1 Introdução

Este capítulo é dedicado a estudar a estrutura da teoria de perturbações para sistemas com centros espalhadores distribuídos aleatoriamente. Vamos detalhar as relações que existem entre as diversas funções correlação que têm importância neste problema. Como um produto deste detalhamento é possível encontrar uma equivalência entre a fórmula de Abrikosov e a fórmula de Einstein comumente utilizada para calcular a condutividade. Isto permitirá mostrar que os diagramas que contribuem para um método de cálculo, não contribuem para outro sob certas condições bem específicas, que implicará posteriormente em simplificações no cálculo da magnetocondutividade, quando estudarmos o modelo de Wegner no Capítulo 4.

Outro produto importante deste estudo é a obtenção de algumas identidades de Ward entre as funções de Green de uma e duas partículas, que refletem em última análise a especialidade deste problema.

No final deste capítulo, vamos estender a fórmula de Abrikosov à temperatura zero para obter a condutividade para um sistema com N tipos de elétrons.

2.2 As Funções Correlação

A primeira quantidade de interesse, neste caso, é a função correlação densidade-densidade retardada que é dada pela função de Green de duas partículas (G2) dependente do tempo e à temperatura finita definida abaixo [8]:

$$K^R(\vec{r}_1 - \vec{r}_2 | t_1 - t_2) = -i \langle [\rho(\vec{r}_1 | t_1), \rho(\vec{r}_2 | t_2)] \rangle \Theta(t_1 - t_2) \quad (2.1)$$

onde $\rho(\vec{r} | t)$ é o operador densidade de partículas. A média em (2.1) é realizada sobre um estado de energia E_n com número de partículas N . São funções definidas da forma acima que estão diretamente relacionadas com as respostas a uma perturbação externa e determinam as propriedades de transporte [8] do sistema.

Nos capítulos que seguem, vamos tratar com funções de Green dependentes do tempo, mas à temperatura zero, com as médias sendo realizadas sobre o estado fundamental que, no entanto, podem ser tomadas como um caso particular da função de Green em (2.1).

Por outro lado, podemos definir também uma função de Green causal de duas partículas à temperatura finita:

$$\begin{aligned} K^T(\vec{k} | i\omega_m) &= \int_0^{1/T} d\tau \langle T_\tau(\rho(\vec{k} | \tau)\rho(-\vec{k} | 0)) \rangle e^{i\omega_m\tau} = \\ &= T \sum_{E_n} \bar{K}(\vec{k} | iE_n + i\omega_m, iE_n) \end{aligned} \quad (2.2)$$

com $\rho(\vec{k} | \tau)$ sendo a transformada de Fourier do operador densidade de partículas, e ω_m , as frequências de Matsubara.

Nesta função podemos utilizar diretamente a técnica de expansão diagramática usual no caso de potenciais de espalhamento (impurezas) colocados aleatoriamente no sistema. Desta forma, os primeiros termos da expansão de $\bar{K}(\vec{k} | iE_n + i\omega_m, iE_n)$ se referem aos diagramas mostrados na Fig.(2.1).

Para obter a relação entre a função de Green definida em (2.1) e $K^T(\vec{k} | i\omega_m)$, devemos continuar analiticamente esta função para frequências reais positivas. Para garantir analiticidade, o valor obtido de $K^R(\vec{k} | \omega)$ é definido [8] como o limite:

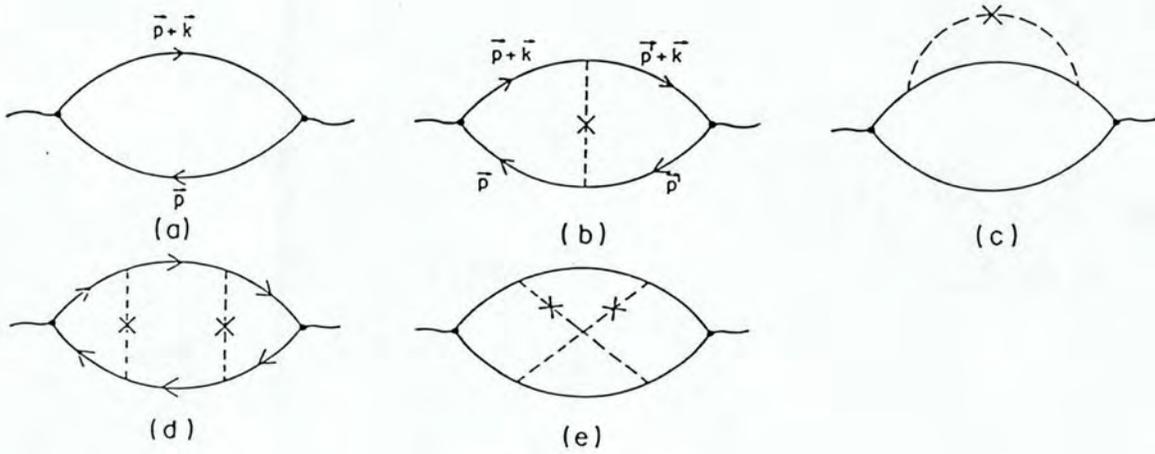


Figura 2.1: Alguns diagramas da expansão $\overline{K}(\vec{k} | iE_n + i\omega_m iE_n)$.

$$K^R(\vec{k} | \omega) = \lim_{\delta \rightarrow 0} K^R(\vec{k} | \omega + i\delta) \quad (2.3)$$

Teremos, portanto, duas tarefas a fazer: inicialmente vamos realizar a soma sobre as frequências de Matsubara E_n e após realizar a continuação analítica mencionada. A primeira parte pode ser realizada considerando a função (ver [27] e [28]) distribuição de Fermi:

$$n(\omega) = [\exp(\beta\omega) + 1]^{-1} \quad (2.4)$$

que tem pólos em $z = iE_n = i\pi T(2n + 1)$. A idéia é realizar integrais sobre o plano complexo, utilizando a função auxiliar $n(\omega)$, de tal forma que:

$$\oint dz n(z) \overline{K}(\vec{k} | z + i\omega_m z) \quad (2.5)$$

permite obter diretamente a soma sobre as frequências E_n , já que, $n(z)$ tem resíduo igual a $-\beta^{-1}$, com a condição auxiliar que $\overline{K}(\vec{k} | z + i\omega_m z)$ seja analítica dentro do contorno em

questão. Porém, a função $\overline{K}(\vec{k} | z + i\omega_m z)$ tem singularidades em cortes paralelos ao eixo real dados por $Im(z + i\omega_m) = 0$ e $Im z = 0$, fato este que divide o plano complexo em 3 regiões, mostradas na Fig.(2.2), nas quais devemos tomar os contornos C_1 , C_2 e C_3 para a integral em (2.5).

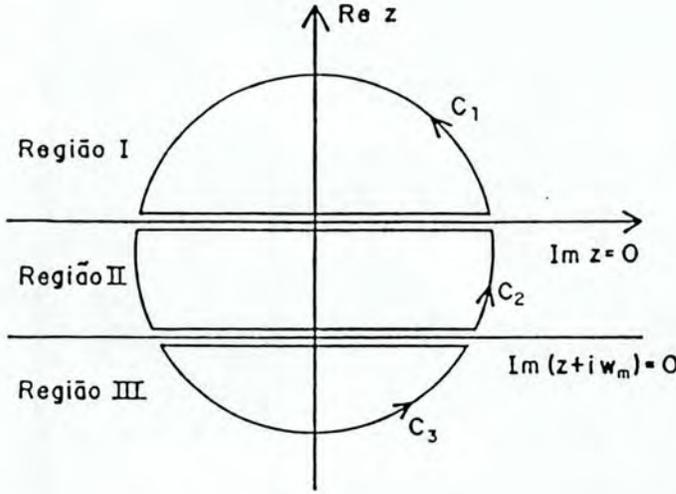


Figura 2.2: Plano complexo dividido em três regiões com seus respectivos contornos.

No contorno C_1 , temos então:

$$\begin{aligned} \oint_{C_1} dz n(z) \overline{K}(\vec{k} | z + i\omega_m z) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dE n(E) \overline{K}(\vec{k} | E + i\omega E) = \\ &= -2\pi iT \sum_{E_n > 0} \overline{K}(\vec{k} | iE_n + i\omega_m iE_n) \end{aligned} \quad (2.6)$$

Com este contorno, teremos coberto a soma de frequências E_n positivas. A segunda parte da igualdade em (2.6) é garantida assegurando-se que $\overline{K}(\vec{k} | z + i\omega_m z)$ decresça rapidamente como função de z para um dado $i\omega_m$. Podemos ver que, como $\omega_m > 0$, neste particular contorno tanto $z + i\omega_m$ quanto z estão no semiplano superior.

Para o contorno C_3 , ficamos com uma situação similar:

$$\begin{aligned} \oint_{C_3} dz n(z) \overline{K}(\vec{k} | z + i\omega_m z) &= - \int_{-\infty}^{+\infty} dE n(E + i\omega_m) \overline{K}(\vec{k} | E + i\omega E) = \\ &= -2\pi iT \sum_{E_n < \omega_m} \overline{K}(\vec{k} | iE_n + i\omega_m iE_n) \end{aligned} \quad (2.7)$$

onde utilizamos a condição $n(z) = n(z + i\omega_m)$. Neste caso, tanto z quanto $z + i\omega_m$ estão no semiplano inferior.

No último caso (contorno C_2) ficamos com:

$$\oint_{C_2} dz \bar{K}(\vec{k} | z + i\omega_m z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dE [n(E) - n(E + \omega)] \bar{K}(\vec{k} | E + i\omega E) = -2\pi iT \sum_{0 < E_n < \omega_m} \bar{K}(\vec{k} | iE_n + i\omega_m iE_n) \quad (2.8)$$

neste particular contorno, embora z esteja no semiplano inferior, $z + i\omega_m$ pertence ao semiplano superior.

Por fim, fazendo a continuação analítica para frequências reais de $K^T(\vec{k} | i\omega_m)$, ficamos então com:

$$K^R(\vec{k} | \omega + i\delta) = \frac{1}{2\pi i} \int dE [(n(E + \omega) - n(E)) \bar{K}(\vec{k} | E + \omega + i\delta E - i\delta) + n(E + \omega) \bar{K}(\vec{k} | E + \omega + i\delta E + i\delta) - n(E) \bar{K}(\vec{k} | E + \omega - i\delta E - i\delta)] \quad (2.9)$$

A energia dos propagadores dados pelas linhas superiores está colocada com o primeiro argumento da função \bar{K} , enquanto os propagadores inferiores têm energia dado pelo segundo argumento. Nestas circunstâncias, o propagador será retardado se:

$$G(\vec{p} | E) = G(\vec{p} | E + i\delta) \quad (2.10)$$

e avançado quando:

$$G^*(\vec{p} | E) = G(\vec{p} | E - i\delta) \quad (2.11)$$

A primeira identidade de Ward [26] que aparece neste problema corresponde aos valores de \bar{K} tomados em $\omega = 0$ e $\vec{k} = 0$, dada abaixo:

$$\bar{K}(0 | E + i\delta E + i\delta) = -\frac{1}{(2\pi)^d} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \frac{\partial}{\partial E} G(\vec{p} | E) \quad (2.12)$$

O argumento básico que permite reconhecer a igualdade (2.12) como verdadeira, consiste em tomar termo a termo a expansão da função de Green de uma partícula (G1), cujos diagramas até primeira ordem são mostrados na Fig(2.3), e realizar as operações indicadas no lado direito desta igualdade.

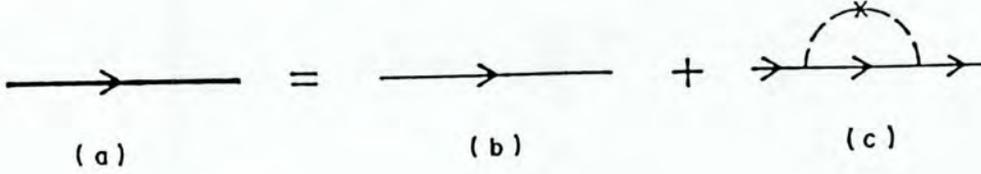


Figura 2.3: Diagramas de ordem mais baixa para G1.

A correspondente expressão analítica dos dois primeiros termos da expansão em G1 é (ver Fig.(2.3):

$$G^{0,1}(\vec{p} | E) = G^0(\vec{p} | E) + G^0(\vec{p} | E) \int \frac{d\vec{p}_1}{(3\pi)^d} G^0(\vec{p}_1 | E) U(\vec{p} - \vec{p}_1) G^0(\vec{p} | E) \quad (2.13)$$

onde

$$G^0(\vec{p} | E) = (-\varepsilon_0(\vec{p}) - E_F + E + i\delta)^{-1} \quad (2.14)$$

então

$$\begin{aligned} - \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \frac{\partial}{\partial E} G^{(0,1)}(\vec{p} | E) &= \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} G^{0,2}(\vec{p} | E) + \\ 2 \int \frac{\vec{p}}{(2\pi)^d} G^{0,2}(\vec{p} | E) \int \frac{d\vec{p}_1}{(2\pi)^d} G^0(\vec{p}_1 | E) U(\vec{p} - \vec{p}_1) G^0(\vec{p} | E) &+ \\ + \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} G^{0,2}(\vec{p} | E) \int \frac{d\vec{p}_1}{(2\pi)^d} G^{0,2}(\vec{p}_1 | E) U(\vec{p} - \vec{p}_1) & \end{aligned} \quad (2.15)$$

Os diagramas que resultam das operações realizadas sobre $G^{(0,1)}(\vec{p} | E)$ podem ser vistos na Fig.(2.4).

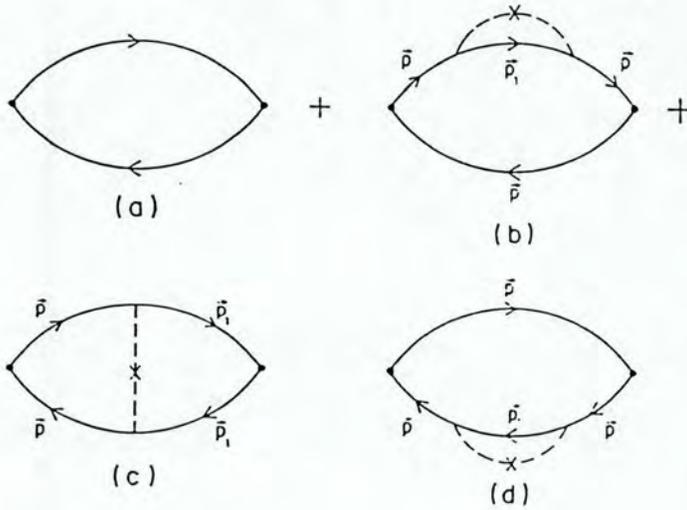


Figura 2.4: Diagramas até primeira ordem da função $\bar{K}(0 | E + i\delta E + i\delta)$.

Estes são exatamente os diagramas até primeira ordem da função de Green de duas partículas $\bar{K}(0 | E + i\delta E + i\delta)$.

Novamente realizamos o mesmo procedimento, agora tomando o termo de segunda ordem da expansão da G_1 dado em termos diagramáticos na Fig.(2.5). O resultado de derivar o diagrama (a) em relação a E , inverter o sinal e integrar em relação ao momentum interno \vec{p} o diagrama (a), é mostrado, por sua vez, na Fig.(2.6).

O mesmo procedimento para o diagrama (b) produz os diagramas que estão na Fig.(2.7), enquanto o diagrama (c) origina aqueles que aparecem na Fig.(2.8).

Desta forma, se prosseguirmos para os diagramas de ordem mais alta de G_1 , vamos reproduzir exatamente termo por termo todos os diagramas da função $\bar{K}(0 | E + i\delta E + i\delta)$. Isto assegura a validade da igualdade (2.12).

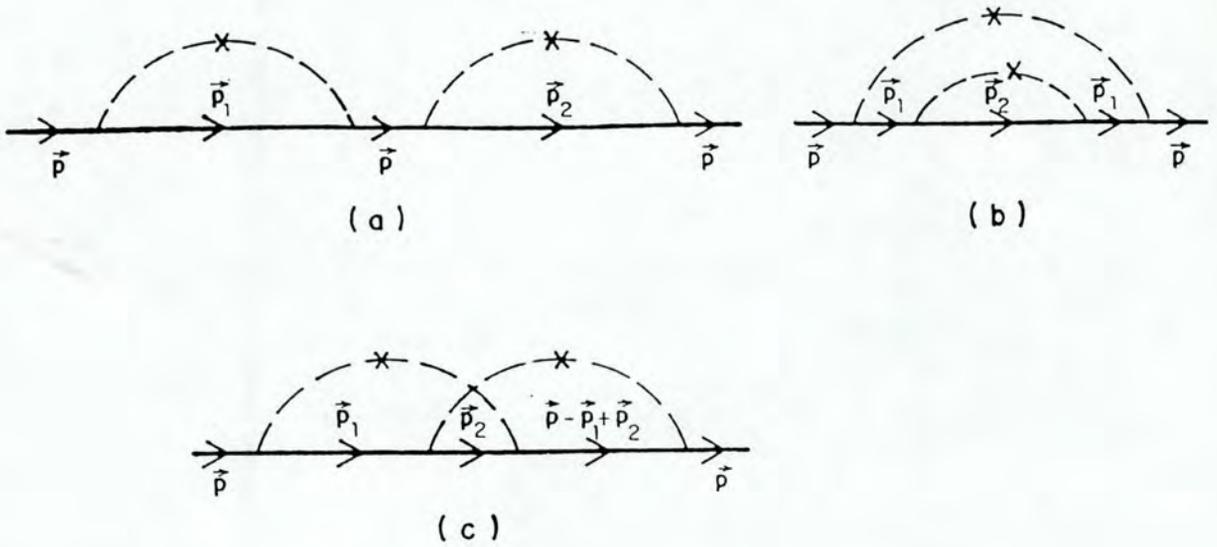


Figura 2.5: Diagramas até segunda ordem para $G1$.

Combinando a identidade de Ward (2.12) com as equações (2.10) e (2.11), obtemos:

$$\overline{K}(0 | E + i\delta \ E + i\delta) = - \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \frac{\partial}{\partial E} G^0(\vec{p} | E) \quad (2.16)$$

$$\overline{K}(0 | E - i\delta \ E - i\delta) = - \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \frac{\partial}{\partial E} G^*(\vec{p} | E) \quad (2.17)$$

que vamos utilizar na equação (2.9) após expandi-la para pequeno momentum \vec{k} e frequência ω externos, de modo que esta pode ser reescrita como:

$$K^R(\vec{k} | \omega + i\delta) = \frac{1}{2\pi i} \int dE \left[\omega \frac{\partial n(E)}{\partial E} \overline{K}(\vec{k} | E + \omega - i\delta \ E - i\delta) - n(E) \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \frac{\partial}{\partial E} (G(\vec{p} | E) - G^*(\vec{p} | E)) \right] \quad (2.18)$$

integrando por partes os dois últimos termos de (2.18), ficamos com a equação colocada a seguir:

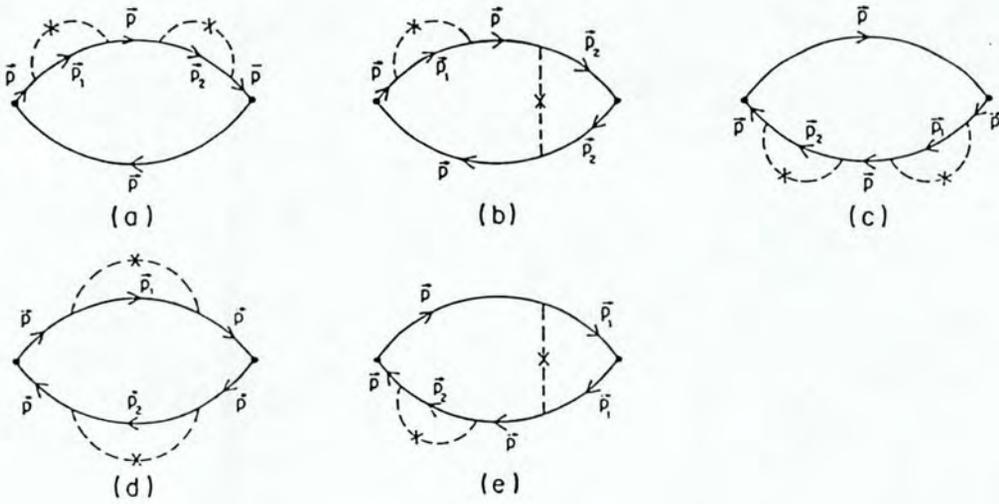


Figura 2.6: Diagramas para $\overline{K}(0 | E + i\delta | E + i\delta)$ obtidos de (a) da Fig.(2.5)

$$K^R(\vec{k} | \omega + i\delta) = \frac{1}{2\pi i} \int dE \frac{\partial n(E)}{\partial E} [\omega \overline{K}(\vec{k} | E + \omega + i\delta | E - i\delta) + \frac{2i}{(2\pi)^d} \int d\vec{p} \text{Im}G^0(\vec{p} | E)] \quad (2.19)$$

A próxima tarefa consiste em demonstrar que:

$$K^R(0 | \omega + i\delta) \equiv 0 \quad (2.20)$$

isto pode ser feito lembrando que a variação temporal do operador densidade é dada pela equação:

$$\frac{d}{dt} \rho(\vec{k} | t) = i[H, \rho(\vec{k} | t)] \quad (2.21)$$

onde $\rho(\vec{k} | t)$ é dada abaixo:

$$\rho(\vec{k} | t) = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \Psi^\dagger(\vec{p} | t) \Psi(\vec{p} - \vec{k} | t) \quad (2.22)$$

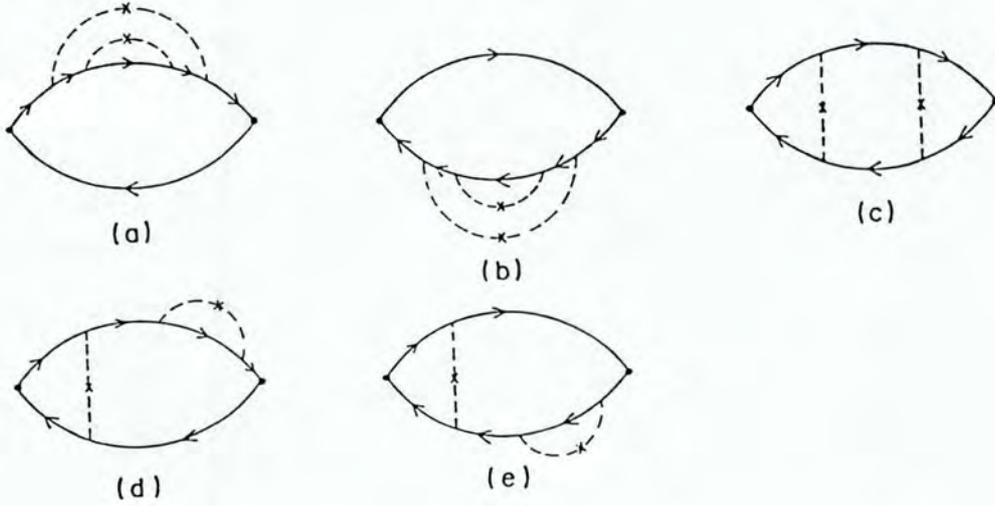


Figura 2.7: Diagramas para $\bar{K}(0 | E + i\delta E + i\delta)$ obtidos de (b) da Fig.(2.5)

com $\Psi^\dagger(\vec{p} | t)$ e $\Psi(\vec{p} | t)$ são operadores de campo na representação de Heisenberg. O número de partículas n é definido como:

$$n = \int d\vec{r} \rho(\vec{r} | t) = \rho(\vec{k} = 0 | t) \quad (2.23)$$

com a equação (2.23) em (2.21), obtemos que $\rho(\vec{k} = 0 | t)$ é independente do tempo.

Com este resultado, podemos fazer a transformada de Fourier espacial da expressão (2.1), então:

$$K^R(\vec{k} | t_1 - t_2) = -i \langle [\rho(\vec{k} | t_1), \rho(-\vec{k} | t_2)] \rangle \Theta(t_1 - t_2) \quad (2.24)$$

Quando $K^R(\vec{k} = 0 | t_1 - t_2)$, o operador $\rho(\vec{k} = 0 | t)$ não depende do tempo, logo, o comutador se anula em (2.24) e recuperamos (2.20).

Este resultado faz com que, através da equação (2.18), possamos escrever a igualdade abaixo:

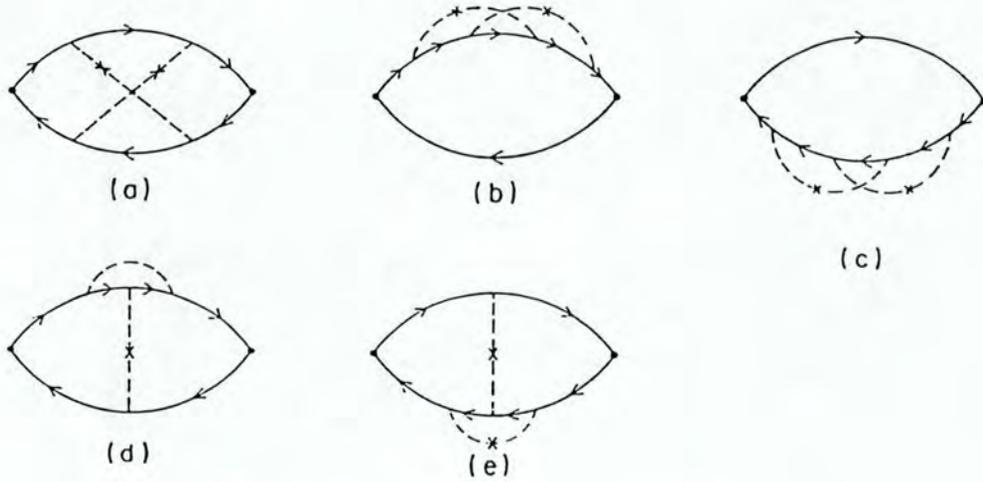


Figura 2.8: Diagramas para $\overline{K}(0 | E + i\delta, E + i\delta)$ obtidos de (c) da Fig.(2.5)

$$\overline{K}(0) = \frac{2\pi i N(E)}{\omega} \quad (2.25)$$

onde

$$\pi N(E) = -\frac{1}{(2\pi)^d} \int d\vec{p} \text{Im} G(\vec{p} | E) \quad (2.26)$$

com $N(E)$ sendo a densidade de estados com energia E .

A importância do resultado (2.25) é que ele constitui uma igualdade exata neste problema, sendo uma referência da teoria para as expansões perturbativas de modelos específicos.

Outro resultado muito importante é a conexão que se pode estabelecer entre a função correlação densidade-densidade retardada e a função correlação corrente-corrente retardada definida abaixo:

$$P^R(\vec{k} | t_1 - t_2) = \frac{i}{k^2} \langle [(\vec{k} \cdot \vec{j}(\vec{k} | t_1)), (\vec{k} \cdot \vec{j}(-\vec{k} | t_2))] \rangle \Theta(t_1 - t_2) \quad (2.27)$$

Esta conexão pode ser obtida derivando sucessivamente a expressão (2.1) em relação a t_1 e a t_2 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial t_2 \partial t_1} K^R(\vec{r}_1 - \vec{r}_2 | t_1 - t_2) = & -i \left\langle \frac{d}{dt} \rho(1), \frac{d}{dt} \rho(2) \right\rangle \Theta(t_1 - t_2) + \\ & + i \left\langle [\rho(1), \frac{d}{dt} \rho(2)] \right\rangle \delta(t_1 - t_2) \end{aligned} \quad (2.28)$$

onde 1 = (\vec{r}_1, t_1) e 2 = (\vec{r}_2, t_2)

O segundo termo da expressão (2.28) pode ser avaliado utilizando a equação da continuidade

$$\frac{d}{dt} \rho(2) = \vec{\nabla}_2 \cdot \vec{j}(2) \quad (2.29)$$

juntamente com as relações de comutação para operadores de campo de Fermi na representação de Schroendiger, que podem ser estendidos para a representação de Heisenberg tomados ao mesmo tempo:

$$\Psi(\vec{r}_1) \Psi^\dagger(\vec{r}_2) + \Psi^\dagger(\vec{r}_2) \Psi(\vec{r}_1) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (2.30)$$

então

$$\left[\rho(1), \frac{d}{dt_2} \rho(2) \right]_{1=2} = -\frac{i}{m} \vec{\nabla}_2 \cdot [\rho(1) \vec{\nabla}_2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - \frac{1}{2} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{\nabla}_1 \rho(1)] \quad (2.31)$$

tomando a média na expressão anterior juntamente com o fato que $\vec{\nabla} N = 0$, nas condições de homogeneidade espacial, com $N = \langle \rho(\vec{r}) \rangle$, logo:

$$\left[\rho(1), \frac{d}{dt_2} \rho(2) \right]_{1=2} = -\frac{iN}{m} \vec{\nabla}^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad (2.32)$$

Podemos voltar com este resultado para a expressão (2.28), utilizar a equação de continuidade para o primeiro termo do lado direito desta igualdade, que resulta em:

$$\frac{\partial^2}{\partial t_1 \partial t_2} K^R(\vec{r}_1 - \vec{r}_2 | t_1 - t_2) = -i \langle [\vec{\nabla}_1 \cdot \vec{j}(1), \vec{\nabla}_2 \cdot \vec{j}(2)] \rangle \Theta(t_1 - t_2) + \quad (2.33)$$

$$+ \frac{N}{m} (\vec{\nabla}_1^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)) \delta(t_1 - t_2)$$

Fazendo a transformada de Fourier espacial da expressão (2.33):

$$\frac{\partial^2}{\partial t_1 \partial t_2} K^R(\vec{k} | t_1 - t_2) = k^2 P^R(\vec{k} | t_1 - t_2) - k^2 \frac{N}{m} \delta(t_1 - t_2) \quad (2.34)$$

e após a transformada de Fourier em tempo, ficamos finalmente com:

$$- \frac{i\omega}{k^2} K^R(\vec{k} | \omega) = \frac{1}{i\omega} [P^R(\vec{k} | \omega) - \frac{N}{m}] \quad (2.35)$$

O lado direito da igualdade (2.35) está relacionado diretamente com a condutividade, como poderemos ver através da teoria da resposta linear. A densidade de corrente média neste formalismo é dada por:

$$\langle j_\mu(x) \rangle = ie^2 \sum_\nu \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^t dt' \langle [j_\mu(x), j_\nu(x')] A_\nu(x') \rangle \quad (2.36)$$

onde $x = (\vec{r}, t)$, $x' = (\vec{r}', t')$ e A_ν são as componentes do potencial vetorial que esta relacionado com o campo elétrico por:

$$\vec{E} = \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

A expressão anterior pode ser desdobrada como:

$$\langle j_\mu(x) \rangle = -\frac{e^2 N}{m} A_\mu + ie^2 \sum_\nu \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^t dt' \langle [j_\mu(x), j_\nu(x')] A_\nu(x') \rangle \quad (2.37)$$

Vamos definir

$$P_{\mu\nu}^R(\vec{r} - \vec{r}' | t - t') = i \langle [j_\mu(x), j_\nu(x')] \rangle \Theta(t - t') \quad (2.38)$$

de tal forma que a equação (2.37) pode ser reescrita utilizando $P_{\mu\nu}^R(\vec{r} - \vec{r}' | t - t')$, isto é:

$$\langle j_\mu(x) \rangle = -\frac{e^2 N}{m} A_\mu(x) + e^2 \sum_\nu \int d\vec{r}' \int_{-\infty}^{+\infty} dt' P_{\mu\nu}^R(x-x') A_\nu(x') e^{i\omega t'} \quad (2.39)$$

que tem transformada de Fourier geral:

$$\langle j_\mu(\vec{k} | \omega) \rangle = -\frac{e^2 N}{m} A_\mu(\vec{k} | \omega) + e^2 \sum_\nu P_{\mu\nu}^R(\vec{k} | \omega) A_\nu(\vec{k} | \omega) \quad (2.40)$$

logo a condutividade é dada por:

$$\sigma_{\mu\nu}(\omega) = \frac{1}{i\omega} \lim_{k \rightarrow 0} \left(-\frac{e^2 N}{m} \delta_{\nu\mu} + e^2 P_{\mu\nu}^R(\vec{k} | \omega) \right) \quad (2.41)$$

Se compararmos a definição de $P_{\nu\mu}^R(\vec{k} | \omega)$ (ver equação (2.38)) com $P^R(\vec{k} | \omega)$ de (2.27), obtemos:

$$P^R(\vec{k} | \omega) = \sum_\mu \frac{k_\mu^2}{k^2} P_{\mu\mu}^R(\vec{k} | \omega) \quad (2.42)$$

Considerando $P_{\mu\mu}^R(\vec{k} | \omega)$ isotrópico, a condutividade obtida como função de $P^R(\vec{k} | \omega)$ pela (2.41) é:

$$\sigma(\omega) = \frac{1}{i\omega} \lim_{k \rightarrow 0} \left(e^2 P^R(\vec{k} | \omega) - \frac{e^2 N}{m} \right) \quad (2.43)$$

Agora podemos relacionar a função $K^R(\vec{k} | \omega)$ com a condutividade pela equação (2.35):

$$\sigma(\omega) = \lim_{k \rightarrow 0} \left(-\frac{i\omega}{k^2} K^R(\vec{k} | \omega) \right) \quad (2.44)$$

A relevancia deste resultado reside em que *conectamos diretamente a condutividade com a função correlação densidade- densidade retardada*, que, por sua vez, está relacionada com a função $\bar{K}(\vec{k} | E + \omega + i\delta, E - i\delta)$ pela equação (2.19), que tem expansão perturbativa dada, por exemplo, pelo conjunto de diagramas mostrado na Fig.(2.1). Dito de outra maneira, conhecido o conjunto de diagramas de Feynman que compõe a expansão

da $K^R(\vec{k} | \omega)$ (por intermédio da $\bar{K}(\vec{k} | E + \omega + i\delta, E - i\delta)$) é possível calcular a condutividade pela equação (2.44). Este é o procedimento realizado, por exemplo, por Wegner [13] ou por D. Volhardt e P. Wolfle [24].

Entretanto, podemos também obter a condutividade diretamente de $P^R(\vec{k} | \omega)$. O método, no seu princípio, é idêntico ao que foi feito para $K^R(\vec{k} | \omega)$. Inicialmente definimos uma função correlação causal à temperatura finita [8] no espaço real:

$$P_{\mu\nu}^T(\vec{r}_1 - \vec{r}_2 | \tau_1 - \tau_2) = \langle T_\tau(j_\mu(x_1)j_\nu(x_2)) \rangle \quad (2.45)$$

onde agora $x_1 = (\vec{r}_1, \tau_1)$, $x_2 = (\vec{r}_2, \tau_2)$ e T_τ produz o ordenamento cronológico usual. A equação (2.45) pode ser escrita:

$$P_{\mu\nu}^T(\vec{k} | i\omega_m) = \int_0^{1/T} \langle T_\tau(j_\mu(\vec{r} | \tau)j_\nu(\vec{r} | 0)) \rangle e^{i\omega\tau} = T \sum_{E_n} \bar{P}_{\mu\nu}(\vec{k} | iE_n + i\omega_m, iE_n) \quad (2.46)$$

Se usamos que:

$$\vec{j}(x) = -\frac{ie}{2m} [\bar{\Psi}(x)\vec{\nabla}\Psi(x) - (\vec{\nabla}\bar{\Psi}(x))\Psi(x)] \quad (2.47)$$

a equação (2.45) assume a forma:

$$P_{\mu\nu}^T(x_1, x_2) = -\frac{e^2}{4m^2} (\partial_{r_4}^\mu - \partial_{r_1}^\mu)_{r_4=r_1} (\partial_{r_2}^\nu - \partial_{r_3}^\nu)_{r_3=r_2} \langle T_\tau(\Psi(x_3)\Psi(x_1)\bar{\Psi}(x_4)\bar{\Psi}(x_2)) \rangle_{\tau_4=\tau_1^+, \tau_3=\tau_2^+} \quad (2.48)$$

A média em ordem cronológica dos quatro operadores em (2.48) pode ser fatorada (considerando partículas independentes) como:

$$\langle T_\tau(\Psi(x_3)\Psi(x_1)\bar{\Psi}(x_4)\bar{\Psi}(x_2)) \rangle = G^T(x_1-x_2)G^T(x_3-x_4) - G^T(x_3-x_2)G^T(x_1-x_4) \quad (2.49)$$

O segundo termo da expressão (2.49) equivale, quando substituído em (2.48), ao produto dos valores médios de operador densidade de corrente (definido em (2.47)) em ausência de campo elétrico que, portanto, é nulo.

Fazendo a transformada de Fourier da equação (2.48), então

$$P_{\mu\nu}^T(\vec{k} | i\omega_m) = \frac{2e^2 T}{4m^2} \sum_{E_n} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^d} (2\vec{p} + \vec{k})_\mu (2\vec{p}' + \vec{k})_\nu \times \quad (2.50)$$

$$\times G^0(\vec{p} + \vec{k} | \vec{p}' + \vec{k} | iE_n + i\omega_m) G^0(\vec{p} | \vec{p}' | iE_n)$$

Comparando com (2.46), imediatamente podemos escrever:

$$\bar{P}_{\mu\nu}(\vec{k} | iE_n + i\omega_m | iE_n) = \frac{2e^2}{4m^2} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^d} (2\vec{p} + \vec{k})_\mu (2\vec{p}' + \vec{k})_\nu \times \quad (2.51)$$

$$\times G^0(\vec{p} + \vec{k} | \vec{p}' + \vec{k} | iE_n + i\omega_m) G^0(\vec{p} | \vec{p}' | iE_n)$$

Se fizermos a média sobre a desordem na equação (2.51), vamos *recuperar o mesmo conjunto de diagramas mostrado na Fig.(2.1)* com um fator a mais $4(\vec{p} + \frac{\vec{k}}{2})_\mu (\vec{p}' + \frac{\vec{k}}{2})_\nu$, exceto que a expressão final para $\bar{P}_{\mu\nu}$ requer ainda uma integração sobre \vec{p} e \vec{p}' .

Por exemplo, o diagrama (c) da Fig.(2.4) é escrito como:

$$4 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \int \frac{d\vec{p}'}{(2\pi)^d} (\vec{p} + \frac{\vec{k}}{2}) \cdot (\vec{p}' + \frac{\vec{k}}{2}) G^0(\vec{p} + \vec{k} | E + i\delta) G^0(\vec{p}' + \vec{k} | E + i\delta) \quad (2.52)$$

$$G^0(\vec{p} | E + i\delta) G^0(\vec{p}' | E - i\delta) U(\vec{p} - \vec{p}')$$

É possível perceber que se considerarmos o potencial espalhador como sendo de contato:

$$U(\vec{p} - \vec{p}') = U_0 \quad (2.53)$$

e a relação de dispersão sendo parabólica, então:

$$G^0(\vec{p} | E) = G^0(p^2 | E) \quad (2.54)$$

No limite $\vec{k} \rightarrow 0$, o termo (2.52) não contribui devido à integração angular que é identicamente nula para expressões do tipo:

$$\int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \vec{p} f(p^2)$$

Isto significa que existem certos diagramas que aparecem na função correlação densidade-densidade contribuindo para a condutividade, que, entretanto, *podem não* contribuir, se olharmos para a condutividade diretamente da função correlação corrente-corrente.

Realizando a continuação analítica de $P^T(\vec{k} | i\omega_m)$, como já foi feita para a função correlação densidade-densidade, obtemos:

$$P^R(\vec{k} | \omega + i\delta) = \frac{1}{2\pi i} \int dE [(n(E + \omega) - n(E)) \bar{P}(\vec{k} | E + \omega + i\delta, E - i\delta) + \quad (2.55)$$

$$-n(E) \bar{P}(\vec{k} | E + \omega - i\delta, E - i\delta) + n(E + \omega) \bar{P}(\vec{k} | E + \omega + i\delta, E + i\delta)]$$

Vamos utilizar a identidade de Ward:

$$\bar{P}(0 | E + i\delta, E + i\delta) = \frac{2}{(2\pi)^d} \int d\vec{p} \vec{p} \cdot \vec{\nabla}_p G(\vec{p} | E) \quad (2.56)$$

que pode ser mostrada utilizando o mesmo procedimento para argumentar a validade da equação (2.12). Tomamos termo por termo a expansão da G_1 , cujos dois primeiros termos são mostrados na Fig.(2.3) e Fig(2.5). Realizando as operações apontadas (2.51), vamos conseguir os mesmos diagramas da Fig(2.4), mas a correspondente expressão analítica é:

$$\frac{2}{(2\pi)^d} \int d\vec{p} \vec{p} \cdot \vec{\nabla}_p G^{0,1}(\vec{p} | E) = \frac{4}{(2\pi)^d} \int d\vec{p} p^2 G^{02}(\vec{p} | E) + \quad (2.57)$$

$$+ \frac{8}{(2\pi)^d} \int d\vec{p} p^2 G^{03}(\vec{p} | E) \int \frac{d\vec{p}_1}{(2\pi)^d} G^0(\vec{p} | E) U(\vec{p} - \vec{p}_1) +$$

$$+ 4 \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \int \frac{d\vec{p}_1}{(2\pi)^d} \vec{p} \cdot \vec{p}_1 G^{02}(\vec{p} | E) G^{02}(\vec{p} | E) U(\vec{p} - \vec{p}_1)$$

Desta forma, com a identidade (2.56), podemos finalmente escrever $P^R(\vec{k} | \omega + i\delta)$, no limite de \vec{k} e ω pequenos, como:

$$P^R(\omega) = \lim_{k \rightarrow 0} P^R(\vec{k} | \omega) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int dE [n(E + \omega) - n(E)] \times \quad (2.58)$$

$$\times \bar{P}(\vec{k} | E + \omega + i\delta, E - i\delta) + \frac{N}{m}$$

onde

$$\frac{N}{m} = \frac{2}{\pi} \int dE n(E) \int \frac{\vec{p}}{(2\pi)^d} \text{Im} G(\vec{p} | E) \quad (2.59)$$

Substituindo a expressão (2.51) isotrópica, e considerando a igualdade (2.43), obtemos diretamente a condutividade:

$$\sigma(\omega) = \lim_{k \rightarrow 0} \frac{e^2}{2\pi i} \int dE (n(E + \omega) - n(E)) \bar{P}(\vec{k} | E + \omega + i\delta, E - i\delta) \quad (2.60)$$

que é a *própria fórmula de Abrikosov* [8].

Como conclusão, observamos que existem duas formas possíveis para calcular a condutividade; uma olhando para a função correlação densidade- densidade e outra pela função corrente-corrente. Os caminhos são equivalentes quanto ao resultado físico final. Entretanto, *sob certas condições particulares* é possível que existam diagramas que aparecem na expansão perturbativa de uma função, mas que *não aparecem na expansão da outra*. Dada a equivalência entre os métodos de cálculo, temos a liberdade de escolher um deles, segundo, por exemplo, um critério de simplicidade. Tipicamente, em presença de campo magnético fraco (no limite da aproximação semiclássica) em presença de potencial de contato para as impurezas, devemos calcular a magnetocondutividade pela função correlação corrente-corrente, já que podemos encontrar a supressão de vários diagramas devido à integração angular.

Por fim, vamos estender a fórmula de Abrikosov para um sistema de N elétrons diferentes, utilizando a equação de movimento da G_1 à temperatura zero:

$$i \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\beta}(x, x') = \delta_{\alpha\beta} \delta(x - x') - \langle T([H, \Psi_\alpha(x)] \Psi_\beta(x')) \rangle \quad (2.61)$$

com $G_{\alpha\beta}(x, x')$ sendo definida abaixo:

$$G_{\alpha\beta}(x, x') \equiv \langle T(\Psi_\alpha(x) \Psi_\beta(x')) \rangle \quad (2.62)$$

onde a média é agora sobre o estado fundamental, e x é dado como em (2.36).

Considerando um Hamiltoniano para potenciais espalhadores aleatórios:

$$H_0 = - \int d\vec{r} \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{m_\alpha} \Psi_\alpha^\dagger(\vec{r}) \vec{\nabla}_r \Psi_\alpha(\vec{r}) + \sum_{\alpha,\beta=1}^N \int d\vec{r} \Psi_\alpha^\dagger(\vec{r}) V_{\alpha\beta}(\vec{r}) \Psi_\beta(\vec{r}) \quad (2.63)$$

com uma perturbação devido à aplicação de um campo elétrico:

$$H_I = \int d\vec{r} \sum_{\alpha=1}^N \frac{ie}{2m_\alpha} \vec{A}_1 \cdot \Psi_\alpha^\dagger(\vec{r}) \vec{\nabla}_r \Psi_\alpha(\vec{r}) = \sum_{\alpha,\beta} \delta_{\alpha\beta} \int d\vec{r} (H_I(\vec{r}))_{\alpha\beta} \quad (2.64)$$

onde \vec{A}_1 é o potencial vetorial relacionado com o campo elétrico.

Podemos escrever a solução para a equação (2.61), utilizando um formalismo matricial:

$$\underline{\underline{G}}^{(\vec{A}_1)}(\vec{r} \vec{r}' | \omega) = \underline{\underline{G}}^0(\vec{r} \vec{r}' | \omega) + \int d\vec{r}_1 \underline{\underline{G}}^0(\vec{r} \vec{r}_1 | \omega) \underline{\underline{H}}_I(\vec{r}_1) \underline{\underline{G}}^{(\vec{A}_1)}(\vec{r}_1 \vec{r}' | \omega) \quad (2.65)$$

O operador densidade de corrente neste caso é:

$$\vec{j}(x) = \sum_{\alpha=1}^N \vec{j}_\alpha(x) = \sum_{\alpha=1}^N \frac{ie}{m_\alpha} [\Psi_\alpha^\dagger(x) \vec{\nabla} \Psi_\alpha(x) - (\vec{\nabla} \Psi_\alpha^\dagger(x)) \Psi_\alpha(x)] \quad (2.66)$$

ou

$$\vec{j}(x) = \sum_{\alpha=1}^N \frac{ie}{m_\alpha} \lim_{\vec{r} \rightarrow \vec{r}'} \lim_{t' \rightarrow t^+} (\vec{\nabla}_r - \vec{\nabla}_{r'}) G_{\alpha\alpha}^{(\vec{A}_1)}(x, x') \quad (2.67)$$

Tomando (2.65) até o termo linear no potencial vetorial para $G^{(\vec{A}_1)}(\vec{r} \vec{r}' | \omega)$, a densidade de corrente finalmente aparece na forma:

$$\vec{j}(\vec{r} | \omega) = \sum_{\alpha} \frac{ie^2}{2m_\alpha} \sum_{\beta} \frac{1}{m_\beta} [\vec{\nabla}_{r_4} - \vec{\nabla}_{r_1}]_{r_4=r_1} \int d\vec{r}_3 \vec{A}(\vec{r}_3) \cdot [\vec{\nabla}_{r_3} - \vec{\nabla}_{r_2}]_{r_3=r_2} \times \quad (2.68)$$

$$\times G_{\alpha\beta}^0(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + \omega) G_{\beta\alpha}^0(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | E)$$

que é a versão da fórmula de Abrikosov para N tipos de elétrons à temperatura zero.

Esta é a fórmula que basicamente vamos utilizar nos capítulos seguintes; isto significa claramente que estamos fazendo a opção de obter a condutividade pela função correlação corrente-corrente. Esta escolha será justificada mais claramente no Capítulo 4.

Capítulo 3

Universalidade em Localização Fraca

3.1 Introdução

Como foi discutido no Capítulo 1, muito esforço foi dispendido na compreensão do fenômeno de transição de localização, em particular no efeito de localização fraca (ELF). Este efeito é basicamente produzido pela interferência quântica coerente das funções de onda dos elétrons espalhados pelas impurezas distribuídas aleatoriamente no sistema. O ELF pode ser obtido através da expansão diagramática da função de Green de duas partículas (G₂) considerando diagramas maximamente cruzados que podem ser interpretados como uma difusão coerente do par partícula-buraco com momenta opostos.

A primeira observação que devemos fazer é que o cálculo da condutividade tem sido feito tomando como modelo de partida uma versão bastante simplificada, onde somente uma banda de elétrons é considerada e com massa isotrópica. A questão que deve ser levantada neste momento é se esta versão simplificada é capaz de reproduzir os aspectos essenciais das propriedades de transporte em sistemas desordenados reais.

Nos últimos anos uma série de trabalhos têm sido propostos no sentido de tentar obter alguma generalização para este problema. Hikami et al.[1] propuseram incluir efeitos devido à interação spin-órbita e espalhamento de elétrons por impurezas magnéticas em duas dimensões. Como resultado, os autores obtiveram o vértice maximamente cruzado em função de 3 tipos de processos de espalhamentos dos elétrons: por impurezas (como num sistema

simples), por interação spin-órbita (τ_{so}) e devido à presença de impurezas magnéticas (τ_s).

É possível distinguir 3 casos:

1) Se $\tau_{so}^{-1} = 0$ e $\tau_s^{-1} = 0$, recuperamos o pólo de difusão usual.

2) Se $\tau_s^{-1} \neq 0$, o pólo de difusão desaparece.

3) Se $\tau_{so}^{-1} \neq 0$ e $\tau_s^{-1} = 0$, aparece um comportamento tipo pólo de difusão, mas de origem diferente do caso 1.

Os autores também estenderam o problema para incluir campo magnético utilizando a aproximação semi-clássica (posteriormente vamos discutir as virtudes e os defeitos desta aproximação); neste caso a magnetorresistência apresenta 3 tipos de situação:

1) Quando espalhamentos spin-órbita e magnético estão ausentes, $\Delta R = R(H) - R(0)$ é negativo.

2) Se a interação spin-órbita é forte, ΔR é positivo.

3) Se o espalhamento magnético é suficientemente forte, ΔR é pequeno. Este trabalho teve, como motivação, a explicação de alguns fatos empíricos de sistemas físicos tipo Mosfet.

Posteriormente, Fukuyama [2] utilizou um modelo (para estudar também propriedades do Si- Mosfet) que admitia a existência de duas bandas de elétrons com a possibilidade de espalhamentos mais complexos destes elétrons pelas impurezas: dentro de uma mesma banda (intrabanda) e de uma banda para outra (interbanda). Neste modelo, o espalhamento entre elétrons e impurezas era usual e não existia interação spin-órbita nem impurezas magnéticas. O resultado encontrado foi que o coeficiente, multiplicando o termo contendo o pólo de difusão era reduzido à metade devido ao espalhamento intervale.

A próxima abordagem do problema foi feita por R. N. Bhatt e T. V. Ramakrishnan [3], que olharam para possíveis efeitos de anisotropia de massa e de espalhamentos dos elétrons na condutividade. A conclusão deste trabalho é que a anisotropia de massa alteraria o coeficiente do fator contendo o pólo de difusão, que, por sua vez, não dependeria do mecanismo de espalhamento anisotrópico. O problema é que os autores não consideraram diagramas que não se cancelam no caso de espalhamento anisotrópico, fato este que trará modificações relevantes, como veremos a seguir.

Olhando para este problema, P. Wolffe e R. N. Bhatt [4] encontraram que a anisotropia no tensor de massa não seria suficiente para explicar o comportamento anisotrópico de sistemas tipo Si-Mosfet. Como consequência, seria estritamente necessário considerar espalhamentos não isotrópicos. Levando adiante estas considerações, os autores efetuaram a análise do problema contando corretamente os diagramas que contribuem ao problema não isotrópico. Seu resultado sugere que todo efeito de anisotropia pode ser absorvido em um coeficiente de difusão anisotrópico.

G. Bergman [5], tendo como base um formalismo em que a integração da parte radial dos diagramas é equivalente a resolver uma equação de transporte clássica, encontrou que o ELF é universal em sistemas multibandas definindo adequadamente uma constante de difusão efetiva e o tempo de relaxação presentes no sistema.

Enfim, todos estes autores têm tentado sofisticar os modelos para ELF com a intenção de investigar as consequências que estas alterações poderiam ocasionar na condutividade.

A segunda observação importante é que estas abordagens têm incluído (quando incluem) o campo magnético \vec{B} de maneira fenomenológica, que consiste basicamente em calcular a condutividade em ausência deste e após incluí-lo diretamente no vértice maximamente cruzado, substituindo integração sobre momentum por somas sobre os níveis de Landau (isto constitui o cerne do que é conhecido como aproximação semiclássica, mencionada anteriormente). Acontece, porém, que o mecanismo físico responsável pelo ELF é fortemente dependente da presença do campo, isto é, a correlação especial que existe no par elétron-buraco provém da simetria de inversão temporal da difusão do par mencionado. Ora, o campo \vec{B} destrói esta simetria. Dado, portanto, que todo problema é extremamente sensível à presença do \vec{B} , a aproximação semiclássica (embora simples de implementar como técnica de cálculo), obscurece pontos importantes na formulação do problema. Falando objetivamente, esta aproximação não permite controlar em detalhes os efeitos do campo magnético em quantidades fundamentais como a Função de Green de Uma Partícula (G1) e G2. Por exemplo, quando construímos a expansão para a G2 em presença de campo, não é nada óbvio como escrever os diagramas de Feynman diretamente no espaço de momentum. Esta

passagem é fundamental, já que a magnetocondutividade depende diretamente da G_2 no limite em que o momentum e a frequência se anulam.

Questões desta natureza colocam a necessidade de formular o problema desde o seu princípio com campo magnético, de maneira que seja possível perceber passo a passo suas consequências nas funções de Green olhando para a expansão diagramática no espaço real.

A forma como vamos introduzir \vec{B} segue as linhas gerais da formulação dada por A. Theumann e S.G. Magalhães [6] para um modelo com uma banda e massa isotrópicos, que pode ser resumido na sequência de passos descrita abaixo:

1) Escrevemos a G_1 diretamente em presença de campo magnético. Por exemplo, no caso de um modelo com uma banda com espalhamentos e massas isotrópicos:

$$G(\vec{r} \vec{r}' | E) = \sum_{|\lambda|} \frac{\psi_{\lambda}^*(\vec{r}) \psi_{\lambda}(\vec{r}')}{E - \omega_c(n + \frac{1}{2}) - \frac{p_z^2}{2m} + E_F + \frac{i}{2\tau} \text{sgn} E} \quad (3.1)$$

com $|\lambda| = [n, p_x, p_z]$ e

$$\frac{1}{\tau} = 2\pi U(2E_F)^{1/2} \quad (3.2)$$

e $\psi_{\lambda}(\vec{r})$ sendo a função de onda do elétron

$$\psi_{\lambda}(\vec{r}) = \frac{e^{i(p_x x + p_z z)}}{2\pi} \phi_n(y + p_x/m\omega_c) \quad (3.3)$$

$$\phi_n(y) = \left(\frac{m\omega_c}{\pi}\right)^{1/4} (2^n n!)^{-1/2} e^{\omega_c y^2/2} H_n[(\omega_c)^{1/2} y] \quad (3.4)$$

onde $\omega_c = eB/m$ é a frequência de ciclotron e $H_n(z)$ são os polinômios de Hermite.

É importante ressaltar neste momento, a perda da invariância translacional da G_1 ; isto terá implicações drásticas quando se tentar realizar a transformada de Fourier de todas as expressões subsequentes que são contruídas a partir desta.

2) Podemos escrever a G_1 de maneira alternativa; integrando a expressão anterior com relação a p_x , isto resulta em

$$G(\vec{r} \vec{r}' | E) = e^{i\frac{\omega c}{2}(x-x')(y+y')} g(\vec{r} - \vec{r}' | E) \quad (3.5)$$

onde

$$g(\vec{r} | E) = \omega_c \sum_{n=0}^{\infty} \int \frac{dp}{2\pi} e^{\omega_c(x^2+y^2)/4} L_n\left(\frac{\omega_c}{2}(x^2+y^2)\right) \times g_E(n p) e^{ipz} \quad (3.6)$$

A vantagem de utilizar esta forma é que agora a perda da invariança translacional está toda contida no argumento da exponencial, de maneira que nestas condições a manipulação da G1 é enormemente facilitada.

3) Por outro lado, a condutividade é relacionada diretamente com a G2 pela fórmula de Abrikosov [12]. Se estamos interessados no ELF, então a G2 é dada como:

$$\begin{aligned} < G(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + \omega) G(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | E) > = G(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + \omega) G(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | E) + \\ & + U \int d\vec{r} \int d\vec{r}' G(\vec{r}_1 \vec{r} | E + \omega) G(\vec{r}' \vec{r}_2 | E + \omega) \overline{K}(\vec{r} \vec{r}' | \omega) \times \\ & \times G(\vec{r}_3 \vec{r} | E) G(\vec{r}' \vec{r}_4 | E) \end{aligned} \quad (3.7)$$

com

$$\overline{K}(\vec{r} \vec{r}' | \omega) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') + UK(\vec{r} \vec{r}' | \omega) \quad (3.8)$$

onde $K(\vec{r} \vec{r}' | \omega)$ corresponde ao vértice maximamente cruzado e é solução da equação:

$$K(\vec{r} \vec{r}' | \omega) = K^0(\vec{r} \vec{r}' | \omega) + U \int d\vec{r}'' K^0(\vec{r} \vec{r}'' | \omega) K(\vec{r}'' \vec{r}' | \omega) \quad (3.9)$$

cujos correspondentes diagramas de Feynman são colocados na Fig.(3.1).

Devemos olhar agora para a solução da equação integral correspondendo a $K(\vec{r} \vec{r}' | \omega)$ que constitui a parte central deste método. Evidentemente não é possível utilizar diretamente o teorema da convolução para transformada de Fourier na equação integral para obter a solução.

A $K^0(\vec{r} \vec{r}' | \omega)$ é definida como

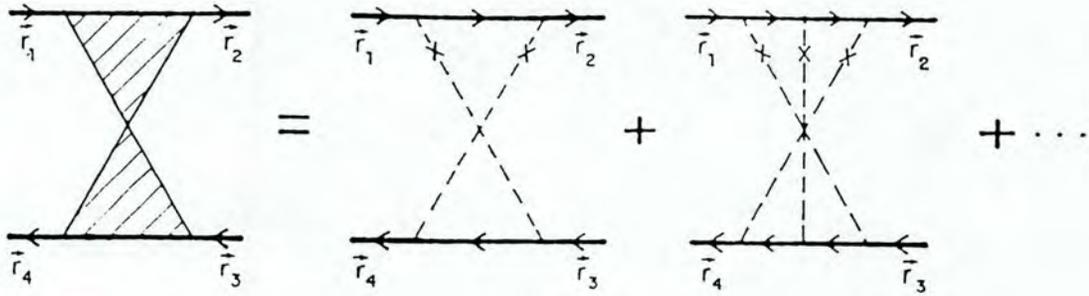


Figura 3.1: *Expansão diagramática do vértice maximamente cruzado.*

$$\begin{aligned}
 K^0(\vec{r} \vec{r}' | \omega) &= G(\vec{r} \vec{r}' | E + \omega)G(\vec{r} \vec{r}' | \omega) = \\
 &= e^{i\omega_c(x-x')(y+y')} \Lambda^0(\vec{r} - \vec{r}' | \omega)
 \end{aligned}
 \tag{3.10}$$

Com a forma alternativa para G1 obtida no item 2) contruímos a quantidade:

$$\Lambda^0(\vec{r} - \vec{r}' | \omega) = g(\vec{r} - \vec{r}' | E + \omega)g(\vec{r} - \vec{r}' | E)
 \tag{3.11}$$

que tem grande importância neste problema, já que a equação integral em (3.9) pode ser escrita em termos de $\Lambda^0(\vec{r} - \vec{r}' | \omega)$.

Agora podemos encontrar uma solução para o vértice maximamente cruzado escrevendo

$$K(\vec{r} \vec{r}' | \omega) = e^{i\omega_c(x-x')(y+y')} \Lambda(\vec{r} - \vec{r}' | \omega)
 \tag{3.12}$$

onde $\Lambda(\vec{r} \vec{r}' | \omega)$ satisfaz a equação

$$\Lambda(\vec{r} | \omega) = \Lambda^0(\vec{r} | \omega) + U \int d\vec{r}_1 \Lambda(\vec{r}_1 | \omega) e^{i\omega_c(x_1 y - y_1 x)} \Lambda(\vec{r} - \vec{r}_1 | \omega)
 \tag{3.13}$$

Estamos diante de uma equação que tem agora uma estrutura que pode ser descrita como um produto de funções invariantes translacionais por exponenciais em cujo argumento

está colocada a ω_c . A vantagem desta estrutura, porém, é que agora podemos expandir as exponenciais em série de Taylor com um parâmetro diretamente relacionado com o campo magnético, que é a frequência de ciclotron. Concluído este processo, podemos fazer a transformada de Fourier, de tal maneira que ao final ficamos com:

$$\begin{aligned} \Lambda(\vec{k} | \omega) = & \frac{\Lambda^0(\vec{k} | \omega)}{1 - U\Lambda^0(\vec{k} | \omega)} + \frac{U}{1 - U\Lambda^0(\vec{k} | \omega)} \times \\ & \times \left(-\frac{\omega_c^2}{2}\right) \left[\frac{\partial^2}{\partial k_x^2} \Lambda^0(\vec{k} | \omega) \frac{\partial^2}{\partial k_y^2} \Lambda(\vec{k} | \omega) + \frac{\partial^2}{\partial k_y^2} \Lambda^0(\vec{k} | \omega) \frac{\partial^2}{\partial k_x^2} \Lambda(\vec{k} | \omega) - \right. \\ & \left. - 2 \frac{\partial^2}{\partial k_x \partial k_y} \Lambda^0(\vec{k} | \omega) \frac{\partial^2}{\partial k_y \partial k_x} \Lambda(\vec{k} | \omega) \right] \end{aligned} \quad (3.14)$$

4) O último passo é o cálculo da magnetocondutividade utilizando a forma (3.1) para a G1 e o resultado conseguido para o $K(\vec{r} \vec{r}' | \omega)$.

O importante a ser enfatizado neste tipo de abordagem é a forma como calculamos a quantidade central, $K(\vec{r} \vec{r}' | \omega)$. Utilizando os níveis de Landau exatos foi possível calcular o vértice maximamente cruzado controlando claramente a presença do campo magnético na teoria.

Feitas estas considerações, podemos discutir a tese central deste capítulo que é encontrar uma universalidade no ELF em presença de campo magnético. Neste momento é necessário precisar claramente qual o sentido que estamos dando para esta idéia de universalidade no contexto deste trabalho. Para nós, o significado desta idéia é encontrar (se possível) um comportamento para a magnetocondutividade no regime de localização fraca que seja independente dos detalhes específicos do sistema. Tal comportamento foi encontrado nas referências [4] e [5] *em ausência de campo magnético ou com as limitações da aproximação semiclassica*. Desta maneira a questão fundamental pode ser sintetizada nos seguintes termos: se a presença do campo magnético é fundamental no ELF, existe universalidade (no sentido colocado anteriormente) em modelos mais complexos de gás de elétrons com impurezas? A resposta a esta indagação é o objeto de análise do restante deste capítulo.

Para responder a esta questão, vamos estudar basicamente 3 classes de modelos :

1) Gás de elétrons com impurezas e anisotropia de massa em presença de campo magnético.

2) Gás de elétrons em presença de impurezas com duas bandas de energia para os elétrons, que estão representadas pela presença de índices nas massas dos elétrons sem campo magnético.

3) O mesmo modelo do caso 2), mas agora com campo magnético.

O estudo do segundo modelo se faz necessário em virtude das dificuldades envolvidas no terceiro caso, por isso, nos debruçamos primeiro sobre um problema similar, só que em campo nulo. O ponto importante é que os diagramas importantes para a condutividade encontrados em 2) são os mesmos que contribuem em 3).

3.2 Anisotropia de Massa

O modelo utilizado é definido pelo Hamiltoniano abaixo:

$$H = - \sum_{\mu=1}^3 \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) \frac{D_\mu^2}{2m_\mu} \Psi(\vec{r}) + \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r} \Psi^\dagger(\vec{r}) V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) \quad (3.15)$$

onde

$$\begin{aligned} D_1 &= \frac{\partial}{\partial x} - \frac{ie}{c} B y \\ D_2 &= \frac{\partial}{\partial y} \\ D_3 &= \frac{\partial}{\partial z} \end{aligned} \quad (3.16)$$

e \vec{B} é o campo magnético na direção z .

$V(\vec{r})$ é um potencial aleatório que tem primeiro e segundo momentos dados respectivamente como

$$\langle V(\vec{r}) \rangle = 0 \quad (3.17)$$

$$\langle V(\vec{r}) V(\vec{r}') \rangle = U \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (3.18)$$

Como neste modelo os elétrons estão numa única banda de energia, não existe essencialmente nada de novo no que se refere ao espalhamento dos elétrons pelas impurezas em comparação com o modelo de banda simples sem anisotropia de massa. Desta maneira, a expansão diagramática, tanto para a G1 quanto para a G2, tem exatamente os mesmos diagramas do problema isotrópico. As diferenças surgem nas próprias expressões analíticas com o desdobramento da massa dos elétrons segundo os eixos coordenados. As autofunções do Hamiltoniano (estamos tomando $c = h = 1$) dado em (3.15), podem ser encontradas [7]:

$$\psi_{k_x k_z n}(\vec{r}) = \frac{e^{i(xk_x + zk_z)}}{2\pi} \phi_n\left(y + \frac{k_x}{(m_x m_y)^{1/2} \omega_c}\right) \quad (3.19)$$

com

$$\begin{aligned} \phi_n\left(y + \frac{k_x}{(m_x m_y)^{1/2} \omega_c}\right) &= \frac{\sqrt{m_y \omega_c}}{(2^n n! \sqrt{\pi})^{1/2}} e^{-m_y \frac{\omega_c}{2} \left|y + \frac{k_x}{\omega_c (m_x m_y)^{1/2}}\right|^2} \times \\ &\times H_n\left[\sqrt{m_y \omega_c} \left(y + \frac{k_x}{\omega_c (m_x m_y)^{1/2}}\right)\right] \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde $\omega_c = \frac{eB}{\sqrt{m_x m_y}}$

O Hamiltoniano descrito pela equação (3.15), tem autovalor de energia associado dado por:

$$E_n = \omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{k_z^2}{2m_z} \quad (3.21)$$

Neste momento devemos notar o comportamento anisotrópico da própria função de onda dos elétrons, onde distinguimos dois comportamentos; um no plano perpendicular ao \vec{B} onde temos um oscilador harmônico e outro na direção paralela ao \vec{B} onde temos uma onda plana. A G1 correspondendo ao problema com $V(\vec{r}) = 0$, pode ser escrita como [6]:

$$G^0(\vec{r} \vec{r}' | E) = \sum_{[\lambda]} \psi_\lambda^*(\vec{r}) \psi_\lambda(\vec{r}') g^0(n k_z | E) \quad (3.22)$$

com $\psi_\lambda(\vec{r})$ já definido em (3.19) e

$$g^0(n k_z | E) = \frac{1}{-E - E_F + \omega_c(n + \frac{1}{2}) + \frac{k_z^2}{2m_z} - i\delta \text{sgn}E} \quad (3.23)$$

Nas expressões (3.19) e (3.23) escrevemos explicitamente as massas para tornar claro a superposição das duas anisotropias: das funções de onda em campo magnético e das massas. No caso em que o \vec{B} é nulo, toda dificuldade com as massas pode ser resolvida redefinindo os momentos [4]. O próximo passo é encontrar a G1 em presença do potencial aleatório. Neste caso, esta é dada pela equação integral [6]:

$$\overline{G}(\vec{r} \vec{r}' | E) = G^0(\vec{r} \vec{r}' | E) + \int d\vec{r}_1 G(\vec{r} \vec{r}_1 | E) V(\vec{r}_1) \overline{G}(\vec{r}_1 \vec{r}' | E) \quad (3.24)$$

Realizando a média sobre distribuição de impurezas, onde utilizamos os valores de primeiro e segundo momentos do potencial aleatório definido no modelo, a G1 pode ser representada diagramaticamente em ordem mais baixa pela Fig.(3.2).

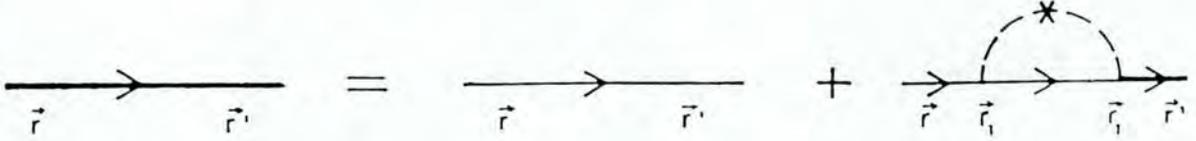


Figura 3.2: Diagrama para G1 mediado sobre distribuição de impurezas.

Nesta aproximação, a auto-energia pode ser calculada como:

$$Im\Sigma = \frac{1}{2\tau} = \pi U Im G^0(\vec{r} \vec{r}' | E) = \pi U (eB) Im \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_z}{2\pi} \frac{1}{\omega_c(n + \frac{1}{2}) + \frac{k_z^2}{2m_z} - E_F - E + i\delta \text{sgn}E}$$

e

$$\frac{1}{2\tau} = 2\pi (m_x m_y m_z)^{1/2} (2E_F)^{1/2} U$$

Resulta finalmente que a G1 é descrita por:

$$\langle \bar{G}(\vec{r} \vec{r}' | E) \rangle = G(\vec{r} \vec{r}' | E) = \sum_{|\lambda|} \psi_\lambda^*(\vec{r}) \psi_\lambda(\vec{r}') g(n p_z | E) \quad (3.25)$$

novamente $\psi_\lambda(\vec{r})$ foi definido em (3.19) e

$$g(n p | E) = \frac{1}{\omega_c(n + \frac{1}{2}) + \frac{p^2}{2m_z} - E_F - E - \frac{i}{2\tau} \text{sgn} E} \quad (3.26)$$

De maneira similar ao problema com isotropia de massa [6], podemos encontrar uma forma alternativa para G1 integrando (3.25) com relação a k_x :

$$\begin{aligned} G(\vec{r} \vec{r}' | E) = eB e^{-\frac{ieB}{2}(y+y')(x-x')} \sum_n \int \frac{dk_z}{2\pi} e^{ik_z(z-z')} \times \\ \times e^{-\frac{\omega_c}{4}[m_y(y-y')^2 + m_z(x-x')^2]} L_n\left[\frac{\omega_c}{2}[m_y(y-y')^2 + m_z(x-x')^2]\right] \times \\ \times g(n k_z | E) \end{aligned} \quad (3.27)$$

De posse da forma (3.27) para G1 podemos calcular a polarização definida abaixo:

$$\Pi_0(\vec{r} \vec{r}' | \omega) = G^+(\vec{r} \vec{r}' | E + \omega) G^-(\vec{r}' \vec{r} | \omega) \quad (3.28)$$

As $G^+(\vec{r} \vec{r}' | E)$ e $G^-(\vec{r}' \vec{r} | E)$ correspondem respectivamente às funções de Green avançada e retardada que se relacionam com a função de Green causal dada em (3.25) por:

$$G^+(\vec{r} \vec{r}' | E) = G(\vec{r} \vec{r}' | E) \quad E \geq 0 \quad (3.29)$$

e

$$G^-(\vec{r} \vec{r}' | E) = G(\vec{r} \vec{r}' | E) \quad E < 0 \quad (3.30)$$

Como no caso de massas isotrópicas, esta quantidade é central pois o vértice maximamente cruzado pode ser escrito em função da polarização como veremos posteriormente.

Utilizando a forma (3.27) para as funções de Green, percebemos claramente que a polarização é invariante translacional, logo fazendo a transformada de Fourier:

$$\Pi^0(\vec{p} | \omega) = \int d\vec{r} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} \Pi(\vec{r} | \omega) \quad (3.31)$$

ou explicitamente

$$\begin{aligned} \Pi^0(\vec{p} | \omega) &= \alpha^2 \sum_{n n'} \int d\vec{r} e^{-\frac{\alpha}{2} [(\frac{m_x}{m_y})^{1/2} r_x^2 + (\frac{m_y}{m_x})^{1/2} r_y^2]} \times \\ &\times e^{-i(p_x r_x + p_y r_y)} L_n[\alpha [(\frac{m_x}{m_y})^{1/2} r_x^2 + (\frac{m_y}{m_x}) r_y^2]] L_{n'}[\alpha [(\frac{m_x}{m_y})^{1/2} r_x^2 + (\frac{m_y}{m_x}) r_y^2]] \times \\ &\times \int \frac{dk_z}{2\pi} g(n k_z + p_z | E + \omega) g(n' k_z | E) \end{aligned} \quad (3.32)$$

com $\alpha = eB$. Fazendo uma mudança de variável;

$$\begin{aligned} \xi_x &= (\frac{m_x}{m_y})^{1/4} x \\ \xi_y &= (\frac{m_y}{m_x})^{1/4} y \\ \xi_z &= z \end{aligned} \quad (3.33)$$

com $d\vec{\xi}_\perp = d\vec{r}_\perp$ obtemos

$$\begin{aligned} \Pi^0(\vec{p} | \omega) &= \alpha^2 \sum_{n n'} \int \frac{dk_z}{2\pi} \int d\xi_\perp \xi_\perp e^{-\frac{\alpha^2}{2} \xi_\perp^2} L_n[\alpha \xi_\perp^2] \times \\ &\times L_{n'}[\alpha \xi_\perp^2] \int \frac{dk_z}{2\pi} g(n k_z + p_z | E + \omega) g(n' k_z | E) \int_0^{2\pi} d\theta e^{ip_\perp \xi \cos\theta} \end{aligned} \quad (3.34)$$

e

$$p_\perp^2 = (\frac{m_x}{m_y})^{1/2} p_x^2 + (\frac{m_y}{m_x})^{1/2} p_y^2 \quad (3.35)$$

As equações (3.32) e (3.34) têm a mesma forma geral de expressões equivalentes da referência [6], exceto que as projeções no plano xy do vetor posição e momentum se alteram em função das massas anisotrópicas. Então, efetuando a integração angular [9]:

$$\int_0^{2\pi} e^{ip_{\perp}\xi_{\perp}\cos\theta} = 2\pi J_0(p_{\perp}\xi_{\perp}) \quad (3.36)$$

onde $J_0(x)$ é uma função de Bessel. Desta forma, a polarização se torna:

$$\begin{aligned} \Pi_0(\vec{p} | \omega) &= \alpha^2 \sum_{n n'} \int d\xi_{\perp} \xi_{\perp} e^{-\frac{\alpha^2}{2}\xi_{\perp}^2} L_n[\alpha \xi_{\perp}^2] L_{n'}[\alpha \xi_{\perp}^2] \times \\ &\times J_0(p_{\perp} \xi_{\perp}) \int \frac{dk_z}{2\pi} g(n k_z + p_z | E + \omega) g(n k_z | E) \end{aligned} \quad (3.37)$$

A expressão anterior pode agora ser integrada em ξ_{\perp} utilizando a fórmula 7.422-2 de [9], tal que finalmente:

$$\Pi_0(\vec{p} | \omega) = \alpha \sum_{n n'} L_{n'}^{n'-n} \left(\frac{p_{\perp}^2}{2\alpha} \right) L_n^{n-n'} \left(\frac{p_{\perp}^2}{2\alpha} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_z}{2\pi} g(n k_z + p_z | E + \omega) g(n k_z | E) \quad (3.38)$$

Podemos expandir o produto dos polinômios de Laguerre até ordem p_{\perp}^2 , então:

$$L_n^{n'-n} \left(\frac{p_{\perp}^2}{2\alpha} \right) L_n^{n-n'} \left(\frac{p_{\perp}^2}{2\alpha} \right) = \left(1 - \frac{n p_{\perp}^2}{\alpha} \right) \delta_{n,n'} + \frac{n p_{\perp}^2}{2\alpha} \delta_{n',n-1} + \frac{(n+1) p_{\perp}^2}{2\alpha} \delta_{n,n'-1} \quad (3.39)$$

Voltando com expansão (3.39) para (3.38), ficamos com a polarização dada como:

$$\Pi_0(\vec{p} | \omega) = C_0 + C_z p_z^2 + C_{\perp} p_{\perp}^2 \quad (3.40)$$

onde expandimos a $g(n k_z + p_z | E + \omega)$ até ordem p_z^2 . As constantes C_0 , C_z e C_{\perp} são dadas explicitamente abaixo:

$$C_0 = \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} dk_z g(n k_z | E + \omega) g(n k_z | E) \quad (3.41)$$

$$C_z = \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} dk_z g(n k_z | E) \frac{\partial^2}{\partial k_z^2} g(n k_z | E + \omega) \quad (3.42)$$

$$C_{\perp} = \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} dk_z g(n k_z | E + \omega) \left[\left(n + \frac{1}{2}\right) g(n k_z | E) - \frac{n}{2} g(n-1 k_z | E) - \right. \quad (3.43) \\ \left. - \left(\frac{n+1}{2}\right) g(n+1 k_z | E) \right]$$

As integrais em k_z podem ser calculadas:

$$C_0 = (m_x m_y m_z)^{1/2} 2\pi \sqrt{2} \frac{\tau}{1 - i\omega\tau} \omega_c \sum_n \text{Re}[E_F - \omega_c n + \frac{i}{2\tau}]^{-1/2} \quad (3.44)$$

$$C_z = (m_x m_y m_z)^{1/2} \frac{4\pi \sqrt{2}}{m_z} \tau^3 \omega_c \sum_n \text{Re}[E_F - \omega_c n + \frac{i}{2\tau}]^{-1/2} \quad (3.45)$$

$$C_{\perp} = (m_x m_y m_z)^{1/2} \frac{2\pi \sqrt{2} \tau^3}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \omega_c^2 \sum_n n \text{Re}[E_F - \omega_c n + \frac{i}{2\tau}]^{-1/2} \quad (3.46)$$

As somas nas expressões anteriores podem ser calculadas [9] usando:

$$\sum_{n=1}^N n^a = \frac{N^{a+1}}{a+1} \left[1 + \frac{1}{2} \frac{a+1}{N} + o\left(\frac{1}{N^2}\right) \right] \quad (3.47)$$

onde o termo dominante na expressão (3.47) corresponde a tomar soma por integrais com $N = \frac{E_F}{\omega_c}$. Assim, a polarização pode ser finalmente escrita como:

$$\Pi^0(\vec{p} | \omega) = 2\pi N(E_F) \tau \left[1 + i\omega\tau - D_0^z \tau p_z^2 - D_H^x \tau p_x^2 - D_H^y \tau p_y^2 \right] \quad (3.48)$$

A constante de difusão anisotrópica é dada por:

$$D_0^\mu = \frac{2E_F \tau}{3m_\mu}; \quad \mu = x, y, z. \quad (3.49)$$

$$D_H^\mu = \frac{D_0^\mu}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \quad (3.50)$$

e

$$N(E_F) = (2m_x m_y m_z)^{1/2} \sqrt{2E_F} \quad (3.51)$$

Quando fazemos $m_x = m_y = m_z$, recuperamos o resultado da referência [6]. Podemos comparar também com o resultado de Houghton et al [10] em duas dimensões que encontraram a polarização por métodos diferentes. Na equação (3.48) podemos ver claramente a superposição das duas anisotropias; uma devido à presença do campo magnético e outra devido às massas. Podemos passar ao cálculo da equação integral do vértice maximamente cruzado dada na expressão (3.9) que corresponde à série de diagramas maximamente cruzados mostrados na Fig.(3.1).

Notando que pela expressão (3.10) temos que:

$$\Pi^0(\vec{r} - \vec{r}' | E) = \Lambda^0(\vec{r} - \vec{r}' | E) \quad (3.52)$$

substituindo o valor obtido para a polarização em (3.14), chegamos finalmente em:

$$\overline{K}(\vec{r} \vec{r}' | E) = e^{i\omega_c(x-x')(y+y')} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} (1 + U \Lambda(\vec{k} | E)) \quad (3.53)$$

$$\overline{K}(\vec{r} \vec{r}' | E) = e^{i\omega_c(x-x')(y+y')} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2}{(D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2)^2 + \alpha^2 D_H^x D_H^y \tau^2} \quad (3.54)$$

Na obtenção de (3.54) está sendo utilizada a aproximação pólo de difusão [12]. Resta agora com o valor obtido para o vértice maximamente cruzado calcular diretamente a magnetocondutividade pela fórmula de Abrikosov (ver Capítulo 2) adaptada para o problema de massas anisotrópicas:

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\mu}(\vec{q} | \omega) = & \frac{e^2}{2\omega} \int_{-\omega}^0 dE \int d(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} \frac{1}{2m_\mu^2} (D_{\vec{r}_4}^\mu - D_{\vec{r}_1}^{\mu*})_{\vec{r}_4 = \vec{r}_1} \times \\ & \times (D_{\vec{r}_3}^\mu - D_{\vec{r}_2}^{\mu*})_{\vec{r}_3 = \vec{r}_2} < G(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + \omega) G(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | E) > \end{aligned} \quad (3.55)$$

com $\mu = x, y, z$.

Como queremos calcular as correções no regime do ELF, substituindo o valor encontrado em (3.54) em (3.7), podemos calcular a magnetocondutividade pela equação (3.55). Então, se $\sigma_{\mu\nu} = \sigma_{\mu\nu}^0 + \sigma'_{\mu\nu}$, obtemos:

$$\sigma'_{zz} = -\frac{e^2}{2\pi^2} U \frac{(m_x m_y)^{1/2}}{m_z^2} \omega_c \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z p_z^2 [g(n p_z | E + \omega) g(n p_z | E)]^2 \times \quad (3.56)$$

$$\times f(D_0^\mu, D_H^\mu, \tau) \quad (3.57)$$

$$\sigma'_{xx} = -\frac{e^2}{2\pi^2} U \frac{(m_x m_y)^{1/2}}{m_x} \omega_c^2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \left[\frac{n+1}{2} [g(n p_z | E + \omega) g(n+1 p_z | E)]^2 + \right. \\ \left. + \frac{n}{2} [g(n p_z | E + \omega) g(n-1 p_z | E)]^2 \right] \times f(D_0^\mu, D_H^\mu, \tau) \quad (3.58)$$

$$\sigma'_{yy} = -\frac{e^2}{2\pi^2} U \frac{(m_x m_y)^{1/2}}{m_y} \omega_c^2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \left[\frac{n+1}{2} [g(n p_z | E + \omega) g(n+1 p_z | E)]^2 + \right. \\ \left. + \frac{n}{2} [g(n p_z | E + \omega) g(n-1 p_z | E)]^2 \right] \times f(D_0^\mu, D_H^\mu, \tau) \quad (3.59)$$

onde

$$f(D_0^\mu, D_H^\mu, \tau) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2}{(D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2)^2 + \alpha^2 D_H^x D_H^y \tau^2}$$

Os detalhes da obtenção das equações acima são inteiramente similares aquelas do apêndice da referência [6]. As constantes multiplicativas à integral em \vec{k} podem ser encontradas utilizando a mesma sistemática para o cálculo da polarização, isto é, calculamos a integral em p_z e após transformamos somas sobre os níveis de Landau em integrais pela expressão (3.47), logo:

$$\omega_c \sum_n \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z p_z^2 [g(n p_z | E + \omega) g(n p_z | E)]^2 = 2\pi (2m_z E_F)^{1/2} \left(\frac{2}{3} E_F \tau\right) \tau^2 \quad (3.60)$$

$$\omega_c^2 \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_z \left[\frac{n+1}{2} [g(n p_z | E + \omega) g(n+1 p_z | E)]^2 + \right. \quad (3.61)$$

$$\left. \frac{n}{2} [g(n p_z | E + \omega) g(n-1 p_z | E)]^2 \right] = 2\pi (2m_z E_F)^{1/2} / 2\tau \left(\frac{2}{3} E_F \tau\right) \frac{1 - 3\omega_c^2 \tau^2}{1 + (\omega_c^2 \tau^2)^2}$$

Com estes resultados podemos reconstruir as componentes da magnetocondutividade:

$$\sigma_{zz} = -e^2 D_z^0 \tau \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2}{(D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2)^2 + \alpha^2 D_H^x D_H^y \tau^2} \quad (3.62)$$

$$\sigma_{\mu\mu} = -e^2 D_0^\mu \tau \frac{1 - 3\omega_c^2 \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2}{(D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2)^2 + \alpha^2 D_H^x D_H^y \tau^2} \quad (3.63)$$

com $\mu = x, y$. A integral em \vec{k} pode ser resolvida [6]:

$$\int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2}{(D_0^z \tau k_z^2 + D_H^x \tau k_x^2 + D_H^y \tau k_y^2)^2 + \alpha^2 D_H^x D_H^y \tau^2} = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1 + \omega_c^2 \tau^2}{(D_0^z D_0^x D_0^y \tau_3)^{1/3}} [I^* - \alpha^{1/2} (D_H^x D_H^y)^{1/4} \tau^{1/2}] \quad (3.64)$$

Finalmente, com (3.64) em (3.62) e (3.63), $\Delta\sigma = \sigma'(H) - \sigma'(0)$ torna-se igual a:

$$\Delta\sigma_{zz}(H) = \frac{2e^2}{\pi^2} \frac{D_0^z}{(D_0^z D_0^x D_0^y)^{1/2}} [(eB)^{1/2} (D_0^x D_0^y)^{1/2} - I^* \omega_c^2 \tau^2] \quad (3.65)$$

$$\Delta\sigma_{xx}(H) = \frac{2e^2}{\pi^2} \frac{D_0^x}{(D_0^z D_0^x D_0^y)^{1/2}} [(eB)^{1/2} (D_0^x D_0^y)^{1/2} + 5I^* \omega_c^2 \tau^2] \quad (3.66)$$

$$\Delta\sigma_{yy}(H) = \frac{2e^2}{\pi^2} \frac{D_0^y}{(D_0^z D_0^x D_0^y)^{1/2}} [(eB)^{1/2} (D_0^x D_0^y)^{1/2} + 5I^* \omega_c^2 \tau^2] \quad (3.67)$$

Para comparar os resultados obtidos com outros trabalhos é instrutivo retroceder um pouco e olhar para as expressões em (3.65), (3.66) e (3.67) nas situações mencionadas abaixo:

1) No caso em que $m_z = m_x = m_y = m$ recuperamos o resultado de [6], e a anisotropia sobrevivente se refere apenas à presença do campo magnético que por sua vez pode ser eliminada se considerarmos o limite de campo fraco usualmente utilizado [11].

2) No caso em que $H = 0$, recaímos em (3.62) e (3.63) na mesma expressão obtida por P. Wolffe e R. N. Bhatt [4].

3.3 Duas Bandas Equivalentes sem Campo Magnético

O modelo estudado nesta seção é uma generalização para vales não equivalentes do modelo introduzido por Fukuyama [2]. Ele é descrito por:

$$H = - \sum_{\alpha=1}^2 \frac{1}{2m_{\alpha}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \vec{\nabla}_{\vec{r}}^2 \Psi_{\alpha}(\vec{r}) + \sum_{\alpha\beta=1}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) V_{\alpha\beta}(\vec{r}) \Psi_{\beta}(\vec{r}) \quad (3.68)$$

onde a dimensão do sistema pode ser $d = 2$ ou $d = 3$. O potencial aleatório tem

$$\langle V_{\alpha\beta}(\vec{r}) \rangle = 0 \quad (3.69)$$

$$\langle V_{\alpha\beta}(\vec{r}) V_{\gamma\delta}(\vec{r}') \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') [\Gamma^0 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \Gamma'(1 - \delta_{\alpha\beta})(1 - \delta_{\gamma\delta})] \quad (3.70)$$

A equação de movimento para a G1 é dada por

$$[E - E_F - \frac{\nabla_{\vec{r}}^2}{2m_{\alpha}}] G_{\alpha\beta}(\vec{r} \vec{r}' | E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\nu} V_{\alpha\nu}(\vec{r}) G_{\nu\beta}(\vec{r} \vec{r}' | E) \quad (3.71)$$

cujas soluções são dadas numa forma sintética em que aparecem matrizes 2x2:

$$\underline{\underline{G}}(\vec{r} \vec{r}' | E) = \underline{\underline{G}}^0(\vec{r} \vec{r}' | E) + \int d\vec{r}'' \underline{\underline{G}}^0(\vec{r} \vec{r}'' | E) \underline{\underline{V}}(\vec{r}'') \underline{\underline{G}}(\vec{r}'' \vec{r}' | E) \quad (3.72)$$

A $\underline{\underline{G}}^0(\vec{r} \vec{r}' | E)$ é uma matriz diagonal com elementos $G_{\alpha\alpha}^0(\vec{r} \vec{r}' | E)$, solução da parte livre da equação (3.71), enquanto $\underline{\underline{V}}$ é uma matriz de elementos $V_{\alpha\beta}(\vec{r})$. A transformada de Fourier da equação anterior é imediata:

$$\underline{\underline{G}}(\vec{p} \vec{p}' | E) = \underline{\underline{G}}^0(\vec{p} | E) \delta(\vec{p} - \vec{p}') + \underline{\underline{G}}^0(\vec{p} | E) \int \frac{d\vec{p}''}{2\pi^d} \underline{\underline{V}}(\vec{p} - \vec{p}'') \underline{\underline{G}}(\vec{p}'' \vec{p}' | E) \quad (3.73)$$

Fazendo a média da G1 sobre a desordem utilizando (3.69) e (3.70), recuperamos a invariância translacional e G1 pode ser descrita por diagramas de Feynman conforme podemos ver na Fig.(3.3).

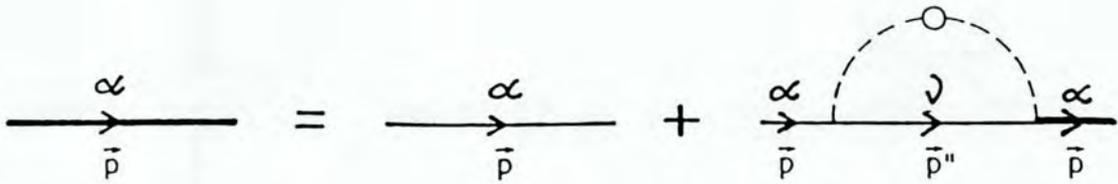


Figura 3.3: G_1 mediada sobre distribuição de impurezas.

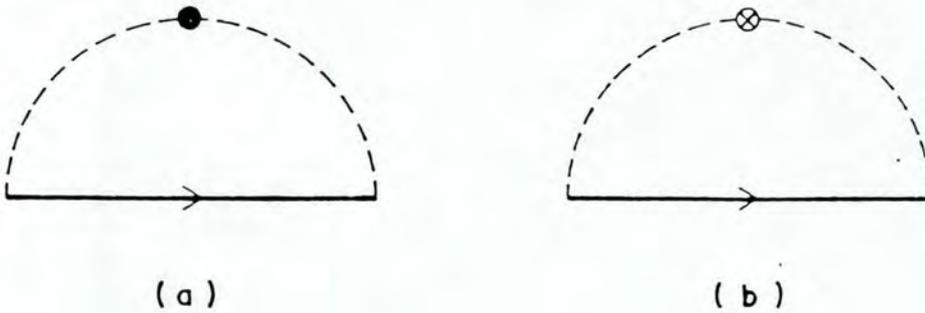


Figura 3.4: Quando o círculo na Fig.(3.3) for preenchido como no processo (a), temos um espalhamento intrabanda, isto é, ao longo da trajetória este elétron permanece sempre na banda i . Quando for com uma cruz, como no processo (b), o elétron sai da banda i para k , configurando um espalhamento interbanda.

Analiticamente, a G_1 correspondendo à Fig.(3.3), é dada por:

$$\langle \bar{G}_{\alpha\beta}(\vec{p} \vec{p}' | E) \rangle = G_{\alpha\beta}(\vec{p} | E) = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{E + E_F - \frac{p^2}{2m_\alpha} + \frac{i}{2\tau_\alpha} \text{sgn} E} \quad (3.74)$$

onde a parte imaginária da auto-energia é

$$\frac{1}{2\tau_\alpha} = \text{Im} \sum_{\alpha\alpha} = \sum_{\nu=1}^2 \Gamma_{\alpha\nu} \text{Im} G_\nu^0(\vec{p} | E) \quad (3.75)$$

e $\Gamma_{\alpha\nu}$ são componentes de uma matriz dada como:

$$\underline{\underline{\Gamma}} = \begin{pmatrix} \Gamma^0 & \Gamma^\nu \\ \Gamma^\nu & \Gamma^0 \end{pmatrix} \quad (3.76)$$

de tal forma que podemos identificar basicamente dois processos de espalhamentos dos elétrons pelas impurezas, ilustrados na Fig.(3.3), onde seus tempos de relaxação são mostrados na equações (3.77) e (3.78)

$$\frac{1}{2\tau_{\alpha\alpha}^0} = \Gamma^0 N_\alpha(E_F) 2\pi \quad (3.77)$$

$$\frac{1}{2\tau_{\alpha\nu}'} = \Gamma' N_\nu(E_F) 2\pi \quad (3.78)$$

$\alpha \neq \nu$

com $N_\nu(E_F) = \sqrt{2E_F}(m_\nu)^{3/2}$ densidade de estados para banda ν . O tempo $\tau_{\alpha\alpha}^0$ é associado com espalhamento intrabanda, enquanto $\tau_{\alpha\nu}'$ é associado com espalhamento interbanda. Podemos perceber pela estrutura da auto-energia (3.75), que a G1 descreve o processo de propagação do elétron com crescente perda de informação microscópica. A densidade de corrente mediada sobre desordem é relacionada com a G2, como vimos no Capítulo 2 por uma fórmula de Abrikosov generalizada:

$$\begin{aligned} \langle \vec{j}(\vec{r} | w) \rangle = & \sum_\alpha \frac{ie^2}{2m_\alpha} \sum_\beta \frac{1}{m_\beta} [\vec{\nabla}_{\vec{r}_4} - \vec{\nabla}_{\vec{r}_1}]_{\vec{r}_4=\vec{r}_1} \int d\vec{r}_3 \vec{A}(\vec{r}_3) \cdot \\ & \cdot [\vec{\nabla}_{\vec{r}_2} - \vec{\nabla}_{\vec{r}_3}]_{\vec{r}_3=\vec{r}_2} \langle G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + w) G_{\beta\alpha}(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | w) \rangle \end{aligned} \quad (3.79)$$

onde $G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + w)$ corresponde à G1 avançada e $G_{\beta\alpha}(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | w)$ à G1 retardada e o símbolo $\langle .. \rangle$ neste contexto corresponde a média sobre a desordem.

O ponto importante agora é calcular a G2, que constitui uma tarefa delicada já que a presença de duas bandas faz com que a geração de diagramas se torne mais complexa que em uma banda simples. Para obter a expansão diagramática para G2, vamos utilizar novamente as equações (3.69) e (3.70) e trabalhar sempre no canal partícula- partícula que torna mais

fácil a identificação das séries de diagramas que aparecem no problema. Como estamos interessados no ELF, os diagramas que devemos olhar são os diagramas cruzados, que no canal partícula-partícula tornam-se diagramas escadas. Então, se a expansão diagramática não se altera do ponto de vista da topologia que participa nas correções à condutividade, a grande questão agora é como se dá a distribuição de índices de bandas nos propagadores que participam na expansão da G_2 ? A resposta é que podemos identificar basicamente dois tipos de contribuição, conforme se pode observar nas Fig.(3.5) e Fig.(3.6), que correspondem respectivamente à diagramas com $\alpha \neq \beta$ e $\alpha = \beta$.

Identificamos basicamente duas classes de diagramas: 1) Diagramas da Fig.(3.5), a G_1 avançada está sempre em uma banda diferente da G_1 retardada. Estes diagramas correspondem aos termos fora da diagonal da G_2 . 2) Diagramas da Fig.(3.6), a G_1 avançada e retardada estão sempre na mesma banda após o espalhamento pelas impurezas que correspondem aos termos diagonais da G_2 . Estes diagramas da Fig.(3.6) estão relacionados com a G_2 através dos vértices $\Lambda_{\alpha\alpha}$, $\Lambda_{\alpha\beta}$ ($(\alpha \neq \beta)$), como podemos ver na Fig.(3.7). Por outro lado, os diagramas com índices $\alpha \neq \beta$ relacionam-se com a G_2 através de $Q_{\alpha\beta}$ e $\bar{Q}_{\alpha\beta}$ como vemos na Fig.(3.8), enquanto os próprios vértices são mostrados na Fig.(3.9).

A questão reside em saber quais os termos que contribuem para a condutividade através da G_2 . Olhando para os vértices que estão relacionados com a parte não diagonal da G_2 , isto é, $Q_{\alpha\beta}$ e $\bar{Q}_{\alpha\beta}$, fazemos a transformada de Fourier das equações integrais correspondendo a estes vértices da Fig.(3.9) e ficamos com um sistema de equações algébricas que podem ser resolvidas:

$$Q_{\alpha\beta}(\vec{p} | \omega) = \frac{(1 - \Gamma^0 Q_{\beta\alpha}^0(\vec{p} | \omega)) Q_{\alpha\beta}^0(\vec{p} | \omega)}{(1 - \Gamma^0 Q_{\alpha\beta}^0(\vec{p} | \omega))(1 - \Gamma^0 Q_{\beta\alpha}^0(\vec{p} | \omega)) - \Gamma^2 Q_{\alpha\beta}^0(\vec{p} | \omega) Q_{\beta\alpha}^0(\vec{p} | \omega)} \quad (3.80)$$

$$\bar{Q}_{\beta\alpha}(\vec{p} | \omega) = \frac{\Gamma Q_{\alpha\beta}^0(\vec{p} | \omega) Q_{\beta\alpha}^0(\vec{p} | \omega)}{(1 - \Gamma^0 Q_{\alpha\beta}^0(\vec{p} | \omega))(1 - \Gamma^0 Q_{\beta\alpha}^0(\vec{p} | \omega)) - \Gamma^2 Q_{\alpha\beta}^0(\vec{p} | \omega) Q_{\beta\alpha}^0(\vec{p} | \omega)} \quad (3.81)$$

onde

$$\begin{aligned}
Q_{\alpha\beta}^0(\vec{p} | w) &= \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} G_{\alpha}(\vec{p} - \vec{k} | E + w) G_{\beta}(\vec{k} | E) = \\
&= 2\pi i \frac{N(E_F)}{m_{\alpha} m_{\beta}} \int d\Omega_{sup} \frac{1}{\vec{k}_F \cdot \vec{p} + 2E_F(m_{\alpha} - m_{\beta}) + 2m_{\alpha}\omega + i(\frac{m_{\alpha}}{\tau_{\alpha}} + \frac{m_{\beta}}{\tau_{\beta}})}
\end{aligned} \tag{3.82}$$

A conclusão é evidente; os vértices $\overline{Q}_{\beta\alpha}(\vec{p} | w)$ e $Q_{\alpha\beta}(\vec{p} | w)$ não apresentam pólo de difusão, portanto têm uma contribuição de ordem mais baixa que os vértices $\Lambda_{\alpha\alpha}(\vec{p} | w)$ e $\Lambda_{\alpha\beta}(\vec{p} | w)$ com $\alpha \neq \beta$, que como veremos adiante, apresentam contribuição tipo pólo de difusão. Recapitulando, o conjunto de diagramas com $\alpha = \beta$ se constitui na classe de diagramas relevantes no problema que por sua vez tornam a G2 diagonal. Desta maneira esta pode ser descrita como:

$$\begin{aligned}
\langle G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2 | E + w) G_{\beta\alpha}(\vec{r}_3 - \vec{r}_4 | w) \rangle &= \int d\vec{r} \int d\vec{r}' G_{\alpha}(\vec{r}_1 - \vec{r} | E + w) \times \\
&\times G_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{r}_2 | E + w) \sum_{\gamma\delta} \Gamma_{\alpha\gamma} \Lambda_{\gamma\delta}(\vec{r} - \vec{r}' | w) \Gamma_{\delta\alpha} G_{\alpha}(\vec{r}_3 - \vec{r} | E) G_{\alpha}(\vec{r}' - \vec{r}_4 | E)
\end{aligned} \tag{3.83}$$

Como todas as funções são invariantes translacionais, podemos trabalhar diretamente no espaço de momentum, de tal forma que a transformada de Fourier de $\Lambda_{\mu\nu}(\vec{r} | w)$ é dada numa forma sintética pela equação matricial:

$$\underline{\Lambda}(\vec{p} | w) = \underline{\Lambda}^0(\vec{p} | w) + \underline{\Lambda}^0(\vec{p} | w) \underline{\Gamma} \underline{\Lambda}(\vec{p} | w) \tag{3.84}$$

com a matriz $\underline{\Lambda}^0(\vec{p} | w)$ sendo diagonal com elementos;

$$\Lambda_{\alpha\alpha}^0(\vec{p} | w) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} G_{\alpha}(\vec{p} - \vec{k} | E + w) G_{\alpha}(\vec{k} | E) \tag{3.85}$$

É preciso notar que esta quantidade corresponde à polarização definida em (3.27). A equação para $\underline{\Lambda}(\vec{p} | w)$ pode ser resolvida;

$$\underline{\Lambda}(\vec{p} | w) = [\underline{I} - \underline{\Lambda}^0(\vec{p} | w) \underline{\Gamma}]^{-1} \underline{\Lambda}^0(\vec{p} | w) \tag{3.86}$$

onde \underline{I} é a matriz identidade, enquanto a integral em (3.85) pode ser calculada

$$\Lambda_{\alpha\alpha}^0(\vec{p} | w) = 2\pi N_\alpha(E_F)\tau_\alpha(1 - \Theta_\alpha(\vec{p} | w)) \quad (3.87)$$

e

$$\Theta_\alpha(\vec{p} | w) = D_\alpha^0\tau_\alpha p^2 - iw\tau_\alpha \quad (3.88)$$

com $N_\alpha(E_F)$ sendo densidade de estados na banda α e D_α é dado por:

$$D_\alpha^0 = \frac{2E_F\tau_\alpha}{dm_\alpha} \quad (3.89)$$

A equação (3.86) pode ser resolvida explicitamente:

$$\underline{\underline{\Delta}}(\vec{p} | w) = \Delta^{-1}(\vec{p} | w) \begin{pmatrix} (1 - \Gamma^0\Lambda_2^0)\Lambda_1^0 & \Gamma'\Lambda_1^0\Lambda_2^0 \\ \Gamma'\Lambda_2^0\Lambda_1^0 & (1 - \Gamma^0\Lambda_1)\Lambda_2 \end{pmatrix} \quad (3.90)$$

onde

$$\Delta(\vec{p} | w) = \det[\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{\Gamma}}\underline{\underline{\Delta}}^0(\vec{p} | w)] \quad (3.91)$$

que em ordem dominante é dado por:

$$\Delta(\vec{p} | w) = \frac{N_1\Gamma'}{N_2\Gamma^0 + N_1\Gamma'}\Theta_1(\vec{p} | w) + \frac{N_2\Gamma'}{N_1\Gamma^0 + N_2\Gamma'}\Theta_2(\vec{p} | w) \quad (3.92)$$

Podemos desta maneira reconstruir a matriz $\underline{\underline{\Delta}}(\vec{p} | w)$:

$$\underline{\underline{\Delta}}(\vec{p} | w) = \frac{\Delta^{-1}(\vec{p} | w)\Gamma'}{(\Gamma^0N_2 + \Gamma'N_1)(\Gamma^0N_1 + \Gamma'N_2)}\underline{\underline{M}} \quad (3.93)$$

com

$$\underline{\underline{M}} = \begin{pmatrix} N_1^2 & N_1N_2 \\ N_1N_2 & N_2^2 \end{pmatrix} \quad (3.94)$$

Após alguma álgebra, finalmente obtemos:

$$\underline{\underline{\Lambda}}(\vec{p} | w) = 2\pi \left[\frac{N_1}{2\tau_1} \Theta_1(\vec{p} | w) + \frac{N_2}{2\tau_2} \Theta_2(\vec{p} | w) \right]^{-1} \underline{\underline{M}} \quad (3.95)$$

Explicitando $\Theta_\alpha(\vec{p} | w)$ com (3.88), podemos reescrever a equação acima como:

$$\underline{\underline{\Lambda}} = 4\pi N(0) [D_{ef}^0 p^2 - iw]^{-1} \underline{\underline{M}} \quad (3.96)$$

onde

$$D_{ef}^0 = \frac{N_1 D_1 + N_2 D_2}{N(0)} \quad (3.97)$$

e

$$N(0) = N_1 + N_2 \quad (3.98)$$

Tendo construído $\underline{\underline{\Lambda}}(\vec{p} | w)$, podemos calcular a condutividade combinando as fórmulas (3.79) e (3.83), desta forma:

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\mu}(\vec{q} | w) = & \frac{e^2}{4\pi\omega} \int_{-\omega}^0 dE \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} k_\mu^2 \sum_\alpha \frac{1}{m_\alpha^2} G_\alpha(\vec{k} | E + \omega) \times \\ & \times G_\alpha(-\vec{k} | E + \omega) G_\alpha(-\vec{k} | E) G_\alpha(\vec{k} | E) \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \sum_{\alpha\delta\gamma} \Gamma_{\alpha\gamma} \Lambda_{\gamma\delta}(\vec{p} | w) \Gamma_{\delta\alpha} \end{aligned} \quad (3.99)$$

Podemos recompor a condutividade em (3.99) utilizando os resultados obtidos em (3.96), (3.97) e (3.98), então:

$$\sigma(\vec{q} | w) = \frac{e^2}{12\pi} \sum_\alpha N_\alpha D_\alpha^0 \tau_\alpha^2 (\underline{\underline{\Gamma}} \underline{\underline{M}} \underline{\underline{\Gamma}})_{\alpha\alpha} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{2N(0) [D_{ef}^0 p^2 - iw]} \quad (3.100)$$

finalmente

$$\sigma(\vec{q} | w) = \frac{e^2}{12\pi} \frac{N_1 D_1^0 + N_2 D_2^0}{N_1 + N_2} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \frac{1}{D_{ef}^0 p^2 - iw} \quad (3.101)$$

Recuperamos, portanto, o mesmo comportamento obtido para o problema de uma banda, se efetuarmos a integração em (3.101) tanto em $d = 3$ quanto em $d = 2$, exceto que a constante de difusão aparece redefinida em termos de uma constante efetiva D_{ef}^0 .

3.4 Duas Bandas Equivalentes em Campo Magnético

O modelo seguinte a ser considerado é definido como:

$$H = -\frac{1}{2m_\alpha} \sum_{\alpha=1}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r} \Psi_\alpha^\dagger(\vec{r}) \vec{D}_r^2 \Psi_\alpha(\vec{r}) + \sum_{\alpha\beta=1}^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r} \Psi_\alpha^\dagger(\vec{r}) V_{\alpha\beta}(\vec{r}) \Psi_\beta(\vec{r}) \quad (3.102)$$

onde as componentes do vetor \vec{D}_r foram definidas na equação (3.16).

O potencial aleatório tem

$$\langle V_{\alpha\beta}(\vec{r}) \rangle = 0 \quad (3.103)$$

$$\langle V_{\alpha\beta}(\vec{r}) V_{\gamma\delta}(\vec{r}') \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') [\Gamma^0 \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} + \Gamma'(1 - \delta_{\alpha\beta})(1 - \delta_{\gamma\delta})] \quad (3.104)$$

Neste modelo, diferente do caso de massas anisotrópicas, a geração dos diagramas de Feynman é mais complicada, entretanto completamente similar ao conjunto de diagramas encontrados em campo nulo na seção 3.3. A vantagem agora reside em que as expressões analíticas para G_1 são próximas àquelas do problema de uma banda, mas a presença de índices nas massas e nos operadores de campo nos remete para a utilização de um formalismo matricial. A equação integral para a G_1 pode ser escrita como:

$$\underline{\underline{G}}(\vec{r} \vec{r}' | E) = \underline{\underline{G}}^0(\vec{r} \vec{r}' | E) + \int d\vec{r}'' \underline{\underline{G}}^0(\vec{r} \vec{r}'' | E) \underline{\underline{V}}(\vec{r}'') \underline{\underline{G}}(\vec{r}'' \vec{r}' | E) \quad (3.105)$$

$\underline{\underline{G}}^0(\vec{r} \vec{r}' | E)$ na expressão anterior é uma matriz diagonal cujos elementos são dados por:

$$G_{\alpha\alpha}^0(\vec{r} \vec{r}' | E) = \sum_{[\lambda]} \frac{\psi_{\lambda,\alpha}^*(\vec{r})\psi_{\lambda,\alpha}(\vec{r}')}{w_{\alpha}(n + \frac{1}{2}) + \frac{k_z^2}{m_{\alpha}} - E_F - E - i\delta \text{sgn}E} \quad (3.106)$$

com $[\lambda] = [n, k_x, k_z]$

$$\psi_{\lambda,\alpha}(\vec{r}) = e^{i(xk_x + zk_z)} \phi_{n,\alpha}(y + \frac{k_x}{m_{\alpha}w_{\alpha}}) \quad (3.107)$$

$$\phi_{n,\alpha}(y) = (\frac{m_{\alpha}w_{\alpha}}{\pi})^{1/4} (2^n n!)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}m_{\alpha}w_{\alpha}y^2} H_n(m_{\alpha}w_{\alpha}y) \quad (3.108)$$

onde $w_{\alpha} = \frac{eB}{m_{\alpha}}$.

Note que em $\psi_{\lambda,\alpha}(\vec{r})$ aparece sempre o produto $m_{\alpha}w_{\alpha}$, de tal maneira que a dependência com índice α desaparece em toda parte espacial da $G_{\alpha\alpha}^0(\vec{r} \vec{r}' | E)$. O próximo passo é fazer a média sobre distribuição de impurezas de acordo com o procedimento padrão. A autoenergia na aproximação de Born é dada pelos mesmos diagramas da seção anterior, isto é, podemos identificar duas contribuições; uma relativa ao espalhamento intrabanda e outra, relativa ao espalhamento interbanda, de tal forma que a G1 mediada sobre a desordem pode ser obtida de (3.105):

$$\langle G_{\alpha\alpha}(\vec{r} \vec{r}' | E) \rangle = G_{\alpha}(\vec{r} \vec{r}' | E) = \sum_{[\lambda]} \psi_{\lambda}^*(\vec{r})\psi_{\lambda}(\vec{r}')g_{\alpha}(n k_z | E) \quad (3.109)$$

a função $g_{\alpha}(n k_z | E)$ assume a forma:

$$g_{\alpha}(n k_z | E) = [w_{\alpha}(n + \frac{1}{2}) + \frac{k_z^2}{2m_{\alpha}} - E_F - E - \frac{i}{2\tau_{\alpha}} \text{sgn}E]^{-1} \quad (3.110)$$

onde $1/2\tau_{\alpha}$ é dado pela equação (3.75). Como foi dito anteriormente, o índice de banda só aparece no fator $g_{\alpha}(n k_z | E)$; isto tem consequências importantes na medida que significa que as manipulações da parte espacial são semelhantes ao primeiro caso, tomando $m_y = m_x = m_z = m_{\alpha}$ e $1/\tau$ por $1/\tau_{\alpha}$. Portanto, detalhes de cálculo da parte espacial serão remetidos à correspondente expressão do problema de massa anisotrópica. Conforme foi discutido na [6], é possível encontrar uma expressão equivalente para G1 integrando k_x na parte espacial de (3.109). Então:

$$G_\alpha(\vec{r} \vec{r}' | E) = e^{\frac{ieB}{2}(y+y')(x-x')} g_\alpha(\vec{r} - \vec{r}' | E) \quad (3.111)$$

com

$$g_\alpha(\vec{r} | E) = eB \sum_n \int \frac{dk_z}{2\pi} e^{ik_z z} e^{-eB(x^2+y^2)/4} L_n\left[\frac{eB}{2}(x^2+y^2)\right] g_\alpha(n k_z | E) \quad (3.112)$$

Até este momento, o problema parece similar ao das massas anisotrópicas com relação às expressões analíticas, enquanto se aproxima bastante ao modelo da seção 3.3 no que se refere às consequências da indexação das massas como a geração de uma estrutura de tempos de relaxação microscópicos. A questão agora reside em calcular a magnetocondutividade dada pela equação abaixo:

$$\begin{aligned} \sigma_{\mu\mu}(\vec{q} | \omega) = & \frac{e^2}{4\pi\omega} \int_{-\omega}^0 dE \int d\vec{r}_1 e^{i\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} [D_{\vec{r}_4}^\mu - D_{\vec{r}_1}^{\mu*}]_{\vec{r}_4 = \vec{r}_1} [D_{\vec{r}_3}^\mu - D_{\vec{r}_2}^{\mu*}]_{\vec{r}_3 = \vec{r}_2} \times \\ & \times \sum_{\alpha\beta} \langle G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + \omega) G_{\beta\alpha}(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | E) \rangle \end{aligned} \quad (3.113)$$

Para o cálculo da G2, recorreremos ao mesmo conjunto de diagramas da Fig(3.6). O critério que define quais os diagramas que apresentam contribuição relevante é o mesmo da seção 3.3, isto é, diagramas em que os propagadores avançado e retardado se apresentam em bandas diferentes para cada evento de espalhamento pelo potencial de impurezas não possuem pólos de difusão, portanto não serão considerados. Desta forma, podemos escrever G2 para os diagramas restantes como:

$$\begin{aligned} \langle G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + \omega) G_{\beta\alpha}(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | E) \rangle = & \delta_{\alpha\beta} \sum_{\gamma\delta} \int d\vec{r} \int d\vec{r}' G_\alpha(\vec{r}_1 \vec{r} | E + \omega) \times \\ & \times G_\alpha(\vec{r}' \vec{r}_3 | E + \omega) \Gamma_{\alpha\gamma} K_{\gamma\delta}(\vec{r} \vec{r}' | \omega) \Gamma_{\delta\alpha} G_\alpha(\vec{r}_3 \vec{r} | E) G_\alpha(\vec{r}' \vec{r}_4 | E) \end{aligned} \quad (3.114)$$

$\Gamma_{\alpha\beta}$ nesta equação, são elementos da matriz $\underline{\Gamma}$ definida em (3.76). A equação que conseguimos para $K_{\gamma\delta}(\vec{r} \vec{r}' | \omega)$ pode ser dada em forma compacta por uma equação matricial:

$$\underline{K}(\vec{r} \vec{r}' | w) = \underline{K}^0(\vec{r} \vec{r}' | w) + \int d\vec{r}'' \underline{K}^0(\vec{r} \vec{r}'' | w) \underline{\Gamma} \underline{K}(\vec{r} \vec{r}' | w) \quad (3.115)$$

sendo $\underline{K}^0(\vec{r} \vec{r}' | w)$ uma matriz diagonal com elementos:

$$\begin{aligned} K_{\alpha\alpha}^0(\vec{r} \vec{r}' | w) &= G_\alpha(\vec{r} \vec{r}' | E + w) G_\alpha(\vec{r} \vec{r}' | E) = \\ &= e^{ieB(x-x')(y+y')} g_\alpha(\vec{r} - \vec{r}' | E + w) g_\alpha(\vec{r} - \vec{r}' | E) \end{aligned} \quad (3.116)$$

A perda da invariância translacional está contida na exponencial enquanto $g_\alpha(\vec{r} | E)$ é dada em (3.112). Neste momento, retomamos a discussão realizada no início deste capítulo. É preciso notar a impossibilidade de resolver a equação (3.115) utilizando a transformada de Fourier recaindo numa equação algébrica. No entanto, podemos aplicar os métodos desenvolvidos para o problema de uma banda (ver [6]), isto é, propondo uma solução do tipo:

$$\underline{K}(\vec{r} \vec{r}' | E) = e^{ieB(x-x')(y+y')} \underline{\Lambda}_H(\vec{r} - \vec{r}' | E) \quad (3.117)$$

onde por sua vez $\underline{\Lambda}_H(\vec{r} | E)$ satisfaz a igualdade;

$$\underline{\Lambda}_H(\vec{r} | E) = \underline{\Lambda}_H^0(\vec{r} | E) + \int d\vec{r}'' \underline{\Lambda}_H^0(\vec{r}'' | E) \underline{\Gamma} \underline{\Lambda}_H(\vec{r} - \vec{r}'' | E) e^{ieB(x''y-y''x)} \quad (3.118)$$

com $\underline{\Lambda}_H^0(\vec{r} | E)$ sendo uma matriz diagonal cujos elementos são

$$\Lambda_{H,\alpha}^0(\vec{r} | E) = g_\alpha(\vec{r} | w + E) g_\alpha(\vec{r} | E) \quad (3.119)$$

O cálculo da transformada de Fourier desta quantidade é semelhante a de $\Pi_0(\vec{r} | E)$ definida em (3.28). Então, das equações (3.44), (3.45) e (3.46) podemos escrever:

$$\Lambda_{H,\alpha}^0(\vec{p} | E) = 2\pi N_\alpha(E_F) \tau_\alpha (1 - \Theta_\alpha^H(\vec{p} | E)) \quad (3.120)$$

$$\Theta_\alpha^H(\vec{p} | w) = D_\alpha^0 \tau_\alpha p_z^2 + D_\alpha^H \tau_\alpha p_\perp^2 - iw \tau_\alpha \quad (3.121)$$

onde $p_1^2 = p_x^2 + p_y^2$ e as constantes

$$D_\alpha^0 = \frac{2 E_F \tau_\alpha}{3 m_\alpha} \quad ; \quad D_\alpha^H = \frac{D_\alpha^0}{1 + (w_\alpha \tau_\alpha)^2} \quad (3.122)$$

correspondem às constantes de difusão da banda α . Podemos expandir a exponencial em (3.118) até $O(e^2 B^2)$, depois realizando a transformada de Fourier:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\Lambda}}_H(\vec{p} | w) = \underline{\underline{\Lambda}}_H(\vec{p} | w) & [1 - \frac{(eB)^2}{2} \underline{\underline{\Lambda}}^{0^{-1}} [\frac{\partial^2}{\partial p_x^2} \underline{\underline{\Lambda}}_H^0 \Gamma \frac{\partial^2}{\partial p_y^2} \underline{\underline{\Lambda}}_H + \\ & + \frac{\partial^2}{\partial p_y^2} \underline{\underline{\Lambda}}_H^0 \Gamma \frac{\partial^2}{\partial p_x^2} \underline{\underline{\Lambda}}_H - \alpha \frac{\partial^2}{\partial p_x \partial p_y} \underline{\underline{\Lambda}}_H^0 \Gamma \frac{\partial^2}{\partial p_y \partial p_x} \underline{\underline{\Lambda}}_H]] \end{aligned} \quad (3.123)$$

onde

$$\underline{\underline{\Lambda}}(\vec{p} | w) = [1 - \underline{\underline{\Lambda}}_H^0(\vec{p} | w) \underline{\underline{\Gamma}}]^{-1} \underline{\underline{\Lambda}}_H^0(\vec{p} | w) \quad (3.124)$$

A expressão (3.124) é formalmente semelhante à (3.86), logo a manipulação das matrizes para a obtenção de uma expressão explícita para $\underline{\underline{\Lambda}}(\vec{p} | w)$ é inteiramente igual àquela desenvolvida na seção 3.3; logo:

$$\underline{\underline{\Lambda}}_H(\vec{p} | w) = [\frac{N_1}{2\tau_1} \Theta_1^H(\vec{p} | w) + \frac{N_2}{2\tau_2} \Theta_2^H(\vec{p} | w)]^{-1} \underline{\underline{M}} \quad (3.125)$$

a matriz $\underline{\underline{M}}$ na equação anterior está definida em (3.94). Podemos reorganizar a expressão (3.125) como:

$$\underline{\underline{\Lambda}}_H(\vec{p} | w) = \frac{2}{2\pi N(0)} \Theta_{ef}^{H^{-1}}(\vec{p} | w) \underline{\underline{M}} \quad (3.126)$$

com

$$\Theta_{ef}^H(\vec{p} | w) = D_{ef}^0 p_z^2 + D_{ef}^H p_1^2 - iw \quad (3.127)$$

$$D_{ef}^0 = \frac{N_1 D_1^0 + N_2 D_2^0}{N(0)} \quad (3.128)$$

$$D_{ef}^H = \frac{N_1 D_1^H + N_2 D_2^H}{N(0)} \quad (3.129)$$

$$N(0) = N_1 + N_2 \quad (3.130)$$

Podemos agora obter as derivadas de $\underline{\Lambda}_H^0(\vec{p} | w)$ e $\bar{\Lambda}_H(\vec{p} | w)$:

1) Para $\underline{\Lambda}_0^H(\vec{p} | w)$ a dependência é simétrica em p_x e p_y em $\Theta_\alpha^H(\vec{p} | w)$, portanto, ficamos com:

$$\frac{\partial^2}{\partial p_x^2} \Lambda_{H,\alpha}^0(\vec{p} | w) = \frac{\partial^2}{\partial p_y^2} \Lambda_{H,\alpha}^0(\vec{p} | w) = -4\pi N_\alpha D_\alpha^0 \tau_\alpha^2 \quad (3.131)$$

enquanto o termo cruzado é nulo.

2) Para $\bar{\Lambda}_H(\vec{p} | w)$, da expressão (3.125), o termo dominante é:

$$\frac{\partial^2}{\partial p^2} \bar{\Lambda}_{H,\alpha\beta}(\vec{p} | w) = -\left[\sum_{\mu=1}^2 \frac{2\pi N_\mu}{2\tau_\mu} \Theta_\mu^H(\vec{p} | w)\right]^{-2} \sum_{\nu=1}^2 2\pi N_\nu D_\nu^H \tau_\nu \quad (3.132)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial p^2} \bar{\Lambda}_H(\vec{p} | w) = -\frac{4}{2\pi N(0)} \frac{D_{ef}^H}{\Theta_{ef}^{H^2}} \underline{M} \quad (3.133)$$

Agora voltamos para (3.123), então

$$\underline{\Lambda}_H(\vec{p} | w) = \bar{\Lambda}_H(\vec{p} | w) \left[\underline{I} + \frac{(2eB)^2}{2\pi N(0)} \frac{D_{ef}^H}{\Theta_{ef}^{H^2}} \underline{\Lambda}_H^{0^{-1}}(\vec{p} | w) \frac{\partial^2}{\partial p^2} \underline{\Lambda}_H^0(\vec{p} | w) \underline{\Gamma} \underline{M} \right] \quad (3.134)$$

obtendo o inverso da matriz em (3.134) explicitamente até ordem $O(e^2 B^2)$, ficamos com:

$$\underline{\Lambda}_H(\vec{p} | w) = \frac{2}{N(0) \Theta_{ef}^H(\vec{p} | w)} \frac{\underline{M}}{1 + \frac{(2eB)^2 D_{ef}^{H^2}}{\Theta_{ef}^{H^2}(\vec{p} | w)}} \quad (3.135)$$

$$\underline{\Lambda}_H(\vec{p} | w) = \frac{2}{N(0)} \underline{M} \frac{\Theta_{ef}^H(\vec{p} | w)}{\Theta_{ef}^{H^2}(\vec{p} | w) + (2eB D_{ef}^H)^2} \quad (3.136)$$

Com este resultado, podemos voltar para (3.117), assim teremos obtido $K(\vec{r} \vec{r}' | w)$ e então poderemos começar a construir os elementos que faltam para o cálculo da magnetocodutividade. Pela equação (3.114) temos:

$$(\underline{\Gamma} \underline{K}(\vec{r} \vec{r}' | \omega) \underline{\Gamma})_{\alpha\alpha} = \frac{1}{\tau_\alpha^2} \frac{2}{N(0)} e^{i\omega_\alpha(x-x')(y+y')} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^d} \frac{\Theta_{ef}^H(\vec{p} | \omega)}{\Theta_{ef}^{H^2}(\vec{p} | \omega) + (2eBD_{ef}^0)^2} \quad (3.137)$$

Com isto, a G_2 é encontrada como:

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha\beta} \langle G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + \omega) G_{\beta\alpha}(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | E) \rangle = \quad (3.138) \\ & = \sum_{\alpha\beta} \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{m_\alpha^2 \tau_\alpha^2} \frac{2}{N(0)} \int \frac{d\vec{r}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\vec{r}'}{(2\pi)^3} G_\alpha(\vec{r}_1 \vec{r} | E + \omega) G_\alpha(\vec{r}' \vec{r}_2 | E + \omega) \times \\ & \quad \times G_\alpha(\vec{r}_3 \vec{r} | \omega) G_\alpha(\vec{r}' \vec{r}_4 | \omega) \frac{2}{N(0)} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{\Theta_{ef}^H(\vec{p} | \omega)}{\Theta_{ef}^{H^2}(\vec{p} | \omega) + (2eBD_{ef}^0)^2} \end{aligned}$$

Substituindo diretamente em (3.113), verificamos que o cálculo das integrais em \vec{r} e \vec{r}' tem a mesma sistemática do problema de massas anisotrópicas. Exceto que, como já foi dito, devemos tomar $m_\alpha = m_\mu$ ($\mu = x, y$ e z) e substituir $1/\tau$ por $1/\tau_\alpha$. Portanto, as correções no regime do ELF tornam-se:

$$\begin{aligned} \sigma'_{zz} = & -\frac{e^2}{2\pi^2} \sum_\alpha \frac{eB}{m_\alpha^2 \tau_\alpha^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_z}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} p_z^2 [g_\alpha(n p_\alpha | E + \omega) g_\alpha(n p_z | E)] \times \quad (3.139) \\ & \times \frac{2}{N(0)} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{\Theta_{ef}^H(\vec{p} | \omega)}{\Theta_{ef}^{H^2}(\vec{p} | \omega) + (2eBD_{ef}^0)^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma'_\perp = & -\frac{e^2}{2\pi^2} \sum_\alpha \frac{(eB)^2}{m_\alpha^2 \tau_\alpha^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp_z}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{n+1}{2} [g_\alpha(n p_z | E + \omega) g_\alpha(n+1 p_z | E)]^2 + \quad (3.140) \right. \\ & \left. + \frac{n}{2} [g_\alpha(n p_z | E + \omega) g_\alpha(n-1 p_z | E)]^2 \right] \frac{2}{N(0)} \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3} \frac{\Theta_{ef}^H(\vec{p} | \omega)}{\Theta_{ef}^{H^2}(\vec{p} | \omega) + (2eBD_{ef}^0)^2} \end{aligned}$$

A resolução das integrais em (3.139) e (3.140) pode ser obtida de (3.60) e (3.61), fazendo as adaptações convenientes, de maneira similar ao cálculo da integral em \vec{p} que foi encontrada em (3.64), com $D_0^z = D_{ef}^0$ e $D_H^x = D_H^y = D_{ef}$. Finalmente:

$$\sigma'_{zz} = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{e^2}{\pi^4} \frac{1}{N(0)} \frac{1}{(D_{ef}^0)^{1/2} D_{ef}^H} [I^* - \sqrt{eBD_{ef}^0}] \sum_\alpha \left(\frac{m_\alpha}{\tau_\alpha}\right)^2 (D_\alpha^0 \tau_\alpha)^{3/2} \quad (3.141)$$

$$\sigma'_{\perp} = -\sqrt{\frac{3}{2}} \frac{e^2}{\pi^4} \frac{1}{N(0)} \frac{1}{(D_{ef}^0)^{1/2} D_{ef}^H} [I^* - \sqrt{eBD_{ef}^0}] \sum_{\alpha} \left(\frac{m_{\alpha}}{\tau_{\alpha}}\right)^2 (D_{\alpha}^0 \tau_{\alpha})^{3/2} \times \quad (3.142)$$

$$\times [1 - 6(\omega_{\alpha} \tau_{\alpha})^2]$$

I , neste caso, é uma constante independente do campo magnético aplicado. As expressões (3.141) e (3.142) são similares ao problema de uma banda, mas agora temos a presença de uma constante de difusão efetiva (provinda da integração do vértice maximamente cruzado) e um fator anisotrópico dependente da constante de difusão e do tempo de relaxação na banda α . Entretanto, no limite de campo magnético suficientemente baixo ($\omega_{\alpha} \tau \ll 1$) ficamos:

$$\sigma(H) - \sigma(0) \approx \sqrt{eBD_{ef}} \frac{e^2}{\pi^4} \frac{1}{N(0)} \sum_{\alpha} \frac{m_{\alpha}^2}{\sqrt{\tau_{\alpha}}} \left(\frac{D_{\alpha}}{D_{ef}}\right)^{3/2} \quad (3.143)$$

Desta forma, utilizando o método da referência [6] que permite olhar para os níveis de Landau exatos, podemos recuperar um comportamento universal para a magnetocondutividade no sentido que é possível obter as mesmas expressões do problema de uma banda em termos de uma constante de difusão efetiva definida na equação (3.128).

Os resultados deste capítulo, estão expostos em forma de artigo na referência [29] aceito para publicação em Phys. Rev. B.

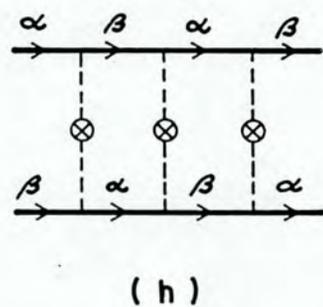
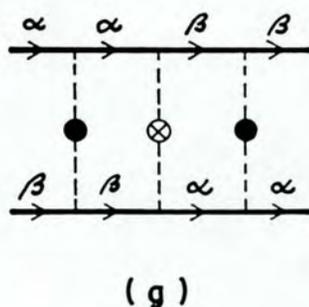
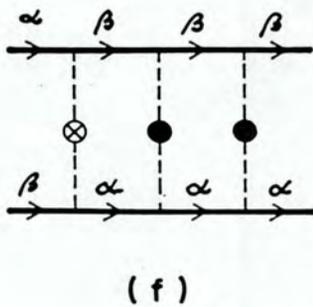
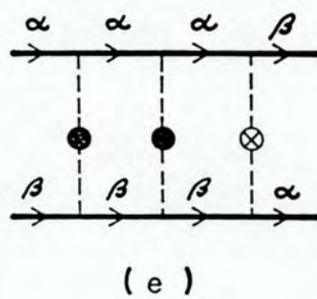
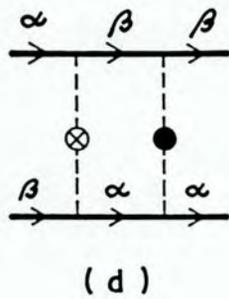
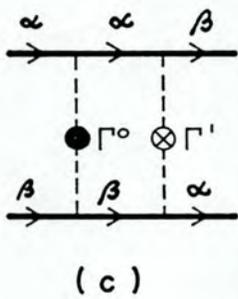
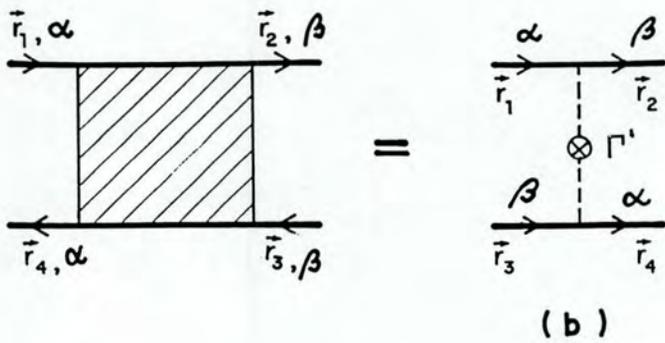


Figura 3.5: Expansão diagramática para a G_2 até terceira ordem, tomando $\alpha \neq \beta$.

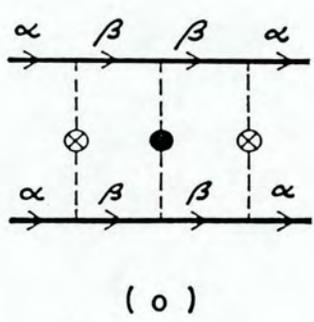
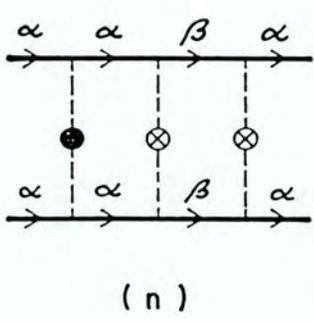
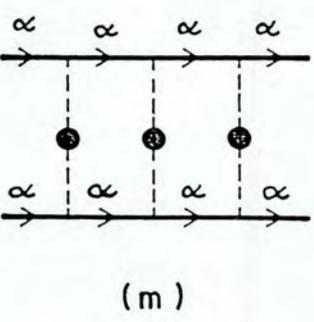
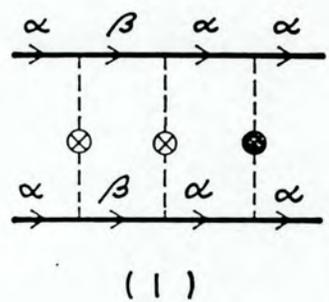
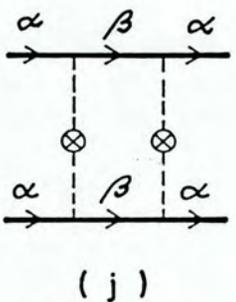
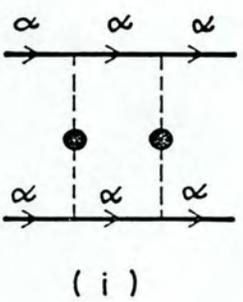
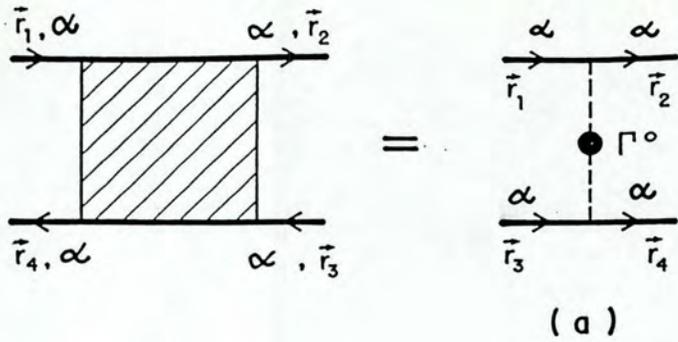


Figura 3.6: Expansão diagramática para G_2 até terceira ordem, considerando somente a parte diagonal.

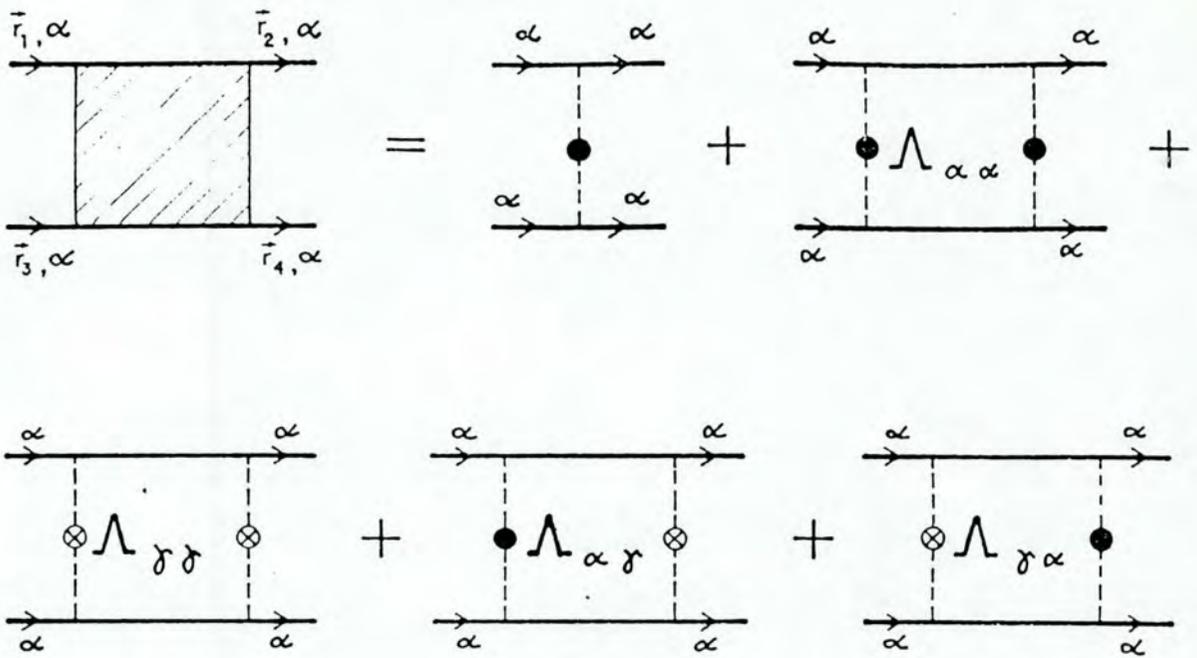


Figura 3.7: A relação entre a G_2 e os vértices $\Lambda_{\alpha\alpha}$, $\Lambda_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$).

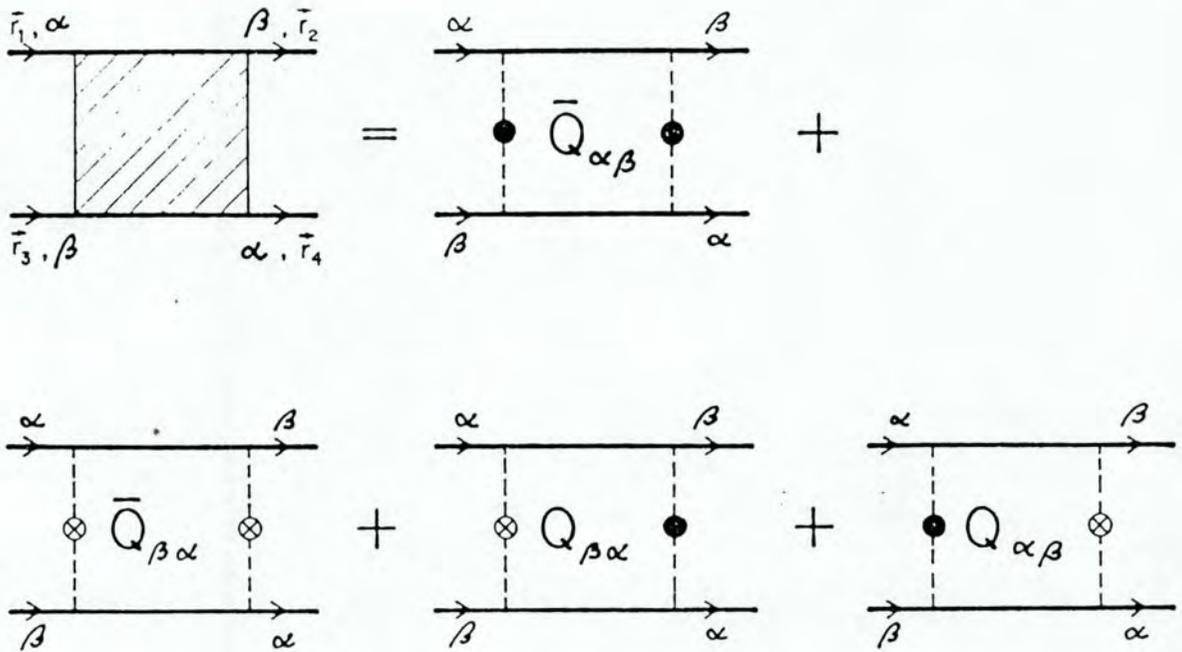


Figura 3.8: A relação entre a G_2 e os vértices $Q_{\alpha\beta}$ e $\bar{Q}_{\alpha\beta}$.

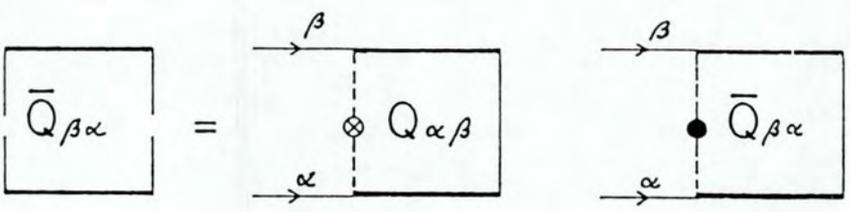
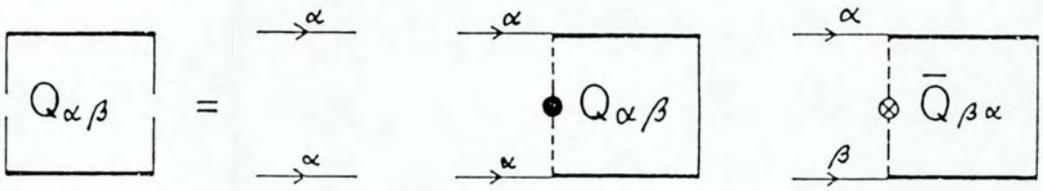
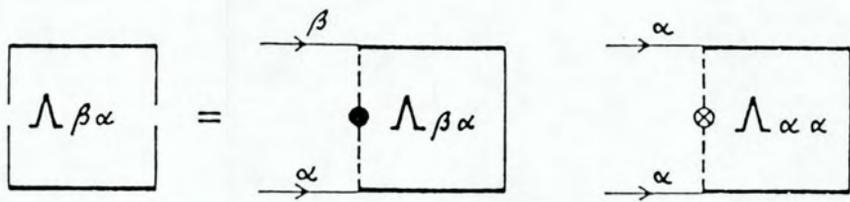
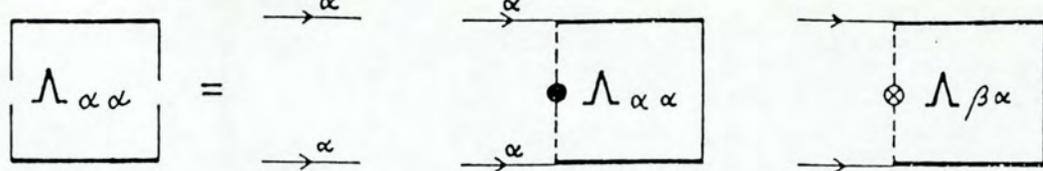


Figura 3.9: Expressões diagramáticas para os vértices $\Lambda_{\alpha\alpha}$, $\Lambda_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$), $Q_{\alpha\beta}$ e $\bar{Q}_{\alpha\beta}$.

Capítulo 4

Magnetocondutividade no Modelo de Wegner em Ordem $1/N$

4.1 Introdução

No capítulo anterior, enfrentamos o problema de encontrar alguma característica de universalidade para o ELF em presença de campo magnético, tratando com modelos mais elaborados e, portanto, mais adequados para a descrição de sistemas físicos reais. Para implementar este programa, construímos um modelo que permitia a existência de dois tipos de elétrons, ou se quisermos utilizar a linguagem do capítulo anterior, elétrons em duas bandas de energia.

A pergunta natural que surge é: por que não fazer um modelo geral, admitindo a possibilidade não de dois, mas de N tipos de elétrons? Evidentemente esta generalização tem um custo, e este custo consiste em que é necessário fazer uma escolha adequada de segundo momento para o potencial aleatório. Caso contrário, vamos assistir a uma proliferação desordenada e incontrolável de diagramas cuja análise com o objetivo de construir uma hierarquia de contribuições à magnetocondutividade se torna bastante dificultada.

Desta maneira, gostaríamos de encontrar o modelo desordenado com N tipos de elétrons, contendo uma escolha simples para a distribuição de probabilidade do potencial aleatório, e com parâmetro de expansão que permitisse organizar de maneira sistemática as contribuições diagramáticas.

Em 1980, Wegner [13] propôs um modelo para sistema desordenado de elétrons com N orbitais por sítio. O resultado fundamental deste trabalho é que a G_1 e G_2 puderam ser calculadas exatamente no limite $N = \infty$. Nestas condições, os auto-estados dos elétrons foram encontrados estendidos e, portanto, a condutividade residual dividida por N é finita quando a energia de Fermi recai dentro da banda. Correções em ordem $1/N$ para um modelo de gás de elétrons desordenado interagente foram realizados por Ma e Fradkin [14], que obtiveram uma divergência logarítmica para a condutividade em duas dimensões, resultado que corrobora a abordagem de Wegner, para descrever a transição de localização por um modelo sigma-não linear.

Um ponto importante que faz com que este modelo de N orbitais seja atraente, é que este torna exata a aproximação feita para a auto-energia num modelo de gás de elétrons desordenado usual [12] (que corresponde ao caso $N = 1$). Acontece um ordenamento das topologias dos diagramas segundo potências $1/N$, tal que no limite de $N = \infty$, os diagramas sobreviventes correspondem exatamente àqueles considerados em ordem mais baixa em um gás desordenado usual.

Vamos mostrar neste capítulo que existem outros resultados surpreendentes; os diagramas que contribuem para G_2 (que está diretamente relacionado com a condutividade) correspondendo a correções em ordem $1/N$, quando calculados pela forma de Abrikosov (ver discussão no Capítulo 2) são exatamente os mesmos que dão origem ao ELF num gás desordenado usual, quando o potencial aleatório é de contato. Entretanto, no modelo de Wegner, a aparição de diagramas maximamente cruzados acontece naturalmente, como resultado da expansão do parâmetro $1/N$.

Desta maneira, o modelo de Wegner se torna o ponto de partida ideal para investigar a influência do campo magnético neste problema de transição de localização. O objetivo deste capítulo é estudar o modelo de Wegner em presença de campo magnético com métodos da referência [6]. Para isto, inicialmente vamos expor a genealogia dos diagramas para G_1 e G_2 . Posteriormente, obtidos os diagramas, vamos calcular correções em ordem $1/N$ à magnetocondutividade utilizando a fórmula de Abrikosov.

4.2 O Modelo de Wegner em Campo Magnético

O modelo pode ser enunciado como uma extensão em campo magnético da referência [25]:

$$H = -\frac{1}{2m} \sum_{\alpha=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \vec{D}_r^2 \Psi_{\alpha}(\vec{r}) + \sum_{\alpha\beta=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} d\vec{r} \Psi_{\alpha}^{\dagger}(\vec{r}) \frac{V_{\alpha\beta}(\vec{r})}{\sqrt{N}} \Psi_{\beta}(\vec{r}) \quad (4.1)$$

O potencial aleatório segue uma distribuição com:

$$\langle V_{\alpha\beta}(\vec{r}) \rangle = 0 \quad (4.2)$$

$$\langle V_{\alpha\beta}(\vec{r}) V_{\gamma\delta}(\vec{r}') \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') [M \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} + M' \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}] \quad (4.3)$$

A equação de movimento para $G_{\alpha\beta}(\vec{r} \vec{r}' | E)$ é dada por:

$$\begin{aligned} [E - E_F - \frac{\vec{D}_r^2}{2m}] \bar{G}_{\alpha\beta}(\vec{r} \vec{r}' | E) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\alpha\beta} + \\ + N^{-1/2} \sum_{\alpha_1} V_{\alpha\alpha_1}(\vec{r}) G_{\alpha_1\beta}(\vec{r} \vec{r}' | E) \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde o vetor \vec{D} é definido:

$$\vec{D} = \vec{\nabla} - ie\vec{A}(\vec{r})$$

e

$$\vec{A}(\vec{r}) = (-By, 0, 0)$$

A solução da equação de movimento (4.4) para a G1 é dada em termos de uma expansão do potencial aleatório, onde o termo diagonal produz a contribuição principal. Desta maneira, a solução da parte diagonal da equação de movimento pode ser escrita de maneira geral como indicamos abaixo:

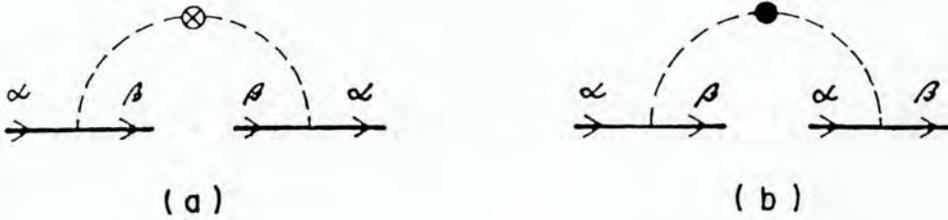


Figura 4.1: O desenho (a) está associado com um fator $\frac{M}{N}$ e a contração de índices está indicada na figura. Da mesma forma, (b) representa um fator $\frac{M'}{N}$ com sua respectiva contração de índices.

Em termos diagramáticos, as duas contribuições correspondentes à equação (4.7) seriam dadas na Fig.(4.2). No diagrama (a) desta figura, temos o aparecimento de um somatório

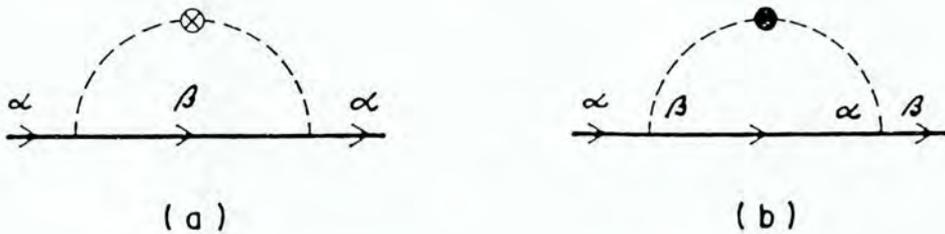


Figura 4.2: Primeiro termo da expansão da G_1 : diagrama (a) contribui com M e diagrama (b) com $\frac{M'}{N}$.

sobre o índice β que faz com que apareça um fator N , de tal maneira que este diagrama apresente uma contribuição $\frac{M}{N}$. No diagrama (b), ao contrário, existe uma $\delta_{\alpha\beta}$ que impede a aparição de uma soma interna como no caso (a). Nestas condições, este diagrama contribui com $\frac{M'}{N}$.

O problema agora é ir determinando uma estrutura hierárquica de diagramas à medida que vamos obtendo os termos seguintes da expansão da G_1 . É preciso ter em mente que o mecanismo responsável pelo surgimento de um fator N multiplicativo é a aparição

de uma soma interna, conforme vimos na Fig.(4.1). A nossa tarefa é encontrar quais as topologias que facilitam a existência deste mecanismo, por que desta maneira será possível atribuir uma ordem de contribuição para cada topologia, criando a estrutura hierárquica mencionada acima.

Para o próximo termo da expansão da G_1 , os diagramas são mostrados na Fig.(4.3). Pela figura, percebemos a existência de duas somas internas nos diagramas (a) e (b) de tal forma que estas apresentam contribuição dominante. Vamos chamar estes diagramas respectivamente de "arco-íris" e "reduzível". Nos diagramas (f), (g) e (h) aparece somente uma soma interna fazendo com que este conjunto corresponda a uma contribuição de ordem inferior. É possível notar que os dois últimos diagramas podem ser pensados como combinações simples de (a) e (b) da Fig.(4.2). Neste sentido parece natural que eles apresentem esta ordem de contribuição. Entretanto, temos ainda a aparição de um novo personagem na Fig.(4.3). Este diagrama, que designaremos "arco-íris irreduzível", não pode ser obtido como uma nova inserção simples do diagrama (a) no diagrama (b), ou vice-versa, da Fig.(4.2).

Por fim, restam os diagramas de ordem N^{-2} . Neste caso temos a presença de um conjunto de deltas de Kroeneker ligando todos os índices e evitando desta maneira a existência de somas internas. Para este conjunto, existem aqueles que surgem como inserções da Fig.(4.2) (ver (d) e (e) da Fig.(4.3)) assim como o surgimento de novos "arco-íris irreduzíveis" (ver (c) e (i) da Fig.(4.3)).

Os diagramas do termo seguinte podem ser obtidos através da técnica de combinar as Fig.(4.2) e Fig.(4.3). Devemos, porém, tomar cuidado com a aparição, em cada termo de perturbação de diagramas "arco-íris irreduzível" que *não* podem ser obtidos por combinações de diagramas já conhecidos. Alguns diagramas para o terceiro termo da expansão de G_1 são mostrados na Fig.(4.4).

Pelas figuras mostradas até agora, podemos extrair algum padrão de evolução, à medida que passamos os termos da expansão diagramática da G_1 . As famílias de diagramas "arco-íris" e "reduzível" *sempre* produzem somas internas capazes de originar fatores N , portanto

correspondem à contribuição em ordem dominante. Isto nos permite escrever a G1 total, como um desdobramento na forma abaixo:

$$G(\vec{r} \vec{r}' | E) = G^\infty(\vec{r} \vec{r}' | E) + G^N(\vec{r} \vec{r}' | E) \quad (4.8)$$

onde $G^\infty(\vec{r} \vec{r}' | E)$ representa a parte da G1 que corresponde aos diagramas da classe "arco-íris" e "reduzível" que são de ordem N^0 , e $G^N(\vec{r} \vec{r}' | E)$ está relacionada com todos os outros diagramas que apresentam contribuição mais baixa.

Podemos também pensar em inserções de diagramas "arco-íris" e "reduzível" em diagramas de ordem mais baixa, sem que isto altere a ordem de contribuição destes diagramas referidos. Estas inserções podem ser ilustradas nos diagramas (g),(h) e (i) da Fig.(4.4). Realizar este processo significa substituir os propagadores $G^0(\vec{r} \vec{r}' | E)$ por $G^\infty(\vec{r} \vec{r}' | E)$.

Evidentemente, no limite $N = \infty$, só sobreviverão diagramas da classe "arco-íris" e "reduzível". Desta forma podemos tomar a G1 total como *exatamente* aquela composta por estes dois conjuntos de diagramas. Este limite corresponde à aproximação de Born para a G1 feita num modelo desordenado usual. É necessário assinalar com veemência a importância desta comparação: o modelo Wegner permite através da expansão do parâmetro N, que recuperemos de forma límpida, simplesmente explorando as propriedades do próprio modelo, o resultado obtido pela expansão de $1/E_F\tau$ para um modelo de sistema desordenado comum.

O conjunto de diagramas "arco-íris" e "reduzíveis" podem ser representados por uma equação de Dyson, conforme é colocado abaixo:

$$G^\infty(\vec{r} \vec{r}' | E) = G^0(\vec{r} \vec{r}' | E) + \quad (4.9)$$

$$M \int d\vec{r}'' G^0(\vec{r} \vec{r}'' | E) G^\infty(\vec{r}'' \vec{r}' | E) G^0(\vec{r} \vec{r}'' | E)$$

onde $G^0(\vec{r} \vec{r}' | E)$ é a solução da G1 em ausência do potencial aleatório.

Desta maneira, recaímos novamente na discussão do capítulo anterior referente ao efeito da presença do campo magnético, ou seja, não é possível olhar os diagramas no espaço de

momentum, da mesma forma não podemos utilizar a transformada de Fourier como método de solução das equações integrais. No entanto, exatamente este é o nosso ponto de contato com os métodos da referência [6]; podemos utilizar todo repertório obtido naquela referência para tratar a presença do campo magnético no modelo de Wegner.

A equação (4.9) pode ser resolvida como [6]:

$$G^\infty(\vec{r} \vec{r}' | E) = \sum_{[\lambda]} \frac{\psi_\lambda^*(\vec{r})\psi_\lambda(\vec{r}')}{g_E^{0^{-1}}(\lambda) - MG^\infty(\vec{r} \vec{r}' | E)} \quad (4.10)$$

onde $[\lambda] = [n, k_x, k_z]$ e $g_E^0(\lambda) = [E - \omega_c(n + \frac{1}{2}) - \frac{k_z^2}{2m} + E_F + i\delta \text{sgn}E]^{-1}$.

Desprezando contribuições da parte real $G^\infty(\vec{r} \vec{r}' | E)$, podemos escrever [8]:

$$G^\infty(\vec{r} \vec{r}' | E) = \sum_{[\lambda]} \psi_\lambda^*(\vec{r})\psi_\lambda(\vec{r}')g_E(\lambda) \quad (4.11)$$

onde $\psi_\lambda(\vec{r})$ é definida pelas equações (3.3) e (3.4), então:

$$g_E(\lambda) = [\omega_c(n + \frac{1}{2}) + \frac{k_z^2}{2m} - (E + E_F) - \frac{1}{2\tau} \text{sgn}E] \quad (4.12)$$

$$\frac{1}{2\tau} = MN(E_F)2\pi \quad (4.13)$$

com $\omega_c = \frac{eH}{m}$ e $N(E_F) = (2E_F)^{1/2}$.

Por outro lado, esta não é a única forma para G1. Conforme foi discutido no Capítulo 3, a integração em k_x produz uma nova forma

$$G^\infty(\vec{r} \vec{r}' | E) = e^{\frac{i\omega_c}{2}(x-x')(y+y')} g^\infty(\vec{r} - \vec{r}' | E) \quad (4.14)$$

aqui $g^\infty(\vec{r} | E)$ é semelhante à função definida em (3.6).

A primeira grande tarefa deste capítulo está encerrada. Obtivemos pela expansão em termos do parâmetro $1/N$, a G1 calculada exatamente no limite $N = \infty$ em presença de campo magnético.

4.3 A Magnetocondutividade

O próximo passo é calcular correções em ordem $1/N$ à magnetocondutividade. Conforme foi discutido no Capítulo 2, podemos obter uma fórmula de Abrikosov para um sistema de N elétrons

$$\sigma_{\mu\mu}(\vec{q} | \omega) = \frac{e^2}{4\pi\omega} \int_{-\omega}^0 dE \int d\vec{r} e^{i\vec{q}\vec{r}} \Gamma_{\mu\mu}(\vec{r} | E \omega) \quad (4.15)$$

onde

$$\Gamma_{\mu\mu}(\vec{r} | \omega) = [D_{\vec{r}_4}^{\mu} - D_{\vec{r}_1}^{\mu*}]_{\vec{r}_4=\vec{r}_1} [D_{\vec{r}_3}^{\mu} - D_{\vec{r}_2}^{\mu*}]_{\vec{r}_3=\vec{r}_2} \sum_{\alpha\beta} K_{\alpha\beta\beta\alpha}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 \vec{r}_3 \vec{r}_4 | z z') \quad (4.16)$$

A tarefa é obter a função de Green de duas partículas $K_{\alpha\beta\beta\alpha}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 \vec{r}_3 \vec{r}_4 | E \omega)$ definida abaixo

$$\sum_{\beta} K_{\alpha\beta\beta\alpha}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 \vec{r}_3 \vec{r}_4 | E \omega) = \sum_{\beta} \langle G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E + \omega) G_{\beta\alpha}(\vec{r}_3 \vec{r}_4 | \omega) \rangle \quad (4.17)$$

utilizando os valores de primeiro e segundo momento do potencial aleatório dados em (4.2) e (4.3) juntamente com a G1 obtida como solução da equação (4.4).

$$G_{\alpha\beta}(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E) = G^0(\vec{r}_1 \vec{r}_2 | E) \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha_1=1}^N \int d\vec{r}' G^0(\vec{r}_1 \vec{r}' | E) \frac{V_{\alpha\alpha_1}(\vec{r}')}{\sqrt{N}} G_{\alpha_1\beta}(\vec{r}' \vec{r}_2 | E) \quad (4.18)$$

A questão que devemos responder agora é: quais são os diagramas que aparecem em ordem $1/N$ para G2? O problema é, a exemplo da G1, relacionar com cada topologia o aparecimento de somas internas.

O primeiro vértice de interesse que aparece como uma contribuição de ordem dominante para K é dado na Fig.(4.5) [13]. Um comentário importante com relação à esta figura: as setas superiores representam a G1 avançada, enquanto as setas inferiores correspondem à G1 retardada.

Podemos observar o aparecimento de $N - 1$ somas internas, fazendo com que este diagrama contribua em ordem N^{-1} para $K_{\alpha\beta\beta\alpha}$. Entretanto, a magnetocondutividade está relacionada com $\sum_{\beta} K_{\alpha\beta\beta\alpha}$. Nestas condições, o diagrama contribui em ordem N^0 , pois a soma sobre β neste vértice tem o papel de uma soma interna.

Por outro lado, é possível acrescentar neste vértice, inserções tipo "arco-íris" e "re-dutível", sem que isto altere sua ordem de contribuição. Isto implica, que nas expressões analíticas correspondentes a este diagrama, devemos utilizar ao inves de $G^0(\vec{r} \vec{r}' | E)$, a própria $G^{\infty}(\vec{r} \vec{r}' | E)$. Na realidade, este tipo de inserção pode ser feito em qualquer topologia que vamos estudar adiante.

Um último comentário sobre este vértice se refere à sua semelhança com diagramas escadas de uma teoria desordenada usual. Por este motivo, vamos utilizar a mesma designação quando for o caso de distingui-lo na discussão posterior; entretanto, como se referem a diagramas originados no modelo de Wegner, para diferenciá-lo dos diagramas de uma teoria desordenada usual, utilizaremos aspas. Vamos usar o mesmo procedimento toda vez que aparecerem diagramas que tenham semelhança topológica com aqueles de uma teoria desordenada usual.

O próximo diagrama de interesse é dado na Fig.(4.6). Este vértice também contribui em ordem $1/N$ para $K_{\alpha\beta\beta\alpha}$, mas diferentemente do caso "escada", a soma sobre o índice β não aparece como uma soma interna devido ao surgimento de $\delta_{\alpha\beta}$ que aparece como consequência da forma especial como contraímos os índices neste vértice. Desta forma este diagrama contribui em ordem $1/N$ para a condutividade. Relevante notar que, se a quantidade de interesse fosse $\sum_{\beta} K_{\alpha\beta\alpha\beta}$, então este vértice teria contribuição dominante.

Outros dois conjuntos que produzem uma contribuição de ordem $1/N^2$ para $K_{\alpha\beta\beta\alpha}$ compõem-se da articulação 2 vértices "maximamente cruzados", conforme podemos ver na Fig.(4.7). Diferentemente do vértice "maximamente cruzado", os dois diagramas desta figura não contêm uma $\delta_{\alpha\beta}$ de tal forma que, quando somamos sobre β , sua ordem de contribuição é na realidade $1/N$.

Na Fig.(4.7), assim como em algumas figuras que seguem adiante, também colocamos si-

multaneamente uma versão equivalente para a articulação de dois "maximamente cruzados" como aparecem na referência [15] a título de comparação com a nossa forma de representar os mesmos diagramas.

Naturalmente podemos pensar em combinar vértices "escada" e "maximamente cruzado", já que estes contribuem respectivamente em ordem N^0 e N^{-1} para $\sum_{\beta} K_{\alpha\beta\beta\alpha}$. As combinações óbvias são mostradas na Fig.(4.8). Nos diagramas (a) e (b) em princípio, a exemplo do que acontece para o vértice "escada", a soma sobre β produz um fator N . No diagrama (c), temos uma soma interna sobre o índice γ correspondendo ao aparecimento de uma junção ligando diferentes vértices por propagadores G_1 . A soma sobre γ e β nestes diagramas constituem exatamente o modo como se produz um fator N^2 que torna este diagrama de ordem N^{-1} para a condutividade.

O diagrama (c) da Fig.(4.8) é ilustrativo, porque aí vemos o surgimento do mecanismo através do qual se obtêm fatores N 's em combinações mais complexas dos vértices canônicos "escada", "maximamente cruzado" e "maximamente cruzado" articulados que é a aparição de uma junção interna. Esta junção nada mais é que um conjunto de G_1 's que realiza as conexões necessárias entre os diversos vértices, tal que apareça sempre uma soma interna. A partir de agora, nas próximas combinações devemos atentar para este mecanismo de compensação.

A discussão do parágrafo anterior pode ser clareada quando iniciamos as próximas combinações usando os vértices "maximamente cruzado" articulados com vértices "escada", como está apontado na figura Fig.(4.9). Para o diagrama (a), temos a combinação de um "escada" com uma articulação que contribuem com N^{-1} e N^{-2} , respectivamente, para $K_{\alpha\beta\beta\alpha}$. No entanto, surge uma junção interna que significa uma soma sobre γ , portanto aparece um fator N . Para a condutividade temos que somar ainda sobre β , que produz outro fator N . A combinação final gera um diagrama de ordem N^{-1} . Exatamente as mesmas considerações podem ser feitas ao diagrama (b), assim como aos diagramas simétricos que correspondem à inserção de um vértice "maximamente cruzado" por baixo, tanto no diagrama (a) quanto no diagrama (b).

Com relação ao diagrama (c) existem duas junções que são responsáveis por somas internas sobre γ e δ de tal modo que temos um fator N^2 . Com a soma final sobre β , nosso conjunto de vértices todo conectado por duas junções torna-se também de ordem $1/N$. As mesmas considerações podemos fazer sobre seu simétrico. Isto encerra o conjunto de diagramas que participam em ordem $1/N$ na condutividade.

Poderia ser perguntado se, além dos diagramas já descritos, não existem outras combinações de "escadas" e "maximamente cruzado" que contribuem na ordem mencionada anteriormente, como, por exemplo, aqueles mostrados na Fig.(4.10).

Em princípio, para o diagrama (a) temos os "escada" e "maximamente cruzado" contribuindo cada um com N^{-1} para $K_{\alpha\beta\beta\alpha}$. Entretanto, é preciso lembrar que o vértice "maximamente cruzado" carrega um $\delta_{\alpha\beta}$ na forma como está mostrado em (a) da Fig.(4.10), igualando todos os índices do conjunto total. Em outras palavras esta conexão não produz soma interna e ao mesmo tempo faz com que a soma sobre β atue sobre um delta de Kroeneker, não produzindo nenhum fator N adicional. Desta forma o diagrama total contribui com N^{-2} para a condutividade. Essencialmente, poderíamos aplicar o mesmo argumento para o diagrama (b).

Assim o conjunto de diagramas que contribuem em ordem N^0 e N^{-1} para $\sum_{\beta} K_{\alpha\beta\beta\alpha}$ são aqueles colocados nas figuras Fig.(4.5) até Fig.(4.9) e são em número de treze se incluímos todos os simétricos.

Podemos definir um propagador "escada" generalizado \bar{L} correspondendo à soma de um produto de duas G1's com um propagador "escada" normal, como podemos ver na Fig.(4.11) que analiticamente tem a forma

$$\bar{L} = GG + L \quad (4.19)$$

onde L corresponde ao propagador "escada" normal.

Com este "escada" generalizado é possível reduzir o número de diagramas que contribuem em ordem N^{-1} para 3, mostrados na Fig.(4.12).

Como já foi discutido no Capítulo 2, existem duas maneiras distintas (porém fisicamente equivalentes) de calcular a condutividade (tomaremos a partir de agora $M = M'$):

A) Combinar a fórmula de Einstein com a função de difusão;

B) Utilizar a fórmula de Abrikosov.

Wegner [13] em seu trabalho original de apresentação do modelo, calculando a condutividade no limite $N = \infty$, utilizou o método A). Desta maneira, o termo correspondendo ao produto simples de G_1 's é tomado como produzindo contribuições de curto alcance que são posteriormente negligenciadas. Nestas circunstâncias, em ordem dominante resta somente o vértice "escada". Ma e Fradkin [14], quando calcularam correções em ordem N^{-1} para a condutividade, também utilizaram o método A). Isto significa que \bar{L} se reduz a L , e os diagramas que aparecem para esta ordem de contribuição são aqueles da Fig.(4.12), exceto que as inserções laterais são de propagadores "escada" normais. Nós vamos mostrar neste capítulo que em campo magnético nulo, a utilização do método B) implica numa redução drástica de diagramas que contribuem em ordem N^{-1} , quando o potencial aleatório é de contato (por exemplo, tipo delta de Dirac).

Isto constitui um resultado importante, dadas as dificuldades de se manipular com o campo magnético. Por isto qualquer redução de diagramas tem consequências importantes no cálculo da magnetocondutividade. Como vimos no capítulo anterior, a presença de um campo magnético impede que se possa escrever os diagramas diretamente no espaço de momentum. Assim, todo o trabalho deve ser feito necessariamente no espaço real. Devido à existência de topologias realmente complicadas no modelo de Wegner, o cálculo analítico no espaço real neste modelo pode ser muito pesado. Basta olhar para G_1 dada em (4.11) ou (4.12), para se ter uma idéia do grau de dificuldade de calcular a contribuição de um diagrama como aqueles da Fig.(4.12).

As considerações anteriores fazem com que sejam realmente surpreendentes as vantagens de utilizar a fórmula de Abrikosov. No entanto, é preciso frisar, que tanto o método A) quanto o método B) são inteiramente equivalentes (ver Capítulo 2) do ponto de vista dos resultados físicos. As vantagens que estamos enfatizando são de natureza prática, quando se trata de implementar o cálculo da condutividade.

Se fizermos a transformada de Fourier na fórmula de Abrikosov em campo magnético

nulo, $\Gamma_{\mu\mu}(\vec{q} | \omega)$ tem a forma geral

$$\Gamma_{\mu\mu}(\vec{q} | \omega) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \sum_{\vec{p}, \vec{p}'} (\vec{p} + \frac{1}{2}\vec{q})_{\mu} R_{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{p}' | E, \omega) (\vec{p}' + \frac{1}{2}\vec{q})_{\mu} \quad (4.20)$$

com

$$R_{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{p}' | E, \omega) = \sum_{\alpha\beta} \langle G_{\alpha\beta}(\vec{p} + \vec{q}, \vec{p}' + \vec{q} | E + \omega) G_{\beta\alpha}(\vec{p}', \vec{p} | E) \rangle \quad (4.21)$$

$$= \sum_{\alpha\beta} K_{\alpha\beta\beta\alpha}(\vec{p}, \vec{p}', \vec{q} | E, \omega) \quad (4.22)$$

Estamos interessados em distinguir quais dentre os diagramas obtidos para $\sum_{\beta} K_{\alpha\beta\beta\alpha}$ não contribuem para a condutividade d-c, dada a condição que o potencial de interação seja de contato. O mecanismo através do qual alguns diagramas se anulam provém da integração da parte angular em \vec{p} e \vec{p}' no limite para o qual \vec{q} tende a zero.

Neste sentido podemos identificar dois ordenamentos de momentum para $R_{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{p}' | E, \omega)$ que são típicos do conjunto de diagramas expostos na expansão $1/N$:

A) $R_{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{p}' | E, \omega)$ pode ser reescrito como

$$R_{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{p}' | E, \omega) = R_{\vec{q}}(\vec{p} | E, \omega) \delta(\vec{p} - \vec{p}') \quad (4.23)$$

se o potencial de espalhamento é de contato

$$R_{\vec{q}}(\vec{p} | E, \omega) = R_{\vec{q}}(p^2 | E, \omega) \quad (4.24)$$

então

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Gamma_{\mu\mu}(\vec{q} | \omega) = \frac{i}{2\pi} \int dE \sum_{\vec{p}} p^2 R_{\vec{q}}(p^2 | E, \omega) \neq 0 \quad (4.25)$$

Este seria, tipicamente, o caso do vértice correspondendo ao termo de Drude quando $G_{\alpha\beta}$ é substituído por $G_{\alpha\beta}^0$ na equação (4.21).

B) O segundo caso de interesse $R_{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{p}' | E, \omega)$ pode separar-se em blocos de momentum (ver Fig.4.5), como segue abaixo:

$$R_{\vec{q}}(\vec{p}, \vec{p}' | E, \omega) = R_{\vec{q}}^{(1)}(\vec{p} | \omega) R_{\vec{q}}^{(2)}(\vec{p}' | \omega) \times L(\vec{q} | E, \omega) \quad (4.26)$$

Novamente se o potencial aleatório é de contato

$$R_{\vec{q}}^{(i)}(\vec{p} | E \omega) = R_{\vec{q}}^{(i)}(p^2 | E \omega) \quad (4.27)$$

então temos integração de momentum \vec{p} e \vec{p}' , tal que

$$\lim_{q \rightarrow 0} \Gamma_{\mu\mu}(\vec{q} | \omega) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dE \sum_{\vec{p}} (\vec{p})_{\mu} R_{\vec{q}}^{(1)}(p^2 | E \omega) \sum_{\vec{p}'} (\vec{p}')_{\mu} R_{\vec{q}}^{(2)}(\vec{p} | E \omega) \times \quad (4.28)$$

$$\times L(\vec{q} | E \omega) = 0$$

já que $\int d\vec{p} \vec{p} f(p^2) \equiv 0$.

O problema agora consiste em determinar quais são os diagramas obtidos em ordem $1/N$ do modelo de Wegner que se encaixam na situação correspondendo a (4.25) ou (4.28), isto é, aqueles que contribuem e aqueles que não contribuem para a condutividade. Para realizar esta análise, devemos olhar para os diagramas no espaço recíproco. Por exemplo, vamos nos fixar, no diagrama contendo *um* vértice "escada", mostrado na Fig.(4.5). A condutividade é calculada pela fórmula de Abrikosov dada em (4.15) e (4.16). Em termos diagramáticos, isto corresponde a ligar as pontas do diagrama colocada na Fig.(4.5), acrescentando um momento externo \vec{q} relacionado à aplicação de um campo elétrico. O diagrama correspondente está mostrado na Fig.(4.13), que agora deve seguir as leis de conservação de momentum usuais para construção de diagramas de Feiynman no espaço recíproco.

A correspondente expressão analítica para $R_{\vec{q}}^{(esc.)}(\vec{p} \vec{p}' | E \omega)$ deste diagrama é dada pela equação abaixo:

$$R_{\vec{q}}^{(esc.)}(\vec{p} \vec{p}' | E \omega) = G(\vec{p} + \vec{q} | E + \omega) \Gamma(\vec{q} | E \omega) G(\vec{p}' + \vec{q} | E + \omega) \times \quad (4.29)$$

$$\times G(\vec{p} | E) G(\vec{p}' | E)$$

A condutividade pode ser obtida inserindo $R_{\vec{q}}^{(esc.)}(\vec{p} \vec{p}' | E \omega)$ em (4.20), e este resultado por sua vez na fórmula de Abrikosov. Podemos perceber claramente que este diagrama apresenta contribuição nula para condutividade, já que se separa em dois blocos de momentum recuperando a situação descrita na equação (4.28), isto é, a integração angular sobre \vec{p} e \vec{p}' são identicamente nulas.

O próximo diagrama que vamos analisar corresponde àquele da Fig.(4.6), que mostra agora o conjunto constituído pelo vértice "maximamente cruzado" mais quatro G1's externas conectadas a ele. Novamente vamos para o espaço de momentum, mostrado agora na Fig.(4.14), que tem contribuição dominante $R_{\vec{q}}^{(cruz.)}(\vec{p} \vec{p}' | E \omega)$ dado em (4.30):

$$R_{\vec{q}}^{(cruz.)}(\vec{p} \vec{p}' | E \omega) \approx \delta(\vec{p} + \vec{p}') G(\vec{p} + \vec{q} | E + \omega) G(\vec{p}' + \vec{q} | E + \omega) \times \\ \times G(\vec{p} | E) G(\vec{p}' | E) \times \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \Lambda(\vec{k} | E \omega) \quad (4.30)$$

A situação agora se alterou substancialmente em relação ao caso anterior. Agora os momenta das G1's externas conectadas ao vértice "cruzado" se distribuem de tal forma, que $R_{\vec{q}}^{(cruz.)}(\vec{p} \vec{p}' | E \omega)$ não se separa em blocos de momentum; logo, estamos na situação descrita pela equação (4.25). A integração angular sobre a variável \vec{p} não é nula, logo este diagrama *contribui para a condutividade*. Esta propriedade é recorrente em todos os diagramas que aparecem vértices "cruzados", devido ao fato que uma contribuição singular aparece quando $\vec{p} \approx -\vec{p}'$, isto implica que não existirá mais separação em blocos para os propagadores ligados a este vértice especial. É necessário observar que neste caso, estamos utilizando a aproximação pólo de difusão, significando que o vértice "cruzado" tem contribuição singular nos limites $k \rightarrow 0$ e $\omega \rightarrow 0$ (\vec{k} é o momentum associado ao vértice "cruzado"). Isto permite desconectar as G1's externas do vértice.

Os próximos diagramas em complexidade correspondem aos da Fig.(4.7). Percebemos que agora existe um elemento complicador: a inserção de um vértice "maximamente cruzado" numa linha de propagadores avançado (ou retardado). Entretanto, podemos tomar inserção como sendo igual ao primeiro termo da sua correspondente série. Este procedimento se justifica porque os propagadores que participam deste vértice ou são só inteiramente do tipo avançado ou só inteiramente do tipo retardado. Logo, todas as G1's em questão estão no mesmo semiplano do plano complexo, por isto não se produz uma contribuição singular, tipo pólo de difusão. Desta maneira, podemos tomar o vértice "cruzado" insertado como [25]:

$$\Lambda(\vec{p} | E \omega) = M \quad (4.31)$$

Mostramos na Fig.(4.15) a correspondente contribuição à condutividade do diagrama (a) da Fig.(4.7). Os argumentos que seguem basicamente poderiam ser aplicados para o diagrama (b) desta figura. A expressão para $R_{\vec{q}}^{(4.7)}(\vec{p} \vec{p}' | E \omega)$ é dada como:

$$\begin{aligned} R_{\vec{q}}^{(4.7)}(\vec{p} \vec{p}' | E \omega) &= G(\vec{p} + \vec{q} | E + \omega)G(\vec{p}_1 + \vec{q} | E + \omega)G(\vec{p}_3 + \vec{q} | E + \omega) \times \\ &\times G(\vec{p}_3 + \vec{p} - \vec{p}_1 + \vec{q} | E + \omega)G(\vec{p}_3 + \vec{p} - \vec{p}_1 | E)G(\vec{p} | E) \times \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^d} \Lambda(\vec{k} | E \omega) \end{aligned} \quad (4.32)$$

Neste caso, embora tenhamos a presença de um vértice "cruzado" cuja contribuição dominante se dá quando $\vec{p}_3 \approx -\vec{p}$; a inserção na linha de propagadores provoca uma separação em dois grupos de G1's, um que só depende de \vec{p} e outro que só depende de \vec{p}_1 . Novamente recaímos na situação descrita na equação (4.28), quando $\vec{q} \rightarrow 0$; este diagrama não contribui para a condutividade.

É possível distinguir entre as duas situações discutidas, olhando somente para os diagramas. Por exemplo, na Fig.(4.13) e Fig.(4.15), a configuração dos momenta é tal que os dois propagadores externos à esquerda dependem só de \vec{p} e os dois à direita só de \vec{p}' (ou só de \vec{p}_1). Então, para os próximos diagramas do modelo de Wegner, quando redesenharmos no espaço recíproco, se possuírem esta mesma característica, não contribuem para a condutividade porque recaem no caso discutido em (4.28).

Passamos agora aos diagramas da Fig.(4.8). Inicialmente, olhamos para o correspondente diagrama no espaço recíproco (ver Fig.(4.16)) do diagrama (c). Novamente reproduzimos a situação mencionada no parágrafo anterior. Embora o núcleo deste diagrama tenha um vértice "cruzado", a presença dos vértices "escada" laterais separa a dependência em momentum das G1's externas à direita e à esquerda; sendo assim, este diagrama também não contribui para a condutividade.

Para o diagrama (a) da Fig.(4.8), cuja correspondente contribuição diagramática para a condutividade está colocada na Fig.(4.17), também notamos que as variáveis \vec{p} e \vec{p}'

permanecem distintas, logo a integração sobre elas nos conduz novamente para a situação da equação (4.28). Por considerações de simetria o diagrama (b) da Fig.(4.8) recai na mesma situação, isto é, ele possui um ordenamento de momentum por seus propagadores similar (porém invertido) à Fig.(4.17).

Portanto, relativamente à Fig.(4.8), concluímos que nenhum dos seus diagramas é capaz de produzir uma condutividade não nula, já que os momenta sempre se distribuem em cada um deles de tal forma que sempre recaímos no caso descrito pela equação (4.28). Este fato é explicado pela presença de vértice "escada", pois a separação em blocos de propagadores com momentum distintos é dominada por ele.

A pergunta que se pode fazer é se este fato se repete nos diagramas que restam para analisar. Para a próxima série que inicia com o (c) da Fig.(4.9), cuja contribuição para a condutividade em representação no espaço recíproco aparece na Fig.(4.18). Nesta figura observamos o mesmo tipo de fenômeno das Fig.(4.17) e Fig.(4.16), a separação dos propagadores em bloco de momentum. Isto é razoável de entender, dado que aparece sempre devido a presença de um vértice "escada" ou por uma inserção na linha de propagadores avançado ou retardado do vértice "cruzado". A mesma consideração pode ser estendida ao seu simétrico (com inserção pela linha de baixo de propagadores), ambos não contribuem a condutividade.

Passamos para os últimos diagramas correspondentes à (a) e (b) da Fig.(4.9). Vamos aplicar o procedimento utilizado para os diagramas anteriores, entretanto, basta estudar apenas um dos diagramas (a) ou (b), porque as conclusões serão comuns aos dois, por uma questão de similaridade (da mesma forma podemos repetir as conclusões para seus simétricos). A condutividade está mostrada na Fig.(4.19). Claramente podemos observar pelo diagrama da figura mencionada, que este não contribui à condutividade já que a integração angular das variáveis \vec{p} e \vec{p}' se anula.

Toda a discussão anterior a respeito de quais diagramas contribuem ou não para a condutividade pode ser sintetizada da seguinte maneira: a fórmula de Abrikosov, no caso em que o potencial aleatório seja de contato, nos leva a duas possibilidades (equações (4.25)

e (4.28)), tal que em uma delas a condutividade se anula. Por outro lado, o modelo de Wegner e ordem N^0 e N^{-1} produz um conjunto de diagramas onde em quase todos existe pelo menos um vértice "escada" ou uma inserção de "cruzado" pela linha de propagadores avançado (ou retardado). A existência de uma destas duas situações nos leva sempre a recair no caso em que a integração sobre a parte angular implica na anulação da condutividade.

Existe somente um único diagrama que não tem as características mencionadas anteriormente que é aquele onde aparece o vértice "maximamente cruzado" simples, isto é, sem inserção nenhuma. Desta forma, concluímos que pela utilização da fórmula de Abrikosov, da miríade de diagramas que aparecem no modelo de Wegner, resta simplesmente *um* que contribui à condutividade. Isto pode ser comparado com Fradkin [25] e [14] que utilizam a fórmula de Einstein, sendo obrigados a estudar três diagramas de grande complexidade devido ao número extenso de propagadores e vértices que aparecem nestes (os diagramas em questão são aqueles da Fig.(4.12)). Obviamente, seria de grande transtorno estudar o modelo de Wegner em presença de campo magnético se tivéssemos que olhar para *todo* o conjunto de diagramas. Este transtorno pode ser evitado se utilizarmos a fórmula de Abrikosov que nos indica que apenas *um* diagrama é importante.

Desta forma, podemos aplicar o método da referência [6] para o modelo de Wegner, calculando a condutividade via fórmula de Abrikosov, mas, pelo que já foi discutido, isto significa se debruçar novamente sobre o vértice "maximamente cruzado". Neste sentido, o estudo do modelo de Wegner em campo magnético recupera exatamente os resultados obtidos em [6], estudando a magnetocondutividade de um gás de elétrons desordenado em uma banda, onde foi calculada a contribuição do vértice "maximamente cruzado" em presença do campo:

$$\sigma_{1/N}(\omega_c) - \sigma_{1/N}(0) \approx \frac{e^2 UN}{\pi^4} [\pi 2^{-3/4} (\omega_c D_0 \tau)^{1/2} - I^* (\omega_c \tau)^2] \quad (4.33)$$

onde estamos considerando o limite de campo magnético $(D_0 \tau_i)^{-1} < \omega_c < (D_0 \tau)^{-1} \ll 1$ com I^* , sendo uma constante independente do campo aplicado.

Uma última palavra deve ser dita com relação a uma comparação entre o modelo de

Wegner e os modelos estudados no capítulo anterior. A realidade é que este não pode ser pensado como uma generalização daqueles visto que pela formulação do modelo (ver equações (4.1), (4.2) e (4.3)) as massas estão libertas de índice, assim como o segundo momento do potencial aleatório tem uma forma diferente daquele dado pela equação (2.3). Isto explica por que o modelo de Wegner recai nas expressões analíticas para a condutividade num modelo de uma banda.

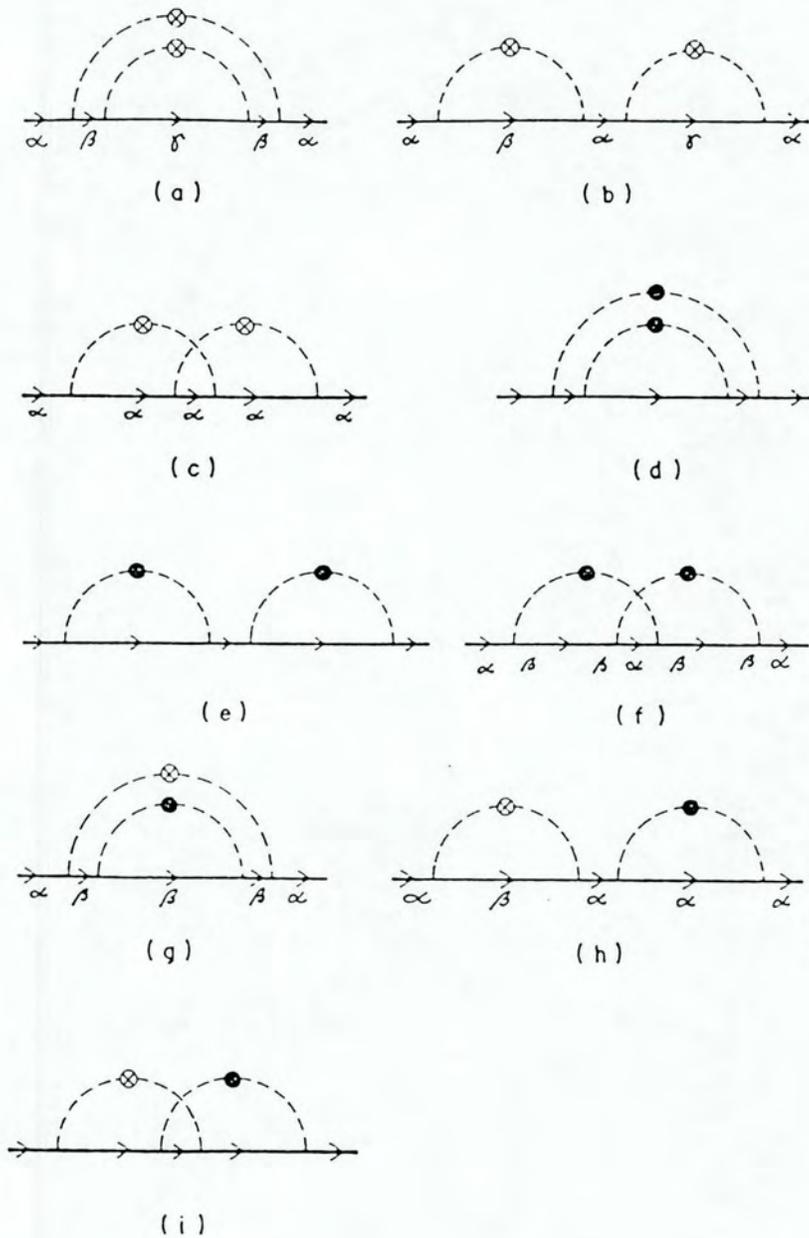


Figura 4.3: Segundo termo da expansão da $G1$. Diagramas (a) e (b) contribuem com N^0 . Diagramas (f), (g) e (h) contribuem com N^{-1} . Os restantes apresentam contribuições de ordem N^{-2} .

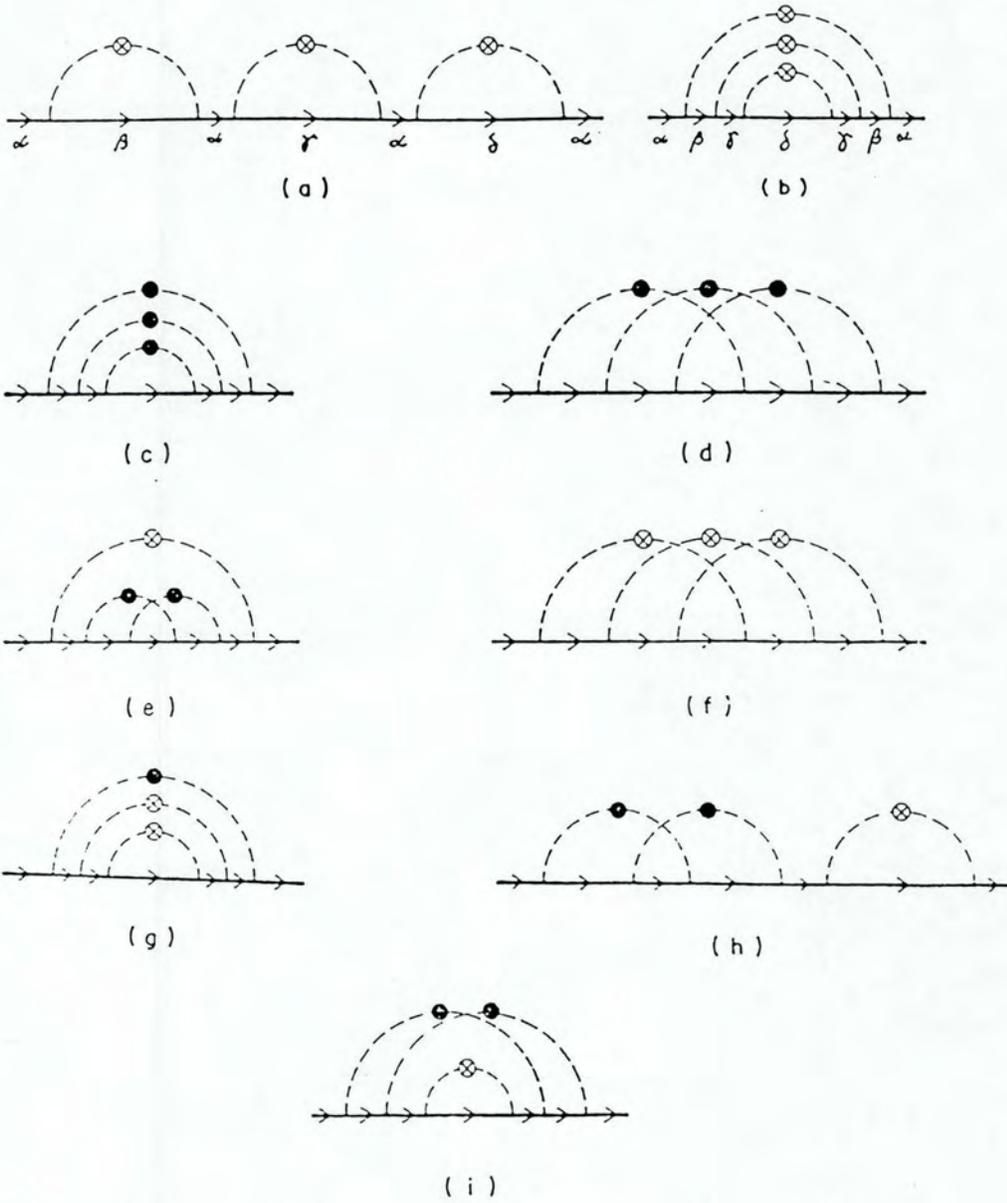


Figura 4.4: Terceiro termo da expansão da $G1$ - Diagramas (a) e (b) são de ordem N^0 . Diagramas (d), (e), (h) e (i) aparecem como N^{-1} . Os restantes são de ordem N^{-2} .

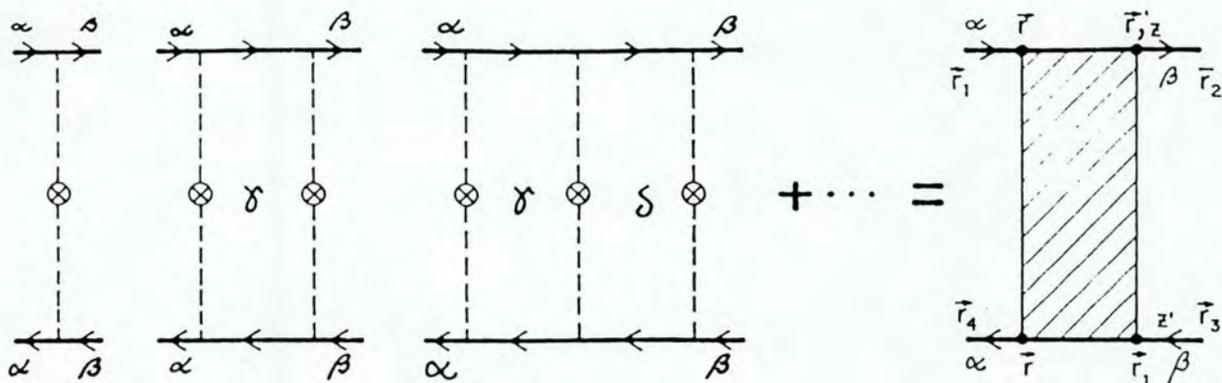


Figura 4.5: Diagramas "escada" que contribuem com N^{-1} para $K_{\alpha\beta\beta\alpha}$.

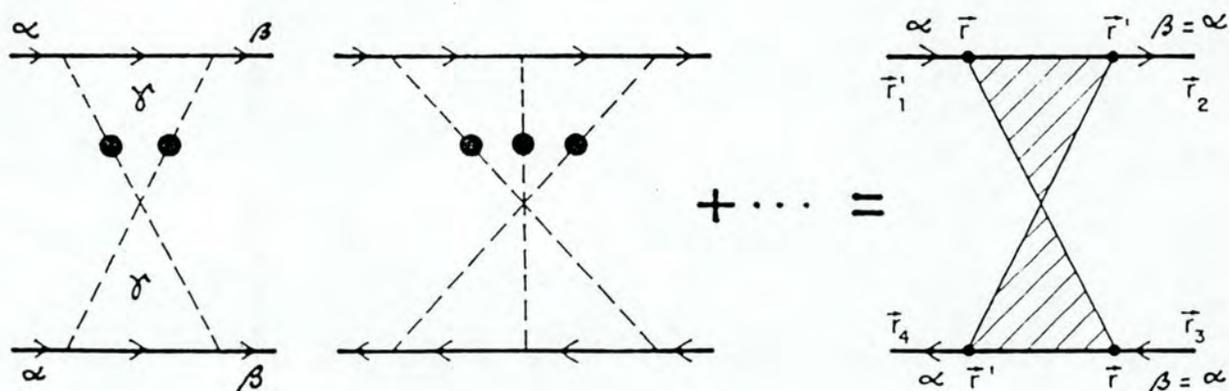
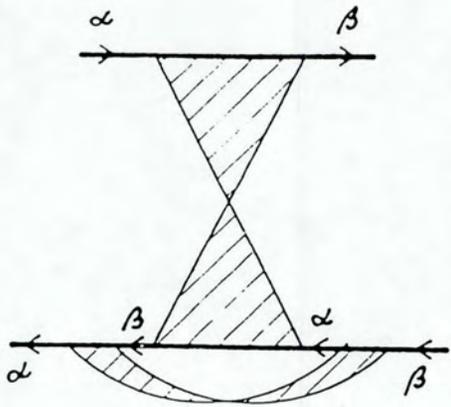
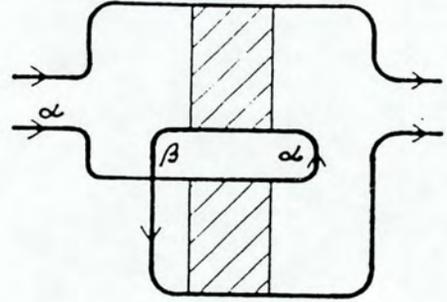


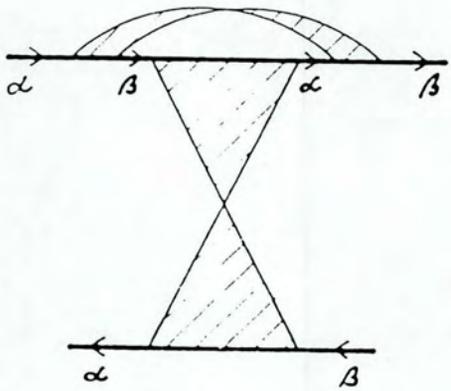
Figura 4.6: Vértice "maximamente cruzado" no modelo de Wegner.



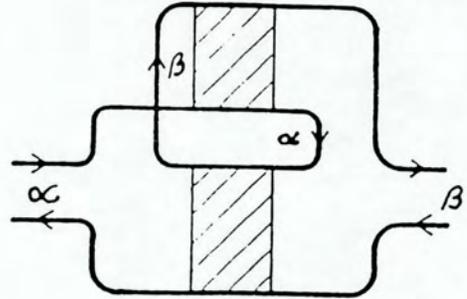
=



(b)

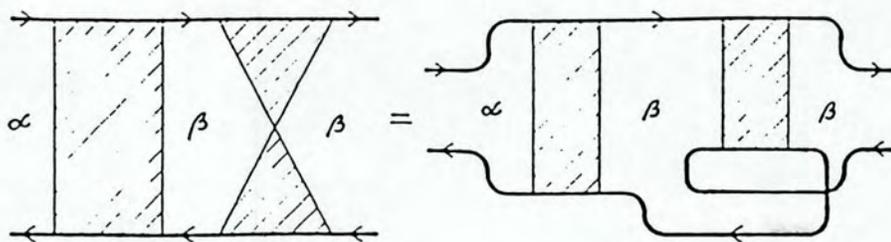


=

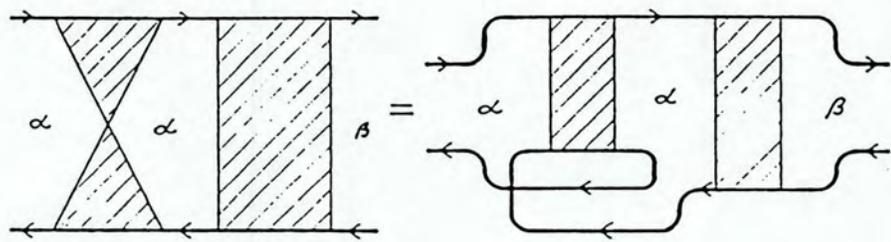


(a)

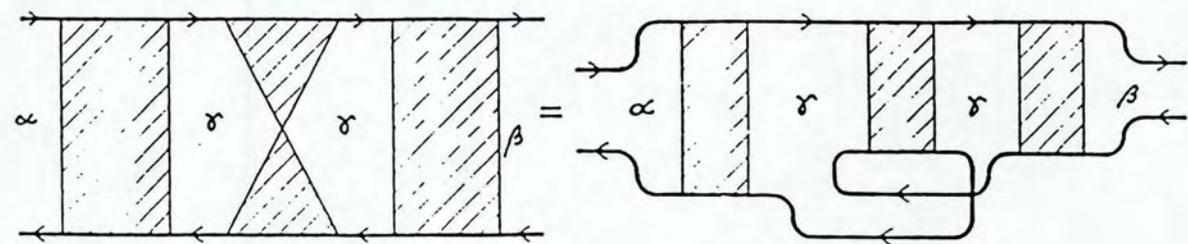
Figura 4.7: Articulação de 2 vértices "maximamente cruzados" com suas respectivas traduções para versão da referência [15].



(a)



(b)



(c)

Figura 4.8: Combinações imediatas de vértices "maximamente cruzado" com vértices "escada".

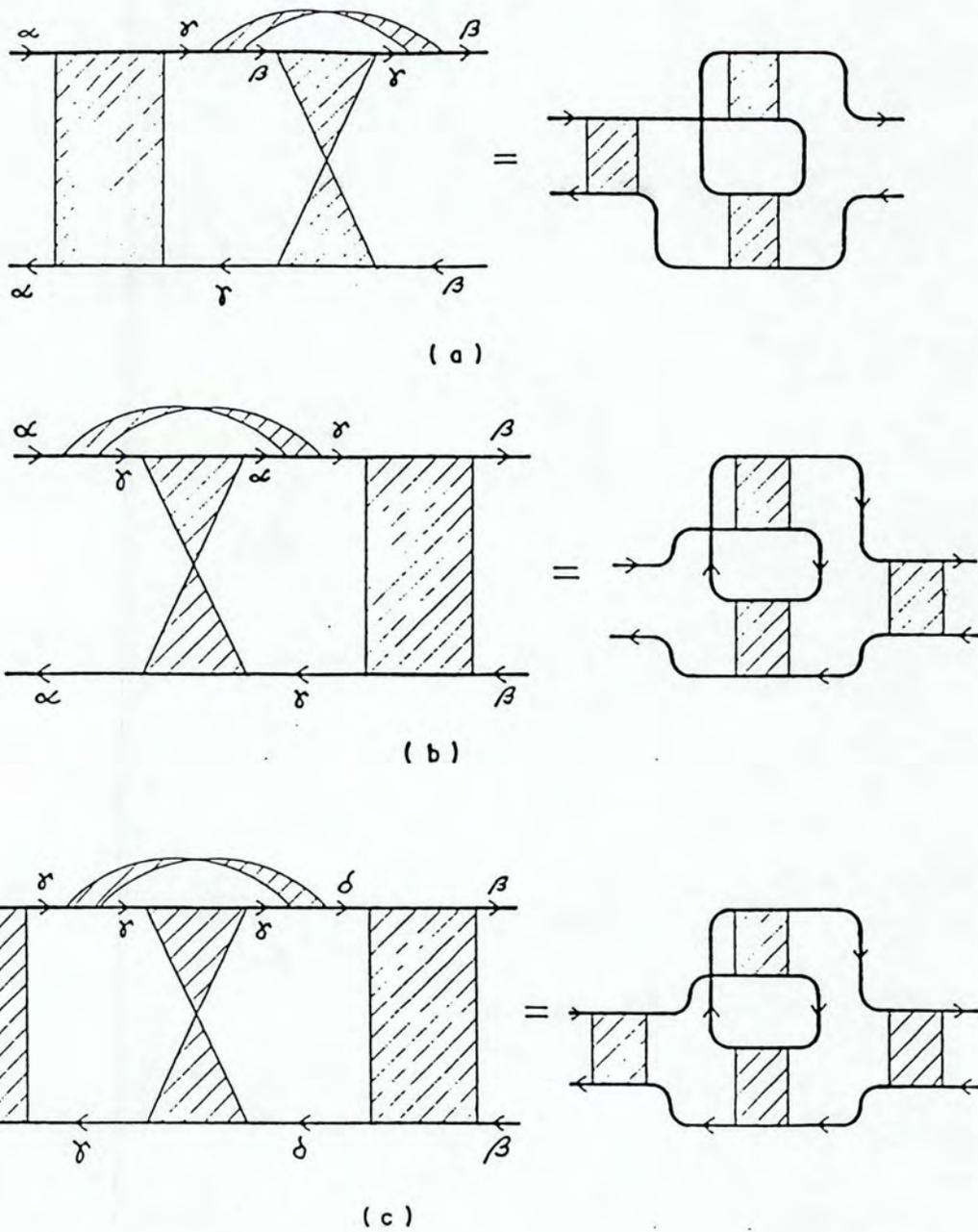


Figura 4.9: Combinações de "maximamente cruzados" articulados com "escadas".

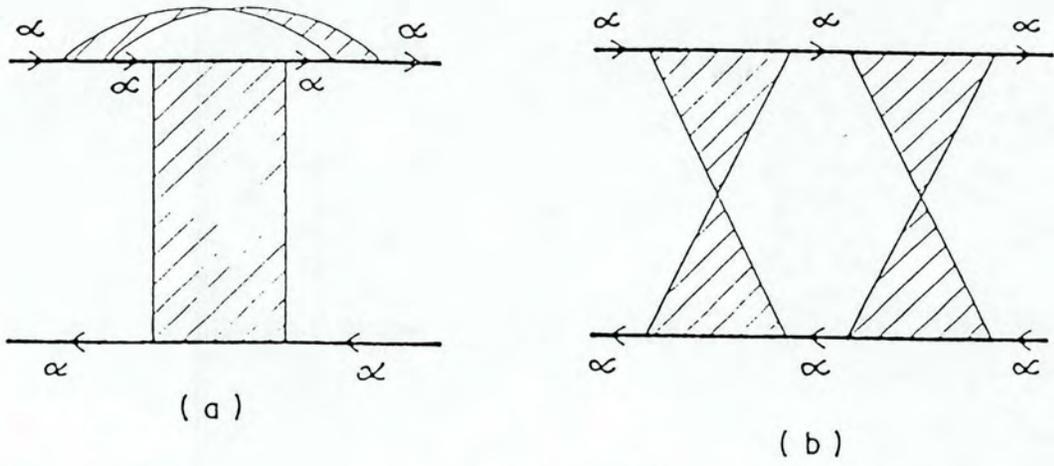


Figura 4.10: Exemplos de contribuição de ordem mais alta para $K_{\alpha\beta\alpha}$

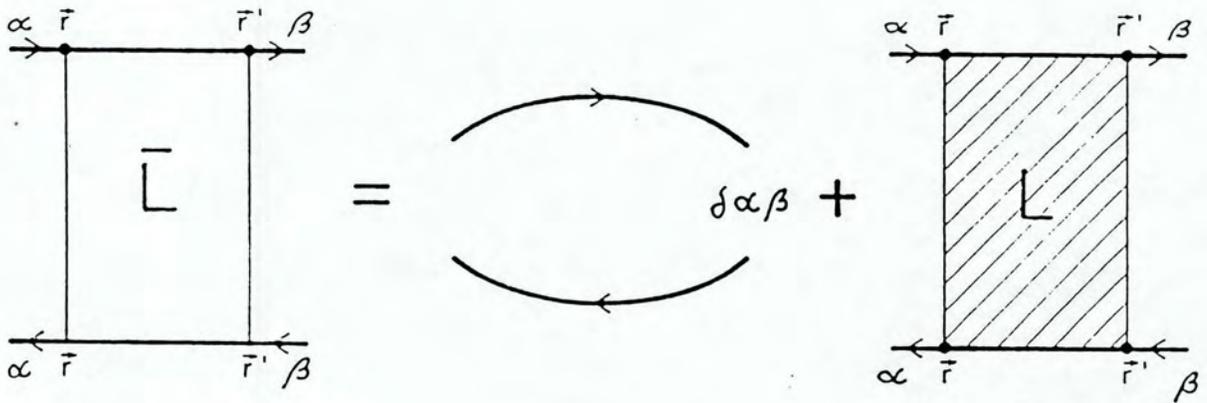
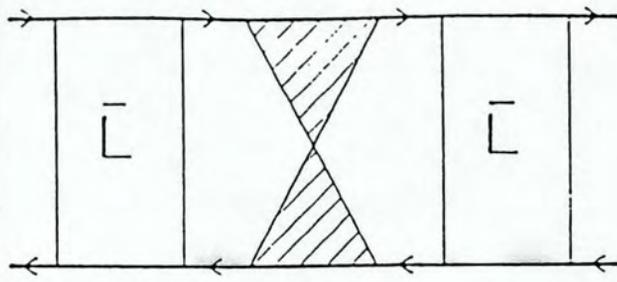
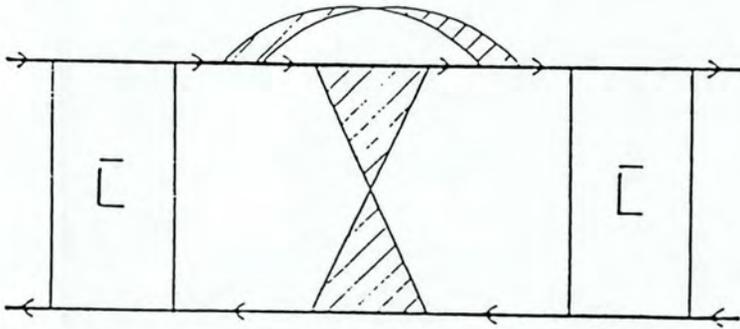


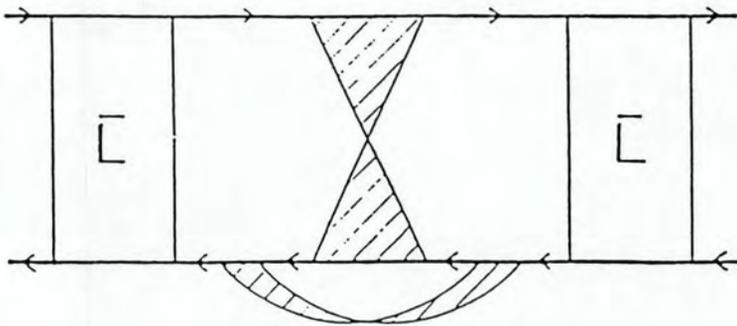
Figura 4.11: Definição diagramática do propagador "escada" generalizado incluindo um produto simples de $G1$'s.



(a)



(b)



(c)

Figura 4.12: O conjunto de diagramas que contribui para a condutividade em ordem N^{-1} quando utilizamos \bar{L} .

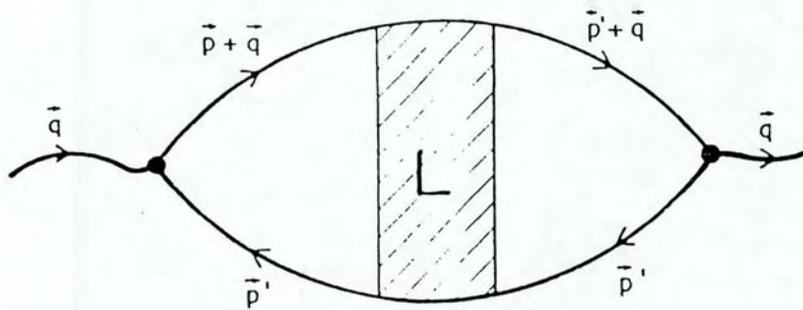


Figura 4.13: Diagrama correspondente à condutividade relacionada ao vértice "escada".

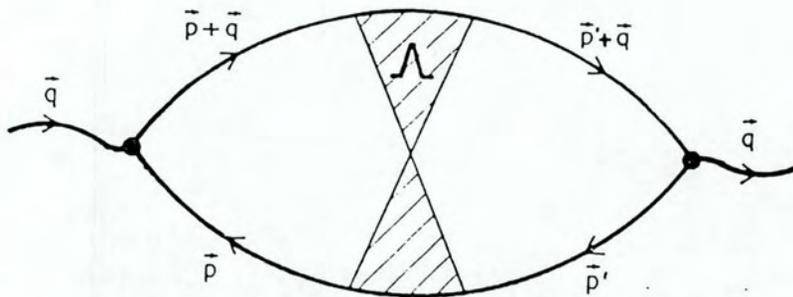


Figura 4.14: Diagrama correspondente à condutividade relacionada ao vértice "maximamente cruzado".

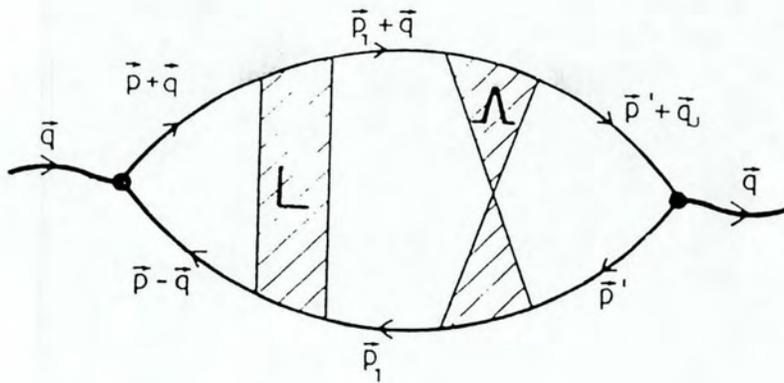


Figura 4.17: Condutividade do diagrama (a) da Fig.3.8.

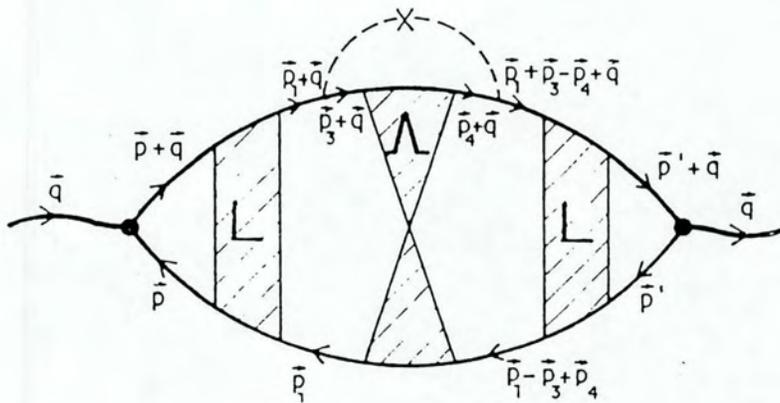


Figura 4.18: Condutividade correspondendo ao diagrama (c) da Fig.3.9.

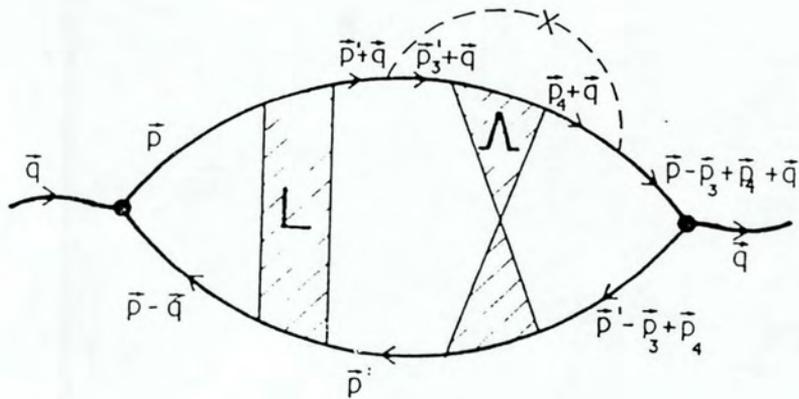


Figura 4.19: Condutividade relacionada ao diagrama (a) da Fig.3.9.

Capítulo 5

Conclusões

5.1 Discussão Final

Finalmente podemos sintetizar as discussões ocorridas nos capítulos anteriores.

No Capítulo 2 estudamos a estrutura da teoria de perturbação para centros espalhadores colocados aleatoriamente no sistema. É possível encontrar uma relação entre as funções correlação densidade-densidade e corrente-corrente. Elas estão relacionadas respectivamente com as fórmulas para a condutividade conhecidas como Einstein e Abrikosov que produzem resultados absolutamente equivalentes. No entanto, mostramos que em teoria de perturbação os diagramas que aparecem para uma fórmula podem não aparecer em outra, mais exatamente se o potencial aleatório é do tipo contato, alguns diagramas (conhecidos como "escada") dão contribuição nula para a condutividade pela fórmula de Abrikosov devido a integração da parte angular das expressões analíticas correspondentes aos diagramas. Isto, em princípio, coloca uma certa liberdade para assumir uma estratégia de cálculo ou outra. Nós optamos por utilizar sempre a fórmula de Abrikosov. As vantagens desta opção são nítidas quando calculamos a magnetocondutividade em ordem $1/N$ no modelo de Wegner.

No Capítulo 3 olhamos para o problema da universalidade do ELF. Inicialmente, vamos analisar o modelo de massas indexadas sem campo magnético. O resultado encontrado na equação (3.101) mostra que os detalhes específicos do modelo podem ser absorvidos

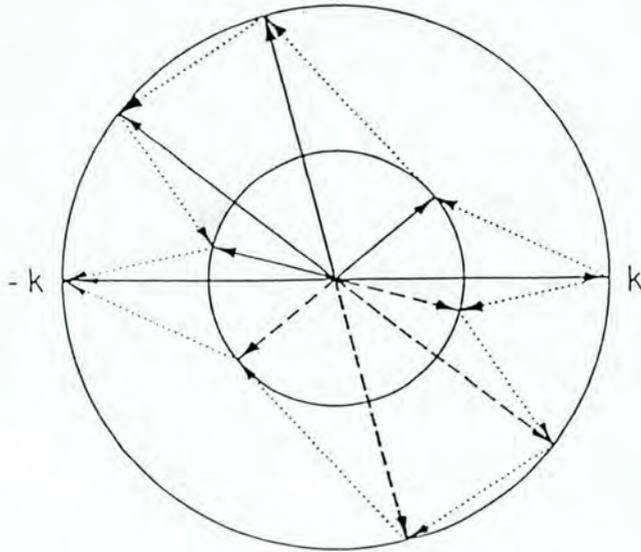


Figura 5.1: *Esquema para retro-espalhamento correlacionado pra dois elétrons em bandas diferentes.*

definindo uma constante de difusão D_{ef}^0 e um tempo de relaxação efetivos (ver equações (3.75) e (3.97)). Deste modo recuperamos a forma geral da correção à condutividade devido a soma de diagramas maximamente cruzados. *Neste sentido podemos considerar que o ELF é universal para o modelo de duas bandas dado pelas equações (3.68), (3.69) e (3.70).*

Este resultado pode ser entendido sob a ótica da interpretação do ELF como sendo produto de retro-espalhamentos correlacionados conforme foi discutido no Capítulo 1 e está especialmente ilustrado na Fig.(1.3).

Na realidade, podemos estender a interpretação da seção 1.2 (ver [5]) para sistemas de duas bandas com interferencia construtiva se consideramos espalhamentos ocorrendo conforme está mostrado na Fig.(5.1). No modelo de duas bandas, a simetria do retro-espalhamento se mantém se a transferencia de momentum \vec{g}_1' é igual a \vec{g}_n'' com uma condição adicional: o elétron espalhado do estado \vec{k} na banda 1 para o estado \vec{k}_1' na banda 2, deve ter como espalhamento complementar de \vec{k}_{n-1}'' na banda 1 para $-\vec{k}$ na banda 2. *Éssencial para a universalidade neste modelo de duas bandas que os estados simétricos em relação a origem da Fig.(5.1) após cada espalhamento estejam na mesma*

banda.

Com a presença do campo magnético, o resultado se altera de acordo com a intensidade do campo. No modelo de massas anisotrópicas, calculando as componentes diagonais do tensor magnetocondutividade, na condição $\omega_c\tau < 1$, é possível observar que a aplicação do campo gera um comportamento anisotrópico dependente deste. Entretanto, tomando o limite de campo definido pela aproximação semiclássica

$$\frac{1}{D_0\tau_i} < \omega_c < \frac{1}{D_0\tau} \quad (5.1)$$

recuperamos a dependência da magnetocondutividade com o campo como uma raiz quadrada:

$$\sigma'_{\mu\mu} = -\frac{2e^2}{\pi^4} (I^* - (2\omega_c\tau D_0)^{1/2} \Pi_\nu[\frac{1}{(D_\nu\tau)^{1/2}}])(D_\nu\tau) \quad (5.2)$$

que coincide com o resultado encontrado na referência [11].

Por outro lado, o efeito da anisotropia de massa é inteiramente absorvido no coeficiente multiplicativo

$$\Pi_\nu[\frac{1}{(D_\nu\tau)^{1/2}}](D_\nu\tau) \quad (5.3)$$

onde $\mu, \nu = x, y, z$. Este resultado está inteiramente de acordo com a referência [4].

Um raciocínio similar pode ser estendido ao problema de massas indexadas em campo magnético. Se entendemos campo fraco como sendo definido pela desigualdade $\omega_\alpha\tau_\alpha < 1$, novamente encontramos um comportamento para a magnetocondutividade pautado pela anisotropia provinda da aplicação do campo. No limite da aproximação semiclássica ($\omega_\alpha\tau_\alpha \ll 1$) recuperamos um comportamento isotrópico para a magnetocondutividade, onde aparecem novamente uma constante de difusão e um tempo de relaxação efetivos, como no problema de duas bandas sem campo.

De maneira geral, no limite de campo onde os efeitos de anisotropia são desprezados, podemos dizer que *o ELF é universal em presença de campo magnético, independentemente dos detalhes específicos do modelo, à medida que redefinimos a constante de difusão e o tempo de relaxação para valores efetivos.*

Aqui cabe um comentário; o campo fraco é derivado na aproximação semiclássica usual [11] pela suposição da existencia de uma escala de corte L_{TH} , que é introduzido na teoria para fazer *convergente no limite no ultravioleta o vértice maximamente cruzado em duas dimensões*. A introdução deste corte nesta dimensionalidade tem a função de tornar finita a teoria. Em 3 dimensões, entretanto, isto não se faz mais necessário; a teoria é convergente e a presença de L_{TH} é discutível. Portanto, esta dimensionalidade é especial, no sentido que ela permite indiscutivelmente ir além da aproximação semiclássica neste problema de universalidade em presença de campo.

No ultimo capítulo, estudamos o modelo de Wegner [13] em presença do campo magnético. A primeira parte é reservada à derivação dos diagramas até ordem $1/N$ para a magnetocondutividade, numa topologia que permite comparação imediata com as expansões perturbativas usuais para um modelo de centros espalhadores desordenados. Os diagramas que aparecem estão colocadas na Fig.(4.12). No limite de campo fraco, onde não consideramos os efeitos de anisotropia para o tensor magnetocondutividade, toda a influência do campo magnético está colocada nos vértices dos diagramas em questão. Desta forma, se utilizamos a fórmula de Abrikosov, do conjunto inicial de diagramas, a correção em ordem $1/N$ para a magnetocondutividade se reduz à contribuição relacionada sómente ao vértice "maximamente cruzado". Assim, calculado $\Delta\sigma(H)$ (ver equação (4.33)) podemos dizer que: *o campo magnético suprime a divergencia no limite infravermelha com a presença de um termo ω_c^2 no vértice* em 3 dimensões para correções em ordem $1/N$ à magnetocondutividade do modelo de Wegner. Isto corrobora a interpretação [17] que o campo altera substancialmente a transição de localização.

Uma ultima palavra deve ser dita a respeito do método de cálculo [6] utilizado por nós para incluir o campo magnético. Ele permite incluir desde o princípio o campo magnético, controlando passo a passo as modificações no problema relacionado com a existencia do campo. Em particular, se vamos além da aproximação semiclássica (ver Capítulo tres), obtemos efeitos de anisotropia que aparece como resultado da soma sobre os níveis de Landau dos propagadores que estão conectados ao vértice maximamente cruzado. No entanto,

o efeito fundamentalmente do campo magnético está colocado no próprio vértice cruzado. Desta maneira, no limite de campo fraco, os efeitos de anisotropia podem ser desprezados. Por outro lado, podemos notar que nesta abordagem, recuperamos naturalmente o limite de campo nulo tomando $H = 0$ e portanto $\omega_c = 0$, enquanto na aproximação semiclássica usual [22], não é evidente como recuperar este limite.

Referências

- [1] HIKAMI, S., LARKIN, A. I., NAGAOKA, Y. Prog. Theor. Phys., **63**, 707, 1980.
- [2] FUKUYAMA, H. J. Phys. Soc. Jpn., **50**, 3562, 1981.
- [3] BHATT, R. N., RAMAKRISHNAN, T. V. Physica **109/110B**, 2078, 1982.
- [4] WOLFLE, P., BHATT, R. N. Phys. Rev. B, **30**, 3542, 1984.
- [5] RAINER, D., BERGMANN, G. Phys. Rev. B, **32**, 3522, 1985.
- [6] THEUMANN, A., MAGALHÃES, S. G. Phys. Rev. B, **39**, 5798, 1989.
- [7] LANDAU, L. D., LIFSHITZ, E. M. Quantum Mechanics. London: Pergamon, 1959.
- [8] ABRIKOSOV, A. A., GORKOV, L. P., DZIALOSHINSKI, I. E. Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1963.
- [9] GRADSHTEYN, I. S., RYZHIK, I. M. (Eds.) TABLE of Integrals, Series and Products. New York: Academic, 1965.
- [10] HOUGHTON, A., SENNA, J. R., YING, S. C. Phys. Rev. B, **25**, 2196, 1982.
- [11] ALTSHULER, B. L., KHMELNITZKII, D., LARKIN, A. I., LEE, P. A. Phys. Rev. B, **22**, 5142, 1980.
- [12] BERGMANN, G. Phys. Rep., **107**, 1, 1984.

- [13] WEGNER, F. J. Phys. Rev. B, **19**, 783, 1979.
- [14] MA, M., FRADKIN, E. Phys. Rev. B, **28**, 2990, 1983.
- [15] OPPERMANN, R., WEGNER, F. Z. Physik B **34**, 327, 1979.
- [16] ABRAHAMAS, E. , ANDERSON, P. W., LICCIARDELO, D. C.
RAMAKRISHNAN, T. V. Phys. Rev. Lett., **42**, 673, 1979.
- [17] HOUGHTON, A., MACKANE, A. J., CERDEIRA, H. J. Stat. Phys., **48**,
81, 1987.
- [18] SHAPIRO, B. Phyl. Mag. B **50**, 241, 1984.
- [19] THOULESS, D. J. Phys. Rep. **67**, 5, 1980.
- [20] LEE, P., RAMAKRISHNAN, T. V. Rev. Mod. Phys., **52**, 287, 1985.
- [21] ALTSHULER, B. L. , ARONOV, A. G. Electron-Electron Interaction in Di-
sordered Systems, IN: EFROS, A. L., POLLACK, M. (Eds.) Amsterdam:
North-Holland, 1985.
- [22] ALTSHULER, B. L., ARONOV, A. G., LARKIN, A. I. et al. Sov. Phys.,
JETP, **54**, 411, 1981.
- [23] VOLHARDT, D., WOLFLE, P. Phys. Rev. B, **22**, 4666, 1980.
- [24] THEUMANN, A., IDIART, M. A. J. Phys. C, **3**, 3765, 1991.
- [25] FRADKIN, E. Interactions And Localization in a Disordered Electron
Gas. IN: Les Houches, Session XXXIX-Recent Advances in Field Theory
and Statistical Mechanics. Les Houche: Elseviers, 1984. p.527
- [26] MALEEV, S. V., TOPERVERG, B. V. Sov. Phys. JETP, **42**, 734, 1976.
- [27] GINZBURG, S. L. Sov. Phys. Solid State, **16**, 5, 1974.

[28] E'LIASHBERG, G. M. Sov. Phys. JETP, **14**, 866, 1962.

[29] MAGALHÃES, S. G., THEUMANN, A. Phys. Rev. B, **47**, 7572, 1993.