

UNIVERSIDAD DE CHILE



3 5601 20226 0539



RESISTIVIDAD RESIDUAL
DE PAREDES DE BLOCH

Guillermo Cabrera

Departamento de Física
Facultad de Ciencias
Universidad de Chile
1971

FC

r



§1. INTRODUCCION

Mucho interés ha despertado el estudio de la resistividad eléctrica de materiales ferromagnéticos a bajas temperaturas.

White & Woods (1958) encontraron que la resistividad eléctrica ρ para el Fe, Co & Ni variaba como T^2 para temperaturas bajo 10°K ; i. e.,

$$(1.1) \quad \rho(T) = \beta T^2$$

Kondorsky, Galkina & Tchernikova (1958) también encontraron la misma dependencia para Fe & Ni bajo los 30°K , pero los coeficientes β resultaron tres veces mayores, tal vez porque sus muestras eran menos puras que las usadas por W & W.

En trabajos posteriores de Semenenko & Sudovtsov (1962) y de Taylor, Isin & Coleman (1968) se encuentra una dependencia lineal de la resistividad con la temperatura, bajo 4°K , en adición al término cuadrático. Resumimos este resultado por:

$$(1.2) \quad \rho(T) = \rho_0 + \alpha T + \beta T^2, \quad 1^\circ \leq T \leq 4,2^\circ \text{K}$$

Sin embargo el coeficiente α medido por Taylor et al resulta ser un orden de magnitud mayor que el medido por Semenenko y Sudovtsov, mientras que el coeficiente β es apreciablemente menor en la medición posterior. Taylor et al atribuyen estas diferencias a la mayor pureza de sus muestras y a un mejor control de la estructura de dominios.

Damos a continuación una tabla que resume ambos experimentos.

Ref.	Metal	Campo Magnético \underline{H} (Oe) (#)	α $\mu\Omega \text{ cm}/^\circ\text{K}$	β $\mu\Omega \text{ cm}/^\circ\text{K}^2$
S & S (1962)	Fe	0	$3,0 \cdot 10^{-5}$	$1,07 \cdot 10^{-5}$
S & S (1962)	Fe	850	$1,85 \cdot 10^{-5}$	$1,60 \cdot 10^{-5}$
TI & C (1968)	Fe	0	$8,2 \cdot 10^{-4}$	$< 10^{-6}$
TI & C (1968)	Fe	1200	$2,14 \cdot 10^{-4}$	$< 10^{-6}$

El comportamiento tipo $\alpha T + \beta T^2 + \rho_0$ bajo 4°K está de acuerdo cuantitativamente con los trabajos de Vonsovski (1955) y Turov (1955, 1958) sobre la interacción magnón - electrón debida al acoplamiento spin - órbita. Sin embargo el coeficiente α predicho por la teoría es algo menor que el encontrado experimentalmente.

El comportamiento cuadrático se debe a que bajo el punto de Curie las ondas de spin (magnones) interactúan con los electrones de conducción a través del mecanismo de intercambio s - d. Esto fue ampliamente estudiado por Vonsovski (1955), Turov (1955, 1958, 1960), Kasuya (1956) y Mannari (1959).

Un problema aún no estudiado, y sugerido por los experimentos de Taylor et al (1968) y de Beitchman, Trussel & Coleman (1970), es ver como depende la resistividad eléctrica de la estructura de dominios; explícitamente como contribuyen a la resistividad los procesos de scattering de los electrones de conducción en las paredes de Bloch.

El objeto de este trabajo es estimar la resistividad residual debida al scattering elástico de los electrones de conducción con una pared de

La medición con $\underline{H} = 0$ corresponde a la estructura de dominio de flujo cerrado, mientras que $\underline{H} \neq 0$ corresponde a un estado parcialmente saturado.

Bloch estática, de 180° .

Con respecto a las paredes de Bloch, un problema ya resuelto es el cálculo del factor de transmisión de la pared para ondas de spin de vector de onda perpendicular a ella. Hartmann - Boutron (1961) encontró que la pared es prácticamente transparente, cualquiera que sea la energía de la onda de spin incidente; aunque posteriormente Pick & Saint - James (1962) demostraron que esto era una propiedad del potencial particular supuesto. Damos estas referencias con propósitos ilustrativos solamente.

Para nuestro problema, el tratamiento que damos aquí sólo considera los efectos debidos a la pared de Bloch. Suponemos que los demás efectos se superponen en la resistividad mediante la regla de Matthiessen (Ziman, 1963), que daremos por cierta a bajas temperaturas.

La sección § 2 está dedicada al estudio de la distribución de las direcciones de la magnetización en la pared de Bloch, para un cristal uniaxial. Se sigue esencialmente las ideas propuestas por Landau & Lifshitz (1935) para spines localizados.

En la sección § 3 se plantea el Hamiltoniano del problema en términos de segunda cuantización. Se propone una separación no trivial del mismo en una parte libre \mathcal{H}_0 y una parte perturbativa \mathcal{H}_1 y se diagonaliza \mathcal{H}_0 con una elección adecuada de los campos fermiónicos $\psi_{(\underline{n})}$ & $\psi_{(\underline{n})}^+$ que corresponden a la primera aproximación de Born.

En la sección § 4 se discute la validez de dicha aproximación y se calcula las probabilidades de transición para los distintos procesos de scattering mediante la regla de oro de Fermi. En el apéndice IV se analiza la equivalencia entre esta regla y la primera aproximación de Born mediante la matriz S de scattering.

La sección § 5 trata de teoría de transporte propiamente tal. Para encontrar la función de distribución se emplea un método basado en el balance de momentum (balance detallado), que resulta más conveniente que el método que usa tiempo de relajación. Finalmente se estima la conductividad en términos del camino libre medio.

Los resultados se discuten en el párrafo § 6, donde además se propone una extensión del presente trabajo que actualmente se encuentra en estado avanzado. Se finaliza sugiriendo un posible experimento sobre el tema.

§2 DOMINIOS FERROMAGNETICOS Y PAREDES DE BLOCH

En 1907, P. Weiss fue capaz de explicar los aspectos esenciales del ferromagnetismo mediante dos hipótesis:

- i) la postulación de la existencia de un campo molecular sumamente intenso en los materiales ferromagnéticos, llamado campo de Weiss, que tiende a alinear los momentos magnéticos de los electrones poniéndolos paralelos uno al otro.
- ii) Postuló la existencia de una estructura de dominios ferromagnéticos. Estos fueron caracterizados como pequeñas regiones dentro de las cuales la magnetización local está saturada y sus direcciones en los diferentes dominios no son necesariamente paralelas.
- i) La magnitud del campo de Weiss puede estimarse en el punto de Curie, donde se destruye el ferromagnetismo. En este punto la energía térmica del electrón, $k_B T_C$ (donde T_C es la temperatura de Curie) es del orden de magnitud de la energía de interacción $\mu_B H_W$ del momento magnético del electrón con el campo molecular.

$$k_B T_C \sim \mu_B H_W, \text{ i.e.;} \quad H_W \sim k_B T_C / \mu_B$$

$$\mu_B = 0.9 \cdot 10^{-20} \text{ erg gauss}^{-1} \text{ (magnetón de Bohr)}$$

$$T_C = 1043^\circ\text{K para hierro (temperatura de Curie)}$$

$$k_B = 1.38 \times 10^{-16} \text{ erg}^\circ\text{K}^{-1} \text{ (cte. de Boltzmann)}$$

De aquí resulta:

$$H_W \sim 10^7 \text{ [oe]}$$

En 1928, el campo molecular de Weiss es interpretado por Heisenberg y Frenkel (independientemente) como un efecto de intercambio cuantomecánico.

Heisenberg planteó el siguiente potencial de intercambio:

$$(2.1) \quad V_I = - 2 \sum'_{i,k} J_{ik} \underline{S}_i \cdot \underline{S}_k$$

donde \sum' significa suma sobre los vecinos más cercanos.

J_{ik} es la integral de intercambio definida por:

$$(2.2) \quad J_{ik} = \int d^3r_1 d^3r_2 \varphi_i^*(r_1) \varphi_k^*(r_2) \cdot V(r_1 - r_2) \varphi_i(r_2) \varphi_k(r_1),$$

donde $\varphi_i(r)$ es la parte orbital de la función de onda del electrón i - ésimo.

El potencial V_I de (2.1) nos describe un acoplamiento de los spines de los electrones. Este es un efecto puramente cuántico que proviene de la antisimetría de la función de onda total.

Si $J_{ik} > 0$ se dice que el sistema es ferromagnético. En este caso \underline{S}_i tenderá a ser paralelo a \underline{S}_k para minimizar el potencial (2.1) (#)

En el Apéndice I se analiza en detalle el efecto de intercambio, para un

(#) La definición aquí dada no es rigurosamente cierta. Para más información ver J.H. Van Vleck (1947).

sistema con dos electrones y después se generaliza el método para un cristal ferromagnético.

ii) Landau y Lifshitz (1935) pusieron en relieve que la estructura de dominios es un efecto de superficie que minimiza la energía magnética, "evitando" que haya polos superficiales.

Esencialmente son dos los procesos que se superponen en esta minimización:

a) la formación de dominios largos y delgados

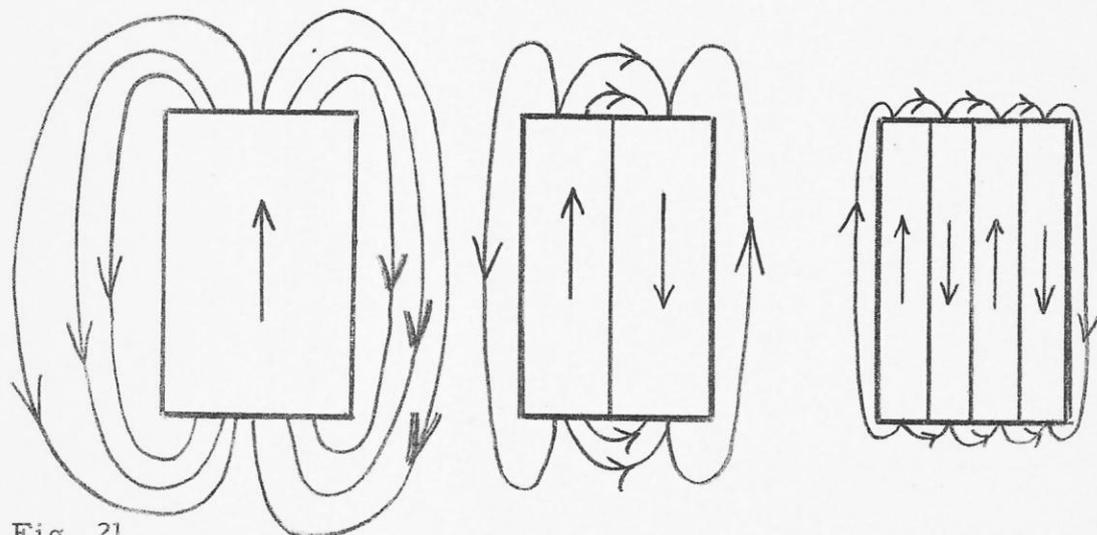


Fig. 2.1

b) los dominios se disponen de tal manera que la componente normal de la magnetización M sea continua a través del límite entre dominios y no haya polos superficiales.

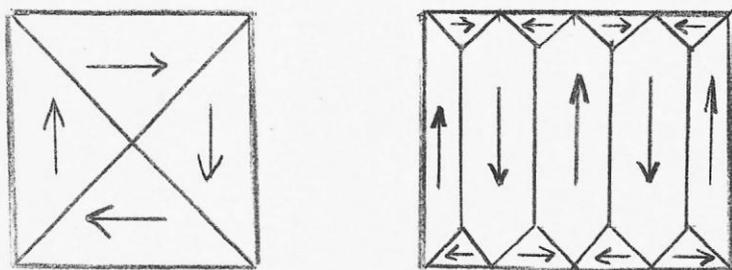


Fig. 2.2

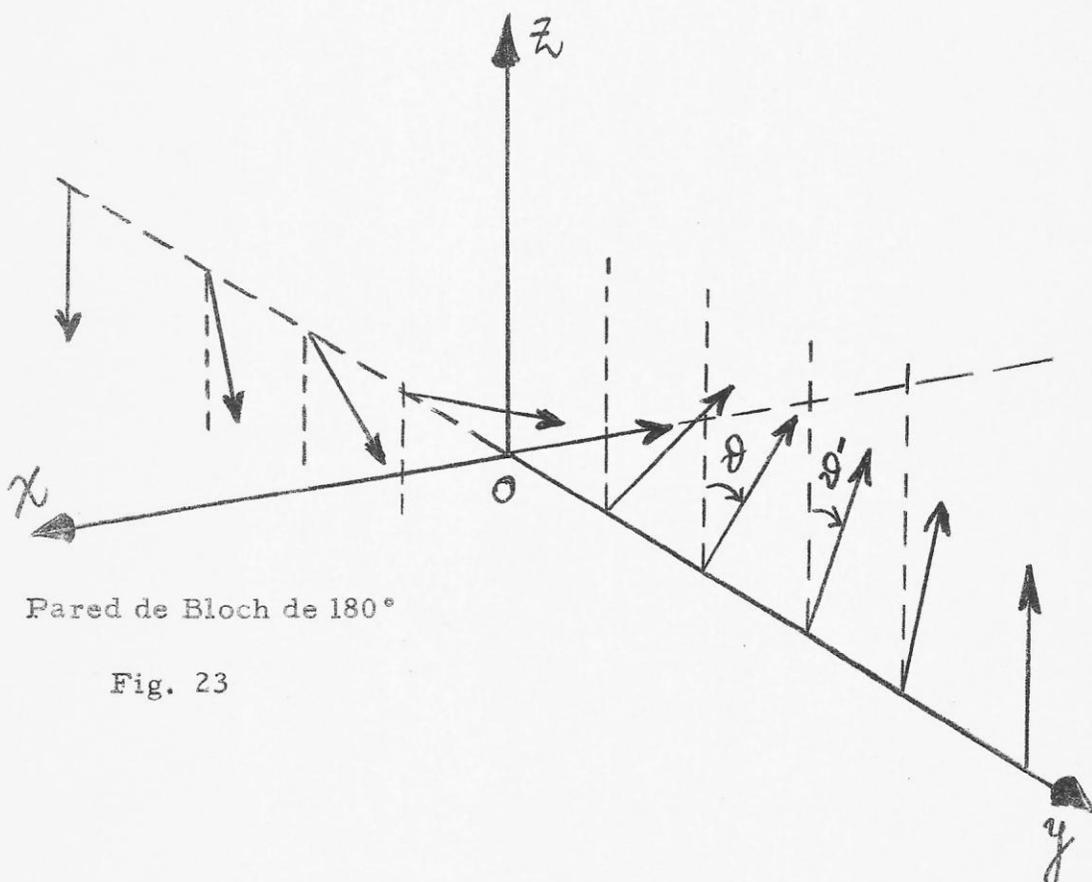
Landau & Lifshitz señalan que la existencia de estos dominios se debe solamente al efecto desmagnetizante de la superficie. El número y ta-

maño de los dominios queda determinado por las dimensiones del cuerpo.

De un dominio a otro la magnetización no cambia abruptamente de dirección. Vamos a ver que la disposición que minimiza la energía es una transición continua en la dirección de la magnetización local. Esto es lo que se llama una pared de Bloch.

El proceso de subdivisión en dominios continúa hasta que la energía necesaria para establecer una pared de Bloch es mayor que la reducción en energía a causa de una división más fina.

Nosotros analizaremos el caso de un cristal ferromagnético uniaxial (con un eje de fácil magnetización) y nos limitaremos a una pared de Bloch de 180° (aquella donde la magnetización cambia en 180°)



Como las fuerzas de intercambio de Heisenberg favorecen el alineamiento paralelo o antiparalelo de los spines, puede verse entonces que hay

una cierta energía asociada a la pared.

En la formación de los dominios es también importante la llamada energía de anisotropía que proviene de la existencia de un eje de fácil magnetización. Experimentalmente se sabe que requiere mucha más energía saturar una muestra según cualquier eje que según el eje de fácil magnetización.

El potencial de intercambio de Heisenberg $V_H = -2J \underline{S}_i \cdot \underline{S}_j$, no exhibe ninguna anisotropía, pues sólo depende de la orientación relativa de los spines \underline{S}_i y \underline{S}_j . Esto ya no sucede si agregamos un potencial debido a acoplamiento dipolar del tipo:

$$(2.3) \quad V_{DP} = C_{ij} \left\{ \underline{S}_i \cdot \underline{S}_j - \frac{3(\underline{S}_i \cdot \underline{r}_{ij})(\underline{S}_j \cdot \underline{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right\}$$

Asimismo podemos agregar un potencial cuadrupolar:

$$(2.4) \quad V_{ij} = D_{ij} (\underline{S}_i \cdot \underline{r}_{ij})^2 (\underline{S}_j \cdot \underline{r}_{ij})^2 \quad (\#)$$

donde $\underline{r}_{ij} \equiv \underline{r}_i - \underline{r}_j$, \underline{r}_i = vector posición del electrón i .

En el citado artículo de Van Vleck (1939) se discute exhaustivamente

(#) La anisotropía puede aparecer además como un efecto de la combinación del campo cristalino y el acoplamiento spin - órbita ("M. Greene's Lectures on Ferromagnetism")

el origen de la anisotropía ferromagnética y de si los potenciales (2.3) & (2.4) dan cuenta de ella. Por ahora digamos solamente que para una pared de Bloch de 180° con el eje Z como eje de fácil magnetización, la energía de anisotropía por unidad de volumen está dada por:

$$(2.5) \quad \frac{1}{2} \beta (S_x^2 + S_y^2)$$

donde \underline{S} es la magnetización local.

Llamamos $\vartheta = \vartheta(y)$ al ángulo formado por la magnetización y el eje Z de fácil magnetización.

$\vartheta = \vartheta(y)$ es una función desconocida del eje y. Haciendo aproximación del continuo y considerando los spines como vectores clásicos escribiremos la energía de intercambio en función de los cosenos directores y encontraremos la energía del estado base minimizando el Hamiltoniano (que tiene una parte de anisotropía y otra de intercambio)

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A + \mathcal{H}_I) \quad \text{con respecto a } \vartheta.$$

Esto nos dará automáticamente la función $\vartheta = \vartheta(y)$ para el estado base.

Para la energía de intercambio ponemos:

$$(2.6) \quad \mathcal{H}_I = -2J \sum_{i, \delta} \underline{S}_i \cdot \underline{S}_{i+\delta} = -2JS^2 \sum_{i, \delta} \cos \varphi_{i, \delta}$$

donde la suma sobre δ representa suma sobre los vecinos más cercanos;

$\varphi_{i, \delta}$ es el ángulo que forman los spines \underline{S}_i & $\underline{S}_{i+\delta}$.

Para ángulos pequeños usaremos desarrollo de Taylor:

$$(2.7) \quad \cos \varphi_{i,\underline{\delta}} = 1 - \frac{1}{2} \varphi_{i,\underline{\delta}}^2 + \dots$$

Expresando $\varphi_{i,\underline{\delta}}$ en función de los cosenos directores $(\alpha_i^1, \alpha_i^2, \alpha_i^3)$ del spin \underline{S}_i y desarrollando en serie de Taylor (en $\underline{\delta}$) $\alpha_{i+\underline{\delta}}$ se obtiene expresión:

$$(2.8) \quad \mathcal{H}_I = -2JNS^2 - 2a^2JS^2 \sum_i (\underline{\alpha}_i \cdot \nabla^2 \underline{\alpha}_i)$$

con a parámetro de la red, $\underline{\alpha}_i \equiv (\alpha_i^1, \alpha_i^2, \alpha_i^3)$

N es el número total de átomos en la red

La expresión (2.10) puede ponerse en otra forma más útil:

(Los detalles están en el Apéndice II)

$$(2.9) \quad \mathcal{H}_I = -2JNS^2 + 2a^2JS^2 \sum_i \left\{ (\nabla \alpha_i^1)^2 + (\nabla \alpha_i^2)^2 + (\nabla \alpha_i^3)^2 \right\}$$

Para el hamiltoniano total tendremos:

$$(2.10) \quad \mathcal{H} = -2JNS^2 + 2a^2JS^2 \sum_i \left\{ (\nabla \alpha_i^1)^2 + (\nabla \alpha_i^2)^2 + (\nabla \alpha_i^3)^2 \right\} + \frac{1}{2} \beta \sum_i \left\{ (S_x^i)^2 + (S_y^i)^2 \right\}$$

Para el caso de anisotropía uniaxial (eje Z)

$$\alpha_i^1 = \sin \vartheta_i ; \quad \alpha_i^2 = 0 ; \quad \alpha_i^3 = \cos \vartheta_i$$

Luego

$$(\nabla \alpha_i^1)^2 + (\nabla \alpha_i^3)^2 = \sin^2 \vartheta_i \left(\frac{d\vartheta_i}{dy} \right)^2 + \cos^2 \vartheta_i \left(\frac{d\vartheta_i}{dy} \right)^2 = \left(\frac{d\vartheta_i}{dy} \right)^2$$

Luego para el caso continuo y omitiendo el término constante tenemos:

$$(2.11) \quad \mathcal{H} = 2a^2 \gamma S^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left(\frac{d\vartheta}{dy} \right)^2 + \frac{1}{2} \beta \int_{-\infty}^{+\infty} dy S^2 \sin^2 \vartheta$$

Al Poner límites $-\infty$ & $+\infty$ en las integrales de (2.11) se ha tenido en cuenta el hecho experimental (justificable teóricamente) de que las dimensiones de un dominio son mucho más grandes que el grosor medio de una pared de Bloch. Al minimizar (2.11) hay que tener en cuenta las condiciones de borde:

$$(2.12)a \quad \vartheta(-\infty) = \pi, \quad \vartheta(+\infty) = 0$$

y además hay que imponer que la función $\vartheta(y)$ no dependa de y al alejarse mucho de la pared, i. e;

$$(2.12)b \quad \frac{d\vartheta}{dy} (\pm\infty) = 0$$

Sea

$$2a^2 \gamma \equiv \frac{1}{2} \delta$$

Tenemos entonces

$$0 = \delta \mathcal{H} = \int_{-\infty}^{+\infty} dy \left\{ \delta S^2 \left(\frac{d\vartheta}{dy} \right) \delta \left(\frac{d\vartheta}{dy} \right) + \beta S^2 \sin \vartheta \cos \vartheta \delta \vartheta \right\}$$

pero

$$\left(\frac{d\vartheta}{dy} \right) \delta \left(\frac{d\vartheta}{dy} \right) = \left(\frac{d\vartheta}{dy} \right) \left(\frac{d}{dy} \delta \vartheta \right) = \frac{d}{dy} (\vartheta' \delta \vartheta) - \frac{d^2 \vartheta}{dy^2} \delta \vartheta$$

con

$$\vartheta' \equiv \frac{d\vartheta}{dy}$$

Integrando por partes e imponiendo la condición de borde (2.12)b

obtenemos:

(2.13)

$$\gamma S^2 \frac{d^2\vartheta}{dy^2} = \beta S^2 \operatorname{sen} \vartheta \cos \vartheta$$

Multiplicando por $\frac{d\vartheta}{dy}$ e integrando

(2.14)

$$\gamma \left(\frac{d\vartheta}{dy} \right)^2 - \beta \operatorname{sen}^2 \vartheta = \underline{\text{cte.}}$$

evaluamos la cte de (2.14) con las condiciones (2.12):

$$\underline{\text{cte}} = 0$$

de donde

(2.15)

$$\frac{1}{2} \gamma \left(\frac{d\vartheta}{dy} \right)^2 = \frac{1}{2} \beta \operatorname{sen}^2 \vartheta$$

La relación (2.15) nos muestra que la situación que hace mínima el hamiltoniano \mathcal{H} es aquella donde la densidad de energía de intercambio es igual a la densidad de anisotropía en todo punto de la pared.

De (2.15) obtenemos:

$$(2.16) \quad \frac{d\vartheta}{dy} = \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{1/2} \operatorname{sen} \vartheta(y)$$

Haciendo el cambio de variables $x = \cos \vartheta$, e integrando con la condición de borde

$$\vartheta(y) \Big|_{y=0} = \pi/2$$

se llega a la expresión

$$(2.17) \quad x = \cos \vartheta = + \operatorname{tanh} \sqrt{\frac{\beta}{\gamma}} y$$

El signo (+) de la expresión (2.17) es asegurada por las condiciones de borde del problema.

La relación (2.17) nos da la distribución de los momentos magnéticos en la pared para la situación de equilibrio.

Esta relación es equivalente a:

$$\operatorname{sen} \vartheta = 1 / \cosh \left(y \sqrt{\frac{\beta}{\gamma}} \right)$$

si ponemos

$$\sqrt{\frac{\beta}{\gamma}} \equiv 1/\lambda$$

tendremos

$$(2.18) \quad \text{sen } \vartheta = 1 / \cosh (y / \lambda) ;$$

$$\vartheta(y) = \text{Arcsen} \left\{ 1 / \cosh (y / \lambda) \right\}$$

El parámetro λ nos da el ancho medio de la pared de Bloch.

Esta longitud fundamental $\lambda = \left(\frac{\gamma}{\beta} \right)^{1/2}$ es del orden de 2.3×10^{-6} cm en Fe, i.e., aproximadamente 70 constantes de la red (Kittel k Galt, 1956). En este mismo artículo (pág. 483) se estima el ancho aproximado de un dominio que resulta ser del orden de 10^{-3} cm. para un cristal con $L = 1$ cm como muestra la fig. 24.

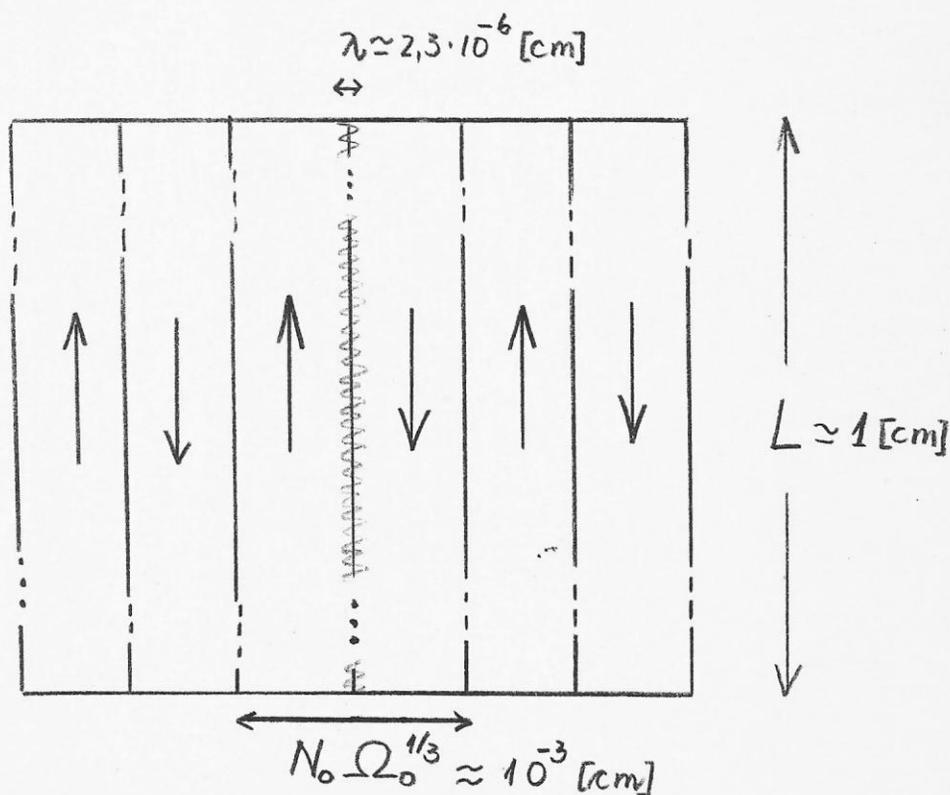


Fig. 2.4

Por último hagamos notar que la forma y tamaño de los dominios ferromagnéticos, como dijimos antes, no son propiedades constantes y fundamentales del ferromagnetismo si no que dependen de la forma y tamaño del cuerpo así como de las dimensiones y orientaciones de la superficie de los cristales, de la tensión e intensidad del campo magnético.

3. HAMILTONIANO DEL PROBLEMA

El tratamiento que haremos sólo considera efectos debidos a la pared de Bloch. Nos interesa por ahora el caso de scattering elástico (a temperatura $T \sim 0^\circ\text{K}$) de los electrones de conducción con la pared. Todo otro tipo de interacción (como ser creación de fonones o interacción con impurezas) aparece en la resistividad mediante la regla de Matthiessen, (Ziman, 1963) que supondremos se cumple con buena aproximación.

Nuestro hamiltoniano lo separaremos en dos partes:

$$(3.1) \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

En \mathcal{H}_0 incluiremos, además de la energía cinética, una "pared" con transición abrupta.

\mathcal{H}_1 será la perturbación que sumada a \mathcal{H}_0 nos dará el efecto real de la pared de Bloch.

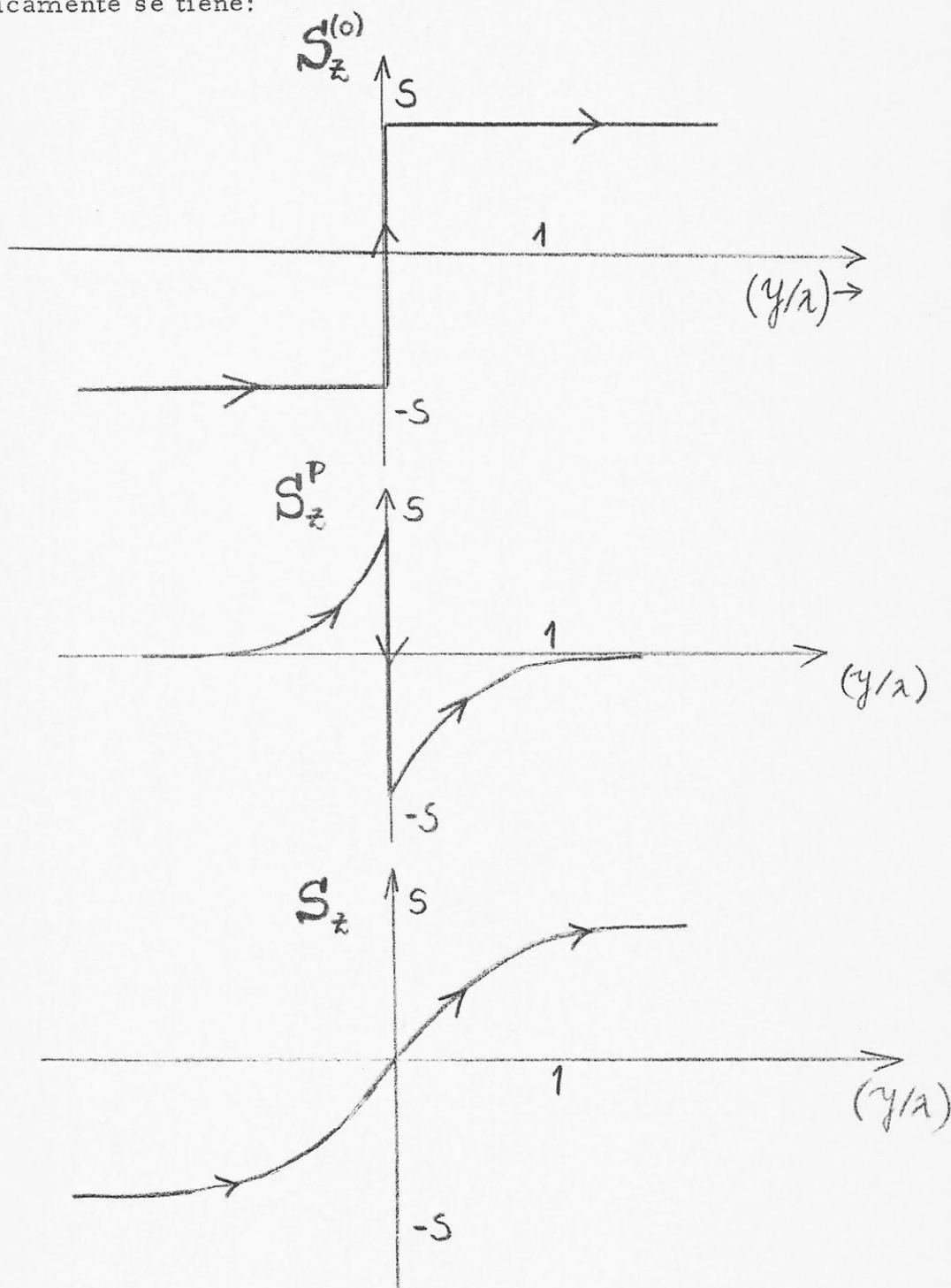
Para el spin pondremos:

$$(3.2) \quad \underline{S}(y) = \underline{S}^{(0)}(y) + \underline{S}^{(P)}(y)$$

donde $\underline{S}^{(0)}(y)$ será:

$$(3.3) \quad \underline{S}^{(0)}(y) = \begin{cases} S \hat{z} & \text{si } y > 0 \\ -S \hat{z} & \text{si } y < 0 \end{cases} \equiv \epsilon(y) S \hat{z}$$

Gráficamente se tiene:



Para el hamiltoniano total tendremos entonces

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

Expresando el hamiltoniano mediante el formalismo de 2^{da} cuanti-

\downarrow

$$(3.4) \quad \mathcal{H}_0 = \int d^3\tilde{r} \psi^\dagger(\tilde{r}) \left(-\frac{1}{2m^*} \nabla^2 \right) \psi(\tilde{r}) - \\ - \int d^3\tilde{r} \psi^\dagger(\tilde{r}) \sum_j \tilde{S}_j^{(0)} \cdot \underline{\sigma} \psi(\tilde{r}) \mathcal{J}(\tilde{r} - \tilde{R}_j)$$

$$(3.5) \quad \mathcal{H}_1 = - \int d^3\tilde{r} \psi^\dagger(\tilde{r}) \sum_j (\tilde{S}_j - \tilde{S}_j^{(0)}) \mathcal{J}(\tilde{r} - \tilde{R}_j) \cdot \psi(\tilde{r})$$

Donde la suma sobre j significa suma sobre todas las posiciones de los átomos en la red cristalina;

$\mathcal{J}(\tilde{r} - \tilde{R}_j)$ es la integral de intercambio entre los electrones

3d ligados al átomo y los electrones de conducción.

$\underline{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ son las matrices de Pauli y $\psi(\tilde{r})$ & $\psi^\dagger(\tilde{r})$ son el campo fermiónico y su hermético conjugado:

$$(3.6) \quad \psi(\tilde{r}) = \sum_{\tilde{k}, \mu} \varphi_{\tilde{k}}(\tilde{r}) \chi_{(y)}^\mu c_{\tilde{k}, \mu}$$

Con la elección de los spinores:

$$(3.7) \quad \mu = a, b; \quad \chi_{(y)}^{a,b} = \begin{cases} \chi^{\uparrow, \downarrow} & \text{si } y > 0 \\ \chi^{\downarrow, \uparrow} & \text{si } y < 0 \end{cases}; \quad \chi^\uparrow = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \chi^\downarrow = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

i-e, \underline{a} significa paralelo a $\underline{S}^{(0)}$
 y \underline{b} significa antiparalelo a $\underline{S}^{(0)}$

$C_{\underline{k}\mu}$ es el operador de destrucción de fermiones de vector
 de onda \underline{k} y spin μ .

Como primera aproximación de Born (aproximación de orden cero en
 las funciones de onda $\varphi_{\underline{k}}(\underline{r})$) tomamos ondas planas normalizadas
 en un volumen V como $\varphi_{\underline{k}}(\underline{r})$

$$(3.8) \quad \varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \frac{e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}}}{\sqrt{V}}$$

Sabemos por § 2 que la función $\mathcal{J}(\underline{r}-\underline{R}_j)$ es bastante locali-
 zada. Ponemos entonces:

$$(3.9) \quad \mathcal{J}(\underline{r}-\underline{R}_j) = \mathcal{J} \delta_{\underline{r}, \underline{R}_j}$$

donde $\delta_{\underline{r}, \underline{R}_j}$ es la función delta de Krönecker. En el límite
 continuo escribiremos:

$$(3.10) \quad \mathcal{J}(\underline{r}-\underline{R}_j) = \mathcal{J} \frac{V}{N} \delta^{(3)}(\underline{r}-\underline{R}_j) \equiv \mathcal{J} \Omega_0 \delta^{(3)}(\underline{r}-\underline{R}_j)$$

donde $\Omega_0 \equiv \frac{V}{N}$, $\delta^{(3)}(\underline{r}-\underline{R}_j)$ es la función delta
 de Dirac.

Queremos expresar \mathcal{H}_0 & \mathcal{H}_1 en término de los operadores

$C_{\underline{k}} C_{\underline{k}}^+$ de destrucción y creación de electrones. El detalle del cálculo está en el apéndice III. El resultado es el siguiente:

$$(3.11) \quad \mathcal{H}_0 = \sum_{\underline{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \left(C_{\underline{k}a}^+ C_{\underline{k}a} + C_{\underline{k}b}^+ C_{\underline{k}b} \right) - JS \sum_{\underline{k}} \left(C_{\underline{k}a}^+ C_{\underline{k}a} - C_{\underline{k}b}^+ C_{\underline{k}b} \right).$$

Para el caso ferromagnético $J > 0$, i-e, los electrones con spin paralelos a $\underline{S}^{(0)}$ disminuyen su energía en JS y los antiparalelos la aumentan en JS .

Para el hamiltoniano perturbativo \mathcal{H}_1 se tiene:

$$(3.12) \quad \mathcal{H}_1 = - \sum_{\substack{\underline{k}, \underline{k}' \\ \underline{k}, \underline{k}'}} A_{\underline{k} \underline{k}'} \left(C_{\underline{k}_\perp \underline{k}'_j a}^+ C_{\underline{k}_\perp \underline{k}'_j b} + C_{\underline{k}_\perp \underline{k}'_j b}^+ C_{\underline{k}_\perp \underline{k}'_j a} \right) - \sum_{\underline{k}, \underline{k}'} B_{\underline{k} \underline{k}'} \left(C_{\underline{k}_\perp \underline{k}'_j a}^+ C_{\underline{k}_\perp \underline{k}'_j a} - C_{\underline{k}_\perp \underline{k}'_j b}^+ C_{\underline{k}_\perp \underline{k}'_j b} \right).$$

donde $N_0 \equiv N^{1/3}$,

$$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{\beta}}$$

$$(3.13)a \quad A_{k'_j k_j} = \left(\frac{JS\pi\lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}} \right) \cdot \frac{1}{\cosh\left\{ (k'_j - k_j) \frac{\pi\lambda}{2} \right\}}$$

$$(3.13)b \quad B_{k'_j k_j} = \left(\frac{JS\pi\lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}} \right) \frac{1}{\pi} \left[\beta\left\{ i\frac{\lambda}{2}(k'_j - k_j) \right\} + \beta\left\{ -i\frac{\lambda}{2}(k'_j - k_j) \right\} \right]$$

donde β es la "función beta"

$$\beta(z) = \frac{1}{2} \left\{ \psi\left(\frac{z+1}{2}\right) - \psi\left(\frac{z}{2}\right) \right\}, \quad \text{con} \quad \psi(z) \equiv \frac{d}{dz} \ln \Gamma(z)$$

El hamiltoniano (3.11) contiene el conocido modelo de Stoner.

La aproximación que hemos hecho al escribir (3.11) es equivalente a decir que las ondas planas (3.8) son funciones propias del hamiltoniano \mathcal{H}_0 .

Conviene indicar además que la separación (3.1) del hamiltoniano total no es trivial, ya los elementos de matriz (3.13) divergen si \mathcal{H}_0 incluyera sólo la energía cinética de los electrones.

Luego, las separaciones (3.1) y (3.2) del hamiltoniano y del spin, además de hacer válida la teoría de perturbaciones (como se verá en § 4), llevan en si una cierta renormalización del problema.

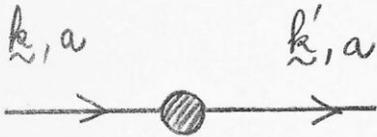
Los elementos de matriz relacionados con los procesos en los cuales cambia la dirección del spin relativa a la magnetización $S_j^{(0)}$ son los $A_{k'_j k_j}$ (sin embargo no cambia la dirección espacial).

§4. VALIDEZ DE TEORIA DE PERTURBACIONES

Por ahora nos interesa calcular las probabilidades de las transiciones posibles por scattering en la pared.

Los procesos posibles son los siguientes:

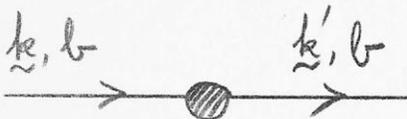
i)



ii)



iii)



iv)



Sea $\Gamma_{\substack{\underline{k} \rightarrow \underline{k}' \\ m \rightarrow m'}}$ ($m, m' = a, b$) la probabilidad de transición por unidad de tiempo del estado (\underline{k}, m) al estado (\underline{k}', m') . Usando la 1ra aproximación de Born obtenemos la expresión:

(4.1)

$$\Gamma_{\substack{\underline{k} \rightarrow \underline{k}' \\ m \rightarrow m'}} = 2\pi f_{\underline{k}, m} (1 - f_{\underline{k}', m'}) \delta(E_{\underline{k}', m'} - E_{\underline{k}, m}) \cdot \left| \langle \underline{k}', m' | \mathcal{V} | \underline{k}, m \rangle \right|^2$$

donde $(f_{\underline{k},m} \& f_{\underline{k}',m'})$ es la distribución de Fermi - Dirac para los electrones.

$f_{\underline{k},m}$ es la probabilidad de que el estado inicial esté ocupado y $(1 - f_{\underline{k}',m'})$ es la probabilidad de que el estado final esté desocupado.

La delta de Dirac $\delta(E_{\underline{k}',m'} - E_{\underline{k},m})$ nos asegura la conservación de la energía.

La expresión (4.1) llamada también regla de oro de Fermi, está analizada en detalle en el apéndice IV. Por ahora digamos que esta expresión aparece al aplicar teoría de perturbaciones en 1^{er} orden (i.e, poniendo $S^{(1)}$ por S como matriz de scattering).

Es bien conocido que esta aproximación es válida solamente si la diferencia entre las energías de los autoestados final e inicial de \mathcal{H}_0 (hamiltoniano libre) es grande comparada con la perturbación, i.e,

$$(4.2) \quad | E_f^{(0)} - E_i^{(0)} | \gg \langle \mathcal{H}_1 \rangle$$

En nuestro caso, mirando (3.11), para un proceso de scattering real se tendrá:

$$(4.3) \quad | E_f^{(0)} - E_i^{(0)} | \sim 2\mathcal{I}\mathcal{S}$$

Para la perturbación, en el peor de los casos, se tendrá en vista de (3.12):

$$(4.4) \quad \langle \mathcal{H}_1 \rangle \sim \pi JS \left(\frac{\lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}} \right)$$

De (4.4) vemos que la validez de nuestro tratamiento depende de la razón

$$\frac{\lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}}$$

Ahora bien, λ es el ancho medio de la pared de Bloch y $N_0 \Omega_0^{1/3}$, dada la forma en que se encontró la relación (2.18), debe interpretarse como el ancho medio de un dominio ferromagnético y como el camino libre medio mínimo de los electrones de conducción.

Para el caso considerado en la sección § 2 tenemos:

$$N_0 \Omega_0^{1/3} \sim 10^{-3} \text{ (cm)} \quad , \quad \lambda \sim 2,3 \cdot 10^{-6} \text{ (cm)}$$

De aquí:

$$(4.5) \quad \frac{\lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}} \sim 2,3 \cdot 10^{-3}$$

Así pues, en este proceso se tendrá:

$$(4.6) \quad \frac{\langle \mathcal{H}_1 \rangle}{|E_f^{(0)} - E_i^{(0)}|} \sim \left(\frac{\pi}{2} \right) \cdot 2,3 \cdot 10^{-3} \sim 3 \cdot 10^{-3}$$

Es importante hacer notar entonces, que en nuestro tratamiento

es crítico el tamaño finito de los dominios, lo cual pudo haberse adelantado tan sólo mirando la expresión (3.13).

Si nuestro dominio crece al infinito desaparece por completo la pared, ya que la formación de dominios es un efecto de superficies (ver sección § 2)

De la expresión (3.12) puede verse también, por la presencia de términos del tipo

$$C_{\underline{k}_\perp k'_y, a} + C_{\underline{k}_\perp k_y, b}, \dots$$

que los elementos de matriz sólo dependen de k_y' & k_y , lo cual implica que debe conservarse la componente perpendicular a la pared del vector de onda.

Es decir las únicas transiciones permitidas serán aquellas

$$\{\underline{k}_\perp, k_y; m\} \longrightarrow \{\underline{k}_\perp, k'_y; m'\} \quad \text{donde}$$

se conserva la energía.

Para fijar ideas supongamos que el estado inicial es del tipo (\underline{k}, a) .

Las probabilidades de transición por unidad de tiempo para los procesos:

$$\{\underline{k}; a\} \longrightarrow \{\underline{k}'; a\}, \quad \{\underline{k}; a\} \longrightarrow \{\underline{k}'; b\} \quad \text{son:}$$

$$(4.7) \quad \Gamma_{\substack{\{\underline{k}_\perp, k_y\} \rightarrow \{\underline{k}_\perp, k'_y\} \\ a \rightarrow b}} = 2\pi \left| A_{k'_y k_y} \right|^2 \cdot f_{\underline{k}, a}$$

$$\cdot (1 - f_{\underline{k}', b}) \delta(\epsilon_{\underline{k}, a} - \epsilon_{\underline{k}', b})$$

$$(4.7) \quad \Gamma_{\{k_x, k_y\} \rightarrow \{k'_x, k'_y\}}^{a \rightarrow a} = 2\pi \left| B_{k'_y k_y} \right|^2 \cdot f_{\underline{k}, a} \cdot (1 - f_{\underline{k}', a}) \delta(\epsilon_{\underline{k}, a} - \epsilon_{\underline{k}', a})$$

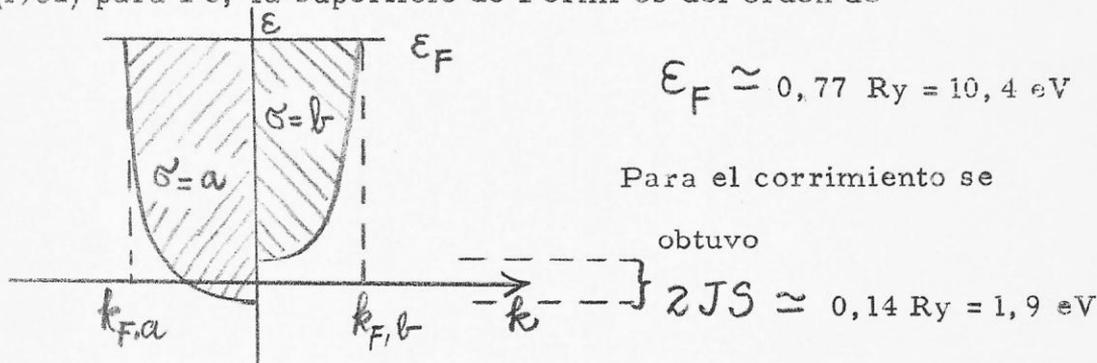
en unidades de \hbar , con

$$(4.8) \quad \epsilon_{\underline{k}, a} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_a^*} - JS \quad (\#)$$

$$\epsilon_{\underline{k}, b} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_b^*} + JS$$

donde $m_{a,b}^*$ es la masa efectiva de los electrones de conducción.

(#) En (4.8) vemos que hay un corrimiento en JS en la energía de los electrones dependiendo de su spin. Este corrimiento hace que $k_{Fa} \neq k_{Fb}$. Según cálculos realizados por J.H. Wood (1962) para Fe, la superficie de Fermi es del orden de



El corrimiento de energía para los electrones con spin \uparrow (up) con respecto a los con spin \downarrow (down) calculado por Wood (1962), resulta mucho mayor que el calculado en base al modelo de ondas planas y superficie de Fermi esférica. De ahora en adelante cambiaremos nuestro J (integral de intercambio), por un J (efectivo) que de cuenta del resultado más realista de Wood (ya que sus cálculos consideran las funciones de onda apropiadas y la estructura de bandas del hierro), pero nos quedamos con nuestro modelo mucho más cómodo para nuestros propósitos.

5. CONDUCTIVIDAD ELECTRICA Y SOLUCION A LA ECUACION DE BOLTZMANN SIN USAR TIEMPO DE RELAJACION

Nos interesa encontrar ahora la función de distribución de los electrones para el estado estacionario en presencia de la pared de Bloch.

Nuestra función de distribución $f_{\vec{k},\sigma}(\vec{r},t)$ representa la probabilidad de encontrar un electrón en el estado (\vec{k},σ) en la vecindad de \vec{r} en el tiempo t . En otras palabras, queremos resolver la ecuación de transporte de Boltzmann para nuestro problema.

Para la corriente eléctrica tendremos:

$$(5.1) \quad \vec{j} = \sum_{\sigma} \int d^3\vec{k} e \vec{v}_{\vec{k},\sigma} f_{\vec{k},\sigma}(\vec{r},t) \quad , \quad \sigma = a, b$$

donde e es la carga del electrón y

$$(5.2) \quad \vec{v}_{\vec{k},\sigma} = \frac{\partial E_{\vec{k},\sigma}}{\partial \vec{k}} = \nabla_{\vec{k}} E_{\vec{k},\sigma}$$

Elegimos nuestro sistema de coordenadas como lo indica la

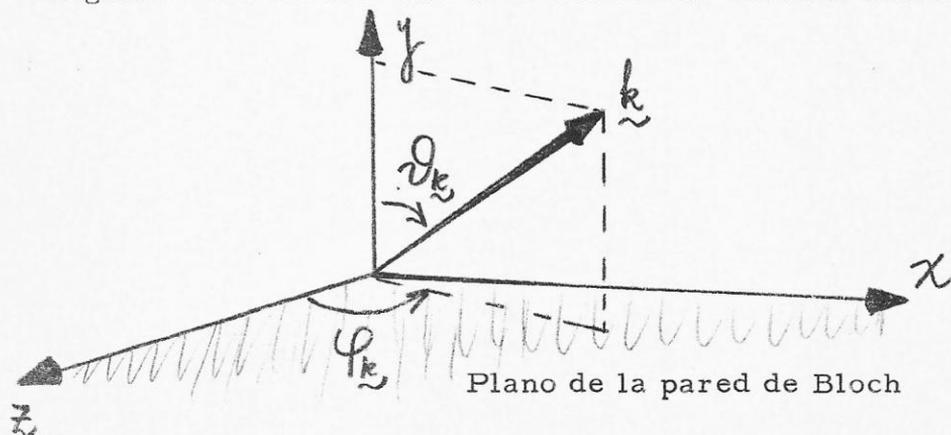


Fig. 5.1

Lo más general a nuestro alcance para plantear la solución de la ec. de Boltzmann es:

$$(5.3) \quad f_{\underline{k},\sigma} = f_{\underline{k},\sigma}^{(0)} + \left(\frac{df_{\underline{k},\sigma}^{(0)}}{d\varepsilon_{\underline{k},\sigma}} \right) \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l a_{lm}^m(\varepsilon_{\underline{k},\sigma}) Y_l^m(\vartheta_{\underline{k}}, \varphi_{\underline{k}})$$

donde $f_{\underline{k},\sigma}^{(0)} = \left\{ \exp(\varepsilon_{\underline{k},\sigma} - \zeta) \beta + 1 \right\}^{-1}$ es la distribución de Fermi - Dirac

con $\beta = (k_B T)^{-1}$

y $Y_l^m(\vartheta_{\underline{k}}, \varphi_{\underline{k}})$ son los armónicos esféricos

La relación (5.1) en coordenadas esféricas queda como:

$$(5.4) \quad J_x = \sum \int d^3 \underline{k} e f_{\underline{k},\sigma} v_{\underline{k},\sigma} \sin \vartheta_{\underline{k}} \sin \varphi_{\underline{k}}$$

$$J_y = \sum \int d^3 \underline{k} e f_{\underline{k},\sigma} v_{\underline{k},\sigma} \cos \vartheta_{\underline{k}}$$

$$J_z = \sum \int d^3 \underline{k} e f_{\underline{k},\sigma} v_{\underline{k},\sigma} \sin \vartheta_{\underline{k}} \cos \varphi_{\underline{k}}$$

con $v_{\underline{k},\sigma} = |v_{\underline{k},\sigma}|$

Pero tenemos las relaciones:

$$(5.5) \quad Y_1^0 = A \cos \vartheta_{\underline{k}} ; \quad Y_1^{\pm 1} = \mp B e^{\pm i \varphi_{\underline{k}}} \sin \vartheta_{\underline{k}}$$

donde A & B son ciertas constantes de normalización

Luego:

$$(5.6) \quad \cos \vartheta_{\underline{k}} = \frac{1}{A} Y_1^0(\vartheta_{\underline{k}}, \varphi_{\underline{k}})$$

$$\sin \vartheta_{\underline{k}} \sin \varphi_{\underline{k}} = \frac{i}{2B} \left\{ Y_1^{-1}(\vartheta_{\underline{k}}, \varphi_{\underline{k}}) + Y_1^{-1}(\vartheta_{\underline{k}}, \varphi_{\underline{k}}) \right\}$$

$$\sin \vartheta_{\underline{k}} \cos \varphi_{\underline{k}} = \frac{1}{2B} \left\{ Y_1^{-1}(\vartheta_{\underline{k}}, \varphi_{\underline{k}}) - Y_1^{-1}(\vartheta_{\underline{k}}, \varphi_{\underline{k}}) \right\}$$

Nos acordamos ahora de las relaciones de ortogonalidad de los esféricos armónicos:

$$(5.7) \quad \int_{\vartheta=0}^{\pi} d\vartheta \sin \vartheta \int_{\varphi=0}^{2\pi} d\varphi Y_l^{m*}(\vartheta, \varphi) Y_{l'}^{m'}(\vartheta, \varphi) = \lambda_l^m \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

Donde nuevamente λ_l^m es un factor de normalización.

Gracias a la relación (5.7) vemos que sólo algunos de los coeficientes $a_l^m(\varepsilon)$ del desarrollo (5.3) contribuyen a la corriente eléctrica \underline{j}

En efecto

$$\underline{j}_x = \sum_{\sigma} \int_{\vartheta_{\underline{k}}=0}^{\pi} \sin \vartheta_{\underline{k}} d\vartheta_{\underline{k}} \int_{\varphi_{\underline{k}}=0}^{2\pi} d\varphi_{\underline{k}} \int_0^{\infty} dk k^2 e^{i\vartheta_{\underline{k}}\sigma} \left(\frac{-i}{2B} \right) \cdot$$

$$\cdot \left\{ Y_1^1 + Y_1^{-1} \right\} f_{\underline{k}, \sigma}$$

, de donde

$$(5.8) \quad j_x = \frac{-i}{2B} \sum \int_0^\infty k^z dk v_{k,\sigma} \left(\frac{df_{k,\sigma}^{(0)}}{d\varepsilon_{k,\sigma}} \right) \cdot \left\{ \bar{\lambda}'_1 \bar{a}'_1(\varepsilon) + \lambda'_1 a'_1(\varepsilon) \right\}$$

Análogamente:

$$(5.9) \quad j_y = \frac{e}{2B} \sum_l \int_0^\infty dk k^z v_{k,\sigma} \left(\frac{df_{k,\sigma}^{(0)}}{d\varepsilon_{k,\sigma}} \right) \left\{ \bar{\lambda}'_1 \bar{a}'_1(\varepsilon) - \lambda'_1 a'_1(\varepsilon) \right\}$$

$$(5.10) \quad j_y = \frac{e}{A} \sum_l \int dk k^z v_{k,\sigma} \left(\frac{df_{k,\sigma}^{(0)}}{d\varepsilon_{k,\sigma}} \right) \lambda^0_1 a^0_1(\varepsilon_{k,\sigma})$$

Vemos entonces que sólo contribuyen los términos con $l = 1$

Además, para $T \sim 0^\circ\text{K}$ se tendrá:

$$(5.11) \quad \left(\frac{df_{k,\sigma}^{(0)}}{d\varepsilon_{k,\sigma}} \right) \simeq -\delta(\varepsilon_{k,\sigma} - \varepsilon_F) \quad \text{donde } \varepsilon_F \text{ es la}$$

energía de Fermi. Luego sólo nos interesa el valor de los coeficientes $a^m_1(\varepsilon)$ ($m = -1, 0, 1$) en la superficie de Fermi.

Es lógico suponer que la pared no afecta las corrientes a lo largo de los ejes x & z , ya que estas direcciones son paralelas a la pared. Vamos entonces, de las expresiones (5.8), (5.9) & (5.10), que el parámetro que da cuenta de la presencia de la pared de Bloch en la corriente es $a^0_1(\varepsilon)$.

Como estamos interesados en estudiar solamente los efectos debidos

a la pared (ver § 3) planteamos nuestra función de distribución $f_{k,\sigma}$ como: (ansatz)

$$(5.12) \quad f_{k,\sigma} = f_{k,\sigma}^{(0)} + \left(\frac{d f_{k,\sigma}^{(0)}}{d \varepsilon_{k,\sigma}} \right) a(\varepsilon_{k,\sigma}) \cos \vartheta_k$$

con $a(\varepsilon) = A a_1^0(\varepsilon)$.

Si no hay pared $a(\varepsilon) \equiv 0$, de donde $f_{k,\sigma} = f_{k,\sigma}^{(0)}$

Este parámetro $a(\varepsilon)$ puede calcularse independientemente, para el estado estacionario, usando la ec. de balance de momentum en la dirección \underline{y} :

$$(5.13) \quad \left(\frac{dP_y}{dt} \right)_{\text{campo}} + \left(\frac{dP_y}{dt} \right)_{\text{pared}} = 0$$

Ahora bien:

$$(5.14) \quad \left(\frac{dP_y}{dt} \right)_{\text{campo}} = N_e e E \cos \vartheta_E$$

donde N_e es el número total de electrones presentes y ϑ_E es el ángulo formado entre el campo eléctrico \underline{E} y el eje \underline{y} .

Para la variación del momentum debida a la pared pondremos, en 1^{ra} aproximación:

$$(5.15) \quad \left(\frac{dP_y}{dt} \right)_{\text{pared}} = \Lambda a(\varepsilon_F)$$

ya que si no hay pared $a(\epsilon_F) = 0$ (según (5.12))

La relación (5.13) queda entonces como:

$$N_e e E \cos \vartheta_{\underline{E}} + \Lambda a(\epsilon_F) = 0$$

de donde:

$$(5.16) \quad a(\epsilon_F) = \frac{-N_e e E \cos \vartheta_{\underline{E}}}{\Lambda} = -\frac{N_e e E_y}{\Lambda}$$

Sólo resta calcular Λ directamente.

Conviene además señalar la ventaja de este método sobre la aproximación que usa tiempo de relajación. Para este problema el tiempo de relajación debe depender de la dirección del vector de onda, ya que los electrones que viajan paralelos a la pared "no la sienten" y tienen, por lo tanto, tiempo de relajación ∞ . Bajo esta imposición es sumamente difícil calcular $\tau(\underline{k})$

El valor requerido de Λ lo obtenemos al calcular explícitamente $\left(\frac{dP_y}{dt}\right)_{\text{pared}}$.

La ecuación del balance detallado queda:

(5.17)

$$\left(\frac{dP_y}{dt}\right)_{\text{pared}} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\text{estados} \\ \text{iniciales} \\ \{\underline{k}, \sigma\}}} \sum_{\substack{\text{estados} \\ \text{finales} \\ \{\underline{k}', \sigma'\}}} (\underline{k}'_y - \underline{k}_y) \left\{ \Gamma_{\{\sigma \rightarrow \sigma'\}}^{\{\underline{k} \rightarrow \underline{k}'\}} - \Gamma_{\{\sigma' \rightarrow \sigma\}}^{\{\underline{k}' \rightarrow \underline{k}\}} \right\}$$

donde hemos sumado sobre los estados finales y promediado sobre las polarizaciones iniciales (a las transiciones que salen del estado $\{\underline{k}, \sigma\}$ le restamos las que llegan a él).

Tenemos:

$$(5.18) \quad \Gamma_{\substack{\{\underline{k} \rightarrow \underline{k}'\} \\ \{\sigma \rightarrow \sigma'\}}} = 2\pi \delta(\varepsilon_{\underline{k}\sigma} - \varepsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \delta_{\underline{k}_\perp, \underline{k}'_\perp} \cdot \\ \left| M_{\underline{k}'_y \underline{k}_y}^{\sigma'\sigma} \right|^2 f_{\underline{k}\sigma} (1 - f_{\underline{k}'\sigma'})$$

donde

$$(5.19) \quad M_{\underline{k}'_y \underline{k}_y}^{\sigma'\sigma} = \begin{cases} A_{\underline{k}'_y \underline{k}_y} & \text{si } \sigma \neq \sigma' \\ B_{\underline{k}'_y \underline{k}_y} & \text{si } \sigma = \sigma' \end{cases}$$

(5.20) Sea

$$W_{\substack{\underline{k} \rightarrow \underline{k}' \\ \sigma \rightarrow \sigma'}} \equiv 2\pi \delta(\varepsilon_{\underline{k}\sigma} - \varepsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \left| M_{\underline{k}'_y \underline{k}_y}^{\sigma'\sigma} \right|^2$$

Por el principio de microreversibilidad tendremos:

$$(5.21) \quad W_{\substack{\underline{k} \rightarrow \underline{k}' \\ \sigma \rightarrow \sigma'}} = W_{\substack{\underline{k}' \rightarrow \underline{k} \\ \sigma' \rightarrow \sigma}}$$

De aquí:

$$(5.22) \quad \Gamma_{\substack{\{\underline{k} \rightarrow \underline{k}'\} \\ \sigma \rightarrow \sigma'}} - \Gamma_{\substack{\{\underline{k}' \rightarrow \underline{k}\} \\ \sigma' \rightarrow \sigma}} = 2\pi \delta(\varepsilon_{\underline{k}\sigma} - \varepsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \left| M_{\underline{k}'_y \underline{k}_y}^{\sigma'\sigma} \right|^2 \\ (f_{\underline{k}\sigma} - f_{\underline{k}'\sigma'}) \delta_{\underline{k}_\perp, \underline{k}'_\perp}$$

Usamos ahora expansión (5.12):

$$(5.23) \quad f_{\underline{k}\sigma}(\epsilon_{\underline{k}\sigma}) - f_{\underline{k}'\sigma'}(\epsilon_{\underline{k}'\sigma'}) = f_{\underline{k}\sigma}^{(0)}(\epsilon_{\underline{k}\sigma}) - f_{\underline{k}'\sigma'}^{(0)}(\epsilon_{\underline{k}'\sigma'}) + \left(\frac{df_{\underline{k}\sigma}^{(0)}}{d\epsilon_{\underline{k}\sigma}} \right) a(\epsilon_{\underline{k}\sigma}) \cos \vartheta_{\underline{k}} - \left(\frac{df_{\underline{k}'\sigma'}^{(0)}}{d\epsilon_{\underline{k}'\sigma'}} \right) a(\epsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \cos \vartheta_{\underline{k}'}$$

Las transiciones sólo ocurren para electrones cerca de la superficie de Fermi (las otras transiciones están bloqueadas).

Así pues $\epsilon_{\underline{k}\sigma} \simeq \epsilon_{\underline{k}'\sigma'} \simeq \epsilon_F$

A temperatura $T \simeq 0^\circ \text{K}$

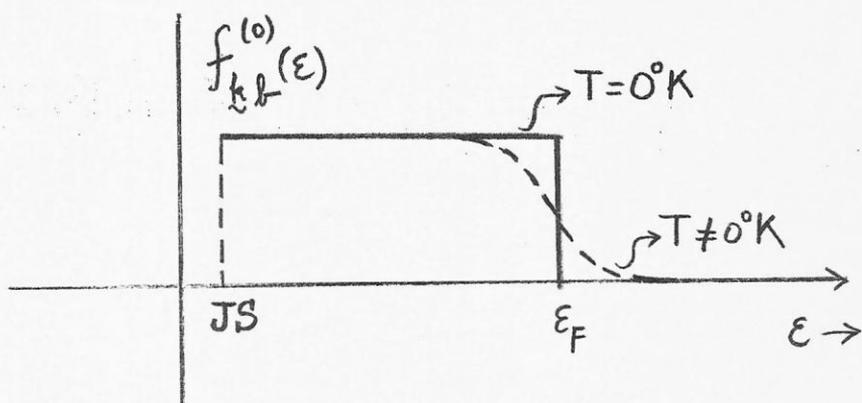
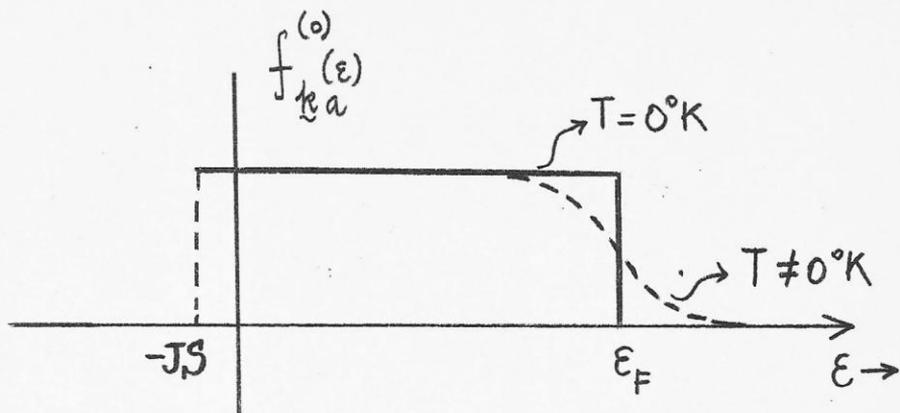
$$\frac{df_{\underline{k}\sigma}^{(0)}}{d\epsilon_{\underline{k}\sigma}} \simeq -\delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_F)$$

Luego en (5.23) tendremos (tomando en cuenta que hay un factor

$$\delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \quad \text{en (5.22)})$$

(5.24)

$$\delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \{ f_{\underline{k}\sigma} - f_{\underline{k}'\sigma'} \} = -a(\epsilon_{\underline{k}\sigma}) \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_F) \cdot \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \{ \cos \vartheta_{\underline{k}} - \cos \vartheta_{\underline{k}'} \}$$



Así pues:

$$\left(\frac{dP_y}{dt}\right)_{\text{pared}} = \frac{1}{2} \sum_{\{k, \sigma; k', \sigma'\}} (k'_y - k_y) \cdot 2\pi \left| M_{k'_y k_y}^{\sigma' \sigma} \right|^2 \delta_{k_{\perp}, k'_{\perp}} a(\epsilon_{k, \sigma}) \{ \cos \theta_{k'} - \cos \theta_k \} \delta(\epsilon_{k, \sigma} - \epsilon_F) \delta(\epsilon_{k, \sigma} - \epsilon_{k', \sigma'})$$

(5.25)

$$= \pi \sum_{\substack{\{k, \sigma\} \\ \{k', \sigma'\}}} (k'_y - k_y) \left| M_{k'_y k_y}^{\sigma' \sigma} \right|^2 a(\epsilon_{k, \sigma}) \delta(\epsilon_{k, \sigma} - \epsilon_F) \delta(\epsilon_{k, \sigma} - \epsilon_{k', \sigma'}) \{ \cos \theta_{k'} - \cos \theta_k \}$$

donde se entiende

$$\underline{k}' = \{ \underline{k}_{\perp}, k'_y \} \quad y$$

$$\epsilon_{k', \sigma'} = \frac{k_{\perp}^2}{2m_{\sigma'}^*} + \frac{k_{y'}^2}{2m_{\sigma'}^*} \pm JS$$

Debido a la función $\delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_F)$ que aparece en (5.25), el coeficiente $A(\epsilon_{\underline{k}\sigma})$ se evalúa en la superficie de Fermi.

Luego obtenemos:

(5.26)

$$\left(\frac{dP_y}{dt}\right) = \pi A(\epsilon_F) \sum_{\{\underline{k}, \sigma; \underline{k}', \sigma'\}} (k'_y - k_y) \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_F) \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_{\underline{k}'\sigma'})$$

$$\{ \cos \theta_{\underline{k}'} - \cos \theta_{\underline{k}} \} \left| M_{k'_y k_y}^{\sigma'\sigma} \right|^2$$

donde

(5.27)

$$\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_{\underline{k}'\sigma'} = \begin{cases} \frac{k_y^2 - k_y'^2}{2m_\sigma^*} & \text{si } \sigma = \sigma' \\ \pm 2JS + \frac{k_y^2}{2m_\sigma^*} - \frac{k_y'^2}{2m_{\sigma'}^*} + \frac{k_\perp^2}{2} \frac{(m_{\sigma'}^* - m_\sigma^*)}{m_\sigma^* m_{\sigma'}^*} & \text{si } \sigma \neq \sigma' \text{ y según el caso} \end{cases}$$

Luego el coeficiente Λ de (5.15) está dado por

(5.28)

$$\Lambda = \pi \sum_{\substack{\{\underline{k}, \sigma\} \\ \{\underline{k}', \sigma'\}}} (k'_y - k_y) \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_F) \cdot \{ \cos \theta_{\underline{k}'} - \cos \theta_{\underline{k}} \} \left| M_{k'_y k_y}^{\sigma'\sigma} \right|^2$$

Haciendo aproximación del continuo, reemplazamos las sumatorias

por integrales:

$$\sum_{\{\underline{k}\}} \longrightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \underline{k} \quad ; \quad \sum_{\{\underline{k}'\}} \longrightarrow \frac{V^{1/3}}{2\pi} \int dk'_y$$

de donde

$$(5.29) \quad \Lambda = \pi \sum_{\{\sigma, \sigma'\}} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \underline{k} \frac{V^{1/3}}{2\pi} \int dk'_y (k'_y - k_y) \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_F) \{ \cos \theta_{\underline{k}'} - \cos \theta_{\underline{k}} \} \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \left| M_{\underline{k}'\underline{k}}^{\sigma'\sigma} \right|^2$$

Ponemos esto como

(5.30)

$$\Lambda = \sum_{\{\sigma, \sigma'\}} \mathbb{I}^{\sigma'\sigma}$$

donde

$$(5.31) \quad \mathbb{I}^{\sigma'\sigma} \equiv \pi \frac{V^{4/3}}{(2\pi)^4} \int d^3 \underline{k} \int dk'_y (k'_y - k_y) \left| M_{\underline{k}'\underline{k}}^{\sigma'\sigma} \right|^2 \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_F) \delta(\epsilon_{\underline{k}\sigma} - \epsilon_{\underline{k}'\sigma'}) \{ \cos \theta_{\underline{k}'} - \cos \theta_{\underline{k}} \}$$

El cálculo de los términos $I^{\sigma\sigma}$ está hecho en el apéndice V.

Una vez calculado el coeficiente Λ estamos en condiciones de evaluar la conductividad.

De (5.10) y (5.12) tenemos

(5.32)

$$J_y = \frac{\lambda_1}{A^2} \sum_{\sigma} e \int_0^{\infty} dk k^2 \left| \frac{\partial \epsilon_{\underline{k},\sigma}}{\partial k} \right| a(\epsilon_{\underline{k},\sigma}) \left(\frac{df_{\underline{k},\sigma}^{(0)}}{d\epsilon_{\underline{k},\sigma}} \right)$$

donde:

$$\epsilon_{\underline{k},a} = \frac{k^2}{2m_a^*} - JS, \quad \sigma = a$$

$$\epsilon_{\underline{k},b} = \frac{k^2}{2m_b^*} + JS, \quad \sigma = b$$

Para temperaturas muy bajas, $T \approx 0^\circ \text{K}$ se cumple

(5.33)

$$\frac{df_{\underline{k},\sigma}^{(0)}}{d\epsilon_{\underline{k},\sigma}} \approx -\delta(\epsilon_{\underline{k},\sigma} - \epsilon_F)$$

Integrando (5.32) se obtiene

(5.34)

$$j_y = -z e \left(\frac{\lambda_1^0}{A^2} \right) \left\{ m_a^* (\epsilon_F + \mathcal{J}S) + m_b^* (\epsilon_F - \mathcal{J}S) \right\} \cdot \frac{-(N_e) e E_x}{\Lambda}$$

donde hemos usado la relación (5.16) para $\alpha(\epsilon_F)$.

Así pues:

(5.35)

$$j_y = \frac{z N_e e^2}{\Lambda} \cdot \left(\frac{\lambda_1^0}{A^2} \right) \left\{ m_a^* (\epsilon_F + \mathcal{J}S) + m_b^* (\epsilon_F - \mathcal{J}S) \right\} E_x$$

Para la conductividad tenemos entonces:

(5.36)

$$\sigma_{yy} = \frac{z N_e e^2}{\Lambda} \left(\frac{\lambda_1^0}{A^2} \right) \left\{ m_a^* (\epsilon_F + \mathcal{J}S) + m_b^* (\epsilon_F - \mathcal{J}S) \right\}$$

Ahora bien tomando los esféricos armónicos, para $l=1$, como:

$$Y_1^0(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^1(\theta, \varphi) = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{+i\varphi}$$

$$Y_{1,1}^{-1}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$$

Estos resultan normalizados en el sentido:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{\ell', m'}^*(\theta, \varphi) Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

De aquí $\lambda_1^0 = 1$ y además

$$A = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}$$

De donde resulta:

(5.37)

$$\sigma_{yy} = \left(\frac{8}{3}\right) \frac{\pi \hbar N_0 e^2}{\Lambda} \left\{ \epsilon_F (m_a^* + m_b^*) + JS (m_a^* - m_b^*) \right\}$$

donde hemos tomado el sistema de unidades C.G.S. para el cual

($\hbar \neq 1$)

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-27} \text{ [erg] [seg]}$$

Los resultados del apéndice V dan:

(5.38)

$$\Pi^{aa} \cong \frac{1}{\lambda^2 k_{F,a}} L_{0m}^2 \left(\frac{m_a^* JS \lambda N_0 \Omega_0^{1/3}}{\pi} \right)^2$$

$$I^{bb} \approx \frac{1}{\lambda^2 k_{F,b}} \ln 2 \left(\frac{m_b^* J S \lambda N_0 \Omega_0^{1/3}}{\pi} \right)^2$$

y para los procesos donde cambia el spin con respecto a la magnetización $\underline{s}^{(0)}$:

(5.39)

$$I^{ab} = I^{ba} = k_{F,b} (1+C) \left(\frac{m^* J S \lambda N_0 \Omega_0^{1/3}}{2} \right)^2.$$

$$\sum_{\epsilon = \pm 1} \int_0^1 \frac{x dx}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1-C^2 x^2}} \cdot \frac{\epsilon \sqrt{1-x^2} \sqrt{1-C^2 x^2} - C x^2 + 1}{\cosh \left\{ \frac{\pi}{2} \lambda k_{F,a} (\sqrt{1-C^2 x^2} + \epsilon \sqrt{1-x^2}) \right\}}$$

con

$$m^* \equiv \sqrt{m_a^* m_b^*}$$

$$C \equiv \frac{k_{F,b}}{k_{F,a}} < 1$$

Las integrales de la expresión (5.39) proporcionan una contribución pequeñísima al valor de Λ comparadas con los coeficientes I^{aa} , I^{bb} , los cuales no dependen de λ , el ancho medio de la pared.

En total, la expresión final depende débilmente de λ , i.e; pare-

ciera ser que el proceso no depende de la forma del potencial.

Ahora nos interesa conocer valores de las masas efectivas

m_a^* & m_b^* y de $k_{F,a}$ & $k_{F,b}$.

Usando la aproximación parabólica para el fondo de la banda de conducción se obtiene relación:

$$(5.40) \quad \mathcal{N}(\epsilon) = \left(\frac{1}{2\pi^2} \right) \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \epsilon^{1/2}$$

(Ziman, 1963), donde $\mathcal{N}(\epsilon)$ es el número de electrones por unidad de energía, por unidad de volumen.

Conociendo $\mathcal{N}(\epsilon_{F,a})$ & $\mathcal{N}(\epsilon_{F,b})$ en

$$\epsilon_{F,a} = \epsilon_F - JS \quad ; \quad \epsilon_{F,b} = \epsilon_F + JS$$

ajustamos las masas efectivas en estos niveles, usando la relación

(5.40). Tomando los datos de Wood (1962) se tiene:

μ	$\epsilon_{F,\mu}$ eV	$n(\epsilon_{F,\mu})$ e/átomo . eV	$k_{F,\mu}$ Å^{-1}	m_{μ}^* 10^{-27} gr
b	9,38	0,77	2,301	3,89
a	11,3	1,68	3,175	6,15

Otras constantes:

$$\lambda = 2,3 \cdot 10^{-6} \text{ cm}$$

$$C \equiv \frac{k_{F,b}}{k_{F,a}} = 0,725 < 1$$

$$D \equiv \frac{\pi}{2} k_{F,a} \lambda = 1,147 \cdot 10^3$$

En el apéndice V se ve que:

(5.41)

$$\Lambda \approx l_{om} \lambda \left(\frac{J S N_0 \Omega_0^{1/3}}{\pi} \right)^2 \left\{ \frac{(m_a^*)^2}{k_{F,a}} + \frac{(m_b^*)^2}{k_{F,b}} \right\}$$

Reemplazando este valor en (5.37) resulta:

(5.42)

$$\sigma_{yx} \approx \frac{1}{l_{om} \lambda} \left(\frac{4}{3} \right) (\pi \hbar)^3 \frac{m_0 N_0 \Omega_0^{1/3} e^2}{(J S)^2} \left\{ \frac{k_{F,a} k_{F,b} (k_{F,a}^2 + k_{F,b}^2)}{(m_a^*)^2 k_{F,b} + (m_b^*)^2 k_{F,a}} \right\}$$

donde m_0 es el número de electrones de conducción por unidad de volumen.

Una estimación numérica de la conductividad σ_{yy} en base al resultado (5.42) da:

(5.43)

$$\sigma_{yy} \approx 1,49 \cdot 10^4 m_0 N_0 \Omega_0^{1/3} \text{ seg}^{-1}$$

En la sección § 4 vimos que $N_0 \Omega_0^{1/3}$ debe interpretarse como el ancho medio de un dominio ferromagnético así como el camino libre medio mínimo. Kittel & Galt (1956) así como Landau & Lifshitz, estiman este ancho medio del orden de 10^{-3} [cm]

i. e.;

$$(5.44) \quad \sigma_{yy} \approx 14,9 m_0 \text{ seg}^{-1}$$

La densidad N_0 puede estimarse suponiendo para el Fe estructura BCC con constante de la red $a = 2,86 \cdot 10^{-8}$ (Wood, 1962). Si asumimos que hay un electrón de conducción por celda unitaria, resulta:

$$N_0 \approx 4,26 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$$

y finalmente:

$$(5.45) \quad \sigma_{yy} \approx 6,4 \cdot 10^{23} \text{ seg}^{-1}$$

Esta conductividad es varios órdenes de magnitud mayor que la conductividad del cobre a temperatura ambiente. En efecto, se tiene:

$$\sigma(\text{Cu})_{273^\circ\text{K}} \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ seg}^{-1},$$

i. e.;

$$(5.46) \quad \frac{\sigma_{yy}}{\sigma(\text{Cu})_{273^\circ\text{K}}} \approx 1,3 \cdot 10^6.$$

Tratemos de expresar este resultado en término del camino libre medio l .

Es bien conocida la expresión que relaciona la conductividad con l , i-e.;

$$(5.47) \quad \sigma = \frac{m_0 e^2 l}{h k_F}$$

Para hacer una estimación tomamos $k_F = \sqrt{k_{F,a} k_{F,b}} \approx 2,69 \text{ \AA}^{-1}$

Comparando con la expresión,

$$\sigma_{yy} \approx 6,46 \cdot 10^{22} m_0 e^2 N_0 \Omega_0^{1/3} \text{ seg}^{-1} \quad \text{obtenida de}$$

(5.42) se llega a:

$$(5.48) \quad l \approx 1,82 \cdot 10^4 N_0 \Omega_0^{1/3} \text{ cm}$$

i. e;

$$l \approx 20 \text{ cm}$$

resultado que está en el límite de lo medible experimentalmente.

La relación (5.48) indica que en promedio los electrones atraviesan 10^4 paredes de Bloch estáticas, es decir una pared es prácticamente transparente para estos procesos de scattering elástico.

6. CONCLUSIONES

Los resultados de la sección § 5 conducen a una resistividad que está en el límite de lo medible experimentalmente. La expresión (5.42) obtenida para la conductividad depende linealmente del parámetro $N_0 \Omega_0^{1/3}$, que fue identificado con el ancho medio de un dominio, pero es independiente de λ el ancho de la pared. La dependencia en $N_0 \Omega_0^{1/3}$ sólo expresa que este parámetro está relacionado con el camino libre medio, lo cual ilustra muy bien la situación física. El hecho de que $\lambda / (N_0 \Omega_0^{1/3}) \approx 10^4$ implica que la efectividad de la pared para producir scattering es muy pequeña y que los electrones de conducción pueden atravesar en promedio 10^4 paredes.

La independencia de λ parece indicar que el resultado es general, independiente de la forma del potencial supuesto, en contraste con lo obtenido por Hartmann - Boutron (1961) para las ondas de spin.

La razón de esto reside en el hecho de que λk_F no puede hacerse más pequeño, ya que k_F^{-1} es del orden de la distancia interatómica. La reducción de λ de cien a diez parámetros de la red, por ejemplo, es imposible ya que aumentaría de manera considerable la energía de anisotropía.

Según la contribución al parámetro Λ de la sección § 5, proporcional a la resistividad, los procesos de scattering pueden dividirse esencialmente en dos grupos:

i) procesos del tipo $\{ \underset{\sim}{k}_\perp, k_y; a \} \rightarrow \{ \underset{\sim}{k}_\perp, k'_y; a \}$
donde no cambia el número de spin $\sigma = a, b$.

La conservación de la energía nos restringe estos a los únicos dos

posibles eventos de scattering:

a) Rebote en la pared $\{\underline{k}_\perp, k_y; a\} \rightarrow \{\underline{k}_\perp, -k_y; a\}$

No cambia ni el número de spin σ , ni la dirección espacial de éste; el momentum perpendicular a la pared cambia de signo pero no cambia su magnitud. Como es de esperar, éste es el proceso que contribuye significativamente a la resistividad en el resultado final (5.42).

b) Procesos sin scattering $\{\underline{k}_\perp, k_y; a\} \rightarrow \{\underline{k}_\perp, k_y; a\}$

Si bien cambia la dirección espacial del spin (#), la función de onda sigue siendo autoestado del hamiltoniano no perturbado \mathcal{H}_0 . Como no cambia el momentum dan contribución nula a Λ y a la resistividad.

ii) procesos del tipo $\{\underline{k}_\perp, k_y; a\} \rightarrow \{\underline{k}_\perp, k_y'; b\}$
donde cambia el número de spin σ .

La conservación de la energía implica que debe cambiar la componente y del momentum. La probabilidad de transición por unidad de tiempo para este tipo de procesos es:

$$(6.1) \quad \Gamma_{\substack{\{\underline{k}_\perp, k_y\} \rightarrow \{\underline{k}_\perp, k_y'\} \\ \{a\} \rightarrow \{b\}}} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| A_{k_y' k_y} \right|^2 f_{\underline{k}, \{a\}} \cdot (1 - f_{\underline{k}', \{b\}}) \delta(\epsilon_{\underline{k}, \{a\}} - \epsilon_{\underline{k}', \{b\}})$$

en unidades C. G. S.

con

$$(3.13)a \quad A_{k_y' k_y} = \left(\frac{JS \pi \lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}} \right) \cdot \frac{1}{\cosh \left\{ (k_y' - k_y) \frac{\pi \lambda}{2} \right\}}$$

(#) Lo que interesa en este caso es la dirección del spin relativa

A priori, el elemento de matriz $A_{k'y'ky}$ podría no ser muy pequeño, pero la función delta de Dirac de la relación (6.1), que expresa la conservación de la energía, nos limita los valores posibles de $\Delta ky \equiv ky' - ky$ entre 10^7 y 10^8 (cm) $^{-1}$, en orden de magnitud. Con estos valores el argumento de la función $\cosh x$ toma valores entre cien y mil, haciendo que la probabilidad de transición sea pequeñísima. La contribución a la resistividad es despreciable frente a los procesos del tipo i) a), como se ve claramente en el Apéndice V.

Este resultado es consecuencia del hecho que $\frac{\lambda}{N_0 \Omega_c^{1/3}}$ es un número pequeño (ver la sección § 4), ya que con esta aproximación se calcula el elemento de matriz $A_{k'y'ky}$ de la expresión 3.13 (a) (ver el Apéndice III). Además, la limitación para el cambio de momentum Δky proviene de que las bandas de energía para los electrones de conducción con spin $\sigma = a$ y los con spin $\sigma = b$ están separadas por una energía $2JS$ bastante grande, del orden de un quinto de la energía de Fermi (Wood, 1962).

La extensión natural de este trabajo, que estamos estudiando actualmente, es el scattering inelástico con excitaciones de la pared y la dependencia de su contribución a la resistividad como función de la temperatura.

El espectro de excitaciones en la pared fue estudiado por Winter (1961). Consiste de dos ramas; una corresponde a una excitación que no se propaga fuera de la pared (ondas de spin ligadas), la otra es similar a una onda de spin ordinaria en un material ferromagnético

(ondas de spin libres). Estas excitaciones son bastante "blandas", es decir es posible excitar muchas de ellas a bajas temperaturas.

Creemos que este hecho haría subir el orden de magnitud del resultado aquí obtenido para la resistividad y se podría comparar con los trabajos experimentales de Taylor et al y Beitchmann et al.

Sugerimos controlar la estructura de dominios, visualizándola mediante el efecto Kerr (Rado & Suhl, 1963).

APENDICE I

Intercambio cuantomecánico

En Mecánica Cuántica, el hecho de que dos partículas sean idénticas introduce inevitablemente una correlación entre ellas, aún cuando las partículas no interactúen dinámicamente.

Esta correlación, llamada Intercambio, desaparece si las dos partículas idénticas están descritas por paquetes de onda que no se traslapan.

Para dar una idea de este efecto consideremos un sistema formado por dos electrones.

Si despreciamos el acoplamiento spin - órbita, la función de onda total de sistema $\Psi(\underline{r}_1, s_1; \underline{r}_2, s_2)$ puede separarse como sigue:

$$\Psi(\underline{r}_1, s_1; \underline{r}_2, s_2) = \phi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \chi(s_1, s_2)$$

donde $\phi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$ es la parte orbital y $\chi(s_1, s_2)$ la parte espinorial. Sabemos, por tratarse de fermiones que $\Psi(\underline{r}_1, \underline{r}_2; s_1, s_2)$ es antisimétrica en la transposición $1 \rightleftharpoons 2$, i. e;

$$\Psi(\underline{r}_1, s_1; \underline{r}_2, s_2) = - \Psi(\underline{r}_2, s_2; \underline{r}_1, s_1)$$

Ahora bien, nos interesa que la parte espinorial sea autofunción de los operadores S_z & S^2 .

(Recordemos que $S_z = S_{1z} \otimes I + I \otimes S_{2z}$ y $S^2 = (S_1 \otimes I + I \otimes S_2)^2$, donde \otimes denota producto tensorial)

Al hacer esto obtenemos un singlete para $S = 0$ y un triplete

para $S = 1$

Singlete:
$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow - \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow) \quad \text{con} \quad S'_z = 0$$

$S = 0$

Triplete :
$$\chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\uparrow \quad \text{con} \quad S'_z = 1$$

$S = 1$

$$\chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\downarrow \quad \text{con} \quad S'_z = -1$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow + \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow) \quad \text{con} \quad S'_z = 0$$

(todas normalizadas a la unidad)

donde $\chi_i^\uparrow, \chi_i^\downarrow$ son las funciones propias de $G_z^i = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
 (S'_z denota el autovalor del operador S'_z)

Veamos cómo se obtiene dicho resultado.

Queremos que la función espinorial $\chi(\sigma_1, \sigma_2)$ sea función propia de los operadores $S_z = S_{1z} \otimes I + I \otimes S_{2z}$, la componente Z del spin total y de $S^2 = (S_1 \otimes I + I \otimes S_2)$ el cuadrado del spin total. (Tomamos $\hbar = 1$)

Nuestro problema es entonces diagonalizar las matrices S_z, S^2 (de 4×4) a partir de las funciones propias $(\chi_i^\uparrow, \chi_i^\downarrow)$ de S_{1z} & S_{2z} . Como $[S_1, S_2] = 0$, podemos encontrar funciones propias de S_z simplemente haciendo productos del tipo $\chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow$

Tomemos las funciones:

$$(I1) \quad \psi_1 \equiv \chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\uparrow, \quad \psi_2 \equiv \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\downarrow, \quad \psi_{3,4} \equiv C \chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow + D \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow$$

con los coeficientes C y D a determinar luego. Por lo dicho antes

todas estas son funciones propias de S_z (fácilmente puede verse que

una combinación lineal del tipo $A \psi_1 + B \psi_2$ no será

función propia de S_z , con A, B $\neq 0$; la única posibilidad que queda es

$$C \chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow + D \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow).$$

Tendremos:

$$S_z \psi_1 = (S_{1z} \otimes I + I \otimes S_{2z})(\chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\uparrow) =$$

$$(I2) \quad = (S_{1z} \chi_1^\uparrow) \otimes \chi_2^\uparrow + \chi_1^\uparrow \otimes (S_{2z} \chi_2^\uparrow) = \chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\uparrow = \psi_1$$

Asimismo

$$S_z \psi_2 = (S_{1z} \otimes I + I \otimes S_{2z})(\chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\downarrow) = -\psi_2$$

$$S_z \psi_{3,4} = S_z (C \chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow + D \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow) = 0$$

Tenemos conjunto de autovalores $S_z = 1, -1, 0$

Para S_z^2 tendremos:

$$S_z^2 = S_1^2 \otimes I + I \otimes S_2^2 + 2 S_1 \cdot S_2$$

(donde $S_1 \cdot S_2$ debe entenderse como $S_{1x} \otimes S_{2x} + S_{1y} \otimes S_{2y} + S_{1z} \otimes S_{2z}$)

$$\underline{S}^2 = \underline{S}_1^2 + \underline{S}_2^2 + S_{1(+)} \otimes S_{2(-)} + S_{1(-)} \otimes S_{2(+)} + 2 S_{1z} \otimes S_{2z}$$

$$e \quad S_{i(+)} \equiv S_{ix} + i S_{iy},$$

$$i = 1, 2$$

$$S_{i(-)} \equiv S_{ix} - i S_{iy}$$

Las relaciones:

$$S_{i(+)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_{i(-)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$4) \quad S_{i(+)} \chi_i^\uparrow = 0, \quad S_{i(+)} \chi_i^\downarrow = \chi_i^\uparrow$$

$$i = 1, 2$$

$$S_{i(-)} \chi_i^\uparrow = \chi_i^\downarrow, \quad S_{i(-)} \chi_i^\downarrow = 0$$

ψ_1 & ψ_2 son evidentemente funciones propias de \underline{S}^2 .

En efecto:

$$(I 5) \quad \underline{S}^2 \psi_1 = \underline{S}^2 \chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\uparrow = \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{1}{2} \right) \chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\uparrow = 2 \psi_1$$

$$\underline{S}^2 \psi_2 = \underline{S}^2 \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\downarrow = \left(\frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{1}{2} \right) \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\downarrow = 2 \psi_2$$

Luego son funciones propias con autovalor 2 de \underline{S}^2 , i.e;

$$2 = S(S+1) \quad , \quad S = 1$$

Pertenece a $S = 1$.

Además ψ_1 & ψ_2 son ortogonales entre si:

$$(\psi_1, \psi_2) = (\chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\uparrow, \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\downarrow) = (\chi_1^\uparrow, \chi_1^\downarrow)(\chi_2^\uparrow, \chi_2^\downarrow) = 0$$

Calculamos los coeficientes C & D de $\psi_{3,4}$ imponiendo que $\psi_{3,4}$ sea función propia de S^2 .

$$S^2 \psi_{3,4} = S(S+1) \psi_{3,4} = (C+D)(\chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow) + (C+D)(\chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow) = S(S+1) \{ C \chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow + D \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow \}$$

identificando los coeficientes de las funciones l.i. $\chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow$ & $\chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow$ tenemos el sistema de ecuaciones simultáneas para C & D:

$$(I 6) \quad \begin{cases} \{S(S+1) - 1\} C - D = 0 \\ -C + \{S(S+1) - 1\} D = 0 \end{cases}$$

pongamos $\lambda \equiv S(S+1)$

El sistema (I 6) tiene solución si y sólo si

$$\begin{vmatrix} \lambda - 1 & -1 \\ -1 & \lambda - 1 \end{vmatrix} = 0$$

i. e; obtenemos

ec. secular ;

$$(\lambda - 1)^2 - 1 = 0 ; \quad \lambda^2 - 2\lambda = \lambda(\lambda - 2) = 0$$

obtenemos soluciones: $\lambda_{1,2} = 0, 2$

$\lambda = 2$ corresponde a $S = 1$, $\lambda = 0$ corresponde a $S = 0$

Reemplazando el autovalor $S = 0$ en (I 6) se tiene $C = -D$

y reemplazando $S = 1$ en (Ib) se obtiene $C = D$

Los valores absolutos los obtenemos en ambos casos exigiendo

que la función ψ_{34} esté normalizada

El resultado es:

$S = 1$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow + \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow)$$

$S = 0$

$$\psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1^\uparrow \otimes \chi_2^\downarrow - \chi_1^\downarrow \otimes \chi_2^\uparrow)$$

ψ_3 & ψ_4 son ortogonales entre sí y ortogonales a ψ_1 & ψ_2 .

Hemos obtenido entonces para el caso $S = 0$ un singlete con

$S'_z = 0$ y función espinorial ψ_4 antisimétrica.

Para el caso $S = 1$, tenemos un triplete con $S'_z = 1, 0, -1$

y funciones espinoriales ψ_1, ψ_2, ψ_3 simétricas.

Concluimos entonces que la parte orbital será simétrica

para $S = 0$ y antisimétrica para $S = 1$

$$S=0, \quad \phi_S(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_1(\underline{r}_1) \phi_2(\underline{r}_2) + \phi_1(\underline{r}_2) \phi_2(\underline{r}_1) \}$$

$$S=1, \quad \phi_A(\underline{r}_1, \underline{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \phi_1(\underline{r}_1) \phi_2(\underline{r}_2) - \phi_1(\underline{r}_2) \phi_2(\underline{r}_1) \}$$

donde ϕ_1, ϕ_2 son las funciones orbitales individuales de los electrones 1, 2 respectivamente.

La energía de estos estados es:

$$E_{S=0} = \langle \Psi_{S=0} | \mathcal{H} | \Psi_{S=0} \rangle, \quad E_{S=1} = \langle \Psi_{S=1} | \mathcal{H} | \Psi_{S=1} \rangle$$

$$E_S = \int d^3\underline{r}_1 \int d^3\underline{r}_2 \chi_S^+(s_1, s_2) \phi^*(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \mathcal{H} \phi(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \chi_S(s_1, s_2)$$

(con $S = 0, 1$) Si \mathcal{H} no depende del spin (por ejemplo, al despreciar acoplamiento spin - órbita)

$$E_S = \int d^3\underline{r}_1 \int d^3\underline{r}_2 \phi^*(\underline{r}_1, \underline{r}_2) \mathcal{H} \phi(\underline{r}_1, \underline{r}_2)$$

Supongamos que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V(|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|)$, donde \mathcal{H}_0

da cuenta de la energía cinética. Entonces:

$$(I 7) \quad E_{S=0} = A_{12} + J_{12}$$

$$E_{S=1} = A_{12} - J_{12}$$

donde

Este intercambio de energía lleva directamente al campo molecular postulado por Weiss.

Además el intercambio aparece como una fuerza de corto alcance, ya que J_{12} será pequeña para orbitales distantes, pues debe haber un traslapeo considerable de las funciones de ondas individuales para que la contribución a J_{12} sea apreciable.

Cuando tratamos con electrones que pertenecen a capas internas incompletas (por ejemplo 3d) la integral de intercambio J_{ik} entre electrones en diferentes átomos es manifiestamente positiva (J. C. Slater, 1930). Entonces hay posibilidad de tener ferromagnetismo.

Generalizando el tratamiento anterior para muchos átomos (un cristal) con capas internas incompletas (en nuestro caso 3d) y haciendo la hipótesis de que la integral de intercambio es despreciable excepto para átomos vecinos, obtenemos el potencial de intercambio del modelo de Heisenberg:

(I 10)

$$V = -Z \sum'_{\{i,k\}} J_{ik} \underline{S}_i \cdot \underline{S}_k$$

donde \sum' significa suma sobre los vecinos más cercanos.

APENDICE II

Sea $\varphi_{i,\underline{\delta}}$ el ángulo entre los spines i & $i + \underline{\delta}$

Tendremos:

$$(II 1) \quad \cos \varphi_{i,\underline{\delta}} = \cos(\vartheta_i - \vartheta_{i+\underline{\delta}}) = \cos \vartheta_i \cos \vartheta_{i+\underline{\delta}} + \text{sen} \vartheta_i \text{sen} \vartheta_{i+\underline{\delta}}$$

Tomando coordenadas esféricas

tendremos:

$$\alpha_i^1 = \text{sen} \vartheta_i \cos \varphi_i$$

$$\alpha_i^2 = \text{sen} \vartheta_i \text{sen} \varphi_i$$

$$\alpha_i^3 = \cos \vartheta_i$$

pero para anisotropía uniaxial

$$\varphi_i = 0, \pi$$

$$\alpha_i^1 = \pm \text{sen} \vartheta_i, \quad \alpha_i^3 = \cos \vartheta_i, \quad \alpha_i^2 = 0$$

Así pues (II 1) queda:

$$(II 2) \quad \cos \varphi_{i,\underline{\delta}} = \alpha_i^1 \alpha_{i+\underline{\delta}}^1 + \alpha_i^3 \alpha_{i+\underline{\delta}}^3$$

Hacemos desarrollo hasta 2^{do} orden en $\underline{\delta}$ de $\alpha_{i+\underline{\delta}}$

$$(II 3) \quad \alpha_{i+\underline{\delta}} = \alpha_i + \underline{\delta} \cdot \nabla \alpha_i + \frac{1}{2} \left\{ x_{\underline{\delta}}^2 \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial x_{\underline{\delta}}^2} + y_{\underline{\delta}}^2 \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial y_{\underline{\delta}}^2} + z_{\underline{\delta}}^2 \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial z_{\underline{\delta}}^2} + 2x_{\underline{\delta}} y_{\underline{\delta}} \frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial x_{\underline{\delta}} \partial y_{\underline{\delta}}} + \dots \right\} + \dots$$

con $\underline{\delta} = (x_{\underline{\delta}}, y_{\underline{\delta}}, z_{\underline{\delta}})$ vector de la red directa (une al átomo i con uno de sus vecinos más cercanos)

Así pues:

$$\begin{aligned} \cos \varphi_{i,\underline{\delta}} = & \alpha_i^1 \alpha_i^1 + \alpha_i^1 \underline{\delta} \cdot \nabla \alpha_i^1 + \frac{1}{2} \alpha_i^1 \left\{ x_{\underline{\delta}}^2 \frac{\partial^2 \alpha_i^1}{\partial x^2} + \dots \right\} + \\ & + \alpha_i^3 \alpha_i^3 + \alpha_i^3 \underline{\delta} \cdot \nabla \alpha_i^3 + \frac{1}{2} \alpha_i^3 \left\{ x_{\underline{\delta}}^2 \frac{\partial^2 \alpha_i^3}{\partial x^2} + \dots \right\} \end{aligned}$$

Pero $\alpha_i^1 \alpha_i^1 + \alpha_i^3 \alpha_i^3 = 1$ (ya que $\alpha_i^2 = 0$)

(II 4)

$$\begin{aligned} \sum_{\underline{\delta}} (1 - \cos \varphi_{i,\underline{\delta}}) = & - \sum_{\underline{\delta}} \underline{\delta} \cdot (\alpha_i^1 \nabla \alpha_i^1 + \alpha_i^3 \nabla \alpha_i^3) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\underline{\delta}} \left[\alpha_i^1 \left\{ x_{\underline{\delta}}^2 \frac{\partial^2 \alpha_i^1}{\partial x^2} + \dots \right\} + \alpha_i^3 \left\{ x_{\underline{\delta}}^2 \frac{\partial^2 \alpha_i^3}{\partial x^2} + \dots \right\} \right] \end{aligned}$$

Para la estructura cúbica bcc (de cuerpo centrado) los vectores $\underline{\delta}$ posibles son ocho (vecinos más cercanos):

$$\left(\pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2}, \pm \frac{a}{2} \right)$$

Además se cumple la condición de "isotropía":

$$\sum_{\underline{\delta}} \underline{\delta} = \underline{0}$$

De aquí:

$$\sum_{\underline{\delta}} (1 - \cos \varphi_{i,\underline{\delta}}) = - \frac{1}{2} \sum_{\underline{\delta}} \left\{ \frac{a^2}{4} \alpha_i^1 \nabla^2 \alpha_i^1 + \alpha_i^3 \nabla^2 \alpha_i^3 \right\}$$

$$= - a^2 \underline{\alpha}_i \cdot \nabla^2 \underline{\alpha}_i$$

ya que $\alpha_i^2 \equiv 0$ y los términos cruzados del tipo $\frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial x \partial y}$,
 $\frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial x \partial z}$ & $\frac{\partial^2 \alpha_i}{\partial y \partial z}$ no contribuyen, pues se compensan al
 sumar sobre $\underline{\delta}$ (nuevamente por "isotropía")

Para la energía de intercambio tendremos:

(II 5)

$$\mathcal{H}_I = -2JS^2 \sum_{i,\underline{\delta}} \cos \varphi_{i,\underline{\delta}}$$

$$= -2NJS^2 - 2JS^2 a^2 \sum_i \underline{\alpha}_i \cdot \nabla^2 \underline{\alpha}_i$$

De aquí resulta que la energía de intercambio por unidad de volumen
 (densidad de energía de intercambio) es:

(II 6)

$$\frac{2JS^2}{a} \underline{\alpha} \cdot \nabla^2 \underline{\alpha}$$

Ahora se usa la identidad:

$$\nabla^2(\alpha^j)^2 = 2(\nabla\alpha^j)^2 + 2\alpha^j \nabla^2\alpha^j$$

de donde:

$$\alpha^j \nabla^2\alpha^j = \frac{1}{2} \nabla^2(\alpha^j)^2 - (\nabla\alpha^j)^2$$

Es decir:

$$\underline{\alpha} \cdot \nabla^2 \underline{\alpha} = \frac{1}{2} \nabla^2(\underline{\alpha} \cdot \underline{\alpha}) - (\nabla\alpha^1)^2 - (\nabla\alpha^2)^2 - (\nabla\alpha^3)^2$$

Considerando que $\underline{\alpha} \cdot \underline{\alpha} = 1$ se tiene finalmente:

(II 7)

$$\mathcal{H}_I = -2NJS^2 + 2JS^2a^2 \sum_i \left\{ (\nabla\alpha_i^1)^2 + (\nabla\alpha_i^2)^2 + (\nabla\alpha_i^3)^2 \right\}$$

Para obtener la expresión final (II 7) hemos hecho la aproximación semiclásica de considerar el spin como un vector y además hemos supuesto una variación espacial lenta (C. Herring & C. Kittel, 1951).

APENDICE III

§ a. El hamiltoniano \mathcal{H}_0

En la sección § 3 planteamos el hamiltoniano libre \mathcal{H}_0 como:

(expresión 3.4)

(III 1)

$$\mathcal{H}_0 = \int d^3 \underline{r} \psi^\dagger(\underline{r}) \left(-\frac{1}{2m^*} \nabla^2 \right) \psi(\underline{r}) - \int d^3 \underline{r} \psi^\dagger(\underline{r}) \sum_j \underline{S}_j^{(0)} \cdot \underline{\sigma} \psi(\underline{r}) J(\underline{r} - \underline{R}_j)$$

La suma sobre j significa suma sobre todos los átomos de la red cristalina.

Para los campos fermiónicos tenemos (en aproximación no relativista):

$$(III 2) \quad \psi(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}, \mu} \varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) \chi^\mu(\underline{y}) C_{\underline{k}, \mu},$$

$\mu = a, b$

donde $\chi^\mu(\underline{y})$ son los spinores definidos en (3.7)

De aquí:

$$\psi^\dagger(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}, \mu} \varphi_{\underline{k}}^*(\underline{r}) \chi^{\mu\dagger}(\underline{y}) C_{\underline{k}, \mu}^\dagger$$

$C_{\underline{k}, \mu}^\dagger$: operador de creación de un electrón de vector de onda \underline{k} y spin μ .

Para las funciones $\varphi_{\underline{k}}(\underline{r})$ tomamos simplemente ondas planas:

$$(III\ 3) \quad \varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) = \frac{e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}}}{\sqrt{V}}$$

Por lo dicho en § 3, hacemos el reemplazo

$$J(\underline{r} - \underline{R}_j) \longrightarrow J \Omega_0 \delta^{(3)}(\underline{r} - \underline{R}_j)$$

lo cual no es más que un paso al límite continuo.

El término de la energía cinética K no da nada nuevo:

$$(III\ 4) \quad K = \int d^3\underline{r} \psi^\dagger(\underline{r}) \left(-\frac{\nabla^2}{2m^*} \right) \psi(\underline{r}) = \\ = \sum_{\underline{k}', \underline{k}} \sum_{\mu', \mu} \frac{\hbar^2}{2m^*} c_{\underline{k}', \mu'}^\dagger c_{\underline{k}, \mu} \delta^{\mu\mu'} \int_V d^3\underline{r} \frac{e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{r}}}{V}$$

Al hacer la integración sobre un volumen finito tenemos:

$$(III\ 5) \quad \int_V d^3\underline{r} e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{r}} \approx V \delta_{\underline{k}', \underline{k}}$$

Así pues:

(III 6)

$$K = \sum_{\underline{k}, \mu} \frac{\hbar^2}{2m^*} C_{\underline{k}, \mu}^+ C_{\underline{k}, \mu}$$

Calculemos ahora la energía de intercambio debida al spin $S_j^{(0)}$

Sabemos que $S_j^{(0)} = \epsilon_j S \hat{z}$ donde $\epsilon_j \equiv \epsilon(R_{jy})$

R_{jy} : componente según el eje \underline{y} del vector posición \underline{R}_j

Tendremos:

$$(III 7) \quad \mathcal{H}_0 - K = - \int d^3 \underline{r} \psi^\dagger(\underline{r}) \sum_{\underline{R}_j} S_j^{(0)} \cdot \underline{\sigma} J(\underline{r} - \underline{R}_j) \psi(\underline{r})$$

Se tiene $S_j^{(0)} \cdot \underline{\sigma} = \epsilon_j S \sigma_z$ con $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$

Debido a la definición (3.7) se cumplen las relaciones:

$$(III 8) \quad \sigma_z \chi^a(y) = \begin{cases} \chi^\uparrow, & y > 0 & = \chi^a \\ -\chi^\downarrow, & y < 0 & = -\chi^a \end{cases} = \epsilon(y) \chi^a(y)$$

$$\sigma_z \chi^b(y) = \begin{cases} -\chi^\downarrow, & y > 0 & = -\chi^b \\ \chi^\uparrow, & y < 0 & = \chi^b \end{cases} = -\epsilon(y) \chi^b(y)$$

Así pues:

$$S_j^{(0)} \cdot \phi(\underline{r}) = \epsilon_j S \epsilon(y) \sum_{\underline{k}} \varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) \{ C_{\underline{k}a} \chi^a(y) - C_{\underline{k}b} \chi^b(y) \}$$

es decir, tenemos:

$$(III 9) \quad \mathcal{H}_0 - K = -J \sum_{\underline{R}_j} \int d^3 \underline{r} S \Omega_0 \delta^{(3)}(\underline{r} - \underline{R}_j) \epsilon_j \epsilon(y) \cdot$$

$$\cdot \sum_{\underline{k}', \underline{k}} \varphi_{\underline{k}'}^*(\underline{r}) \varphi_{\underline{k}}(\underline{r}) (C_{\underline{k}'a}^+ C_{\underline{k}a} - C_{\underline{k}'b}^+ C_{\underline{k}b})$$

Debido a la función

$$\delta^{(3)}(\underline{r} - \underline{R}_j) = \delta(x - R_{jx}) \delta(y - R_{jy}) \delta(z - R_{jz})$$

podemos reemplazar

$$\epsilon(y) \text{ por } \epsilon(R_{jy}) \equiv \epsilon_j$$

Tendremos entonces factor

$$\epsilon_j \epsilon_j = (\epsilon_j)^2 = +1$$

$$(III 10) \quad \mathcal{H}_0 - K = -JS \Omega_0 \sum_{\underline{k}', \underline{k}} (C_{\underline{k}'a}^+ C_{\underline{k}a} - C_{\underline{k}'b}^+ C_{\underline{k}b}) \cdot \sum_{\underline{R}_j} \frac{1}{V} \exp\{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{R}_j\}$$

Usamos aproximación del continuo:

$$(III 11) \quad \sum_{\underline{R}_j} \exp\{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{R}_j\} = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{\underline{R}_j} \Omega_0 e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{R}_j} \\ \simeq \frac{1}{\Omega_0} \int d^3 \underline{r} \exp\{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{r}\} = \frac{V}{\Omega_0} \delta_{\underline{k}', \underline{k}}$$

Así pues obtenemos resultado (3.11):

$$(III 12) \quad \mathcal{H}_0 = K - JS \sum_{\underline{k}} (C_{\underline{k}a}^+ C_{\underline{k}a} - C_{\underline{k}b}^+ C_{\underline{k}b})$$

§ b. El hamiltoniano perturbativo \mathcal{H}_1

La expresión primitiva es la expresión (3.5):

(III 13)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 &= - \int_V d^3 \underline{n} \psi^\dagger(\underline{n}) \sum_{\underline{R}_j} \underline{S}_j^P \cdot \underline{\sigma} \psi(\underline{n}) J \Omega_0 \delta(\underline{n} - \underline{R}_j) \\ &= - J \Omega_0 \sum_{\underline{R}_j} \psi^\dagger(\underline{R}_j) \underline{S}_j^P \cdot \underline{\sigma} \psi(\underline{R}_j) \end{aligned}$$

Ahora bien:

$$\underline{S}_j^P \cdot \underline{\sigma} = (\underline{S}_j - \underline{S}_j^{(0)}) \cdot \underline{\sigma}$$

Se tiene:

$$\underline{S}_j \cdot \underline{\sigma} = S \sin \vartheta_j \underline{\sigma}_x + S \cos \vartheta_j \underline{\sigma}_z \quad \text{con}$$

$$\underline{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

de donde

$$\begin{aligned} \text{(III 14)} \quad \underline{\sigma}_x \chi^a(y) &= \chi^b(y) \\ \underline{\sigma}_x \chi^b(y) &= \chi^a(y) \end{aligned}$$

Así pues:

$$S \sin \vartheta_j \underline{\sigma}_x \psi(\underline{n}) = S \sin \vartheta_j \sum_{\underline{k}} \varphi_{\underline{k}}(\underline{n}) (\chi^b(y) C_{\underline{k}a} + \chi^a(y) C_{\underline{k}b})$$

La contribución al hamiltoniano \mathcal{H}_1 debida a este término es

entonces:

$$-J\Omega_0 S \sum_{\underline{k}', \underline{k}} \sum_{R_j} (c_{\underline{k}'b}^+ c_{\underline{k}a} + c_{\underline{k}'a}^+ c_{\underline{k}b}) \text{sen } \theta_j \int_V d^3r \Psi_{\underline{k}}^*(r) \cdot$$

(III 15)

$$\cdot \Psi_{\underline{k}}(r) \delta^{(3)}(r - R_j) = -J\Omega_0 S \sum_{\underline{k}', \underline{k}, R_j} (c_{\underline{k}'b}^+ c_{\underline{k}a} + c_{\underline{k}'a}^+ c_{\underline{k}b}) \frac{\text{sen } \theta_j}{V} e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot R_j}$$

Queremos evaluar entonces:

$$(III 16) \quad \sum_{R_j} \text{sen } \theta_j e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot R_j} = \frac{1}{\Omega_0} \sum_{R_j} \Omega_0 \text{sen } \theta_j e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot R_j}$$

$$\approx \frac{1}{\Omega_0} \int d^3r \text{sen } \theta(y) e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot r} =$$

$$= \frac{1}{\Omega_0} V^{2/3} \delta_{\underline{k}'_{\perp}, \underline{k}_{\perp}}^{(2)} \int dy \text{sen } \theta(y) e^{-i(\underline{k}' - \underline{k})_{\parallel} y}$$

$\delta_{\underline{k}'_{\perp}, \underline{k}_{\perp}}^{(2)}$ es el delta de Kronecker para la componente perpendicular a la pared de los vectores \underline{K}' , \underline{K} .

Por lo hecho en la sección § 2, (III, 16) queda:

(III 17)

$$\sum_{R_j} \text{sen } \theta_j e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot R_j} = \frac{V^{2/3}}{\Omega_0} \delta_{\underline{k}'_{\perp}, \underline{k}_{\perp}}^{(2)} \int_{-(N_0-1)\frac{a}{2}}^{(N_0-1)\frac{a}{2}} dy \frac{e^{-i(\underline{k}' - \underline{k})_{\parallel} y}}{\cosh(\frac{y}{\lambda})}$$

En las integral de (III 17) puede reemplazarse los límites de integración por $-\infty$ & $+\infty$ gracias a la presencia del factor $\frac{1}{\cosh(\frac{y}{\lambda})}$ que "cae" rápidamente a cero:

$$\sum_{\underline{R}_j} \sin \theta_j \bar{e}^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{R}_j} \approx \frac{2V^{2/3}}{\Omega_0} \delta_{\underline{k}'_1, \underline{k}_1}^{(2)} \int_0^\infty dy \frac{\cos\{(k'_y - k_y)y\}}{\cosh(\frac{y}{\lambda})}$$

La integral está tabulada en las tablas Ryshik -- Gradstein (3582, (2) pag. 182) :

$$(III 18) \quad \int_0^\infty dy \frac{\cos\{(k'_y - k_y)y\}}{\cosh(\frac{y}{\lambda})} = \frac{\pi \lambda}{2} \cdot \frac{1}{\cosh\{(k'_y - k_y)\frac{\pi \lambda}{2}\}}$$

luego,

(III 19)

$$\sum_j \sin \theta_j \bar{e}^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot \underline{R}_j} \approx \frac{V^{2/3}}{\Omega_0} \pi \lambda \delta_{\underline{k}'_1, \underline{k}_1}^{(2)} \cdot \frac{1}{\cosh\{(k'_y - k_y)\frac{\pi \lambda}{2}\}}$$

La contribución dada por (III 15) queda entonces:

(III 20)

$$-\frac{JS\pi\lambda}{V^{1/3}} \sum_{\underline{k}', \underline{k}} (C_{\underline{k}'b}^+ C_{\underline{k}a} + C_{\underline{k}'a}^+ C_{\underline{k}b}) \cdot \frac{\delta_{\underline{k}', \underline{k}}^{(2)}}{\cosh\left\{(k'_j - k_j) \frac{\pi\lambda}{2}\right\}}$$

ponemos $V^{1/3} = N_0 \Omega_0^{1/3}$

(III 21) y definimos

$$A_{\underline{k}'\underline{k}j} = JS\pi \left(\frac{\lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}} \right) \frac{1}{\cosh\left\{(k'_j - k_j) \frac{\pi\lambda}{2}\right\}}$$

(III 20) queda entonces:

(III 22)

$$-\sum_{\underline{k}, \underline{k}'} A_{\underline{k}'\underline{k}j} (C_{\underline{k}_\perp \underline{k}j b}^+ C_{\underline{k}a} + C_{\underline{k}_\perp, \underline{k}'j a}^+ C_{\underline{k}b})$$

como afirmado en la primera parte de (3.12)

Veamos ahora la contribución del término

$$S \cos\theta_j \Theta_z$$

En vista de (III 8)

(III 23)

$$\psi_{(\underline{n})}^+ S \cos\theta_j \Theta_z \psi_{(\underline{n})} = S \cos\theta_j \epsilon(\gamma) \sum_{\underline{k}', \underline{k}} \varphi_{\underline{k}'}^*(\underline{n}) \varphi_{\underline{k}}(\underline{n}) \cdot (C_{\underline{k}'a}^+ C_{\underline{k}a} - C_{\underline{k}'b}^+ C_{\underline{k}b})$$

Nos interesa la diferencia:

$$(III\ 24) \quad \psi(\underline{n})^\dagger (S \cos \theta_j - S \epsilon_j) G_z \psi(\underline{n}) =$$

$$= S(\cos \theta_j - \epsilon_j) \epsilon(y) \sum_{\underline{k}', \underline{k}} \varphi_{\underline{k}'}^*(\underline{n}) \varphi_{\underline{k}}(\underline{n}) (C_{\underline{k}'a}^+ C_{\underline{k}a} - C_{\underline{k}'b}^+ C_{\underline{k}b})$$

La contribución de este término al hamiltoniano \mathcal{H}_1 , al hacer la integración, resulta:

$$(III\ 25) \quad -J\Omega_0 S \sum_{\underline{k}', \underline{k}} (C_{\underline{k}'a}^+ C_{\underline{k}a} - C_{\underline{k}'b}^+ C_{\underline{k}b}) \sum_{R_j} (\cos \theta_j - \epsilon_j) \cdot$$

$$- \epsilon_j \varphi_{\underline{k}'}^*(R_j) \varphi_{\underline{k}}(R_j)$$

Nos interesa evaluar entonces la sumatoria:

$$\sum_{R_j} (\cos \theta_j - \epsilon_j) \epsilon_j \frac{1}{V} e^{-i(\underline{k}' - \underline{k}) \cdot R_j} \approx$$

$$\approx \frac{\delta_{\underline{k}', \underline{k}}^{(c)}}{V^{1/3} \Omega_0} \int_{-(N_0-1)a/2}^{(N_0-1)a/2} dy \epsilon(y) \left\{ \tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) - \epsilon(y) \right\} e^{-i(k'_y - k_y)y}$$

$\epsilon(y) \left\{ \tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) - \epsilon(y) \right\}$ es una función par, así que nuestra in-

tegral en cuestión se reduce a

$$2 \int_0^{(N_0-1)a/2} dy \left\{ \tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) - 1 \right\} \cos\left\{ (k'_y - k_y)y \right\}$$

Ahora bien, $\tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right)$ tiende "suficientemente rápido" a uno, así que podemos reemplazar el límite superior $(N_0-1)\frac{a}{2}$ (que es del orden de magnitud del ancho del dominio) por ∞ :

La integral a calcular es entonces:

$$(III\ 26) \quad \int_0^{\infty} dy \left\{ \tanh\left(\frac{y}{\lambda}\right) - 1 \right\} \cos\{(k'_j - k_j) y\} \equiv I(k'_j - k_j; \lambda) \frac{\pi \lambda}{2}$$

Así pues (III 25) queda entonces:

(III 27)

$$- \frac{JS\pi\lambda}{N_0\Omega_0^{1/3}} \sum_{\underline{k}, k'_j} I(k'_j - k_j; \lambda) (C_{\underline{k}_\perp, k_j}^+ C_{\underline{k}a} - C_{\underline{k}_\perp, k'_j}^+ C_{\underline{k}b})$$

Definimos

$$B_{k'_j k_j} \equiv JS \cdot \frac{\pi \lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}} I(k'_j - k_j; \lambda)$$

y obtenemos

$$- \sum_{\underline{k}, k'_j} B_{k'_j k_j} (C_{\underline{k}_\perp, k_j}^+ C_{\underline{k}a} - C_{\underline{k}_\perp, k'_j}^+ C_{\underline{k}b})$$

como en la 2^{da} parte de (3.12). Sólo falta calcular:

$$I(k'_j - k_j; \lambda) \frac{\pi \lambda}{2}$$

Para comodidad del cálculo pongamos:

$$(III\ 28) \quad \frac{1}{\lambda} \equiv a \quad , \quad k_y' - k_y \equiv b$$

Se tiene entonces:

$$\tanh(ay) - 1 = -2 \frac{e^{-2ay}}{1 + e^{-2ay}}$$

Ahora bien para $a > 0$, $y > 0$

$$e^{-2ay} < 1$$

de donde:

$$\frac{1}{1 + e^{-2ay}} = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k e^{-2aky}$$

$$\tanh(ay) - 1 = 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} e^{-2aky} e^{-2ay}$$

(III 29)

$$= 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k e^{-2aky}$$

Ahora bien

$$\int_0^{\infty} dy \{ \tanh(ay) - 1 \} \cos by = 2 \int_0^{\infty} dy \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k e^{-2aky} \cos by$$

(ya que hay convergencia uniforme)

$$= \frac{1}{2a} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{k - \frac{ib}{2a}} + \frac{1}{2a} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{k + \frac{ib}{2a}}$$

Ahora bien, según resultado (6.392) de las tablas de Ryshik -
Gradstein (pág. 309):

$$(III\ 30) \quad \beta(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{z+k}$$

donde $\beta(z)$ es la función Beta expresable por la función
Psi de Euler

$$\psi(z) \equiv \frac{d}{dz} \ln \Gamma'(z)$$

como sigue:

$$(III\ 31) \quad \beta(z) = \frac{1}{z} \left\{ \psi\left(\frac{z+1}{z}\right) - \psi\left(\frac{z}{z}\right) \right\}$$

De (III 30)

$$\beta(z) = \frac{1}{z} + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{1}{k+z}$$

i. e; la integral a calcular es entonces:

$$\int_0^{\infty} dy \{ \tanh(ay) - 1 \} \cos by =$$

$$= \frac{1}{2a} \left\{ \beta\left(\frac{ib}{2a}\right) + \beta\left(\frac{-ib}{2a}\right) \right\}$$

Así pues:

(III 32)

$$I(k'_y - k_y; \lambda) = \frac{1}{\pi} \left[\beta\left\{ \frac{i\lambda}{2}(k'_y - k_y) \right\} + \beta\left\{ -\frac{i\lambda}{2}(k'_y - k_y) \right\} \right]$$

Con el resultado (III 32) damos forma definitiva a (III 27):

(III 33)

$$- \frac{JS\pi\lambda}{N_0\Omega_0^{1/3}} \sum_{\tilde{k}, \tilde{k}'} \frac{1}{\pi} \left[\beta\left\{ \frac{i\lambda}{2}(k'_y - k_y) \right\} + \beta\left\{ -\frac{i\lambda}{2}(k'_y - k_y) \right\} \right] \cdot (C_{\tilde{k}_y k'_y a}^+ C_{\tilde{k}_y a} - C_{\tilde{k}_y k'_y b}^+ C_{\tilde{k}_y b})$$

y el elemento de matriz

$B_{\tilde{k}'_y \tilde{k}_y}$ queda:

(III 34)

$$B_{\tilde{k}'_y \tilde{k}_y} = \frac{JS\pi\lambda}{N_0\Omega_0^{1/3}} \frac{1}{\pi} \left[\beta\left\{ \frac{i\lambda}{2}(k'_y - k_y) \right\} + \beta\left\{ -\frac{i\lambda}{2}(k'_y - k_y) \right\} \right]$$

APENDICE IV

Regla de oro de Fermi y 1^{ra} aproximación de Born

Nuestro hamiltoniano lo separamos como sigue

$$\text{IV (1)} \quad \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

De ahora en adelante trabajamos en el cuadro de Dirac o cuadro de interacción. Así pues

$$\text{IV (2)} \quad \mathcal{H}_1^D = e^{i\mathcal{H}_0 t} \mathcal{H}_1 e^{-i\mathcal{H}_0 t}$$

Sea S la matriz de scattering

Hacemos expansión:

$$\begin{aligned} S &= 1 + S^{(1)} + S^{(2)} + \dots \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dt_n T \{ \mathcal{H}_1^D(t_1) \dots \mathcal{H}_1^D(t_n) \} \end{aligned}$$

donde T es el operador de ordenamiento temporal.

Queremos calcular la probabilidad de que el estado $|k, m\rangle$ evolucione a $|k', m'\rangle$ después de sufrir scattering por el potencial \mathcal{H}_1 .

Es decir nos interesa la amplitud de la transición

$$\text{IV (3)} \quad \langle \underline{k}', m' | \underline{k}, m \rangle_{\text{out}} = \langle \underline{k}', m' | S | \underline{k}, m \rangle_{\text{in}}$$

$|\underline{k}, m\rangle$ & $|\underline{k}', m'\rangle$ son funciones propias del hamiltoniano libre \mathcal{H}_0 .

Calculamos esto en primer orden, lo cual es equivalente a la primera aproximación de Born.

Dejando de lado los procesos triviales donde no hay scattering tendremos:

$$\begin{aligned} \langle \underline{k}', m' | S^{(1)} | \underline{k}, m \rangle &= (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \underline{k}', m' | \mathcal{H}_1^D(t) | \underline{k}, m \rangle \\ &= (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt \langle \underline{k}', m' | e^{+i\mathcal{H}_0 t} \mathcal{H}_1 e^{-i\mathcal{H}_0 t} | \underline{k}, m \rangle \\ &= (-i) \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'})t} \langle \underline{k}', m' | \mathcal{H}_1 | \underline{k}, m \rangle \\ &= -i \langle \underline{k}', m' | \mathcal{H}_1 | \underline{k}, m \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'})t} \\ &= -2\pi i \langle \underline{k}', m' | \mathcal{H}_1 | \underline{k}, m \rangle \delta(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'}) \end{aligned}$$

Así pues en primer orden:

IV (4)

$$\langle \underline{k}', m' | \underline{k}, m \rangle_{\text{out}} = -2\pi i \langle \underline{k}', m' | \mathcal{H}_1 | \underline{k}, m \rangle \delta(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'})$$

Al calcular $|\text{out} \langle \underline{k}', m' | \underline{k}, m \rangle_{\text{in}}|^2$ vemos que tendremos factor $[\delta(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'})]^2$, lo cual no tiene significado.

Para evitar esta dificultad usamos el truco conocido de poner:

$$[\delta(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'})]^2 = \delta(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'}) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'})t}$$

debido a la primera δ podemos poner $E_{\underline{k}m} = E_{\underline{k}'m'}$ en la integral; tendremos:

$$[\delta(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'})]^2 = \frac{1}{2\pi} \delta(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'}) \int dt = \frac{\delta(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'}) T}{2\pi}$$

donde T es un tiempo que representa la duración de la interacción.

Nos interesa entonces la probabilidad de transición por unidad de

tiempo $\mathbb{T} \left\{ \begin{matrix} \underline{k} \rightarrow \underline{k}' \\ m \rightarrow m' \end{matrix} \right\}$

$$\text{IV (5)} \quad \mathbb{T} \left\{ \begin{matrix} \underline{k} \rightarrow \underline{k}' \\ m \rightarrow m' \end{matrix} \right\} = 2\pi |\langle \underline{k}', m' | H_1 | \underline{k}, m \rangle|^2 \delta(E_{\underline{k}m} - E_{\underline{k}'m'})$$

que es la conocida regla de Fermi.

Si estamos trabajando con un formalismo de muchas partículas, debemos multiplicar por la probabilidad de que el estado inicial esté ocupado y el estado final desocupado; para el caso de fermiones (principio de exclusión de Pauli).

La expresión (5) queda entonces:

IV (6)

$$T_{\substack{\{k \rightarrow k'\} \\ m \rightarrow m'}} = 2\pi f_{\underline{k},m} (1 - f_{\underline{k}',m'}) |\langle \underline{k}',m' | H_1 | \underline{k},m \rangle|^2 \cdot \delta(E_{\underline{k},m} - E_{\underline{k}',m'})$$

donde $f_{\underline{k},m}, f_{\underline{k}',m'}$ son las distribuciones de Fermi - Dirac.

Hemos recobrado entonces la expresión (4.1)

APENDICE V

§ Cálculo de los términos I^{σσ'} de la expresión (5.31)

En la sección § 5 encontramos la expresión:

$$(5.31) \quad \text{II}^{\sigma\sigma'} = \frac{\pi V}{(2\pi)^3} \int d^3 \underline{k} \int \frac{V^{1/3}}{2\pi} dk'_y (k'_y - k_y) |M_{k'_y k_y}^{\sigma\sigma'}|^2 \delta(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_F) \delta(\epsilon_{k\sigma} - \epsilon_{k'\sigma'}) \{ \cos \theta_{k'} - \cos \theta_{\underline{k}} \}$$

$\sigma, \sigma' = a, b.$

que ahora nos interesa calcular para estimar el valor de Λ y luego de la conductividad σ_{yy} de (5.37).

Por simetría esperamos que $I^{ab} = I^{ba}$.

Para hacer las integrales (5.31) es conveniente tomar coordenadas cilíndricas, i.e;

$$(V.1) \quad \int d^3 \underline{k} \dots = \int k_{\perp} dk_{\perp} \int_0^{2\pi} d\varphi \int dk_y \dots$$

Es decir poner $\underline{k} = (k_{\perp}, k_y)$, k_{\perp} está en el plano ortogonal al eje \underline{y} , es decir es el plano (x, z). En este plano se toma coordenadas polarés $\{k_{\perp}, \varphi\}$

La conservación de la energía restringe el dominio de variación de k_y', k_{\perp} & k_y .

i) Cálculo de I^{aa} & I^{bb}

Con nuestro sistema de coordenadas se tiene:

(V. 2)

$$\cos \theta_{k'} - \cos \theta_k = \frac{k'_y}{\sqrt{k_x^2 + k'_y{}^2}} - \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}$$

ya que θ_k es el ángulo que forma el vector \underline{k} con el eje \underline{y} .

Integrando directamente, primero con respecto a ky' y después con respecto a ky se obtiene:

$$(V. 3) \quad II^{aa} = \frac{(m_a^*)^2 V^{4/3}}{\pi^2 k_{Fa}} \int_0^{k_{Fa}} dx \, x \left| M_{\alpha, -\alpha}^{aa} \right|^2$$

donde $\alpha \equiv (k_{Fa}^2 - x^2)^{1/2}$

$$\left| M_{\alpha, -\alpha}^{aa} \right|^2 = \left| B_{\alpha, -\alpha} \right|^2$$

$$= \left(\frac{JS\pi\lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}} \right)^2 \frac{1}{\pi} \left\{ \beta(-i\lambda\alpha) + \beta(i\lambda\alpha) \right\}$$

de acuerdo con (3.13b)

Análogamente se obtiene (cambiando \underline{a} por \underline{b} en todas partes)

$$(V. 4) \quad II^{bb} = \frac{(m_b^*)^2 V^{4/3}}{\pi^2 k_{F,b}} \int_0^{k_{F,b}} dx \, x \left| M_{\beta, -\beta}^{bb} \right|^2$$

con
$$\rho \equiv (k_{Fib}^2 - x^2)^{1/2}$$

Lo que necesitamos ahora es aproximar los coeficientes

M^{aa} y M^{bb} por alguna función "más manejable"

Del apéndice III se tiene:

(V. 5)

$$B_{qq'} = \left(\frac{JS\lambda\pi}{N_0\Omega_0^3} \right) \cdot \left(\frac{2}{\pi\lambda} \right) \int_0^\infty \left\{ \tanh\left(\frac{x}{\lambda}\right) - 1 \right\} \cos x(q'-q) dx$$

donde llamábamos:

(V. 6)

$$I(q'-q; \lambda) \equiv \frac{2}{\pi\lambda} \int_0^\infty \left\{ \tanh\left(\frac{x}{\lambda}\right) - 1 \right\} \cos x(q'-q) dx$$

Hacemos cambio de variable $z \equiv \frac{x}{\lambda}$ y (V. 6) queda:

(V. 7)

$$I(q'-q; \lambda) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \left\{ \tanh z - 1 \right\} \cos \{ \lambda(q'-q)z \} dz$$

Ahora bien, los casos que contribuyen cumplen con

$$q'-q \sim 2k_F \approx 2 \cdot 10^8 \text{ [cm]}^{-1} \text{ en orden de magnitud; además } \lambda \approx 2 \cdot 10^{-6} \text{ [cm]}$$

Así pues $\lambda(q'-q) \approx 4 \cdot 10^2$. Es decir la función

$\cos(\lambda(q'-q)z)$ de (V. 7) tiene período $T \approx \frac{\pi}{200}$; luego

entre $0 \leq Z \leq 1$ esta función oscila bastante. Debido a que este carácter oscilatorio está muy amortiguado por

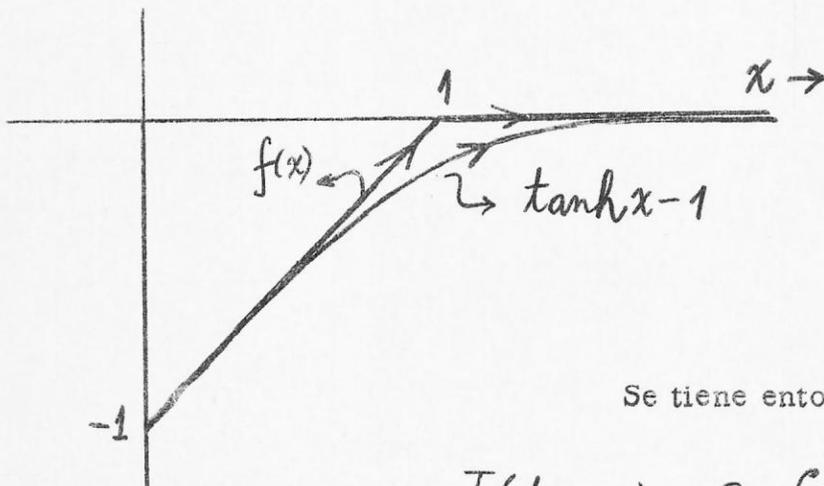
$$\tanh Z - 1 \underset{Z \rightarrow \infty}{\sim} e^{-Z}$$

la mayor contribución a la integral $I(q' - q)$ proviene de la vecindad inmediata de cero.

Así pues basta evaluar $I(q' - q)$ con la aproximación:

$\tanh Z - 1 \simeq f(Z)$, con

$$(V.8) \quad f(Z) = \begin{cases} Z - 1 & \text{si } 0 \leq Z \leq 1 \\ 0 & \text{si } Z > 1 \end{cases}$$



Se tiene entonces que:

$$I(q' - q; \lambda) \simeq \frac{2}{\pi} \int_0^1 (x-1) \cos\{\lambda(q' - q)x\} dx$$

$$= - \frac{4}{\pi \lambda^2 (q' - q)^2} \frac{\sin^2 \lambda(q' - q)}{2}$$

Con esta aproximación se obtiene:

(V.9)

$$I^2(q'-q; \lambda) \approx \frac{16}{\pi^2 \lambda^4 (q'-q)^4} \frac{\text{sen}^4 \frac{\lambda(q'-q)}{2}}{2}$$

Los coeficientes $|B_{qq'}|^2$ quedan entonces:

(V.10)

$$|B_{qq'}|^2 = \left(\frac{JS\lambda}{N_0 \Omega_0^{1/3}} \right)^2 \cdot \frac{\text{sen}^4 \{ \lambda(q'-q)/2 \}}{\lambda^4 (q'-q)^4 / 16}$$

Finalmente reemplazando en las fórmulas (V.3) & (V.4)

obtenemos:

$$(V.11a) \quad II^{aa} = \left(\frac{m_a^* JS\lambda N_0 \Omega_0^{1/3}}{\pi} \right)^2 \cdot \frac{1}{\lambda^2 k_{F,a}} \int_0^{\lambda k_{F,a}} \frac{\text{sen}^4 x}{x^3} dx$$

$$(V.11b) \quad II^{bb} = \left(\frac{m_b^* JS\lambda N_0 \Omega_0^{1/3}}{\pi} \right)^2 \cdot \frac{1}{\lambda^2 k_{F,b}} \int_0^{\lambda k_{F,b}} \frac{\text{sen}^4 x}{x^3} dx$$

Evaluemos los límites superiores de integración. Mirando nuestra tabla de la sección § 5 obtenemos los valores:

$$k_{F_a} \approx 3,175 \cdot 10^{+8} \text{ [cm]}^{-1} \quad ; \quad \lambda = 2,3 \cdot 10^{-6} \text{ [cm]}$$
$$k_{F_b} \approx 2,301 \cdot 10^8 \text{ [cm]}^{-1}$$

De aquí resulta:

$$\lambda k_{F_a} \approx 7,4 \cdot 10^2 \quad ; \quad \lambda k_{F_b} \approx 5,3 \cdot 10^2$$

Es muy "poco" el error que se comete, entonces, al extender el límite superior de las integrales (V.11) hasta ∞ . (En efecto, el error que se comete es del orden de

$$\frac{1}{2} \int_{500}^{\infty} \frac{dx}{x^3} = -\frac{1}{4} \left[\frac{1}{x^2} \right]_{500}^{\infty} \approx \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{(500)^2} \approx \frac{1}{100} \cdot 10^{-4}$$
$$\approx 10^{-6}) .$$

Queremos evaluar, entonces la integral:

$$(V.12) \quad \mathcal{K}_0 = \int_0^{\infty} \frac{\text{sen}^4 x}{x^3} dx$$

Integrando dos veces por partes se obtiene:

$$\mathcal{K}_0 = 2 \int_0^{\infty} dx \frac{3 \text{sen}^2 x \cos^2 x - \text{sen}^4 x}{x}$$

Usamos la identidad trigonométrica:

$$3 \sin^2 x \cos^2 x - \sin^4 x = \frac{1}{2} \cos 2x - \frac{1}{2} \cos 4x,$$

es decir:

$$K_0 = \int_0^{\infty} dx \frac{\cos 2x - \cos 4x}{x}$$

Definimos entonces :

$$(V.13) \quad K(\alpha) \equiv \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} \frac{\cos 2x - \cos 4x}{x} \quad ; \quad \alpha > 0$$

El valor que nos interesa es $K(0)$. Derivando con respecto de α se obtiene:

$$(V.14) \quad K'(\alpha) = \int_0^{\infty} e^{-\alpha x} (\cos 4x - \cos 2x) = \frac{\alpha}{\alpha^2 + 16} - \frac{\alpha}{\alpha^2 + 4}$$

$$(V.14') \quad (\text{con la condición de borde}) \quad K(+\infty) = 0$$

Integrando inmediatamente (V.14) e imponiendo condición (V.14') se obtiene:

$$K(\alpha) = \frac{1}{2} \log \frac{\alpha^2 + 16}{\alpha^2 + 4}$$

y de aquí

$$(V.15) \quad \chi_0 \equiv \chi(0) = \frac{1}{2} \text{Ln} 4 = \text{Ln} 2$$

Las expresiones finales quedan:

$$(a) \quad \text{II}^{aa} \approx \text{Ln} 2 \cdot \frac{1}{k_{F,a}} \left(\frac{m_a^* J S N_0 \Omega_0^{1/3}}{\pi} \right)^2$$

(V.16)

$$(b) \quad \text{II}^{bb} = \text{Ln} 2 \cdot \frac{1}{k_{F,b}} \left(\frac{m_b^* J S N_0 \Omega_0^{1/3}}{\pi} \right)^2$$

ii) Cálculo de I^{ab} & I^{ba}

Por simetría debe tenerse $I^{ab} = I^{ba}$

Se integra primero con respecto a ky' y luego con respecto a ky .

Se obtiene:

(V.17)

$$\text{II}^{ab} = \text{II}^{ba} = \left(\frac{m^* J S \lambda N_0 \Omega_0^{1/3}}{2} \right)^2 \cdot \frac{k_{F,a} + k_{F,b}}{k_{F,a} k_{F,b}}$$

$$\sum_{\epsilon=\pm 1} \int_0^{k_{F,b}} \frac{dx \, x}{\sqrt{k_{F,a}^2 - x^2} \sqrt{k_{F,b}^2 - x^2}} \cdot \frac{\epsilon \sqrt{k_{F,a}^2 - x^2} \sqrt{k_{F,b}^2 - x^2} + k_{F,a} k_{F,b}}{\cosh \left\{ \frac{\pi \lambda}{2} \left(\sqrt{k_{F,a}^2 - x^2} + \epsilon \sqrt{k_{F,b}^2 - x^2} \right) \right\}}$$

con
$$m^* = (m_a^* m_b^*)^{1/2}$$

Es conveniente hacer el cambio de variable:

(V.18)
$$z \equiv x / k_{F,b}$$

Se tiene entonces:

(V.19)

$$\Pi^{ab} = \Pi^{ba} = \left(\frac{m^* J S \lambda N_0 \Omega_0^{1/3}}{z} \right)^2 (1+C) k_{F,b}$$

$$\sum_{\epsilon = \pm 1} \int_0^1 \frac{z dz}{\sqrt{1-z^2} \sqrt{1-C^2 z^2}} \cdot \frac{\epsilon \sqrt{1-z^2} \sqrt{1-C^2 z^2} - C z^2 + 1}{\cosh \left\{ D \left(\sqrt{1-C^2 z^2} + \epsilon C \sqrt{1-z^2} \right) \right\}}$$

con $D \equiv \frac{\pi \lambda}{2} k_{F,a}$, $C \equiv \frac{k_{F,b}}{k_{F,a}} < 1$

Los valores dados en la sección §5 son:

$C = 0,725$; $D = 1,15 \cdot 10^3$

Sea

$$(V. 20) \quad f(x; \epsilon) \equiv \sqrt{1 - c^2 x^2} + \epsilon c \sqrt{1 - x^2}$$

$$\epsilon = \pm 1$$

El estudio de estas funciones da un extremo para $x = 0$; se

tiene:

$$1,41 \approx c + \sqrt{1 + c^2} \leq f(x; 1) \leq 1 + c \approx 1,73$$

$$0,275 \approx 1 - c \leq f(x; -1) \leq \sqrt{1 - c^2} \approx 0,688$$

Es decir $f(x; \epsilon)$ no pasa "suficientemente cerca" de cero como para que haya alguna contribución apreciable de las integrales

(V.19). En este caso podremos acotar las integrales por "números pequeñísimos; en efecto:

$$\left| \int_0^1 \frac{x \, dx}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1-c^2 x^2}} \cdot \frac{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1-c^2 x^2} - c x^2 + 1}{\cosh^2 \{D f(x; 1)\}} \right| \leq$$

$$\leq \frac{1}{\cosh^2 \{D(c + \sqrt{1-c^2})\}} \left| \int_0^1 x \left\{ 1 - \frac{c x^2 - 1}{\sqrt{1-x^2} \sqrt{1-c^2 x^2}} \right\} dx \right| \approx$$

$$(V. 21) \approx \frac{1}{\cosh^2(1,62 \cdot 10^3)} \cdot \frac{1}{2} \left| 1 + \frac{1}{c} - \left(\frac{1-c}{c} \right) \left(\frac{1+c}{2c^2} - 1 \right) \int_0^1 \frac{1+c}{1-c} \right|$$

Del mismo modo se tiene:

$$\left| \int_0^1 \frac{x dx}{\sqrt{1-x^2}\sqrt{1-C^2x^2}} \cdot \frac{-\sqrt{1-x^2}\sqrt{1-C^2x^2} - Cx^2 + 1}{\cosh^2(D f(x; -1))} \right| \leq$$

$$\leq \frac{1}{\cosh^2\{D(1-C)\}} \left| \int_0^1 x \left\{ -1 - \frac{Cx^2 - 1}{\sqrt{1-x^2}\sqrt{1-C^2x^2}} \right\} dx \right| \approx$$

$$\approx \frac{1}{2 \cosh^2(3,16 \cdot 10^2)} \left| \frac{1}{C} - 1 - \left(\frac{1-C}{C}\right) \left(\frac{1+C}{2C^2} - 1\right) L_0 \left(\frac{1+C}{1-C}\right) \right|$$

(V. 22)

Debido al cosh en el denominador, (V. 21) & (V. 22) representan "números muy chicos".

Así pues para todos los propósitos prácticos, se tiene:

(V. 23)

$$\Delta \approx L_0 2 \left(\frac{J S N_0 \Omega_0^{1/3}}{\pi} \right)^2 \left\{ \frac{(m_a^*)^2}{k_{F,a}} + \frac{(m_b^*)^2}{k_{F,b}} \right\}$$

REFERENCIAS

- J. G. Beitchman, C. W. Trussel & R. V. Coleman,
Phys. Rev. Letters, 25, 1291 (1970).
- J. F. Dillon, Jr., Magnetism, editado por G. T. Rado y
H. Suhl (Academic Press, New York, 1963). Vol. 3.
- M. Green, Curso de Ferromagnetismo, Facultad de Ciencias,
Universidad de Chile (1971).
- F. Hartmann - Boutron, C. R. Acad. Sc., 252, 3955 (1961)
- C. Herring & C. Kittel, Phys. Rev. 81, 869 (1951)
- T. Kasuya, Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) 16, 58 (1956).
- C. Kittel & J. K. Galt, Solid - State Physics, editado por
F. Seitz y D. Turnbull (Academic Press, Inc., New York, 1956)
- E. Kondorsky, O. S. Galkina & L. A.
Tchernikova, J. Appl. Phys. 29, 243 (1958)
- L. Landau & E. Lifshitz, Phys. Z. Soviet Un.,
8, 153, (1935).
- I. Mannari, Progr. Theoret. Phys. (Kyoto) 22, 335 (1959)
- R. Pick & D. Saint - James, Journal de Physique,
Le Radium, Vol 23 (1962).
- Ryshik - Gradstein, Tables (Berlin 1963)
- E. E. Semenenko & A. I. Sudovtsov, Zh. Eksperim.
i. Teoret. Fiz. 42, 1022 (1962)
- J. C. Slater, Phys. Rev. 35, 509, (1930)