

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

INSTITUTO DE FÍSICA

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Supercondutividade e magnetismo em pnictídeos baseados em ferro
no formalismo do grupo de renormalização até dois loops**

Por

Vanuildo Silva de Carvalho

GOIÂNIA-GO

Abril de 2012

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**Supercondutividade e magnetismo em pnictídeos baseados em ferro
no formalismo do grupo de renormalização até dois loops**

Por

Vanuildo Silva de Carvalho

Dissertação submetida ao Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva

GOIÂNIA-GO

Abril de 2012

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
GPT/BC/UFG**

C331s Carvalho, Vanuildo Silva de.
Supercondutividade e magnetismo em pnictídeos baseados em ferro no formalismo do grupo de renormalização até dois loops [manuscrito] / Vanuildo Silva de Carvalho. - 2012.
105 f. : figs.

Orientador: Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física, 2012.

Bibliografia.
Inclui lista de figuras.
Apêndice.

1. Teoria quântica de campos. 2. Sistemas Fermiônicos. 3. Supercondutividade. 4. Mecânica estatística. I. Título.

CDU: 530.145

Para ser grande, sê inteiro: nada
Teu exagera ou exclui.
Sê todo em cada coisa. Põe quanto és
No mínimo que fazes.
Assim em cada lago a lua toda
Brilha, porque alta vive.

Fernando Pessoa, heterônimo Ricardo Reis.

Dedicado a
Maria Perpétua Carvalho da Silva.

Agradecimentos

Agora que mais uma etapa da minha vida acadêmica chega ao fim, venho mais uma vez agradecer a todas as pessoas que de alguma forma tornaram a minha vida mais agradável ou contribuíram para a minha formação em física. Por isso, nada mais justo que agradecer, em primeiro lugar, ao meu orientador, Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva, pelo seu empenho e pela maneira como me orientou durante o curso de Mestrado em Física.

Deixo aqui um agradecimento especial aos professores Dr. Álvaro de Almeida Caparica e Dr. Salviano de Araújo Leão pelos valorosos ensinamentos em Física durante os quatro anos de graduação na Universidade Federal de Goiás (UFG). Eles foram de fundamental importância para compreensão de outros temas agora na pós-graduação.

Quanto aos meus colegas de Mestrado, pelo estímulo e companheirismo, ficam os meus agradecimentos especialmente a Cinthia Corrêa, Fausto Faria, Francisco Bezerra, Kelen Noletto, Franco Delfino e Rosane Castro.

Agradeço também à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal do Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo apoio financeiro recebido para o desenvolvimento deste trabalho.

Por último, mas não menos importante, agradeço a toda a minha família que, mesmo estando longe, continua a representar muito para mim.

Conteúdo

Lista de Figuras	3
1 Introdução	9
2 Funções de Green para Sistemas Fermiônicos	14
2.1 Representações em mecânica quântica	14
2.1.1 Representação de Schrödinger	14
2.1.2 Representação de Heisenberg	15
2.1.3 Representação de interação	16
2.2 Funções de Green de tempo imaginário	18
2.2.1 Formalismo de tempo imaginário	18
2.2.2 Funções de Green de Matsubara para férmions	20
2.2.3 Função de Green de Matsubara de uma partícula livre $G^{(0)}$	22
2.3 Diagramas de Feynman	23
2.3.1 Série perturbativa para a função de Green de Matsubara G	23
2.3.2 Regras de Feynman	24
3 Formulação da Mecânica Estatística via Integral Funcional	29
3.1 Álgebra de Grassmann	29
3.2 Estados coerentes para férmions	30
3.3 Integral funcional para a função de partição quântica	32
4 Grupo de Renormalização de Teoria de Campos	37
4.1 Divergências e sua regularização em teoria de campos	37
4.2 Sistemática do grupo de renormalização de teoria de campos	38
5 Renormalização do Modelo de Duas Bandas para os Pnictídeos	42
5.1 O modelo de duas bandas para os pnictídeos	43
5.2 Teoria de perturbação e grupo de renormalização até um loop	46

5.3	Cálculo da auto-energia e do peso da quasipartícula do modelo	54
5.4	O grupo de renormalização até dois loops	59
5.5	Cálculo das susceptibilidades onda de densidade e supercondutora	64
5.6	Cálculo das susceptibilidades de carga e spin uniformes	69
6	Resultados Numéricos	74
6.1	O modelo de duas bandas em um loop	75
6.2	O modelo de duas bandas em dois loops	80
7	Conclusão	90
A	Transformação canônica para a Hamiltoniana do modelo de duas bandas	94
	Bibliografia	96

Lista de Figuras

1.1	(a) Estrutura cristalina do pnictídeo LaAsFeO [4]. (b) Zona de Brillouin estendida com as superfícies de Fermi de buracos (centro) e de elétrons (cantos) do pnictídeo LaAsFeO para a situação onde o mesmo está dopado com elétrons [12].	10
2.1	Propagador livre $G_\sigma^{(0)}(\mathbf{k}, ik_0) = (ik_0 - \xi_{\mathbf{k}})^{-1}$.	25
2.2	Processo de interação.	25
2.3	(a) Representação da função de Green $G_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$ (linha sólida à esquerda da igualdade) em termos de diagramas de Feynman conectados. Os dois diagramas de primeira ordem nessa figura são chamados de diagramas de Hartree-Fock. (b) Auto-energia $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$ (figura à esquerda da igualdade) dada em função dos diagramas irreduzíveis de primeira e segunda ordem.	26
2.4	(a) Representação esquemática da função de Green de duas partículas em termos dos diagramas de Feynman. (b) Função vértice irreduzível de quatro pontos $\Gamma^{(4)}$ em função de alguns diagramas de Feynman de interação entre duas partículas.	27
4.1	Representação por meio dos diagramas de Feynman dos contratermos de renormalização do campo fermiônico (a) e de interação (b).	40
5.1	Esquema da zona de Brillouin estendida utilizada no modelo de duas bandas para uma situação onde o sistema não está dopado. As superfícies de Fermi de buracos e elétrons, nesse caso, são circunferências idênticas centradas, respectivamente, nos pontos $\Gamma = (0, 0)$ e $\mathbf{M} = (\pi, \pi)$.	44
5.2	Representação em termos dos diagramas de Feynman dos cinco tipos de interação relevantes no modelo de duas bandas. As linhas sólidas e tracejadas representam, respectivamente, partículas da banda de buracos (férmions- c) e partículas da banda de elétrons (férmions- f).	46
5.3	“Bolhas” de polarização que contribuem para a função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ ($i = 1, \dots, 4$) no modelo de duas bandas. Nessas figuras, representamos apenas os momentos e omitimos a frequência para não carregar a notação.	49

5.4	Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_1 na aproximação de um loop.	50
5.5	Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento “para trás” U_2 na aproximação de um loop.	51
5.6	Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento Umklapp U_3 na aproximação de um loop.	51
5.7	Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_4 na aproximação de um loop.	51
5.8	Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_5 na aproximação de um loop.	52
5.9	Representação dos contratermos ΔU_{iR} ($i = 1, \dots, 5$) através dos diagramas de Feynman.	53
5.10	Diagramas de Feynman até dois loops associados à auto-energia. O último diagrama do contratermo da auto-energia $\Delta \Sigma_R$ corresponde à correção ΔZ do peso da quasipartícula.	57
5.11	Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_{1R} na aproximação de dois loops.	60
5.12	Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento “para trás” U_{2R} na aproximação de dois loops.	61
5.13	Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_{4R} na aproximação de dois loops.	63
5.14	Diagramas de Feynman de um loop para o cálculo das funções irreduzíveis $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q} \approx 0)$ (círculos escuros) relacionadas à instabilidade supercondutora (a) e à instabilidade onda de densidade (b). As funções respostas renormalizadas $\mathcal{T}_{SC}^{R(c)}$, $\mathcal{T}_{SC}^{R(f)}$ e $\mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}$ são representadas, na figura, por círculos cinzas e os seus contratermos ($\Delta \mathcal{T}_{SC}^{R(c)}$, $\Delta \mathcal{T}_{SC}^{R(f)}$ e $\Delta \mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}$) por círculos cinzas com cruces.	65
5.15	Diagramas de Feynman para o cálculo dos diferentes tipos de susceptibilidades renormalizadas supercondutora (χ_{SC}^R) e onda de densidade (χ_{OD}^R).	68
5.16	Função vértice irreduzível $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q} \approx 0)$ (círculo escuro à esquerda da igualdade) em função dos diagramas de Feynman até dois loops para o cálculo das susceptibilidades de carga e spin uniformes.	70
5.17	Diagramas de Feynman utilizados no cálculo das susceptibilidades uniformes $\chi_{Carga}^{R(i)}$ e $\chi_{Spin}^{R(i)}$ para partículas sobre a superfície de Fermi de buracos (a) e de elétrons (b).	72

- 6.1 Solução das equações do grupo de renormalização até um loop nas variáveis $\bar{U}_{1R}/\bar{U}_{3R}$ e $\bar{U}_{4R}/\bar{U}_{3R}$. Na situação dada por $\bar{U}_{2R} = 0$ e $\bar{U}_{3R} > 0$ como condição inicial, o sistema flui, no limite de baixa energia, para um estado onde todos os acoplamentos divergem. Esse estado é representado por um ponto fixo cujos valores críticos dos acoplamentos comportam-se como $\bar{U}_{2R}/\bar{U}_{1R} = 0$, $\bar{U}_{3R}/\bar{U}_{1R} = \sqrt{5}$ e $\bar{U}_{4R}/\bar{U}_{1R} = -1$ 75
- 6.2 Susceptibilidades em unidades de N_0 para o modelo de duas bandas derivadas através do GR até um loop. Vemos, nos dois gráficos acima, que a susceptibilidade χ_{ODS+}^R supera todas as outras para as condições iniciais $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ e $\bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = 0.18$ (gráfico superior) e $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ (gráfico inferior). Os valores do passo de GR onde as susceptibilidades divergem são, respectivamente, $l_{\text{superior}} \approx 2.51$ e $l_{\text{inferior}} \approx 2.41$ 77
- 6.3 Solução das equações do grupo de renormalização até dois loops nas variáveis $\bar{U}_{3R}/\bar{U}_{1R}$ e $\bar{U}_{4R}/\bar{U}_{1R}$. Na situação dada por $\bar{U}_{2R} = 0$ e $\bar{U}_{3R} > 0$ como condição inicial, o sistema flui, no limite de baixa energia, para um novo ponto fixo onde todos os acoplamentos também divergem. Esse ponto crítico é representado pelos valores dos acoplamentos que comportam-se como $\bar{U}_{2R}/\bar{U}_{1R} = 0$, $\bar{U}_{3R}/\bar{U}_{1R} = 0$ e $\bar{U}_{4R}/\bar{U}_{1R} \approx -1.2$ 81
- 6.4 Solução numérica para o peso da quasipartícula Z utilizando as condições iniciais $\bar{U}_{1R}(0) = \bar{U}_{4R}(0) = 0.20$ e $\bar{U}_{2R}(0) = \bar{U}_{3R}(0) = 0.18$ para os acoplamentos. O valor $l_c \approx 2.33$ representa a escala de energia ω_c onde os acoplamentos do modelo de duas bandas começam a divergir e $Z_c \approx 0.802$ corresponde ao valor do peso da quasipartícula nesse ponto. 82
- 6.5 Funções respostas \mathcal{T}_i^R ($i = SC-s^\pm, SC-s, ODC\pm, ODS\pm$) para o modelo de duas bandas derivadas através do GR até dois loops. A função resposta \mathcal{T}_{ODS+}^R , nos dois gráficos acima, supera todas as outras para as condições iniciais $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ e $\bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = 0.18$ (gráfico superior) e $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ (gráfico inferior). Os valores do passo de GR onde essas funções respostas divergem são, respectivamente, $l_{\text{superior}} \approx 2.33$ e $l_{\text{inferior}} \approx 2.23$ 84

6.6	Susceptibilidades χ_i^R ($i = SC-s^\pm, SC-s, ODC\pm, ODS\pm$) em unidades de N_0 para o modelo de duas bandas derivadas através do GR até dois loops. Vemos, nos dois gráficos acima, que a susceptibilidade χ_{ODS+}^R supera todas as outras para as condições iniciais $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ e $\bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = 0.18$ (gráfico superior) e $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ (gráfico inferior). Os valores do passo de GR onde as susceptibilidades divergem são, respectivamente, $l_{\text{superior}} \approx 2.33$ e $l_{\text{inferior}} \approx 2.23$	85
6.7	Susceptibilidades χ_{ODS}^R (χ_{ODS+}^R e χ_{ODS-}^R), χ_{ODC}^R (χ_{ODC+}^R e χ_{ODC-}^R) e χ_{SC}^R ($\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$ e $\chi_{SC}^{R(s)}$) em unidades de N_0 para o modelo de duas bandas derivadas através do GR até dois loops para $\bar{U}_{1R}(0) = \bar{U}_{4R}(0) = 0.40$, $\bar{U}_{2R} = 0.35$ e $\bar{U}_{3R}(0) = 0$	87
6.8	Fluxo do GR até dois loops para as susceptibilidades uniformes de carga χ_{Carga}^R e spin χ_{Spin}^R . Nesse caso, empregamos as condições iniciais $\bar{U}_{1R}(0) = \bar{U}_{4R}(0) = 0.20$ e $\bar{U}_{2R}(0) = \bar{U}_{3R}(0) = 0.18$ para os acoplamentos.	88

Resumo

Estudamos as propriedades de baixa energia de um modelo de duas bandas por meio do grupo de renormalização (GR) de teoria de campos até dois loops para a descrição de alguns pnictídeos supercondutores baseados em ferro. Inicialmente, reproduzimos alguns resultados conhecidos do GR até um loop para mostrar como se deve proceder com o GR de teoria de campos. Calculamos, então, a auto-energia do modelo e as funções vértices irreduzíveis de quatro pontos $\Gamma^{(4)}$ até dois loops. Derivamos as equações do GR, nessa ordem de aproximação, para os acoplamentos e para o peso da quasipartícula do modelo. Seguindo um procedimento similar, mostramos como se determinar as possíveis instabilidades do estado fundamental do modelo e a natureza das excitações elementares de baixa energia por meio do cálculo das equações do GR até dois loops para as susceptibilidades supercondutoras do tipo onda- s estendida (s^\pm) e onda- s convencional (s^{++}), susceptibilidades de ondas de densidade de carga e spin e também as susceptibilidades uniformes de carga e spin. A análise numérica dessas equações revela que os acoplamentos do modelo de duas bandas são divergentes no limite de baixa energia, mas a razão deles tende para um ponto fixo. Obtemos, por meio dessa análise, que a instabilidade antiferromagnética é a dominante, enquanto a instabilidade supercondutora é a segunda mais importante. Mostramos que a instabilidade supercondutora do tipo s^\pm se sobressai sobre a do tipo s^{++} quando a interação do tipo Umklapp está presente e, eventualmente, supera a instabilidade antiferromagnética para algum valor de dopagem no sistema. A solução numérica para o peso da quasipartícula revela que essa quantidade sempre fica próxima do seu valor inicial durante o processo de renormalização do modelo, enquanto que as susceptibilidades de carga e spin uniformes permanecem finitas para escalas de energia onde o método do GR até dois loops é válido. Esses resultados são consistentes com a interpretação de que o estado normal desse modelo é, de fato, descrito pela teoria do líquido de Fermi de Landau com excitações de quasipartículas bem definidas no limite de baixa energia.

Abstract

We study the low-energy properties of a two-band model by means of the field-theoretical renormalization group (RG) up to two loops in order to describe some iron-based pnictide superconductors. Initially, we reproduce some known results of the RG up to one loop to show how one should proceed with the field-theoretical RG. We then calculate the self-energy of the model and the irreducible four-point vertex functions $\Gamma^{(4)}$ up to two loops. We derive the RG equations for the couplings and the quasiparticle weight of the model at this order of approximation. Following a similar procedure, we show how to determine the possible instabilities of the ground state of the model and the nature of the low-energy elementary excitations by calculating the RG flow equations up to two loops for the extended s-wave (s^\pm) and conventional s-wave (s^{++}) superconducting susceptibilities, charge and spin density wave susceptibilities and also the uniform charge and spin susceptibilities. The numerical analysis of these equations reveals that the couplings of the two-band model are divergent in the low-energy limit, but their ratio flows to a fixed point. We obtain, by means of this analysis, that the antiferromagnetic instability is the dominant one, whereas the superconducting instability is the second most important instability. We show that the superconducting instability of s^\pm -type exceeds the s^{++} -type when the Umklapp interaction is present and may overcome the antiferromagnetic instability for some doping value in the system. The numerical solution for the quasiparticle weight reveals that this quantity is always close to its initial value during the renormalization procedure of the model, while the uniform charge and spin susceptibilities remain finite for the energy scales where the RG approach up to two loops is valid. These results are consistent with the interpretation that the normal state of that model is, in fact, described by Landau's Fermi liquid theory with well-defined quasiparticle excitations in the low-energy limit.

Capítulo 1

Introdução

A descoberta do fenômeno de supercondutividade de altas temperaturas em pnictídeos (compostos binários dos elementos do quinto grupo da tabela periódica: N, P, As, Sb, Bi) baseados em ferro representou um grande avanço na área de materiais supercondutores nas últimas duas décadas [1, 2]. O antagonismo existente entre supercondutividade e magnetismo levou os pesquisadores a evitar o uso de materiais magnéticos como blocos primários de novos materiais supercondutores, uma vez que os campos magnéticos formados no interior deles poderiam destruir os pares de Cooper, elemento essencial para o surgimento da supercondutividade em supercondutores descritos pela teoria BCS [3]. Como demonstrado em um trabalho de Boeri *et al.* [4], a interação elétron-fônon é insuficiente para explicar os valores da temperatura crítica supercondutora T_c encontrados nos pnictídeos, que pode chegar a $T_c = 56K$ [5]. Tal cenário coloca esses materiais na classe dos supercondutores não-convencionais, onde se acredita que um mecanismo puramente eletrônico seja o principal responsável pela formação do estado supercondutor.

Os pnictídeos são materiais antiferromagnéticos para o regime subdopado e à medida que são dopados com buracos ou elétrons se tornam supercondutores [6], como mostra a Fig. 1.1a para o composto LaAsFeO. Eles também são materiais aproximadamente bidimensionais, o que significa que há condução de corrente somente nos planos determinados pelos átomos de ferro (Fe) e de arsênio (As). Os pnictídeos exibem também comportamento semimetálico para todos os valores de dopagem onde eles foram estudados [7–9] e até agora não há evidências

experimentais da presença de gaps de carga ou spin nesses materiais. Uma outra característica interessante dos pnictídeos é que eles não são tão correlacionados quanto outras famílias de materiais supercondutores e, por essa razão, há um consenso na comunidade científica de que eles podem ser bem descritos por teorias de fraco acoplamento [10,11]. Acredita-se, da mesma forma, que o entendimento da física relacionada aos pnictídeos pode vir ajudar a explicar o fenômeno da supercondutividade não-convencional presente também nos chamados cupratos supercondutores, nos materiais do tipo férmions pesados e nos compostos orgânicos.

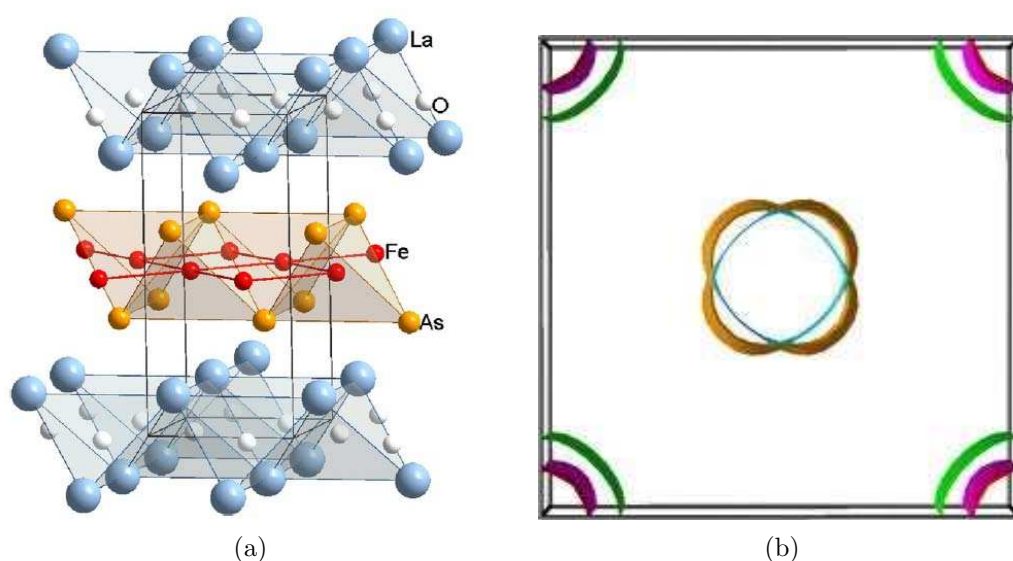


Figura 1.1: (a) Estrutura cristalina do pnictídeo LaAsFeO [4]. (b) Zona de Brillouin estendida com as superfícies de Fermi de buracos (centro) e de elétrons (cantos) do pnictídeo LaAsFeO para a situação onde o mesmo está dopado com elétrons [12].

Os resultados sobre a estrutura eletrônica dos pnictídeos decorrem principalmente de experimentos de espectroscopia de fotoemissão angular resolvida (ARPES) [13–16] e cálculos de estrutura de bandas [17,18]. Em linhas gerais, eles revelam que todos os compostos dessa classe de materiais compartilham aproximadamente a mesma estrutura eletrônica. Ela consiste em duas ou três superfícies de Fermi de buracos e duas superfícies de Fermi de elétrons centradas, respectivamente, nos pontos $\Gamma = (0,0)$ e $\mathbf{M} = (\pi, \pi)$ na chamada zona de Brillouin estendida (ver Fig. 1.1b). Esse tipo de zona leva em conta o fato de que somente metade dos estados dos átomos de ferro (Fe) são na verdade idênticos nos pnictídeos, em razão, por exemplo, de

o arsênio (As) ficar acima ou abaixo do plano determinado pelos átomos de ferro na rede. No regime com ausência de dopagem, essas superfícies de Fermi têm aproximadamente a mesma forma e estão conectadas por um vetor de nesting $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Quando o sistema é dopado, essas superfícies de Fermi mudam de tamanho e o nesting deixa de existir. Como dissemos anteriormente, essas etapas correspondem, respectivamente, às situações onde os pnictídeos apresentam uma fase antiferromagnética e uma fase supercondutora.

Inspirados por esses resultados experimentais, vários pesquisadores propuseram alguns modelos com apenas interações eletrônicas para tentar explicar as propriedades fundamentais dos pnictídeos supercondutores, como o mecanismo responsável pelo emparelhamento eletrônico e o tipo de simetria que o gap supercondutor desses materiais apresenta. Estes trabalhos envolvem modelos de duas [19–23], quatro [24–26] e cinco bandas [27]. Eles contêm várias ordens que competem entre si e devem, a princípio, ser tratadas em pé de igualdade. A aplicação de teoria de campo médio a esses modelos mostra que eles não possuem fase supercondutora, mesmo para o regime com alta dopagem [27]. Na verdade, esse método, quando aplicado ao modelo $J_1 - J_2$, descreve um estado com flutuações antiferromagnéticas que evolui para um estado supercondutor do tipo onda- s estendida (s^\pm), à medida que dopamos o sistema com elétrons ou buracos, como é observado para os pnictídeos [28]. Contudo, o seu uso depende da existência de um gap de carga para esses materiais e até o presente momento, como dissemos, não há evidência experimental nesse sentido [29]. Em vista da sua natureza imparcial, o método do grupo de renormalização (GR) torna-se uma ferramenta teórica adequada para se lidar com as diversas tendências presentes nesses modelos [30].

Entre os modelos usados para a descrição das propriedades físicas dos pnictídeos, o que possui estrutura mais simples é o modelo de duas bandas proposto por Chubukov *et al.* [19]. No Capítulo 4 desta dissertação daremos uma descrição completa desse modelo. Em linhas gerais, ele considera apenas a existência de uma superfície de Fermi de buracos e outra de elétrons na zona de Brillouin estendida e a dependência das interações somente com as superfícies e não com a posição angular exata sobre elas. Aplicando o método do GR até um loop nesse

modelo, Chubukov *et al.* concluíram que, para o regime de dopagem zero, ele apresenta uma fase antiferromagnética do tipo onda de densidade de spin em concordância com os dados experimentais e, no caso de uma dopagem finita, uma fase supercondutora com simetria onda- s estendida (s^\pm) para o gap supercondutor, como foi previsto pela primeira vez por Mazin *et al.* [18]. Em outro importante trabalho realizado por Wang *et al.* [27], um modelo mais complexo de cinco bandas foi analisado usando o método do GR funcional na aproximação de um loop. Nesse caso, as equações diferenciais para os parâmetros do modelo dependem da discretização das cinco superfícies de Fermi presentes na zona de Brillouin, exigindo portanto um alto custo computacional para resolvê-las. Mesmo assim, os seus resultados mostram uma fase antiferromagnética no regime subdopado que, com o aumento da dopagem, cede lugar para um estado supercondutor do tipo onda- s estendida. Para tentar mostrar que esses resultados para os modelos de duas e cinco bandas não dependem dos detalhes da estrutura de bandas e de algumas aproximações empregadas, Platt *et al.* [25] analisaram um modelo de quatro bandas para os pnictídeos por meio do método do GR funcional de um loop e também encontraram resultados semelhantes aos obtidos por Chubukov *et al.* e Wang *et al.*. Isto sugere que esses modelos podem estar na mesma classe de universalidade e, portanto, ter a mesma física de baixa energia. Consequentemente, isso implicaria que o modelo de duas bandas pode ser um modelo efetivo mínimo capaz descrever a física de baixa energia de alguns pnictídeos supercondutores.

Tendo em vista os resultados obtidos pelo método do grupo de renormalização até um loop para o modelo de duas bandas, vamos estudá-lo, nesta dissertação, por meio do grupo de renormalização de dois loops de teoria de campos [32]. A razão para a escolha desse método é devida à sua flexibilidade frente ao método do grupo de renormalização de Wilson ou à sua generalização funcional [33], quando efeitos de flutuações quânticas de ordem superior são introduzidos. Esse método já mostrou ser eficiente na descrição das propriedades de baixa energia do modelo de Hubbard em duas dimensões [34–37], que se acredita conter os ingredientes necessários para a descrição das propriedades dos cupratos supercondutores.

O trabalho está estruturado da seguinte forma. No Capítulo 2, discutimos o formalismo

da teoria quântica de campos para se chegar às regras de Feynman e, conseqüentemente, à definição dos seus diagramas. No Capítulo 3, introduzimos o conceito de uma álgebra de Grassmann e escrevemos a grande função de partição em termos de uma integral funcional (ou integral de caminho) para férmions. No Capítulo 4, descrevemos as etapas do método do grupo de renormalização de teoria de campos de um e dois loops para a derivação de uma teoria efetiva de baixa energia para um modelo fermiônico. No Capítulo 5, discutimos, em um primeiro momento, as suposições acerca do modelo de duas bandas para a sua validação como um modelo mínimo capaz de descrever a física de baixa energia de alguns pnictídeos supercondutores. Depois, aplicamos a metodologia do grupo de renormalização de teoria de campos de um loop para deduzir as equações para os chamados acoplamentos efetivos do modelo. Esses resultados servem apenas como ilustração desse método, uma vez que eles já são conhecidos na literatura. Como passo seguinte, calculamos a auto-energia do modelo e deduzimos as equações do grupo de renormalização até dois loops para os acoplamentos. Essa parte do trabalho é nova e o cálculo completo do grupo de renormalização até dois loops para esse modelo foi feito pela primeira vez pelo nosso grupo. Nesse sentido, definimos as possíveis ordens que podem existir no limite de baixa energia do modelo de duas bandas e calculamos as suas equações de grupo de renormalização associadas. O Capítulo 6 contém a solução numérica de todas as equações deduzidas no Capítulo 5, bem como a interpretação física dos resultados apresentados. Por último, mostramos, no Capítulo 7, a conclusão do trabalho desenvolvido nesta dissertação.

Capítulo 2

Funções de Green para Sistemas Fermiônicos

Neste capítulo, deduziremos alguns resultados conhecidos da teoria quântica de campos para sistemas fermiônicos de muitos corpos como a determinação da função de Green de um sistema interagente e o método diagramático de Feynman que permite o seu cálculo perturbativo. A exposição aqui segue os livros textos de Bruus & Flensberg [38], Fetter & Wallecka [39] e Mattuck [40].

2.1 Representações em mecânica quântica

2.1.1 Representação de Schrödinger

A representação de Schrödinger é útil para se trabalhar quando a Hamiltoniana H de um determinado sistema não possui dependência temporal. Os vetores de estado $|\psi(t)\rangle$ nessa representação, pelo contrário, vão sempre depender do tempo, sendo a sua evolução governada pela equação de Schrödinger. Dado então o vetor de estado $|\psi(0)\rangle$ para $t = 0$, obtém-se facilmente que o vetor de estado em um instante de tempo qualquer pode ser escrito como:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi(0)\rangle. \quad (2.1)$$

Daqui em diante, vamos utilizar as energias em unidades de frequência e fazer a transformação $H/\hbar \rightarrow H$ no que se segue (ou seja, $\hbar = 1$). No final dos cálculos, poderemos, sem problemas, converter as unidades de frequência de volta em unidades de energia. Com esta notação,

organizamos a representação de Schrödinger com seus estados $|\psi(0)\rangle$ e operadores A da seguinte maneira:

$$\text{Representação de Schrödinger} \left\{ \begin{array}{l} \text{estados:} \quad |\psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\psi(0)\rangle, \\ \text{operadores:} \quad A \text{ pode ou não depender do tempo.} \\ \quad \quad \quad H \text{ não depende do tempo.} \end{array} \right.$$

Para situações onde trabalhamos com operadores A independentes do tempo, a representação de Schrödinger se adequa muito bem. Algumas vezes, contudo, é preferível ter toda a dependência temporal nos operadores e trabalhar com vetores de estado independentes do tempo. Este tipo de representação existe e é conhecida como representação de Heisenberg.

2.1.2 Representação de Heisenberg

A ideia básica da representação de Heisenberg é obter uma descrição de um sistema quântico através de vetores de estado independentes do tempo $|\psi_0\rangle$, de tal maneira que toda a dependência temporal seja transferida para os operadores. Supomos também que a Hamiltoniana H não varie explicitamente com o tempo. Então, dado um operador A na representação de Schrödinger, o operador correspondente $A(t)$ na representação de Heisenberg fica determinado pela seguinte transformação unitária:

$$A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}. \quad (2.2)$$

A equivalência entre essas duas representações é demonstrada calculando os respectivos elementos de matriz de um dado operador. Como é fácil de demonstrar, segue pela definição acima que $\langle \psi'(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi'_0 | A(t) | \psi_0 \rangle$, onde $\langle \psi'_0 |$ e $|\psi_0\rangle$ são, respectivamente, um *bra* e um *ket* na representação de Heisenberg. As principais características dessa representação podem ser resumidas da seguinte forma:

$$\text{Representação de Heisenberg} \left\{ \begin{array}{l} \text{estados:} \quad |\psi_0\rangle = e^{iHt}|\psi(t)\rangle, \\ \text{operadores:} \quad A(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}. \\ \quad \quad \quad H \text{ não depende do tempo.} \end{array} \right.$$

As representações de Schrödinger e Heisenberg são preferíveis com a suposição de uma Hamiltoniana H independente do tempo. No caso geral, quando temos Hamiltonianas com dependência temporal explícita, é mais conveniente utilizar a chamada representação de interação.

2.1.3 Representação de interação

A terceira e última representação, conhecida como representação de interação, é introduzida para lidar com situações onde um sistema descrito por uma Hamiltoniana não-interagente $\bar{H}_0 = H_0 - \mu N$ é perturbado por alguma interação¹, possivelmente dependente do tempo, $V(t)$:

$$\bar{H} = H - \mu N = \bar{H}_0 + V(t). \quad (2.3)$$

A ideia por trás da representação de interação é separar a evolução temporal trivial devida a \bar{H}_0 da evolução de $V(t)$. Isso é obtido usando apenas \bar{H}_0 na transformação unitária na Eq. (2.2). Como resultado, os vetores de estado $|\hat{\psi}(t)\rangle$ e os operadores $\hat{A}(t)$ nessa representação passam agora a depender também do tempo². As equações que definem a representação de interação são então as seguintes:

$$\text{Representação de interação} \begin{cases} \text{estados:} & |\hat{\psi}(t)\rangle = e^{i\bar{H}_0 t} |\psi(t)\rangle, \\ \text{operadores:} & \hat{A}(t) = e^{i\bar{H}_0 t} A e^{-i\bar{H}_0 t}. \\ & \bar{H}_0 \text{ não depende do tempo.} \end{cases}$$

O primeiro exemplo da utilidade da representação de interação vem do cálculo da derivada temporal de $|\hat{\psi}(t)\rangle$. Usando as definições dadas acima, obtemos que:

$$i\partial_t |\hat{\psi}(t)\rangle = \hat{V}(t) |\hat{\psi}(t)\rangle. \quad (2.4)$$

Vemos assim que a equação de Schrödinger resultante para $|\hat{\psi}(t)\rangle$ contém apenas referência explícita à parte de interação $\hat{V}(t)$ da Hamiltoniana total \bar{H} . Isso significa que a evolução temporal de um estado $|\hat{\psi}(t_0)\rangle$, de um instante inicial t_0 para um instante qualquer t , pode ser dada por meio de um operador unitário $\hat{U}(t, t_0)$, que possui dependência somente com $\hat{V}(t)$. O operador $\hat{U}(t, t_0)$ é determinado por

$$|\hat{\psi}(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\hat{\psi}(t_0)\rangle. \quad (2.5)$$

¹As quantidades μ e N correspondem, respectivamente, ao potencial químico e ao operador número de ocupação.

²A notação para os vetores de estado e operadores na representação de interação difere da de Heisenberg ou de Schrödinger pelo uso do acento circunflexo nos mesmos.

Quando V e \bar{H} são independentes do tempo, $\hat{U}(t, t_0)$ possui uma forma simples dada por:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{i\bar{H}_0 t} e^{-i\bar{H}(t-t_0)} e^{-i\bar{H}_0 t_0}. \quad (2.6)$$

Disto é fácil ver que $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$, ou seja, \hat{U} é realmente um operador unitário.

No caso geral, quando a interação V varia com o tempo, inserimos a Eq. (2.5) na Eq. (2.4) e efetuamos a diferenciação com relação ao tempo. Observamos que a Eq. (2.5) para o vetor de estado $|\hat{\psi}(t)\rangle$ implica, naturalmente, que $\hat{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}$, e obtemos:

$$i\partial_t \hat{U}(t, t_0) = \hat{V}(t) \hat{U}(t, t_0). \quad (2.7)$$

Por integração desta equação diferencial, chegamos à seguinte equação integral para $\hat{U}(t, t_0)$:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbf{1} + \frac{1}{i} \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t') \hat{U}(t', t_0), \quad (2.8)$$

que pode ser resolvida iterativamente. A solução geral, conhecida como série de Dyson, é a seguinte:

$$\hat{U}(t, t_0) = \mathbf{1} + \frac{1}{i} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}(t_1) + \frac{1}{i^2} \int_{t_0}^t dt_1 \hat{V}(t_1) \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \hat{V}(t_2) + \dots \quad (2.9)$$

Podemos ainda escrever a expressão acima da seguinte forma compacta:

$$\hat{U}(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \dots \int_{t_0}^t dt_n T_t \left[\hat{V}(t_1) \dots \hat{V}(t_n) \right] = T_t \left[e^{-i \int_{t_0}^t dt' \hat{V}(t')} \right], \quad (2.10)$$

onde utilizamos o operador ordenamento temporal T_t . Se temos um produto de n fatores $\hat{V}(t_j)$ e p é uma permutação desses operadores que pertence ao conjunto S_n , então a ação de T_t fica definida por³:

$$T_t \left[\hat{V}(t_1) \hat{V}(t_2) \dots \hat{V}(t_n) \right] \equiv \sum_{p \in S_n} \hat{V}(t_{p(1)}) \hat{V}(t_{p(2)}) \dots \hat{V}(t_{p(n)}) \times \theta(t_{p(1)} - t_{p(2)}) \theta(t_{p(2)} - t_{p(3)}) \dots \theta(t_{p(n-1)} - t_{p(n)}), \quad (2.11)$$

onde $\theta(t)$ representa a função degrau.

³O operador ordenamento temporal é definido da seguinte maneira: dado um produto de operadores dependentes do tempo, o operador T_t ordena-o de forma que o operador com o menor tempo desse produto fique sempre à direita e o com o maior tempo, à esquerda

A Eq. (2.10) para o operador unitário $\hat{U}(t, t_0)$ é o ponto de partida para a teoria de perturbação de ordem infinita e tem uma papel importante na definição dos diagramas de Feynman. Por esse motivo, ela é uma das equações centrais em teoria de perturbação de sistemas de muitos corpos.

2.2 Funções de Green de tempo imaginário

2.2.1 Formalismo de tempo imaginário

Similarmente ao que foi feito na seção anterior, vamos agora definir as chamadas representações de tempo imaginário, fazendo a seguinte rotação de Wick $it \rightarrow \tau$. Dessa forma, introduzimos a nova representação de Heisenberg:

$$A(\tau) = e^{\tau\bar{H}} A e^{-\tau\bar{H}}. \quad (2.12)$$

Da mesma maneira, podemos definir a representação de interação de tempo imaginário como:

$$\hat{A}(\tau) = e^{\tau\bar{H}_0} A e^{-\tau\bar{H}_0}. \quad (2.13)$$

Definindo a Hamiltoniana dependente do tempo $\bar{H} = \bar{H}_0 + V$, onde $\bar{H}_0 = H_0 - \mu N$ é o termo quadrático e V o termo de interação, a relação entre a representação de Heisenberg e a de interação para tempos imaginários segue o que foi explicado anteriormente para tempos reais. Se considerarmos o produto de operadores $A(\tau)B(\tau')$ e o escrevermos em termos dos operadores correspondentes na representação de interação, obtemos:

$$A(\tau)B(\tau') = \hat{U}(0, \tau)\hat{A}(\tau)\hat{U}(\tau, \tau')\hat{B}(\tau')\hat{U}(\tau', 0), \quad (2.14)$$

onde, como na Eq. (2.7), o operador de evolução temporal \hat{U} , na representação de interação, é definido por:

$$\hat{U}(\tau, \tau') = e^{\tau\bar{H}_0} e^{-(\tau-\tau')\bar{H}} e^{-\tau'\bar{H}_0}. \quad (2.15)$$

Essa relação implica que $\hat{U}(\tau, \tau'')\hat{U}(\tau'', \tau') = \hat{U}(\tau, \tau')$, ou seja, \hat{U} é realmente um operador unitário.

A expressão para o operador evolução \hat{U} na Eq. (2.15) não é a ideal para trabalharmos no âmbito da teoria de perturbação, onde uma série perturbativa para esse operador é necessária. Para resolver esse problema, primeiro derivamos o referido operador com relação a τ , ou seja,

$$\partial_\tau \hat{U}(\tau, \tau') = e^{\tau \bar{H}_0} (\bar{H}_0 - \bar{H}) e^{-(\tau - \tau') \bar{H}} e^{-\tau' \bar{H}_0} = -\hat{V}(\tau) \hat{U}(\tau, \tau'). \quad (2.16)$$

Essa equação é análoga à Eq. (2.7) e a condição inicial de ambas é a mesma. Agora, utilizando o mesmo procedimento iterativo utilizado na seção anterior para representação de interação de tempos reais, determinamos que:

$$\begin{aligned} \hat{U}(\tau, \tau') &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (-1)^n \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \cdots \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_n T_\tau [\hat{V}(\tau_1) \cdots \hat{V}(\tau_n)] \\ &= T_\tau \exp \left(- \int_{\tau'}^{\tau} d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \right). \end{aligned} \quad (2.17)$$

O operador T_τ é o operador ordenamento temporal definido na Eq. (2.11), isto é, os operadores são ordenados tal maneira que $T_\tau[A(\tau)B(\tau')]$ é igual a $A(\tau)B(\tau')$ para $\tau > \tau'$ and $B(\tau')A(\tau)$ quando $\tau' > \tau$.

O formalismo de tempo imaginário pode ser usado para se trabalhar com o operador densidade do ensemble grande canônico $\rho_G = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta \bar{H}}$, onde $\mathcal{Z} = \text{Tr} \{ \rho_G \}$ é a função de partição desse ensemble e $\beta = 1/T$, a temperatura recíproca⁴. Usando as Eqs. (2.15) e (2.17) definidas acima, podemos reescrever esse operador da seguinte forma:

$$\rho_G = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta \bar{H}_0} \hat{U}(\beta, 0) = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta \bar{H}_0} T_\tau \exp \left(- \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \right). \quad (2.18)$$

Como veremos, essa propriedade do operador densidade ρ_G juntamente com as do operador ordenamento temporal T_τ são muito importantes para reescrever valores esperados (ou médios) em uma forma compacta.

Considere agora o valor esperado do ordenamento temporal dos operadores na Eq. (2.14), ou seja,

$$\langle T_\tau A(\tau) B(\tau') \rangle = \text{Tr} \{ \rho_G T_\tau [A(\tau) B(\tau')] \}, \quad (2.19)$$

⁴Nesse caso, estamos considerando a temperatura recíproca β em unidades da constante de Boltzmann k_B .

Para o caso onde $\tau > \tau'$, os operadores $A(\tau)$ e $B(\tau)$ são ordenados como na Eq. (2.14) e a expressão do valor médio acima pode ser reescrita segundo

$$\begin{aligned} \langle T_\tau A(\tau)B(\tau') \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{U}(\beta, 0) \hat{U}(0, \tau) \hat{A}(\tau) \hat{U}(\tau, \tau') \hat{B}(\tau') \hat{U}(\tau', 0) \right\} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{U}(\beta, \tau) \hat{A}(\tau) \hat{U}(\tau, \tau') \hat{B}(\tau') \hat{U}(\tau', 0) \right\}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde empregamos a propriedade do operador evolução \hat{U} ser unitário. Agora, podemos reintroduzir o ordenamento temporal. Antes, contudo, observemos que quando escrevemos $\hat{U}(\tau, \tau')$, como na Eq. (2.17), apenas as interações $\hat{V}(\tau'')$ com argumento temporal τ'' entre τ e τ' entram. Dessa forma, pela definição do operador ordenamento temporal, podemos escrever

$$\hat{U}(\beta, \tau) \hat{A}(\tau) \hat{U}(\tau, \tau') \hat{B}(\tau') \hat{U}(\tau', 0) = T_\tau \left[\hat{U}(\beta, 0) \hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') \right]. \quad (2.21)$$

O caso oposto, onde $\tau' > \tau$ e $T_\tau \left[\hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') \right] = \pm \hat{B}(\tau') \hat{A}(\tau)$, segue o mesmo raciocínio descrito acima e o resultado é idêntico ao obtido na Eq. (2.21).

O resultado final para o valor esperado definido na Eq. (2.19) pode então ser calculado como:

$$\begin{aligned} \langle T_\tau [A(\tau)B(\tau')] \rangle &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} T_\tau \left[\hat{U}(\beta, 0) \hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') \right] \right\} \\ &= \frac{\langle T_\tau \left[\hat{U}(\beta, 0) \hat{A}(\tau) \hat{B}(\tau') \right] \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde usamos $\mathcal{Z} = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} \hat{U}(\beta, 0) \right\}$ e onde os valores esperados $\langle \dots \rangle_0$ aparecem logo que efetuamos a divisão do numerador e do denominador da primeira expressão por $\mathcal{Z}_0 = \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \hat{H}_0} \right\}$.

2.2.2 Funções de Green de Matsubara para férmions

As funções de Green de Matsubara (ou funções de Green em temperaturas finitas) para sistemas fermiônicos são definidas da seguinte maneira em teoria quântica de campos:

$$G_{AB}(\tau, \tau') \equiv -\langle T_\tau [A(\tau)B(\tau')] \rangle, \quad (2.23)$$

onde o ordenamento temporal do produto de operadores acima é dado no presente caso por

$$T_\tau [A(\tau)B(\tau')] = \theta(\tau - \tau') A(\tau)B(\tau') - \theta(\tau' - \tau) B(\tau')A(\tau). \quad (2.24)$$

Note que o sinal negativo que aparece antes da segunda função degrau $\theta(\tau)$ está relacionado com a existência de relações de anticomutação entre operadores fermiônicos.

A função de Green de Matsubara na Eq. (2.23) possui três importantes propriedades que podem ser deduzidas por meio da relação $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$ para o traço. A primeira é que $G_{AB}(\tau, \tau') = G_{AB}(\tau - \tau')$, ou seja, a função de Green G depende apenas da diferença de tempo $\tau - \tau'$. A segunda nos diz que $-\beta < \tau - \tau' < \beta$ para que $G_{AB}(\tau - \tau')$ seja uma função convergente. A última propriedade estabelece, quando $\tau < 0$, que

$$G_{AB}(\tau) = -G_{AB}(\tau + \beta). \quad (2.25)$$

A relação acima revela um caráter antisimétrico para as funções de Green $G_{AB}(\tau)$, o que está de acordo com as características dos operadores usados para a descrição de férmions.

Seguindo com o nosso estudo, podemos encontrar as transformadas de Fourier em relação a τ das funções de Green de Matsubara. Em razão das propriedades listadas acima, utilizamos a função $G_{AB}(\tau)$ definida no intervalo $-\beta < \tau < \beta$ e, de acordo com o método das transformadas de Fourier, torna-se uma tarefa simples mostrar que as transformadas inversa e direta obedecem, respectivamente, as seguintes expressões:

$$G_{AB}(ik_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau e^{ik_n\tau} G_{AB}(\tau), \quad (2.26)$$

$$G_{AB}(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-ik_n\tau} G_{AB}(ik_n). \quad (2.27)$$

Em razão da propriedade antissimétrica da função de Green na Eq. (2.25), o resultado na Eq. (2.26) pode ainda ser simplificado, e a expressão resultante torna-se

$$G_{AB}(ik_n) = \int_0^{\beta} d\tau e^{ik_n\tau} G_{AB}(\tau), \quad k_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}. \quad (2.28)$$

A variável de frequência k_n é chamada de frequência de Matsubara para férmions. Observe que a informação sobre a temperatura do sistema está contida nas frequências de Matsubara através da relação $\beta = 1/T$.

2.2.3 Função de Green de Matsubara de uma partícula livre $G^{(0)}$

Uma importante classe de funções de correlação em um sistema de muitos corpos são as funções de Green de Matsubara para uma partícula livre $G^{(0)}$. Obviamente, elas recebem esse nome porque não há termo de interação na Hamiltoniana que descreve o sistema em tal caso. Elas podem ser definidas através dos seguintes valores esperados:

$$G_{\sigma}^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau - \tau') = -\langle T_{\tau} [\Psi_{\sigma}(\mathbf{r}, \tau) \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}', \tau')] \rangle, \quad (2.29)$$

$$G_{\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \tau - \tau') = -\langle T_{\tau} [a_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) a_{\mathbf{k}',\sigma}^{\dagger}(\tau')] \rangle. \quad (2.30)$$

A função de Green de uma partícula livre na Eq. (2.29) depende da posição, do spin e do tempo. Por isso, dizemos que ela está na representação espacial. Já a função de Green na Eq. (2.30) difere desta última por apresentar dependência com o momento e, semelhantemente, referimos a ela como estando na representação- \mathbf{k} .

Suponha agora que a Hamiltoniana \bar{H}_0 que descreve um sistema de muitos corpos seja diagonal no conjunto de números quânticos $\{\mathbf{k}, \sigma\}$, ou seja,

$$\bar{H}_0 = H_0 - \mu N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (2.31)$$

de forma que

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) &= e^{\tau \bar{H}_0} a_{\mathbf{k},\sigma} e^{-\tau \bar{H}_0} = e^{-\xi_{\mathbf{k}} \tau} a_{\mathbf{k},\sigma}, \\ a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}(\tau) &= e^{\tau \bar{H}_0} a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} e^{-\tau \bar{H}_0} = e^{\xi_{\mathbf{k}} \tau} a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}, \end{aligned} \quad (2.32)$$

que fornece

$$\begin{aligned} G_{\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, \tau - \tau') &= -\langle T_{\tau} [a_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}(\tau')] \rangle \\ &= -\theta(\tau - \tau') \langle a_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}(\tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}(\tau') a_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) \rangle \\ &= -\left[\theta(\tau - \tau') \langle a_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \rangle - \theta(\tau' - \tau) \langle a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \right] e^{-\xi_{\mathbf{k}}(\tau - \tau')}. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Colocando $n_F(\xi_{\mathbf{k}}) = \langle a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k},\sigma} \rangle$, onde $n_F(\xi_{\mathbf{k}}) = (e^{\beta \xi_{\mathbf{k}}} + 1)^{-1}$ é a distribuição de Fermi-Dirac, e sabendo que $\{a_{\mathbf{k},\sigma}, a_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger}\} = \mathbf{1}$, podemos realizar a transformada de Fourier da função de Green

de Matsubara de uma partícula livre na Eq. (2.33). O resultado disso é a seguinte função:

$$G_{\sigma}^{(0)}(\mathbf{k}, ik_n) = \frac{1}{ik_n - \xi_{\mathbf{k}}}. \quad (2.34)$$

No restante deste trabalho, a função de Green acima com dependência na frequência ik_n será extensivamente usada.

2.3 Diagramas de Feynman

2.3.1 Série perturbativa para a função de Green de Matsubara G

Podemos agora calcular a função de Green G definida na Eq. (2.23) utilizando os operadores fermiônicos $\Psi(\sigma, \mathbf{r}, \tau)$ e $\Psi^{\dagger}(\sigma, \mathbf{r}, \tau)$. Naturalmente, esses operadores estão na representação de Heisenberg, mas podemos expressar G em função de operadores na representação de interação utilizando a Eq. (2.22). Com o intuito de não sobrecarregar a notação, vamos fazer $a = (\sigma_1, \mathbf{r}_1, \tau_1)$ e $b = (\sigma_2, \mathbf{r}_2, \tau_2)$ e escrever a seguinte expressão para G :

$$G(b, a) = -\frac{\text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}T_{\tau}[\Psi(b)\Psi^{\dagger}(a)]\}}{\text{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\}} = -\frac{\langle T_{\tau}[\hat{U}(\beta, 0)\hat{\Psi}(b)\hat{\Psi}^{\dagger}(a)] \rangle_0}{\langle \hat{U}(\beta, 0) \rangle_0}. \quad (2.35)$$

A notação $\langle \dots \rangle_0$ na equação acima, como sabemos, indica que os valores esperados são com relação ao operador densidade no ensemble grande canônico $\rho_{G_0} = \mathcal{Z}_0^{-1}e^{-\beta\hat{H}_0}$. Inserimos agora a expansão na Eq. (2.17), relacionada ao operador evolução \hat{U} , na Eq. (2.35) para obter:

$$G(b, a) = -\frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_0^{\beta} d\tau_n \langle T_{\tau}[\hat{V}(\tau_1) \cdots \hat{V}(\tau_n)\hat{\Psi}(b)\hat{\Psi}^{\dagger}(a)] \rangle_0}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \cdots \int_0^{\beta} d\tau_n \langle T_{\tau}[\hat{V}(\tau_1) \cdots \hat{V}(\tau_n)] \rangle_0}. \quad (2.36)$$

Os dois operadores de criação, que aparecem na expressão acima, sempre devem permanecer à esquerda dos dois operadores de aniquilação. Para assegurar isso, adicionamos um tempo infinitesimal $\eta = 0^+$ aos argumentos de $\Psi^{\dagger}(1)$ e $\Psi^{\dagger}(2)$. Isso torna o ordenamento correto quando o operador T_{τ} , na Eq. (2.35), atua sobre os outros operadores. As integrais em relação a τ de $\hat{V}(\tau)$ são portanto

$$\int_0^{\beta} d\tau_j \hat{V}(\tau_j) = \frac{1}{2} \int dj \int dj' \hat{\Psi}^{\dagger}(j_+) \hat{\Psi}^{\dagger}(j'_+) V_{j,j'} \hat{\Psi}(j') \hat{\Psi}(j), \quad (2.37)$$

onde definimos j_+ , $\int dj$ e $V_{j,j'}$ como

$$j_+ \equiv (\sigma_j, \mathbf{r}_j, \tau_j + \eta), \quad \int dj \equiv \sum_{\sigma_j} \int d\mathbf{r}_j \int_0^\beta d\tau_j, \quad V_{j,j'} \equiv V(\mathbf{r}_j, \mathbf{r}_{j'}) \delta(\tau_j - \tau_{j'}). \quad (2.38)$$

Somente nas expressões onde o tempo inicial coincide com o final que o deslocamento infinitesimal no tempo de Ψ^\dagger tem alguma importância. Para finalizar, inserimos a Eq. (2.37) na Eq. (2.36) e usamos um teorema importante em teoria quântica de campos, conhecido como teorema de Wick, para mostrar que

$$\begin{aligned} G(b, a) &= \\ &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\frac{1}{2})^n}{n!} \int d1d1' \cdots dndn' V_{1,1'} \cdots V_{n,n'}}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\frac{1}{2})^n}{n!} \int d1d1' \cdots dndn' V_{1,1'} \cdots V_{n,n'}} \frac{\begin{vmatrix} G^0(b, a) & G^0(b, 1) & G^0(b, 1') & \cdots & G^0(b, n') \\ G^0(1, a) & G^0(1, 1) & G^0(1, 1') & \cdots & G^0(1, n') \\ G^0(1', a) & G^0(1', 1) & G^0(1', 1') & \cdots & G^0(1', n') \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G^0(n', a) & G^0(n', 1) & G^0(n', 1') & \cdots & G^0(n', n') \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} G^0(1, 1) & G^0(1, 1') & \cdots & G^0(1, n') \\ G^0(1', 1) & G^0(1', 1') & \cdots & G^0(1', n') \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G^0(n', 1) & G^0(n', 1') & \cdots & G^0(n', n') \end{vmatrix}}. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Na expressão acima, $G^{(0)}(l, j)$ é a função de Green de Matsubara de uma partícula livre definida pela Eq. (2.33), também conhecida como propagador livre. A fórmula em (2.39) é o ponto de partida para se determinar a expansão perturbativa da função de Green $G(b, a)$ e chegar às regras de Feynman para férmions.

2.3.2 Regras de Feynman

Uma análise combinatorial detalhada do numerador da Eq. (2.39) revela que ele pode ser decomposto em um produto de dois termos, sendo um desses termos o denominador dessa equação. Devido a isso, podemos reescrever a função de Green $G(b, a)$ do seguinte modo:

$$\begin{aligned} G(b, a) &= - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \cdots \int_0^\beta d\tau_n \\ &\quad \times \text{Tr} \{ e^{-\beta \hat{H}_0} T_\tau \left[\hat{V}(\tau_1) \cdots \hat{V}(\tau_n) \hat{\Psi}(b) \hat{\Psi}^\dagger(a) \right] \}_{\text{conectado}}. \end{aligned} \quad (2.40)$$

A palavra “conectado” que aparece no subscrito da Eq. (2.40) acima representa, obviamente, os termos de $G(b, a)$ não contidos no denominador da Eq. (2.39). A função de Green $G(b, a)$, mesmo nessa forma, ainda pode ser decomposta em integrais cujos integrandos são as funções de Green de uma partícula livre $G^{(0)}$. Esses fatos sugerem então a possibilidade da existência de um método mais simples para o cálculo de $G(b, a)$. Tal método realmente existe e é conhecido como método diagramático de Feynman.

Antes de tratar propriamente desse método, vamos fazer uma transformada de Fourier na Eq. (2.40) para obter a função de Green G em função da frequência ik_n . No restante desta dissertação, vamos sempre considerar a temperatura do nosso sistema como sendo $T = 0$ e os cálculos no espaço dos momentos. Isso implica que devemos trabalhar com funções de Green cuja dependência é do tipo $G = G(\mathbf{k}, ik_0)$, onde a frequência k_0 não é mais uma variável discreta, mas sim contínua. Tendo em mente esses fatos, as regras do método diagramático de Feynman são as seguintes:

1. A cada linha fermiônica, como a representada na Fig. 2.1, associe uma função de Green (ou propagador) livre $G_\sigma^{(0)}(\mathbf{k}, ik_0) = (ik_0 - \xi_{\mathbf{k}})^{-1}$.

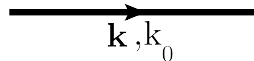


Figura 2.1: Propagador livre $G_\sigma^{(0)}(\mathbf{k}, ik_0) = (ik_0 - \xi_{\mathbf{k}})^{-1}$.

2. A cada linha de interação (linha ondulada), como a da Fig. 2.2, associe um valor $-V_{\mathbf{q}}$.

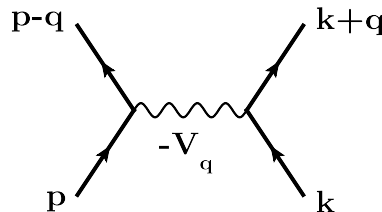


Figura 2.2: Processo de interação.

3. Desenhe todos os diagramas topologicamente distintos.

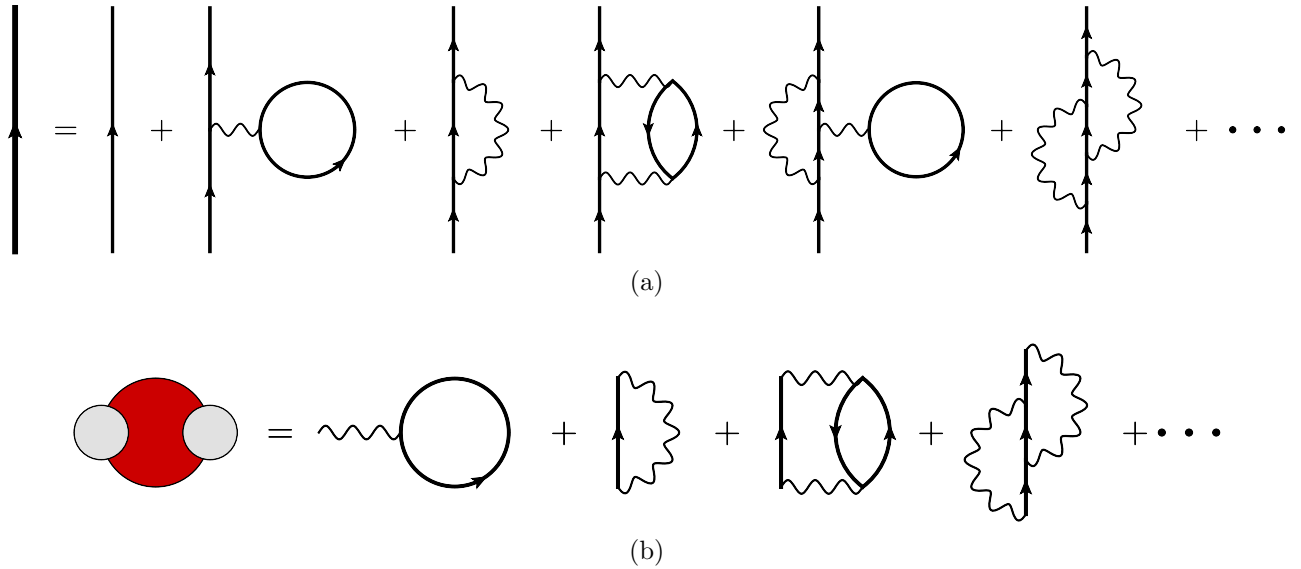


Figura 2.3: (a) Representação da função de Green $G_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$ (linha sólida à esquerda da igualdade) em termos de diagramas de Feynman conectados. Os dois diagramas de primeira ordem nessa figura são chamados de diagramas de Hartree-Fock. (b) Auto-energia $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$ (figura à esquerda da igualdade) dada em função dos diagramas irreduzíveis de primeira e segunda ordem.

4. Todo loop fermiônico contribui com o fator -1 .
5. A distribuição de momento e a energia em um diagrama deve sempre ser conservada.
6. Cada linha interna de um diagrama contribui com uma integração do tipo $\int \frac{dk_0}{2\pi} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d}$ sobre as variáveis de frequência e de momento, onde “ d ” é a dimensão do modelo considerado.

Com essas regras é sempre possível, a partir de uma série diagramática para $G_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$, obter a sua expressão analítica e vice-versa.

Podemos, agora, definir o conceito de diagramas irreduzíveis, baseado na expressão para $G_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$ dada na Fig. 2.3a. Tais diagramas são aqueles que não podem ser divididos em dois outros diagramas cortando uma linha fermiônica. A soma de todos esses diagramas, como mostra a Fig. 2.3b, é usada para definir uma quantidade denominada auto-energia $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$, ou seja,

$$\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_0) \equiv \left\{ \begin{array}{l} \text{Soma de todos diagramas irreduzíveis de uma partícula} \\ \text{em } G_\sigma(\mathbf{k}, ik_0) \text{ sem as duas linhas fermiônicas externas.} \end{array} \right\}.$$

Podemos nos perguntar se existe alguma equação que relaciona a auto-energia $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$ com a função de Green $G_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$, já que a única diferença entre elas são as funções de Green livres externas. Essa questão foi resolvida por Freeman Dyson e a equação que relaciona essas duas quantidades consiste em uma série geométrica infinita. A sua expressão (chamada de equação de Dyson) é dada por:

$$G_\sigma(\mathbf{k}, ik_0) = \frac{1}{ik_0 - \xi_{\mathbf{k}} - \Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)}. \quad (2.41)$$

Comparando as Eqs. (2.34) e (2.41), vemos que a parte real da auto-energia $\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$, induzida aqui pela interação V , aparece como uma renormalização aditiva da relação de dispersão $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$. Dentro do contexto da chamada teoria de Landau do líquido de Fermi, $G_\sigma(\mathbf{k}, ik_0)$ pode ainda ser escrito, utilizando a continuação analítica $ik_0 \rightarrow k_0 + i0^+$, como:

$$G_\sigma(\mathbf{k}, k_0 + i0^+) = \frac{Z_{\mathbf{k}}}{k_0 - Z_{\mathbf{k}}\xi'_{\mathbf{k}} - iZ_{\mathbf{k}} \text{Im} [\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, k_0 + i0^+)]} + F(\mathbf{k}, k_0), \quad (2.42)$$

onde $\xi'_{\mathbf{k}} = \xi_{\mathbf{k}} + \text{Re} [\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, i0^+)]$, $Z_{\mathbf{k}} = \left(1 - \frac{\partial \text{Re} [\Sigma_\sigma(\mathbf{k}, k_0 + i0^+)]}{\partial k_0} \Big|_{k_0=0}\right)^{-1}$ é o chamado peso da quasipartícula da teoria ($0 < Z_{\mathbf{k}} < 1$) e $F(\mathbf{k}, k_0)$ é um termo de correção da expansão acima, que contribui muito pouco quando nos aproximamos da superfície de Fermi.

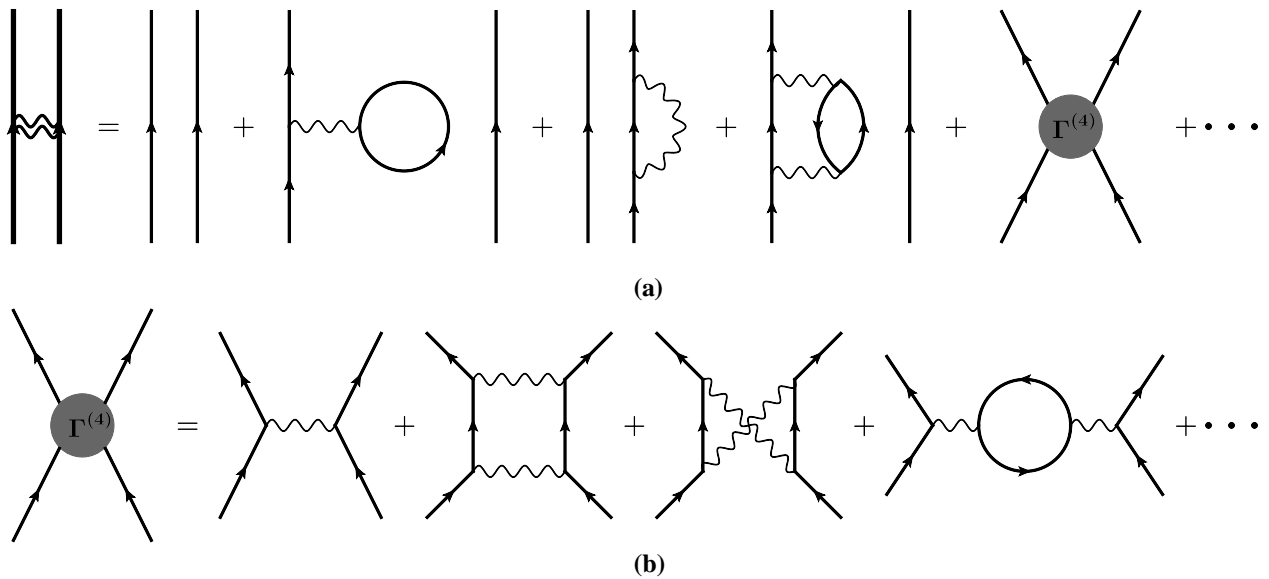


Figura 2.4: (a) Representação esquemática da função de Green de duas partículas em termos dos diagramas de Feynman. (b) Função vértice irreduzível de quatro pontos $\Gamma^{(4)}$ em função de alguns diagramas de Feynman de interação entre duas partículas.

Da mesma forma que definimos a função de Green na Eq. (2.35), podemos agora definir uma nova função de correlação conhecida como função de Green de duas partículas. A sua expressão, no formalismo de tempo imaginário, segue do cálculo do seguinte valor esperado:

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \tau_1; \mathbf{r}_2, \tau_2; \mathbf{r}'_1, \tau'_1; \mathbf{r}'_2, \tau'_2) = \frac{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\bar{H}} T_\tau \left[\Psi_\alpha(\mathbf{r}_1, \tau_1) \Psi_\beta(\mathbf{r}_2, \tau_2) \Psi_\beta^\dagger(\mathbf{r}'_2, \tau'_2) \Psi_\alpha^\dagger(\mathbf{r}'_1, \tau'_1) \right] \right\}}{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta\bar{H}} \right\}}. \quad (2.43)$$

O procedimento para se obter os diagramas de Feynman para a função de Green de duas partículas é inteiramente similar ao usado anteriormente para a derivação das regras de Feynman no caso da função de Green de uma partícula definida pela Eq. (2.35). Na Fig. 2.4, representamos a função de Green de duas partículas em termos de alguns diagramas de Feynman e de uma quantidade conhecida como função vértice irreduzível de quatro pontos $\Gamma^{(4)}$. Como veremos, essa função vértice juntamente com o peso da quasipartícula $Z_{\mathbf{k}}$ desempenharão papéis importantes na implementação do grupo de renormalização de um e dois loops para o modelo de duas bandas que discutiremos no Capítulo 5 desta dissertação.

Capítulo 3

Formulação da Mecânica Estatística via Integral Funcional

Neste capítulo, mostraremos como representar a função de partição do ensemble grande canônico através de uma integral funcional para um sistema fermiônico. Em função disso, teremos de trabalhar com números que obedecem a uma álgebra anticomutativa, conhecida como álgebra de Grassmann. A exposição aqui é baseada nos livros textos de Altland & Simons [41] e Negele & Orland [42].

3.1 Álgebra de Grassmann

Uma álgebra de Grassmann é um espaço vetorial \mathcal{A} anticomutativo, definida por um conjunto de geradores $\{\eta_i\}$, $i = 1, \dots, N$. Esses geradores obedecem a seguinte relação

$$\eta_i \eta_j = -\eta_j \eta_i, \quad (3.1)$$

de forma que, em particular:

$$\eta_i^2 = 0. \quad (3.2)$$

A base da álgebra de Grassmann é formada por todos os produtos distintos dos geradores. Um elemento dessa álgebra, então, é uma combinação linear, com coeficientes complexos, dos elementos do conjunto $\{1, \eta_{i_1}, \eta_{i_1} \eta_{i_2}, \dots, \eta_{i_1} \eta_{i_2} \dots \eta_{i_N}\}$. A dimensão de uma álgebra de Grassmann com N geradores é igual a 2^N , desde que os elementos distintos da base sejam produzidos pela inclusão ou não de um gerador nos diferentes termos que aparecem nessa base. Caso uma

álgebra de Grassmann possua um número par $N = 2p$ de geradores, podemos associar a cada um dos p geradores η_i um gerador distinto que denotamos por $\bar{\eta}_i$. Esse tipo de operação é chamada de conjugação ou involução e vamos considerar que isso é válido daqui em diante.

Funções dos números de Grassmann são definidas via sua expansão em série de Taylor:

$$\xi_1, \dots, \xi_k \in \mathcal{A} : \quad f(\xi_1, \dots, \xi_k) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i_1, \dots, i_n=1}^k \frac{1}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial \xi_{i_1} \cdots \partial \xi_{i_n}} \Big|_{\xi=0} \xi_{i_n} \cdots \xi_{i_1}, \quad (3.3)$$

onde $f = f(\xi_1, \dots, \xi_k)$ é uma função analítica. Em razão da propriedade anticomutativa dos geradores da álgebra de Grassmann (ver Eq. (3.1)), a série acima tem um número finito de termos. Note que quando $f = f(\eta)$ é função apenas da variável anticomutativa η , a sua expressão geral fica:

$$f(\eta) = f(0) + f'(0)\eta. \quad (3.4)$$

Da mesma forma que para as funções de uma variável complexa, podemos também definir uma derivada para as funções cuja variável independente obedece à álgebra de Grassmann. A única mudança é que o operador derivada $\frac{\partial}{\partial \eta}$ em relação à variável η também anticomuta. Sendo assim, não é difícil ver que

$$\frac{\partial}{\partial \eta_i} (\eta_j \eta_i) = -\eta_j, \quad (i \neq j). \quad (3.5)$$

Podemos agora introduzir o conceito de integração para funções cujas variáveis são números de Grassmann. Nesse caso, não há análogo da familiar soma que define a integral de Riemann para funções reais. Elas são apenas definições formais e se estendem a dois únicos tipos de integrando, ou seja,

$$\int d\eta_i = 0, \quad \int d\eta_i \eta_i = 1. \quad (3.6)$$

Como podemos ver, não há limites de integração nas integrais acima e elas podem ser usadas para resolver qualquer tipo de integração que envolva variáveis que anticomutam.

3.2 Estados coerentes para férmions

Um vetor de estado $|\eta\rangle$ do espaço de Fock \mathcal{F} para férmions pode ser escrito, no forma-

lismo de número de ocupação, simplesmente como

$$|\eta\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots} C_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle, \quad |n_1, n_2, \dots\rangle = (a_1^\dagger)^{n_1} (a_2^\dagger)^{n_2} \dots |0\rangle, \quad (3.7)$$

onde os vetores $\{|n_1, n_2, \dots\rangle\}$ formam uma base desse espaço, a_i^\dagger cria um férmion no estado i , $C_{n_1, n_2, \dots}$ são os coeficientes da expansão e $|0\rangle$ representa o vácuo. Vamos agora definir uma álgebra de Grassmann \mathcal{A} nesse espaço, associando um gerador η_i com cada um dos operadores de aniquilação a_i , assim como um gerador $\bar{\eta}_i$ com cada um dos operadores de criação a_i^\dagger . Isso permite generalizar o espaço de Fock \mathcal{F} como o conjunto de combinações lineares de estados onde os coeficientes $C_{n_1, n_2, \dots}$ obedecem à álgebra de Grassmann.

Com o intuito de tratar com expressões contendo combinações de variáveis de Grassmann e operadores de criação e aniquilação de elétrons, precisamos estender a álgebra para permitir a multiplicação de números de Grassmann por operadores fermiônicos. Para ser consistente com as relações de anticomutação, devemos requerer que os operadores fermiônicos e os geradores de Grassmann anticomutem, ou seja,

$$\{\eta_i, a_j\} = 0. \quad (3.8)$$

Um exemplo da manipulação dessas duas quantidades aparece no que são denominados estados coerentes para férmions. A sua expressão geral é dada por

$$|\eta\rangle = \exp \left[- \sum_i \eta_i a_i^\dagger \right] |0\rangle. \quad (3.9)$$

É fácil ver que o vetor de estado $|\eta\rangle$ acima é um autoestado dos operadores de aniquilação a_i , isto é,

$$a_i |\eta\rangle = \eta_i |\eta\rangle, \quad (3.10)$$

onde η_i é o autovalor. Além do mais, usando as relações de anticomutação entres os operadores fermiônicos, $\{a_i, a_j\} = 0$, onde $i \neq j$, obtemos que

$$\eta_i \eta_j = -\eta_j \eta_i. \quad (3.11)$$

Isso demonstra que os objetos η_i são realmente números de Grassmann.

O estado coerente $|\eta\rangle$ na Eq. (3.9) possui algumas propriedades interessantes que serão usadas na próxima seção. Antes de analisá-las, vamos definir um segundo vetor de estado $\langle\eta|$, pertencente ao espaço dual de Fock \mathcal{F}^* , de maneira tal que

$$\langle\eta| = \langle 0| \exp \left[- \sum_i a_i \bar{\eta}_i \right] = \langle 0| \exp \left[\sum_i \bar{\eta}_i a_i \right]. \quad (3.12)$$

A primeira propriedade corresponde à ação dos operadores de criação a_i^\dagger nesses estados. Não é difícil perceber que ela é dada por

$$\langle\eta| a_i^\dagger = \langle\eta| \bar{\eta}_i. \quad (3.13)$$

A segunda propriedade corresponde ao valor do produto interno de dois vetores quaisquer $|\eta'\rangle$ e $|\eta\rangle$ do espaço de Fock \mathcal{F} . Por meio das Eqs. (3.9) e (3.12) e com o uso de algumas manipulações matemáticas, é simples determinar que

$$\langle\eta'| \eta\rangle = \exp \left[\sum_i \bar{\eta}'_i \eta_i \right]. \quad (3.14)$$

A terceira propriedade refere-se ao fato de os estados coerentes $|\psi\rangle$ formarem um conjunto completo de estados no espaço de Fock:

$$\int d(\bar{\psi}, \psi) e^{-\sum_i \bar{\psi}_i \psi_i} |\psi\rangle \langle\psi| = \mathbf{1}_{\mathcal{F}}, \quad (3.15)$$

onde $d(\bar{\psi}, \psi) = \prod_i d\bar{\psi}_i d\psi_i$ e $\mathbf{1}_{\mathcal{F}}$ corresponde ao operador identidade no espaço de Fock. A demonstração desses fatos faz-se com o uso de um resultado matemático conhecido como lema de Schur, mas não faremos isso aqui.¹

3.3 Integral funcional para a função de partição quântica

Um resultado fundamental da mecânica estatística de equilíbrio assegura que se um sistema termodinâmico de volume V e potencial químico μ está submetido a uma temperatura

¹Essa demonstração pode ser encontrada nos livros textos citados no início deste capítulo.

T , então todas as suas propriedades termodinâmicas macroscópicas podem ser calculadas por meio do grande potencial termodinâmico

$$\Xi(T, V, \mu) = -T \ln \mathcal{Z}, \quad (3.16)$$

onde a função de partição \mathcal{Z} traduz o comportamento microscópico do sistema. A sua expressão geral no ensemble grande canônico é dada por

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} [e^{-\beta(H-\mu N)}] = \sum_{n_1, n_2, \dots} \langle n_1, n_2, \dots | e^{-\beta(H-\mu N)} | n_1, n_2, \dots \rangle, \quad (3.17)$$

onde $\beta = 1/T$ é a temperatura recíproca e a soma acima estende-se sobre um conjunto completo do espaço de estados de Fock $\{|n_1, n_2, \dots\rangle\}$. Observe que a função de partição \mathcal{Z} não contém informação alguma sobre os estados coerentes para férmions discutidos na última seção dessa dissertação. Contudo, nos capítulos seguintes, necessitaremos de uma nova representação da mecânica estatística baseada nos números de Grassmann, que, por sua vez, dependem desses estados coerentes. Sendo assim, vamos a partir de agora construir o que é conhecido como uma integral de caminho para \mathcal{Z} ou, equivalentemente, vamos representá-la por meio de uma integral funcional.

Como primeiro passo para representar a função de partição na Eq. (3.17) em termos de estados coerentes, devemos usar a relação de completude dada pela Eq. (3.15) de forma a obter

$$\mathcal{Z} = \int d(\bar{\psi}, \psi) e^{-\sum_i \bar{\psi}_i \psi_i} \sum_{n_1, n_2, \dots} \langle n_1, n_2, \dots | \psi \rangle \langle \psi | e^{-\beta(H-\mu N)} | n_1, n_2, \dots \rangle. \quad (3.18)$$

Devemos agora eliminar o somatório sobre os estados $|n_1, n_2, \dots\rangle$ do espaço de Fock. Caso a álgebra com a qual estamos trabalhando fosse comutativa, bastaria inverter as posições dos dois produtos internos que aparecem na Eq. (3.18) para atingir esse objetivo. Só que esse não é o caso e a permutação de dois produtos internos cujos estados são coerentes acontece com uma mudança sutil de sinal, ou seja,

$$\langle n_1, n_2, \dots | \psi \rangle \langle \psi | n_1, n_2, \dots \rangle = \langle -\psi | n_1, n_2, \dots \rangle \langle n_1, n_2, \dots | \psi \rangle. \quad (3.19)$$

Observe que como ambos os operadores H e N contêm um número par de operadores de criação e/ou aniquilação e o peso de Boltzmann na Eq. (3.18) comuta com qualquer variável de Grassmann. Dessa forma, fazendo uso da inversão dos produtos internos, a expressão para a função de partição pode ser formulada do seguinte modo

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int d(\bar{\psi}, \psi) e^{-\sum_i \bar{\psi}_i \psi_i} \sum_{n_1, n_2, \dots} \langle -\psi | e^{-\beta(H - \mu N)} | n_1, n_2, \dots \rangle \langle n_1, n_2, \dots | \psi \rangle \\ &= \int d(\bar{\psi}, \psi) e^{-\sum_i \bar{\psi}_i \psi_i} \langle -\psi | e^{-\beta(H - \mu N)} | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde a segunda igualdade na expressão acima deve-se à identidade

$$\sum_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle \langle n_1, n_2, \dots| = \mathbf{1}_{\mathcal{F}}. \quad (3.21)$$

Vamos considerar, daqui em diante, que a Hamiltoniana H seja, no máximo, limitada a interações de duas partículas, o que equivale a

$$H(a^\dagger, a) = \sum_{ij} \epsilon_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l. \quad (3.22)$$

O operador H na forma acima (operadores de criação a_i^\dagger à esquerda dos de aniquilação a_i) é dito estar ordenado normalmente. A razão porque enfatizamos isso é que um operador nessa forma pode ser facilmente diagonalizado através do uso de estados coerentes: dividindo-se a temperatura recíproca β em \tilde{N} segmentos, como se ela fosse um intervalo de tempo, e inserindo a cada intervalo $\delta = \beta/\tilde{N}$ a relação de completude para férmions (ver Eq. (3.15)) na Eq. (3.20), a função de partição torna-se

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{n=0}^{\tilde{N}-1} d(\bar{\psi}^n, \psi^n) e^{-\delta \sum_{n=0}^{\tilde{N}-1} [\delta^{-1}(\bar{\psi}^n - \bar{\psi}^{n+1})\psi^n + H(\bar{\psi}^{n+1}, \psi^n) - \mu N(\bar{\psi}^{n+1}, \psi^n)]}, \quad (3.23)$$

onde $\psi^n = \{\psi_i^n\}$ corresponde a um conjunto de variáveis de Grassmann, e $H(\bar{\psi}, \psi')$ e $N(\bar{\psi}, \psi')$ representam, respectivamente,

$$\begin{aligned} H(\bar{\psi}, \psi') &\equiv \frac{\langle \psi | H(a^\dagger, a) | \psi' \rangle}{\langle \psi | \psi' \rangle} = \sum_{ij} \epsilon_{ij} \bar{\psi}_i \psi'_j + \sum_{ijkl} V_{ijkl} \bar{\psi}_i \bar{\psi}_j \psi'_k \psi'_l, \\ N(\bar{\psi}, \psi') &\equiv \frac{\langle \psi | N(a^\dagger, a) | \psi' \rangle}{\langle \psi | \psi' \rangle} = \sum_i \bar{\psi}_i \psi'_i. \end{aligned}$$

Tomando o limite $\tilde{N} \rightarrow \infty$, obtemos, finalmente, a representação em termos de uma integral funcional para \mathcal{Z} :

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}(\bar{\psi}, \psi) e^{-S[\bar{\psi}, \psi]}, \quad S[\bar{\psi}, \psi] = \int_0^\beta d\tau [\bar{\psi} \partial_\tau \psi + H(\bar{\psi}, \psi) - \mu N(\bar{\psi}, \psi)], \quad (3.24)$$

sendo $\mathcal{D}(\bar{\psi}, \psi) = \lim_{\tilde{N} \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^{\tilde{N}} d(\bar{\psi}^n, \psi^n)$; e $\bar{\psi}$ e ψ os campos fermiônicos (isto é, números de Grassmann) com condições de contorno $\bar{\psi}(0) = -\bar{\psi}(\beta)$ e $\psi(0) = -\psi(\beta)$. Como se pode inferir facilmente, a quantidade $S = S[\bar{\psi}, \psi]$ definida acima corresponde à ação do sistema.

No restante dessa dissertação, vamos estudar um modelo bidimensional em temperatura nula ($\beta \rightarrow \infty$) para tentar capturar a física de baixa energia dos supercondutores baseados em ferro do tipo pnictídeos. Sendo assim, a ação na Eq. (3.24) deve ser adaptada a essa situação. Como primeiro passo nessa direção, devemos mudar a variável independente dos campos fermiônicos, partindo do “tempo” τ para a frequência p_0 com a seguinte transformada de Fourier:

$$\psi_\sigma(\mathbf{p}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} e^{-ip_0\tau} \psi_\sigma(\mathbf{p}, p_0), \quad (3.25)$$

$$\bar{\psi}_\sigma(\mathbf{p}, \tau) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} e^{ip_0\tau} \bar{\psi}_\sigma(\mathbf{p}, p_0), \quad (3.26)$$

onde estamos também considerando a dependência explícita desses campos com o momento \mathbf{p} e a projeção de spin σ . A ação total pode agora ser escrita como $S[\bar{\psi}, \psi] = S_0[\bar{\psi}, \psi] + S_{\text{int}}[\bar{\psi}, \psi]$, onde $S_0[\bar{\psi}, \psi]$ é conhecida por ação não-interagente e é dada por²

$$S_0[\bar{\psi}, \psi] = \sum_\sigma \int \frac{dp_0}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \bar{\psi}_\sigma(\mathbf{p}, p_0) (-ip_0 + \epsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \psi_\sigma(\mathbf{p}, p_0). \quad (3.27)$$

O termo $S_{\text{int}}[\bar{\psi}, \psi]$ designa, obviamente, o termo de interação da ação total e com algum esforço é possível determinar a seguinte expressão para o mesmo

$$\begin{aligned} S_{\text{int}}[\bar{\psi}, \psi] &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int \left[\prod_{i=1}^4 \frac{dp_{0i}}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{p}_i}{(2\pi)^2} \right] (2\pi)^3 \delta^{(3)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) V(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) \\ &\times \bar{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{p}_4, p_{04}) \bar{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{p}_3, p_{03}) \psi_{\sigma'}(\mathbf{p}_2, p_{02}) \psi_\sigma(\mathbf{p}_1, p_{01}), \end{aligned} \quad (3.28)$$

²Nas Eqs. (3.28) e (3.29) consideraremos o limite termodinâmico do sistema ($N, V \rightarrow \infty$) e, por isso, faremos a substituição $\sum_{\mathbf{p}} = V \int \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2}$.

onde definimos

$$\delta^{(3)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) = \delta(p_{01} + p_{02} - p_{03} - p_{04})\delta^{(2)}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4). \quad (3.29)$$

A expressão para a ação total $S[\bar{\psi}, \psi] = S_0[\bar{\psi}, \psi] + S_{\text{int}}[\bar{\psi}, \psi]$ nas Eqs. (3.27) e (3.29) define a chamada teoria quântica de campos “nua” (do inglês, *bare*) para um sistema fermiônico 2d. Como veremos, essas equações serão usadas extensivamente na implementação do método do grupo de renormalização de teoria de campos para a análise das propriedades de baixa energia de um modelo eletrônico com duas bandas no nível de Fermi para descrever alguns materiais supercondutores do tipo pnictídeos baseados em ferro sintetizados recentemente.

Capítulo 4

Grupo de Renormalização de Teoria de Campos

As ideias do grupo de renormalização foram introduzidas pelos trabalhos de Stueckelberg & Petermann [43] e Gell-Mann & Low [44] no início da década de 1950 para resolver certos problemas que apareciam em eletrodinâmica quântica. Posteriormente, essas ideias foram generalizadas por Callan [45] e Symanzik [46] e hoje constituem o que é chamado de grupo de renormalização de teoria de campos. Embora esse método seja menos intuitivo que outras formulações do grupo de renormalização, como a desenvolvida por Wilson, a sua metodologia é mais simples de ser aplicada quando trabalhamos em ordens mais elevadas de teoria de perturbação. Já que o enfoque desta dissertação é esse, mostraremos aqui os procedimentos do método do grupo de renormalização de teoria de campos para a investigação das propriedades de um sistema de partículas interagentes em duas dimensões. Os resultados apresentados neste capítulo estão baseados nos artigos das referências [34,36] e no livro texto de Kopietz *et al.* [33].

4.1 Divergências e sua regularização em teoria de campos

Desde o advento da eletrodinâmica quântica, sabe-se que o cálculo perturbativo de certas funções de correlação em termos dos chamados diagramas de Feynman apresenta divergências indesejáveis, como a que acontece quando se tenta calcular a taxa de espalhamento entre elétrons usando teoria de perturbação. A razão para isso pode ser tanto de origem física,

assinalando, por exemplo, a proximidade a uma transição de fase com observáveis realmente divergentes, ou de origem técnica em virtude de uma formulação equivocada da teoria de perturbação com todos os observáveis físicos sendo de fato finitos.

Com o intuito de trabalhar com as integrais divergentes que aparecem em teoria de perturbação, temos, primeiro, que torná-las finitas, introduzindo um limite superior para cada integração ou um “cutoff” ultravioleta. Esse procedimento recebe o nome de *regularização* e pode ser implementado de diferentes maneiras, dependendo do modelo e da dimensão onde este está definido. Basicamente, os três tipos mais comuns de regularização são a regularização de rede, a dimensional e a de cutoff ultravioleta no momento. Esta última considera apenas integrações sobre uma certa região, definida por uma escala de momento λ (ou energia Ω) e será utilizada no próximo capítulo desta dissertação quando introduziremos o modelo de duas bandas para o estudo dos materiais supercondutores do tipo pnictídeos baseados em ferro.

4.2 Sistemática do grupo de renormalização de teoria de campos

Considere um modelo 2d de férmions interagentes descrito pela ação $S[\bar{\psi}, \psi] = S_0[\bar{\psi}, \psi] + S_{\text{int}}[\bar{\psi}, \psi]$ definida no capítulo anterior. Em teoria, se soubermos calcular a integral funcional na Eq. (3.24), que depende dessa ação, então poderemos derivar o valor esperado de qualquer quantidade física. Como na maioria dos casos essa integral é simplesmente impossível de se resolver, temos de recorrer a métodos perturbativos que, por sua vez, possuem termos singulares quando tentamos acessar a dinâmica de baixa energia do modelo.

Tendo em vista a necessidade de se fazer previsões para as quantidades físicas medidas experimentalmente, a ideia do método do grupo de renormalização de teoria de campos consiste em redefinir todos os parâmetros da ação total “nua” $S[\bar{\psi}, \psi]$, caracterizados pela escala de energia representada pelo cutoff ultravioleta no momento λ , por parâmetros renormalizados adequados à escala de energia a qual se está interessado. Esses novos termos são definidos

através das seguintes relações

$$\begin{aligned}
\psi_\sigma(\mathbf{p}, p_0) &= Z^{1/2} \psi_\sigma^R(\mathbf{p}, p_0), \\
\bar{\psi}_\sigma(\mathbf{p}, p_0) &= Z^{1/2} \bar{\psi}_\sigma^R(\mathbf{p}, p_0), \\
V(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) &= Z^{-2} [V_R(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) + \Delta V_R(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)], \quad (4.1)
\end{aligned}$$

onde o fator adimensional de renormalização Z (isto é, o peso da quasipartícula) será determinado iterativamente ordem a ordem em teoria de perturbação e $\Delta V_R(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)$ é denominado contratermo do termo de interação. A estratégia agora consiste em absorver todos os infinitos encontrados em teoria de perturbação por meio das relações entre as quantidades “nuas” do modelo inicial e as quantidades renormalizadas. Dentro disso, a filosofia do método do grupo de renormalização de teoria de campos considera que apenas as quantidades renormalizadas possuem significado físico, podendo ser comparados com as grandezas medidas experimentalmente. Sendo assim, devemos esperar que as quantidades renormalizadas sejam finitas, enquanto o mesmo não precisa acontecer com as quantidades “nuas”, cujas singularidades estão contidas no peso da quasipartícula e nos contratermos da teoria. Para facilitar a compreensão desse método, vamos substituir os parâmetros renormalizados definidos na Eq. (4.1) na ação total “nua” $S[\bar{\psi}, \psi]$ e reescrevê-la do seguinte modo:

$$\begin{aligned}
S[\bar{\psi}, \psi] &= \sum_\sigma \int \frac{dp_0}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2} Z \bar{\psi}_\sigma^R(\mathbf{p}, p_0) (-ip_0 + \epsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \psi_\sigma^R(\mathbf{p}, p_0) \\
&+ \sum_{\sigma, \sigma'} \int \left[\prod_{i=1}^4 \frac{dp_{0i}}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{p}_i}{(2\pi)^2} \right] (2\pi)^3 \delta^{(3)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) [V_R(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) \\
&+ \Delta V_R(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)] \bar{\psi}_\sigma^R(\mathbf{p}_4, p_{04}) \bar{\psi}_{\sigma'}^R(\mathbf{p}_3, p_{03}) \psi_{\sigma'}^R(\mathbf{p}_2, p_{02}) \psi_\sigma^R(\mathbf{p}_1, p_{01}) \\
&\equiv S_R[\bar{\psi}^R, \psi^R], \quad (4.2)
\end{aligned}$$

onde definimos a ação total renormalizada $S_R[\bar{\psi}^R, \psi^R]$ como função dos parâmetros renormali-

zados. Uma forma alternativa de se definir essa ação consiste em expressá-la por meio de

$$\begin{aligned}
S_R[\bar{\psi}^R, \psi^R] &= \sum_{\sigma} \int \frac{dp_0}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \bar{\psi}_{\sigma}^R(\mathbf{p}, p_0) (-ip_0 + \epsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \psi_{\sigma}^R(\mathbf{p}, p_0) \\
&+ \sum_{\sigma, \sigma'} \int \left[\prod_{i=1}^4 \frac{dp_{0i}}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{p}_i}{(2\pi)^2} \right] (2\pi)^3 \delta^{(3)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) V_R(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) \\
&\times \bar{\psi}_{\sigma}^R(\mathbf{p}_4, p_{04}) \bar{\psi}_{\sigma'}^R(\mathbf{p}_3, p_{03}) \psi_{\sigma'}^R(\mathbf{p}_2, p_{02}) \psi_{\sigma}^R(\mathbf{p}_1, p_{01}) \\
&+ \sum_{\sigma} \int \frac{dp_0}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \Delta Z \bar{\psi}_{\sigma}^R(\mathbf{p}, p_0) (-ip_0 + \epsilon_{\mathbf{p}} - \mu) \psi_{\sigma}^R(\mathbf{p}, p_0) \\
&+ \sum_{\sigma, \sigma'} \int \left[\prod_{i=1}^4 \frac{dp_{0i}}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{p}_i}{(2\pi)^2} \right] (2\pi)^3 \delta^{(3)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) \Delta V_R(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4) \\
&\times \bar{\psi}_{\sigma}^R(\mathbf{p}_4, p_{04}) \bar{\psi}_{\sigma'}^R(\mathbf{p}_3, p_{03}) \psi_{\sigma'}^R(\mathbf{p}_2, p_{02}) \psi_{\sigma}^R(\mathbf{p}_1, p_{01}), \tag{4.3}
\end{aligned}$$

onde $\Delta Z = Z - 1$ é chamado de contratermo da renormalização do campo fermiônico. Observe que os dois primeiros termos da ação renormalizada $S_R[\bar{\psi}^R, \psi^R]$ na Eq. (4.3) são da mesma forma que a ação “nua” $S[\bar{\psi}, \psi]$, mas com as grandezas renormalizadas substituindo as correspondentes grandezas “nuas”. Os termos restantes, como já enfatizamos, correspondem aos contratermos da teoria e são considerados como parte do termo de interação em teoria de perturbação renormalizada. Cada contratermo, portanto, produz um novo vértice de interação, que, por sua vez, pode ser representado por um diagrama de Feynman como ilustra a Fig. 4.1.

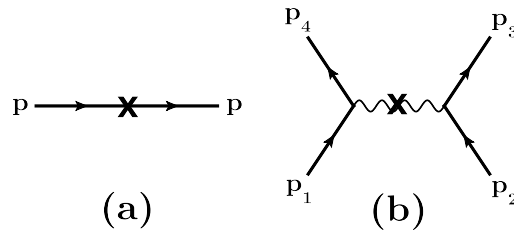


Figura 4.1: Representação por meio dos diagramas de Feynman dos contratermos de renormalização do campo fermiônico (a) e de interação (b).

Funções de correlação como a função vértice de quatro pontos $\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, \mathbf{p}_4)$ são calculadas perturbativamente para um modelo definido por $S_R[\bar{\psi}^R, \psi^R]$. As divergências que apareceriam em uma teoria “nua” podem ser eliminadas por construção pelos contratermos. Esses são definidos através de uma condição de renormalização para cada grandeza física que se

está interessado em calcular. Os efeitos do contratermo de renormalização do campo fermiônico somente serão relevantes quando as correções da auto-energia forem além dos termos convencionais de Hartree-Fock, definidos no Capítulo 2 desta dissertação. Quando isso for o caso, todas as funções de correlação devem ser calculadas até terceira ordem nos acoplamentos para se derivar quaisquer tipos de resultados com o grupo de renormalização. Nessa situação, esse método é conhecido como grupo de renormalização na aproximação de dois loops.

No próximo capítulo deste trabalho, daremos início à implementação da metodologia desenvolvida aqui e nos capítulos anteriores para a análise da física de baixa energia do já comentado modelo de duas bandas.

Capítulo 5

Renormalização do Modelo de Duas Bandas para os Pnictídeos

Neste capítulo, estudaremos o modelo mais simples usado para a descrição das propriedades físicas dos pnictídeos supercondutores, conhecido na literatura como modelo de duas bandas [19, 20, 23]. Esse estudo será feito com o auxílio da técnica do grupo de renormalização (GR) de teoria de campos introduzida no capítulo anterior desta dissertação. Ocuparemos, em um primeiro momento, com o cálculo perturbativo das chamadas funções vértices irreduzíveis de quatro pontos $\Gamma^{(4)}$ até a ordem de um loop para cada canal de interação através do método diagramático convencional de Feynman, a fim de mostrar as limitações de uma formulação ingênua do método perturbativo em acessar a física de baixa energia desse modelo de duas bandas. A ocorrência das chamadas divergências logarítmicas nessas funções vértices possibilitará a implementação da técnica do GR até um loop para a derivação de equações para os acoplamentos nessa ordem de aproximação.

Em um próximo estágio, discutiremos os efeitos de correlações quânticas de mais alta ordem no modelo de duas bandas quando se considera também os efeitos da auto-energia. Isso nos levará ao cálculo das funções vértices $\Gamma^{(4)}$ até a ordem de dois loops e à formulação de novas equações para os acoplamentos com a ajuda do método do GR até essa ordem em teoria de perturbação. Derivaremos também, com esse método, as equações que descrevem a tendência ao aparecimento de possíveis ordenamentos presentes no modelo de duas bandas, assim como a equação para o peso da quasipartícula na tentativa de verificar se as conclusões obtidas neste

trabalho se adequam aos resultados experimentais obtidos para os pnictídeos supercondutores.

5.1 O modelo de duas bandas para os pnictídeos

Para tentarmos explicar as fases magnética e supercondutora nos pnictídeos com planos de ferro e arsênio (Fe-As), vamos imaginá-los como um sistema de elétrons itinerantes em duas dimensões (2d) com apenas dois orbitais eletrônicos que podem sofrer hibridização. Consideraremos também que a interação elétron-elétron nesses sistemas seja de curto alcance e dependa de um acoplamento relativo às densidades fermiônicas de um mesmo orbital e um outro de orbitais diferentes. Nesse caso, a Hamiltoniana H usada para descrever essas interações é dada por

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\mathbf{p},\sigma} \epsilon_{1,\mathbf{p}} \psi_{1,\mathbf{p},\sigma}^\dagger \psi_{1,\mathbf{p},\sigma} + \epsilon_{2,\mathbf{p}} \psi_{2,\mathbf{p},\sigma}^\dagger \psi_{2,\mathbf{p},\sigma} + \Gamma_{\mathbf{p}} (\psi_{1,\mathbf{p},\sigma}^\dagger \psi_{2,\mathbf{p},\sigma} + \psi_{2,\mathbf{p},\sigma}^\dagger \psi_{1,\mathbf{p},\sigma}) \\
&+ \frac{U_{11}}{2} \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma \neq \sigma'} [\psi_{1,\mathbf{p}_1, \sigma}^\dagger \psi_{1,\mathbf{p}_2, \sigma} \psi_{1,\mathbf{p}_3, \sigma'}^\dagger \psi_{1,\mathbf{p}_4, \sigma'} + \psi_{2,\mathbf{p}_1, \sigma}^\dagger \psi_{2,\mathbf{p}_2, \sigma} \psi_{2,\mathbf{p}_3, \sigma'}^\dagger \psi_{2,\mathbf{p}_4, \sigma'}] \\
&+ U_{12} \sum_{\mathbf{p}_i, \sigma, \sigma'} \psi_{1,\mathbf{p}_1, \sigma}^\dagger \psi_{2,\mathbf{p}_2, \sigma} \psi_{2,\mathbf{p}_3, \sigma'}^\dagger \psi_{1,\mathbf{p}_4, \sigma'}, \tag{5.1}
\end{aligned}$$

onde $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 + \mathbf{p}_4$ e U_{11} e U_{12} são, respectivamente, as interações intraorbital e interorbital que aqui são constantes. O fator $\Gamma_{\mathbf{p}}$ é conhecido como termo de hibridização e está relacionado à possibilidade de elétrons de orbitais diferentes poderem trocar de estados entre si. Os operadores fermiônicos $\psi_{i,\mathbf{p},\sigma}^\dagger$ e $\psi_{i,\mathbf{p},\sigma}$ ($i = 1, 2$) são os operadores de criação e aniquilação de elétrons em um estado especificado pelo orbital i , momento \mathbf{p} e spin σ .

A Hamiltoniana H na Eq. (5.1) pode ser parcialmente diagonalizada com uma transformação canônica que relaciona os operadores $\{\psi_{i,\mathbf{p},\sigma}^\dagger, \psi_{i,\mathbf{p},\sigma}\}$ ($i = 1, 2$) com operadores $\{c_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{p},\sigma}\}$ e $\{f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger, f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma}\}$, onde $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. A parte diagonal de H é dada por

$$H_0 = \sum_{\mathbf{p},\sigma} \left\{ \xi_c(\mathbf{p}) c_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{p},\sigma} + \xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma} \right\}, \tag{5.2}$$

onde as novas relações de dispersão $\xi_c(\mathbf{p})$ e $\xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ são dadas em termos das antigas e do termo de hibridização que aparecem na definição da Hamiltoniana na Eq. (5.1) (para uma demonstração desses resultados, veja o Apêndice A). Impondo as condições $\epsilon_{i,\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{i,\mathbf{p}}$

($i = 1, 2$) e $\Gamma_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = \Gamma_{\mathbf{p}}$, obtemos a relação $\xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) = -\xi_c(\mathbf{p})$ entre esses dois novos termos. Considerando ainda que

$$\xi_c(\mathbf{p}) = \mu - \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \quad (5.3)$$

onde μ é o potencial químico, vemos que $\xi_c(\mathbf{p})$ descreve uma banda circular de buracos (energia negativa) centrada em $(0, 0)$ e $\xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ descreve uma banda equivalente de elétrons (energia positiva) centrada em $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Esses fatos podem ser relacionados com a estrutura de bandas de alguns pnictídeos que, no regime de dopagem zero, de acordo com experimentos de espectroscopia de fotoemissão (ARPES), possuem duas bandas de buracos aproximadamente circulares e idênticas no ponto $\Gamma = (0, 0)$ e duas bandas também circulares de elétrons no ponto $\mathbf{M} = (\pi, \pi)$ no esquema da zona de Brillouin estendida. Se considerarmos que as interações não fazem distinção entre as duas bandas de buracos assim como as duas de elétrons, podemos aplicar aos pnictídeos o modelo dado em termos da Hamiltoniana na Eq. (5.1), ou seja, eles poderiam ser considerados na aproximação do modelo de duas bandas (ver Fig. 5.1).

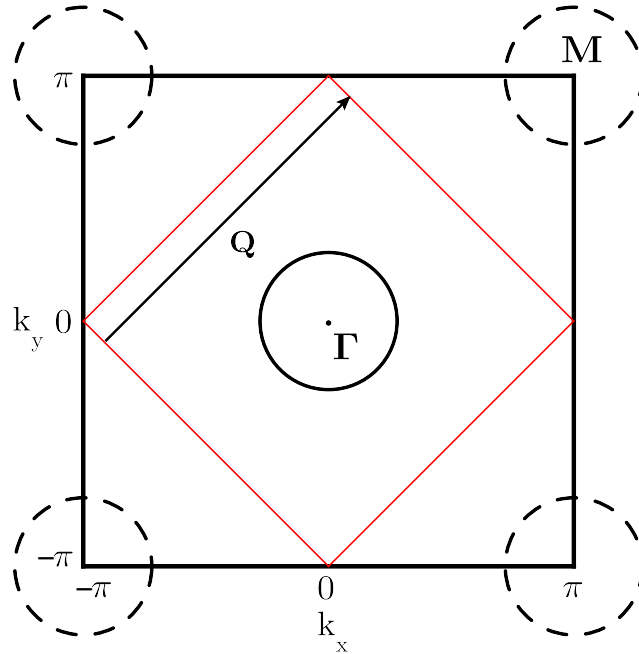


Figura 5.1: Esquema da zona de Brillouin estendida utilizada no modelo de duas bandas para uma situação onde o sistema não está dopado. As superfícies de Fermi de buracos e elétrons, nesse caso, são circunferências idênticas centradas, respectivamente, nos pontos $\Gamma = (0, 0)$ e $\mathbf{M} = (\pi, \pi)$.

Com a transformação canônica já referida acima, obtemos também uma Hamiltoniana de interação dada em função dos novos operadores $\{c_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{p},\sigma}\}$, $\{f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger, f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma}\}$ e de cinco novas constantes de acoplamento definidas em termos das constantes U_{11} e U_{12} . Em forma explícita, temos

$$\begin{aligned}
H_{\text{int}} = & U_1 \sum_{\substack{\mathbf{p},\mathbf{q},\mathbf{k} \\ \sigma,\sigma'}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k},\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma'} c_{\mathbf{q},\sigma} + U_2 \sum_{\substack{\mathbf{p},\mathbf{q},\mathbf{k} \\ \sigma,\sigma'}} f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma'} c_{\mathbf{q},\sigma} \\
& + \frac{U_3}{2} \sum_{\substack{\mathbf{p},\mathbf{q},\mathbf{k} \\ \sigma,\sigma'}} \left\{ c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma'} f_{\mathbf{q}+\mathbf{Q},\sigma} + f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p},\sigma'} c_{\mathbf{q},\sigma} \right\} \\
& + U_4 \sum_{\substack{\mathbf{p},\mathbf{q},\mathbf{k} \\ \sigma,\sigma'}} f_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger f_{\mathbf{k}+\mathbf{Q},\sigma'}^\dagger f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma'} f_{\mathbf{q}+\mathbf{Q},\sigma} + U_5 \sum_{\substack{\mathbf{p},\mathbf{q},\mathbf{k} \\ \sigma,\sigma'}} c_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma'}^\dagger c_{\mathbf{p},\sigma'} c_{\mathbf{q},\sigma}. \quad (5.4)
\end{aligned}$$

onde as constantes de acoplamento da Hamiltoniana de interação acima estão no canal de carga, ou seja, elas são independentes do spin. A constante de acoplamento U_1 descreve processos de espalhamento entre partículas situadas em diferentes bandas na zona de Brillouin onde praticamente não há transferência de momento. Esse tipo de processo é conhecido como espalhamento frontal (do inglês, *forward scattering*). Da mesma forma que U_1 , a constante de acoplamento U_2 caracteriza processos de interação entre partículas situadas em diferentes bandas, mas nesse caso as transferências de momento não são pequenas e sim da ordem do vetor de nesting $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Esse tipo de interação é conhecido como espalhamento “para trás” ou *backscattering*. Há ainda um tipo de interação, definida pela constante de acoplamento U_3 e chamada *Umklapp*, que viola a conservação de momento a menos de um vetor da rede recíproca ($2\mathbf{Q}$). Nesse caso, duas partículas da banda de buracos (férmions- c) podem interagir e passar para a banda de elétrons (férmions- f) da mesma forma que duas partículas da banda de elétrons podem interagir e passar para a banda de buracos. Os dois últimos processos de interação são os caracterizados pelas constantes de acoplamento U_4 e U_5 , que são processos de espalhamento do tipo frontal e envolvem pequenas transferências de momento. Na Fig. 5.2, representamos, em termos dos diagramas de Feynman, todos os processos de interação no modelo de duas bandas.

Até agora, não falamos nada sobre o valor que cada constante de acoplamento U_i

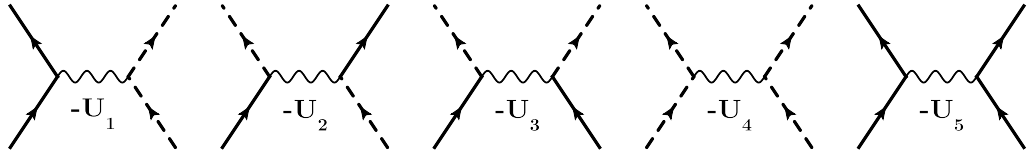


Figura 5.2: Representação em termos dos diagramas de Feynman dos cinco tipos de interação relevantes no modelo de duas bandas. As linhas sólidas e tracejadas representam, respectivamente, partículas da banda de buracos (férmions- c) e partículas da banda de elétrons (férmions- f).

($i = 1, \dots, 5$) possui no nosso modelo. Como discutido no Apêndice A desta dissertação, U_1 , U_4 e U_5 são sempre idênticos entre si, assim como U_2 e U_3 , mas que essas duas últimas constantes de acoplamento possuem valor inferior às primeiras quando se considera o efeito da hibridização no modelo de duas bandas.

5.2 Teoria de perturbação e grupo de renormalização até um loop

Nesta seção, derivaremos as equações de grupo de renormalização (GR) até um loop do modelo de duas bandas. Mas antes de chegarmos a esse ponto, temos que, primeiramente, definir algumas grandezas e fazer algumas considerações. Já que estamos interessados na física de baixa energia e no estado fundamental ($T = 0$) do nosso modelo 2d, vamos linearizar as relações de dispersão $\xi_c(\mathbf{p})$ e $\xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ em torno das respectivas superfícies de Fermi. Nesse caso, como não há a presença de dopagem de elétrons ou de buracos, temos simplesmente

$$\begin{cases} \xi_c(\mathbf{p}) = -v_F(|\mathbf{p}| - k_F), \\ \xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) = v_F(|\mathbf{p}| - k_F). \end{cases}$$

Na expressão acima, estamos considerando que as superfícies de Fermi de buracos e elétrons – centradas, respectivamente, em $\Gamma = (0, 0)$ e no ponto $\mathbf{M} = (\pi, \pi)$ na zona de Brillouin – sejam circunferências de raio k_F e $v_F = -(\partial\xi_c/\partial\mathbf{p})|_{|\mathbf{p}|=k_F}$ seja a velocidade de Fermi de propagação das partículas na banda de elétrons. A aproximação acima só vale para uma região no espaço dos momentos definida por $k_F \leq |\mathbf{p}| \leq k_F + \lambda$, onde λ é o “cutoff” ultravioleta nos momentos da nossa teoria.

A partir de agora, vamos usar uma representação em termos de uma integral funcional da Hamiltoniana total do sistema $H = H_0 + H_{\text{int}}$ e escrever assim uma ação S para o nosso modelo. Dessa forma, temos que a ação não interagente S_0 é dada por¹

$$S_0 = - \sum_{\sigma} \int_p \{ [ip_0 - \xi_c(\mathbf{p})] \bar{c}_{\sigma}(\mathbf{p}) c_{\sigma}(\mathbf{p}) + [ip_0 - \xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q})] \bar{f}_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \}, \quad (5.5)$$

onde $\int_p = \int \frac{dp_0}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{p}}{(2\pi)^2}$. As quantidades $\bar{c}_{\sigma}(\mathbf{p})$ e $c_{\sigma}(\mathbf{p})$ são, respectivamente, campos de Grassmann de criação e aniquilação de férmions- c com momento próximo de $\Gamma = (0, 0)$ e projeção de spin σ . De maneira similar, $\bar{f}_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ e $f_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{Q})$ são campos de Grassmann de criação e aniquilação de férmions- f com momento da ordem de $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ e projeção de spin σ . Os fatores que multiplicam os campos de Grassmann na ação S_0 são, respectivamente, o inverso da função de Green livre para buracos $G_c^{(0)}(\mathbf{p}, p_0)$ e o inverso da função de Green livre para elétrons $G_f^{(0)}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}, p_0)$. A parte de interação da ação total S escreve-se como

$$\begin{aligned} S_{\text{int}} &= U_1 \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} \bar{c}_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{f}_{\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) f_{\sigma'}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) c_{\sigma}(\mathbf{p}) \\ &+ U_2 \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} \bar{f}_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{c}_{\sigma'}(\mathbf{k}) f_{\sigma'}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) c_{\sigma}(\mathbf{p}) \\ &+ \frac{U_3}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} \{ \bar{c}_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{c}_{\sigma'}(\mathbf{k}) f_{\sigma'}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) f_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \\ &\quad + \bar{f}_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{f}_{\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) c_{\sigma'}(\mathbf{q}) c_{\sigma}(\mathbf{p}) \} \\ &+ U_4 \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} \bar{f}_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{f}_{\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) f_{\sigma'}(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) f_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \\ &+ U_5 \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} \bar{c}_{\sigma}(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{c}_{\sigma'}(\mathbf{k}) c_{\sigma'}(\mathbf{q}) c_{\sigma}(\mathbf{p}). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Observamos que a descrição de um sistema por sua Hamiltoniana ou por sua ação é totalmente equivalente, não havendo razão para uma mudança na interpretação física dos acoplamentos U_i ($i = 1, \dots, 5$).

A ação interagente S_{int} na Eq. (5.6) é o ponto de partida da nossa teoria de perturbação para se calcular as chamadas correções aos vértices induzidas no modelo por flutuações quânticas. Uma vez que estamos interessados, no momento, em derivar as equações

¹Para não carregar a notação, a dependência dos campos fermiônicos com a frequência será omitida no restante deste trabalho.

do GR até um loop, vamos calcular até segunda ordem nas interações a função vértice irreduzível de quatro pontos $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ ($i = 1, \dots, 4$) para cada um dos canais do modelo de duas bandas. Ao se fazer isso, dois tipos de estruturas, representadas na Fig. 5.3 e conhecidas como “bolhas” de polarização, aparecerão nos correspondentes diagramas de Feynman. As “bolhas” do tipo partícula-buraco são formadas por duas linhas fermiônicas em direções contrárias. Já as “bolhas” do tipo partícula-partícula possuem estrutura caracterizada pela existência de duas linhas fermiônicas em uma mesma direção. As “bolhas” de polarização servem também como uma espécie de indicativo do tipo de ordem que caracteriza um determinado modelo. “Bolhas” do tipo partícula-partícula divergentes no limite de baixa energia são um indicativo para o aparecimento de uma instabilidade para um estado supercondutor em um modelo assim como uma instabilidade para um estado magnético é, geralmente, caracterizada por “bolhas” partícula-buraco divergentes no limite de baixa energia. Devido a tudo isso, vamos representar as principais “bolhas” de polarização pelas seguintes funções

$$\Pi_{cc}^{(0)}(\mathbf{p}, ip_0) = \int \frac{dk_0}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_c^{(0)}(\mathbf{k}, ik_0) G_c^{(0)}(-\mathbf{k} + \mathbf{p}, -ik_0 + ip_0), \quad (5.7)$$

$$\Pi_{ff}^{(0)}(\mathbf{p}, ip_0) = \int \frac{dk_0}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_f^{(0)}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}, ik_0) G_f^{(0)}(-\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{Q}, -ik_0 + ip_0), \quad (5.8)$$

$$\chi_{cf}^{(0)}(\mathbf{p}, ip_0) = \int \frac{dk_0}{2\pi} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} G_c^{(0)}(\mathbf{k}, ik_0) G_f^{(0)}(\mathbf{k} + \mathbf{p} + \mathbf{Q}, ik_0 + ip_0). \quad (5.9)$$

As duas primeiras funções acima representam “bolhas” de polarização do tipo partícula-partícula formadas, respectivamente, por dois férmions- c e dois férmions- f e a terceira função define uma “bolha” de polarização partícula-buraco formada por um férmion- c e um férmion- f . Observando que as integrações para qualquer quantidade definida aqui devem ocorrer em torno da respectiva superfície de Fermi no espaço- \mathbf{k} e sobre todo o espectro de frequência ($-\infty \leq p_0 \leq \infty$), torna-se simples calcular que

$$\Pi_{cc}^{(0)}(\mathbf{p}, ip_0) = \frac{N_0}{2} \ln \left(\frac{ip_0 - v_F |\mathbf{p}| + \Omega}{ip_0 + v_F |\mathbf{p}|} \right), \quad (5.10)$$

$$\Pi_{ff}^{(0)}(\mathbf{p}, ip_0) = \frac{N_0}{2} \ln \left(\frac{ip_0 + v_F |\mathbf{p}| - \Omega}{ip_0 - v_F |\mathbf{p}|} \right), \quad (5.11)$$

$$\chi_{cf}^{(0)}(\mathbf{p}, ip_0) = -\frac{N_0}{2} \ln \left(\frac{ip_0 + v_F |\mathbf{p}| - \Omega}{ip_0 - v_F |\mathbf{p}|} \right), \quad (5.12)$$

onde $N_0 = m/(2\pi)$ é a densidade de estados de um gás de elétrons 2d e $\Omega = 2v_F\lambda$ é o “cutoff” ultravioleta correspondente na energia. Podemos observar que no caso onde $\mathbf{p} = 0$ e $p_0 \ll \Omega$, todas as “bolhas” de polarização divergem logaritmicamente, ou seja,

$$\Pi_{cc}^{(0)}(\mathbf{p}, ip_0) = \Pi_{ff}^{(0)}(\mathbf{p}, ip_0) = -\chi_{cf}^{(0)}(\mathbf{p}, ip_0) = \frac{N_0}{2} \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right). \quad (5.13)$$

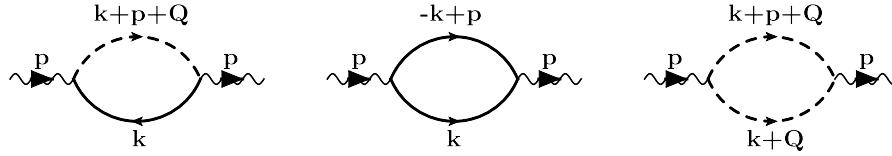


Figura 5.3: “Bolhas” de polarização que contribuem para a função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ ($i = 1, \dots, 4$) no modelo de duas bandas. Nessas figuras, representamos apenas os momentos e omitimos as frequência para não carregar a notação.

Com a ajuda das regras de Feynman, geramos agora todos os diagramas mais relevantes até um loop da função vértice de quatro pontos $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ para o canal de espalhamento frontal U_1 (ver Fig. 5.4). Em termos das “bolhas” de polarização, podemos escrevê-la como

$$\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\}; U_1) = -U_1 + (U_1^2 + U_3^2)\chi_{cf}^{(0)}(\mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_1, p_{03} - p_{01}). \quad (5.14)$$

Utilizando, no referido canal, as prescrições $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 = -\mathbf{p}_4 = \mathbf{k}_F$ para os momentos e $p_{03} - p_{01} = p_0$ para as frequências, obtemos finalmente que

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_1) = -U_1 - \frac{N_0}{2}(U_1^2 + U_3^2) \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right), \quad (5.15)$$

onde podemos perceber claramente que a função vértice $\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_1)$ não está bem definida no limite de baixa energia ($p_0 \rightarrow 0$), uma vez que ela não se reduz ao termo de interação de primeira ordem. Da mesma forma, podemos calcular a função vértice para os outros canais de espalhamento com o uso de prescrições adequadas (ver Figs. 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8). Seguindo isso, temos que a função $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ nos canais de espalhamento “para trás” (U_2), Umklapp

(U_3) e frontal (U_4 e U_5) comportam-se, na aproximação de um loop, como

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_2) = -U_2 + N_0 U_2 (U_2 - U_1) \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right), \quad (5.16)$$

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_3) = -U_3 - \frac{N_0}{2} U_3 (4U_1 - 2U_2 - U_4 - U_5) \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right), \quad (5.17)$$

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_4) = -U_4 + \frac{N_0}{2} (U_3^2 + U_4^2) \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right), \quad (5.18)$$

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_5) = -U_5 + \frac{N_0}{2} (U_3^2 + U_5^2) \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right), \quad (5.19)$$

onde é novamente visível que essa formulação ingênua da teoria de perturbação falha em acessar a física de baixa energia do modelo de duas bandas, uma vez que não possibilita qualquer tipo de correspondência com a situação experimental, onde sempre se mede valores finitos para as quantidades físicas nas quais estamos interessados. Para solucionar o problema das divergências logarítmicas que aparecem no cálculo de teoria de perturbação até um loop da função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$, vamos recorrer ao método do GR na formulação de teoria de campos.

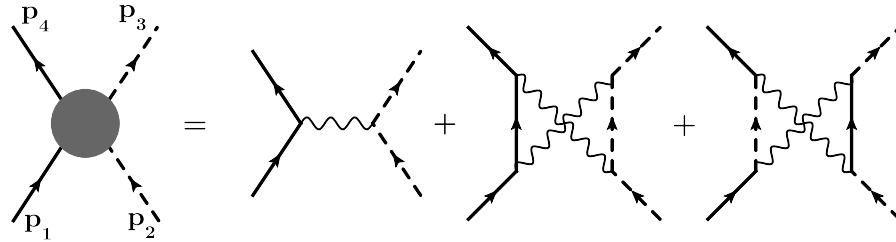


Figura 5.4: Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_1 na aproximação de um loop.

Devido ao fato de o modelo de duas bandas ser um modelo microscópico, todos os parâmetros que aparecem nele, como os acoplamentos e os campos fermiônicos, estão definidos para uma escala de energia da ordem do “cutoff” Ω . Contudo, experimentalmente, o que se observa é a dinâmica de baixa energia associado a um determinado sistema. A ideia, então, do método do GR consiste em substituir os parâmetros do modelo microscópico, também conhecidos como parâmetros “nus”, por parâmetros efetivos ou renormalizados definidos para uma escala de energia ω que, por sua vez, podem representar a escala de baixa energia. No caso do GR até um loop, apenas os acoplamentos do nosso modelo serão modificados, pois não

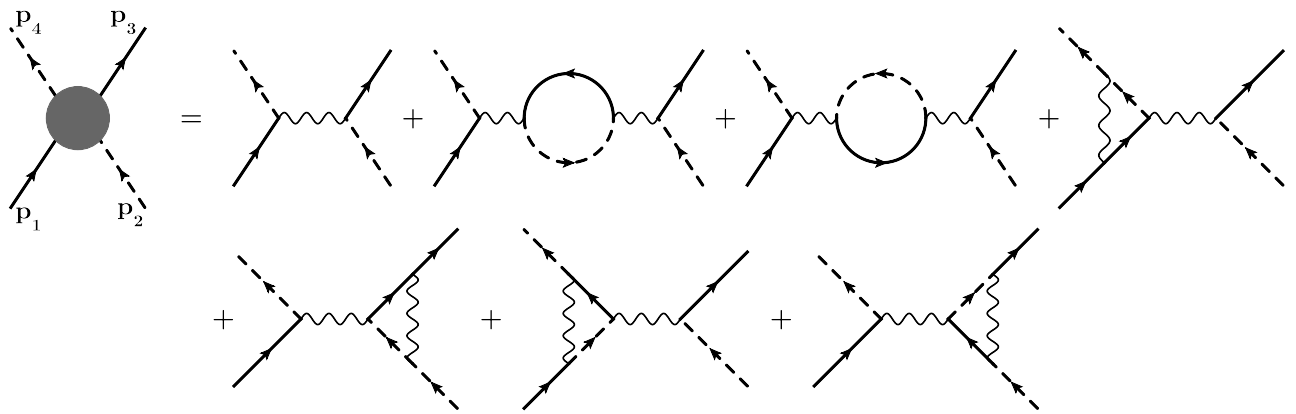


Figura 5.5: Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento “para trás” U_2 na aproximação de um loop.

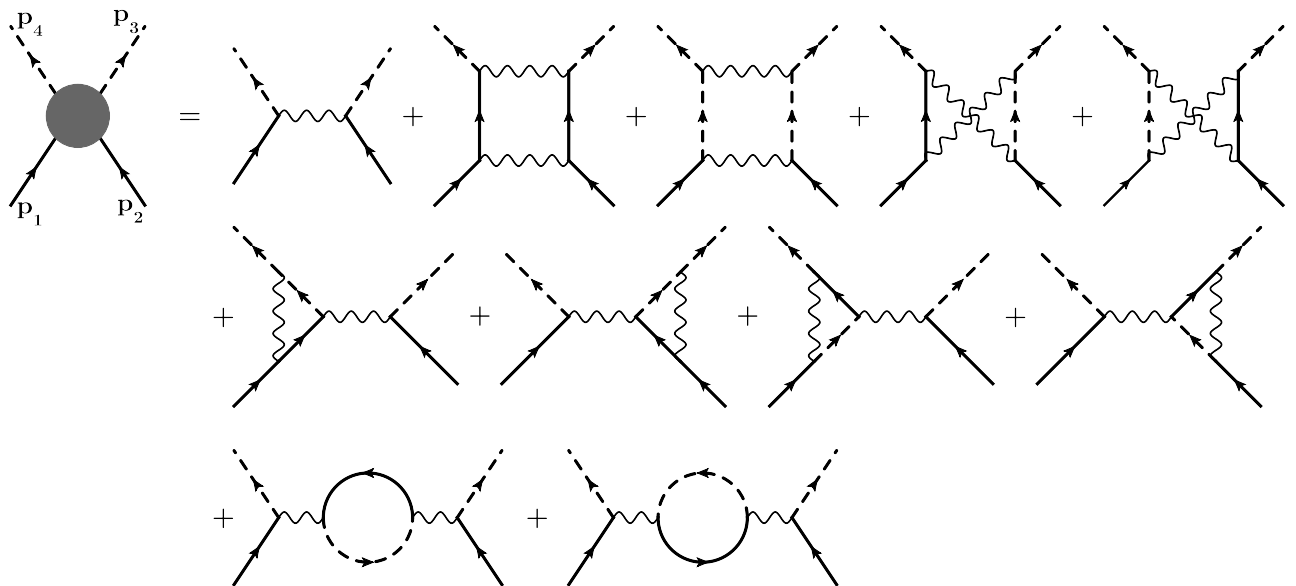


Figura 5.6: Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento Umklapp U_3 na aproximação de um loop.

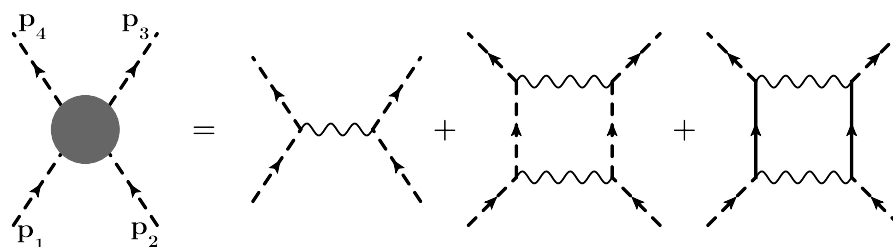


Figura 5.7: Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_4 na aproximação de um loop.

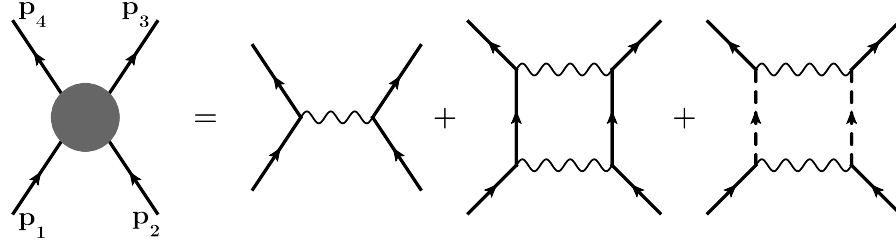


Figura 5.8: Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_5 na aproximação de um loop.

estamos considerando efeitos de flutuações quânticas de ordem mais elevada para se considerar a renormalização dos campos fermiônicos. Dessa forma, definimos os acoplamentos “nus” da seguinte maneira

$$U_i = U_{iR}(\omega) + \Delta U_{iR}(\omega) \quad (i = 1, \dots, 5) \quad (5.20)$$

onde os termos $\Delta U_{iR}(\omega)$ são conhecidos como contratermos da teoria de perturbação e são dados pela diferença entre os acoplamentos “nus” e os renormalizados. Agora podemos inserir a definição (5.20) na expressão da ação interagente “nua” S_{int} na Eq. (5.6) para obtermos, então,

$$\begin{aligned} S_{\text{int}}^{R(1\text{loop})} &= \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} (U_{1R} + \Delta U_{1R}) \bar{c}_\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{f}_{\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) f_{\sigma'}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) c_\sigma(\mathbf{q}) \\ &+ \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} (U_{2R} + \Delta U_{2R}) \bar{f}_\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{c}_{\sigma'}(\mathbf{k}) f_{\sigma'}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) c_\sigma(\mathbf{q}) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} (U_{3R} + \Delta U_{3R}) \{ \bar{c}_\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{c}_{\sigma'}(\mathbf{k}) f_{\sigma'}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_\sigma(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) \\ &\quad + \bar{f}_\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{f}_{\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) c_{\sigma'}(\mathbf{q}) c_\sigma(\mathbf{p}) \} \\ &+ \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} (U_{4R} + \Delta U_{4R}) \bar{f}_\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{f}_{\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) f_{\sigma'}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_\sigma(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) \\ &+ \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} (U_{5R} + \Delta U_{5R}) \bar{c}_\sigma(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{c}_{\sigma'}(\mathbf{k}) c_{\sigma'}(\mathbf{p}) c_\sigma(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (5.21)$$

que é conhecida como a ação interagente até um loop da teoria de perturbação renormalizada. O efeito dos contratermos $\Delta U_{iR}(\omega)$ em $S_{\text{int}}^{R(1\text{loop})}$ será o de evitar o aparecimento de divergências no limite de baixa energia.

Como próximo passo, vamos calcular novamente a função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ para

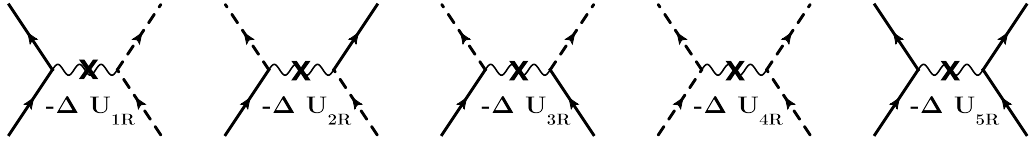


Figura 5.9: Representação dos contratermos ΔU_{iR} ($i = 1, \dots, 5$) através dos diagramas de Feynman.

cada um dos acoplamentos renormalizados que aparece na ação renormalizada S_{int}^R (1loop). O cálculo é semelhante ao já efetuado anteriormente, ou seja, os diagramas de Feynman que aparecem são os mesmos com a exceção de um único diagrama que é devido ao contratermo, cuja representação, em termos dos diagramas de Feynman, encontra-se na Fig. 5.9. Logo, é simples mostrar que

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_{1R}) = -U_{1R} - \frac{N_0}{2}(U_{1R}^2 + U_{3R}^2) \ln\left(\frac{\Omega}{p_0}\right) - \Delta U_{1R}, \quad (5.22)$$

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_{2R}) = -U_{2R} + N_0 U_{2R}(U_{2R} - U_{1R}) \ln\left(\frac{\Omega}{p_0}\right) - \Delta U_{2R}, \quad (5.23)$$

$$\begin{aligned} \Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_{3R}) &= -U_{3R} - \frac{N_0}{2} U_{3R}(4U_{1R} - 2U_{2R} - U_{4R} - U_{5R}) \ln\left(\frac{\Omega}{p_0}\right) \\ &\quad - \Delta U_{3R}, \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_{4R}) = -U_{4R} + \frac{N_0}{2}(U_{3R}^2 + U_{4R}^2) \ln\left(\frac{\Omega}{p_0}\right) - \Delta U_{4R}, \quad (5.25)$$

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0; U_{5R}) = -U_{5R} + \frac{N_0}{2}(U_{3R}^2 + U_{5R}^2) \ln\left(\frac{\Omega}{p_0}\right) - \Delta U_{5R}. \quad (5.26)$$

Como a teoria de perturbação utilizada acima foi definida para a escala particular de energia ω , temos que, para essa região, a função vértice deve obedecer, para cada acoplamento, à seguinte prescrição

$$\Gamma^{(4)}(\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \mathbf{p}_3, p_0 = \omega; U_{iR}) = -U_{iR}(\omega) \quad (i = 1, \dots, 5). \quad (5.27)$$

Dessa forma, todos os contratermos da teoria ficam bem definidos na aproximação de um loop e a substituição dos mesmos nas Eqs. (5.22)–(5.26) mostra que as funções vértices reduzem-se aos respectivos termos de primeira ordem quando $p_0 \rightarrow \omega$. Como última etapa do estudo das interações no modelo de duas bandas pelo método do GR, resta somente a derivação das equações para os acoplamentos que descrevem a dinâmica de baixa energia. Para isso, notamos

que a teoria original não contém qualquer informação sobre a escala de energia ω . Então, observando a Eq. (5.20), concluímos que a seguinte condição deve ser satisfeita

$$\omega \frac{d}{d\omega}(U_{iR} + \Delta U_{iR}) = 0, \quad (i = 1, \dots, 5) \quad (5.28)$$

isto é, as equações para os acoplamentos renormalizados até um loop são dadas por

$$\frac{d}{dl}\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{1R}^2 + \bar{U}_{3R}^2, \quad (5.29)$$

$$\frac{d}{dl}\bar{U}_{2R} = \bar{U}_{2R}(\bar{U}_{1R} - \bar{U}_{2R}), \quad (5.30)$$

$$\frac{d}{dl}\bar{U}_{3R} = \bar{U}_{3R}(4\bar{U}_{1R} - 2\bar{U}_{2R} - \bar{U}_{4R} - \bar{U}_{5R}), \quad (5.31)$$

$$\frac{d}{dl}\bar{U}_{4R} = -\bar{U}_{3R}^2 - \bar{U}_{4R}^2, \quad (5.32)$$

$$\frac{d}{dl}\bar{U}_{5R} = -\bar{U}_{3R}^2 - \bar{U}_{5R}^2, \quad (5.33)$$

onde $\bar{U}_{iR} = N_0 U_{iR}$ e a derivada das equações acima é com relação ao passo de grupo de renormalização l , definido por $\omega = \Omega \exp(-2l)$. Devemos observar ainda que as equações acima valem somente para a situação $E_F < \omega < \Omega$. Daqui em diante, vamos fazer sempre $\bar{U}_{5R} = \bar{U}_{4R}$, pois do ponto de vista do GR esses acoplamentos são equivalentes como pode ser visto no sistema de equações acima.

As Eqs. (5.29)–(5.33) foram derivadas primeiramente por Chubukov *et al.* [19] utilizando um outro esquema do grupo de renormalização. Incluímos esses resultados nesta dissertação para mostrar como se deve proceder com o método do GR de teoria de campos, explicado em linhas gerais no capítulo anterior. Eles também nos permitirão fazer uma comparação entre os valores derivados para os parâmetros do modelo de duas bandas obtidos pelo método do GR de um loop e de dois loops. Devido a isso, não vamos nos preocupar em resolver agora o conjunto de equações definido logo acima, ficando essa tarefa para o próximo capítulo.

5.3 Cálculo da auto-energia e do peso da quasipartícula do modelo

Para derivarmos as equações do grupo de renormalização (GR) até um loop foi necessário substituir os acoplamentos da ação total $S = S_0 + S_{\text{int}}$ (ver Eqs. (5.5) e (5.6)) por

acoplamentos adequados à escala de energia de interesse mais os contratermos dos mesmos. Para irmos além dessa ordem de aproximação, teremos de incluir efeitos de auto-energia no mínimo até dois loops no modelo ou, equivalentemente, realizar uma renormalização de todos os parâmetros da ação total S que, por sua vez, inclui não somente a renormalização das constantes de acoplamento como também a dos campos fermiônicos. Dessa forma, vamos considerar primeiramente a renormalização dos campos fermiônicos, ou seja,

$$\phi_\sigma(\mathbf{p}) = \phi_\sigma^R(\mathbf{p}) + \Delta\phi_\sigma^R(\mathbf{p}) \equiv Z^{1/2}\phi_\sigma^R(\mathbf{p}), \quad (5.34)$$

$$\bar{\phi}_\sigma(\mathbf{p}) = \bar{\phi}_\sigma^R(\mathbf{p}) + \Delta\bar{\phi}_\sigma^R(\mathbf{p}) \equiv Z^{1/2}\bar{\phi}_\sigma^R(\mathbf{p}), \quad (5.35)$$

onde $\phi_\sigma(\mathbf{p}) \in \{c_\sigma(\mathbf{p}), f_\sigma(\mathbf{p})\}$. Nas expressões acima, os contratermos são funções dos campos fermiônicos renormalizados e de um parâmetro Z , que, como veremos, está intimamente ligado à auto-energia do sistema e é conhecido como peso da quasipartícula. A escala de valores desse parâmetro situa-se entre zero e um, sendo que o caso onde $Z = 0$, quando nos aproximamos do limite de baixa energia, caracterizaria um estado com ausência de excitações do tipo quasipartículas fermiônicas, que pode ser ou um estado isolante ou um líquido de não-Fermi.

Agora, devemos substituir as Eqs. (5.34)–(5.37) na expressão para a ação total S . Isso nos permite escrever

$$\begin{aligned} S = & - \sum_\sigma \int_p Z [ip_0 - \xi_c(\mathbf{p})] \bar{c}_\sigma^R(\mathbf{p}) c_\sigma^R(\mathbf{p}) \\ & - \sum_\sigma \int_p Z [ip_0 - \xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q})] \bar{f}_\sigma^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_\sigma^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \\ & + \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} U_1 Z^2 \bar{c}_\sigma^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{f}_{\sigma'}^R(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) f_{\sigma'}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) c_\sigma^R(\mathbf{q}) \\ & + \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} U_2 Z^2 \bar{f}_\sigma^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{c}_{\sigma'}^R(\mathbf{k}) f_{\sigma'}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) c_\sigma^R(\mathbf{q}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} U_3 Z^2 \{ \bar{c}_\sigma^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{c}_{\sigma'}^R(\mathbf{k}) f_{\sigma'}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_\sigma^R(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) \\ & \quad + \bar{f}_\sigma^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{f}_{\sigma'}^R(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) c_{\sigma'}^R(\mathbf{q}) c_\sigma^R(\mathbf{p}) \} \\ & + \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} U_4 Z^2 \{ \bar{f}_\sigma^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{f}_{\sigma'}^R(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) f_{\sigma'}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_\sigma^R(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) \\ & \quad + \bar{c}_\sigma^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{c}_{\sigma'}^R(\mathbf{k}) c_{\sigma'}^R(\mathbf{p}) c_\sigma^R(\mathbf{q}) \}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Uma vez que já renormalizamos os campos fermiônicos do modelo, precisamos, nesse momento, redefinir as suas constantes de acoplamento para evitar o aparecimento de divergências na escala de energia de interesse. Comparando a expressão acima para a ação total S e a da ação interagente renormalizada S_{int}^R (1loop) na aproximação de um loop, é fácil concluir que as constantes de acoplamentos devem ser dadas por

$$U_i = Z^{-2} (U_{iR} + \Delta U_{iR}), \quad (i = 1, \dots, 4) \quad (5.37)$$

ou seja, elas também dependem do peso da quasipartícula do modelo.

A substituição das Eqs. (5.39) na Eq. (5.38) definem, propriamente, a ação total renormalizada S do nosso modelo. Dessa forma, vamos representar, inicialmente, a ação livre renormalizada S_0^R da seguinte forma

$$S_0^R = - \sum_{\sigma} \int_p \{ [ip_0 - \xi_c(\mathbf{p})] \bar{c}_{\sigma}^R(\mathbf{p}) c_{\sigma}^R(\mathbf{p}) + [ip_0 - \xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q})] \bar{f}_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \}, \quad (5.38)$$

e a ação interagente por

$$\begin{aligned} S_{\text{int}}^{R(2\text{loop})} = & - \sum_{\sigma} \int_p \Delta Z [ip_0 - \xi_c(\mathbf{p})] \bar{c}_{\sigma}^R(\mathbf{p}) c_{\sigma}^R(\mathbf{p}) \\ & - \sum_{\sigma} \int_p \Delta Z [ip_0 - \xi_f(\mathbf{p} + \mathbf{Q})] \bar{f}_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \\ & + \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} (U_{1R} + \Delta U_{1R}) \bar{c}_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{f}_{\sigma'}^R(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) f_{\sigma'}^R(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) c_{\sigma}^R(\mathbf{p}) \\ & + \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} (U_{2R} + \Delta U_{2R}) \bar{f}_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{c}_{\sigma'}^R(\mathbf{k}) f_{\sigma'}^R(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) c_{\sigma}^R(\mathbf{p}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} (U_{3R} + \Delta U_{3R}) \{ \bar{c}_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{c}_{\sigma'}^R(\mathbf{k}) f_{\sigma'}^R(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) f_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \\ & \quad + \bar{f}_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{f}_{\sigma'}^R(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) c_{\sigma'}^R(\mathbf{q}) c_{\sigma}^R(\mathbf{p}) \} \\ & + \sum_{\sigma, \sigma'} \int_{p, q, k} (U_{4R} + \Delta U_{4R}) \{ \bar{f}_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k} + \mathbf{Q}) \bar{f}_{\sigma'}^R(\mathbf{k} + \mathbf{Q}) f_{\sigma'}^R(\mathbf{q} + \mathbf{Q}) f_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \\ & \quad + \bar{c}_{\sigma}^R(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \bar{c}_{\sigma'}^R(\mathbf{k}) c_{\sigma'}^R(\mathbf{q}) c_{\sigma}^R(\mathbf{p}) \}, \end{aligned} \quad (5.39)$$

onde o fator ΔZ é definido segundo a relação $Z = 1 + \Delta Z$ e representa uma perturbação no peso da quasipartícula usado no cálculo de grupo de renormalização na aproximação de dois

loops. Representamos, aqui, a ação interagente por $S_{\text{int}}^R(2\text{loop})$ para enfatizar que essa será a ação que utilizaremos no cálculo do GR até dois loops.

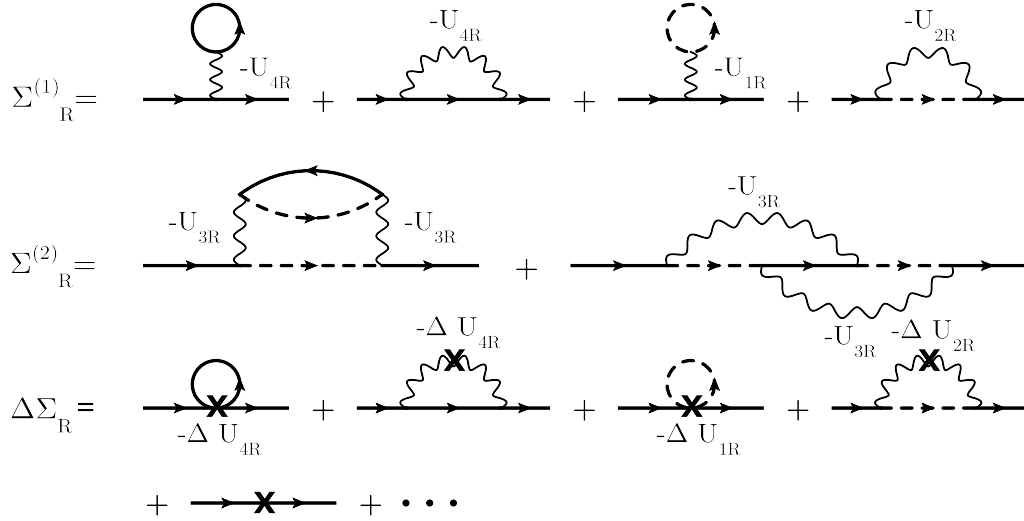


Figura 5.10: Diagramas de Feynman até dois loops associados à auto-energia. O último diagrama do contratermo da auto-energia $\Delta\Sigma_R$ corresponde à correção ΔZ do peso da quasipartícula.

Com o uso das regras de Feynman e da ação $S_{\text{int}}^R(2\text{loop})$, podemos agora gerar todos os diagramas que contribuem para a auto-energia renormalizada $\Sigma_R(\mathbf{p}, p_0)$ do sistema até segunda ordem nas interações ou, equivalentemente, até dois loops como pode ser visto na Fig. 5.10. Para isso, vamos supor que o momento \mathbf{p} das partículas esteja próximo da superfície de Fermi de buracos e escrever

$$\Sigma_R(\mathbf{p}, p_0) = \Sigma_R^{(1)} + \Sigma_R^{(2)} + \Delta\Sigma_R. \quad (5.40)$$

O termo $\Sigma_R^{(1)}$ representa as contribuições de um loop, sendo dado em termos dos diagramas de Hartree-Fock. O seu cálculo é simples e corresponde a

$$\Sigma_R^{(1)} = -\frac{N_0\Omega}{4}(2U_{1R} - U_{2R} - U_{4R}). \quad (5.41)$$

Já o termo $\Delta\Sigma_R$ diz respeito aos contratermos definidos na teoria e pode ser dividido em uma parte relacionada às contribuições de um loop e outra relacionada às de dois loops que, na Fig. 5.10, corresponde ao último diagrama da série para $\Delta\Sigma_R$. Dessa forma, podemos calcular

$$\Delta\Sigma_R = \Delta\Sigma_R^{(1)} - \Delta Z [ip_0 + v_F(|\mathbf{p}| - k_F)], \quad (5.42)$$

e $\Delta\Sigma_R^{(1)}$ é definido pela substituição dos acoplamentos U_{iR} por ΔU_{iR} em $\Sigma_R^{(1)}$. Por último, temos a contribuição de dois loops $\Sigma_R^{(2)}$ para a auto-energia dos diagramas de “pôr-do-sol” (do inglês, *sunset*). Nesse caso, apenas os diagramas que apresentam interação do tipo U_{3R} são relevantes para o nosso cálculo e obtemos que

$$\Sigma_R^{(2)} = -\frac{N_0^2 U_{3R}^2}{4} \left\{ [ip_0 + v_F(|\mathbf{p}| - k_F)] \ln \left[\frac{ip_0 + v_F(|\mathbf{p}| - k_F) - \Omega}{ip_0 + v_F(|\mathbf{p}| - k_F)} \right] + \Omega \right\}. \quad (5.43)$$

Estamos, nesse momento, aptos a calcular uma quantidade central para o método do GR, conhecida como função irreduzível de dois pontos $\Gamma^{(2)}(\mathbf{p}, p_0)$ que nada mais é que o inverso da função de Green total $G^{-1}(\mathbf{p}, p_0)$. Antes disso, temos que excluir do nosso cálculo os termos que contribuem em um loop para a auto-energia (isto é, $\Sigma_R^{(1)}$ e $\Delta\Sigma_R^{(1)}$), uma vez que não estamos considerando o efeito da renormalização da superfície de Fermi no nosso modelo. Feito isso, usamos a definição da função $\Gamma^{(2)}(\mathbf{p}, p_0)$ dada por

$$\Gamma^{(2)}(\mathbf{p}, p_0) = [G^{(0)}(\mathbf{p}, p_0)]^{-1} - \Sigma(\mathbf{p}, p_0), \quad (5.44)$$

e obtemos, simplesmente, que

$$\Gamma^{(2)}(\mathbf{p}, p_0) = [ip_0 + v_F(|\mathbf{p}| - k_F)] \left\{ 1 + \Delta Z + \frac{N_0^2 U_{3R}^2}{4} \ln \left[\frac{ip_0 + v_F(|\mathbf{p}| - k_F) - \Omega}{ip_0 + v_F(|\mathbf{p}| - k_F)} \right] \right\}. \quad (5.45)$$

A relação acima nos permite calcular o valor da perturbação ΔZ no peso da quasipartícula se estabelecermos uma prescrição adequada para a função $\Gamma^{(2)}(\mathbf{p}, p_0)$. Vamos impor então que no limite de baixa energia, a função de Green do sistema interagente apresente um polo simples na superfície de Fermi, ou seja,

$$\text{Im } \Gamma^{(2)}(\mathbf{p} = \mathbf{k}_F, p_0 = \omega) = \omega. \quad (5.46)$$

Então é fácil deduzir que a perturbação ΔZ possui a forma

$$\Delta Z(\omega) = -\frac{N_0^2 U_{3R}^2}{4} \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right), \quad (5.47)$$

e o peso da quasipartícula Z é dado em teoria de perturbação até dois loops por

$$Z(\omega) = 1 - \frac{N_0^2 U_{3R}^2}{4} \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right). \quad (5.48)$$

Da mesma forma que fizemos para as constantes de acoplamento do modelo de duas bandas, podemos também deduzir uma equação do GR para o peso da quasipartícula no limite de baixa energia. Temos então a seguinte equação

$$\omega \frac{d \ln Z}{d\omega} = \frac{N_0^2 U_{3R}^2}{4}, \quad (5.49)$$

que deve ser usada em conjunto com as Eqs. (5.39) para descrever os efeitos das flutuações quânticas induzidas no sistema pela auto-energia, na aproximação até dois loops do grupo de renormalização. Substituindo a Eq. (5.50) nas Eqs. (5.39), vemos que as correções induzidas pelo peso da quasipartícula Z no cálculo das constantes de acoplamento são uma ordem superior às correções da função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ para a aproximação de um loop. Para sermos consistentes na derivação das equações do GR, levando em conta esses novos efeitos, devemos estender a nossa teoria de perturbação até dois loops.

5.4 O grupo de renormalização até dois loops

A ideia do método do grupo de renormalização (GR) de teoria de campos para a derivação das equações para os acoplamentos de um determinado modelo na aproximação de dois loops consiste em levar em consideração a definição dos acoplamentos “nus” em termos dos acoplamentos renormalizados e seus contratermos, o efeito da auto-energia do modelo e a expansão em série perturbativa da função vértice irreduzível de quatro pontos $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ até terceira ordem nos acoplamentos. Tendo em vista o modelo de duas bandas, os dois primeiros efeitos aqui citados são representados pelas Eqs. (5.39) e pela equação do GR até dois loops para o peso da quasipartícula no sistema (ver Eq. (5.51)) e eles podem ser combinados nas seguintes equações do GR

$$\omega \frac{d}{d\omega} U_{iR}(\omega) = -\omega \frac{d}{d\omega} \Delta U_{iR}(\omega) + \omega \frac{d \ln Z^2}{d\omega} U_{iR}(\omega), \quad (i = 1, \dots, 4) \quad (5.50)$$

onde novamente estamos considerando a independência dos acoplamentos “nus” U_i com a escala de energia ω . De agora em diante, os contratermos $\Delta U_{iR}(\omega)$ da teoria de perturbação e que

aparecem na equação logo acima devem ser calculados em dois loops uma vez que a inclusão da auto-energia representa uma correção desse tipo.

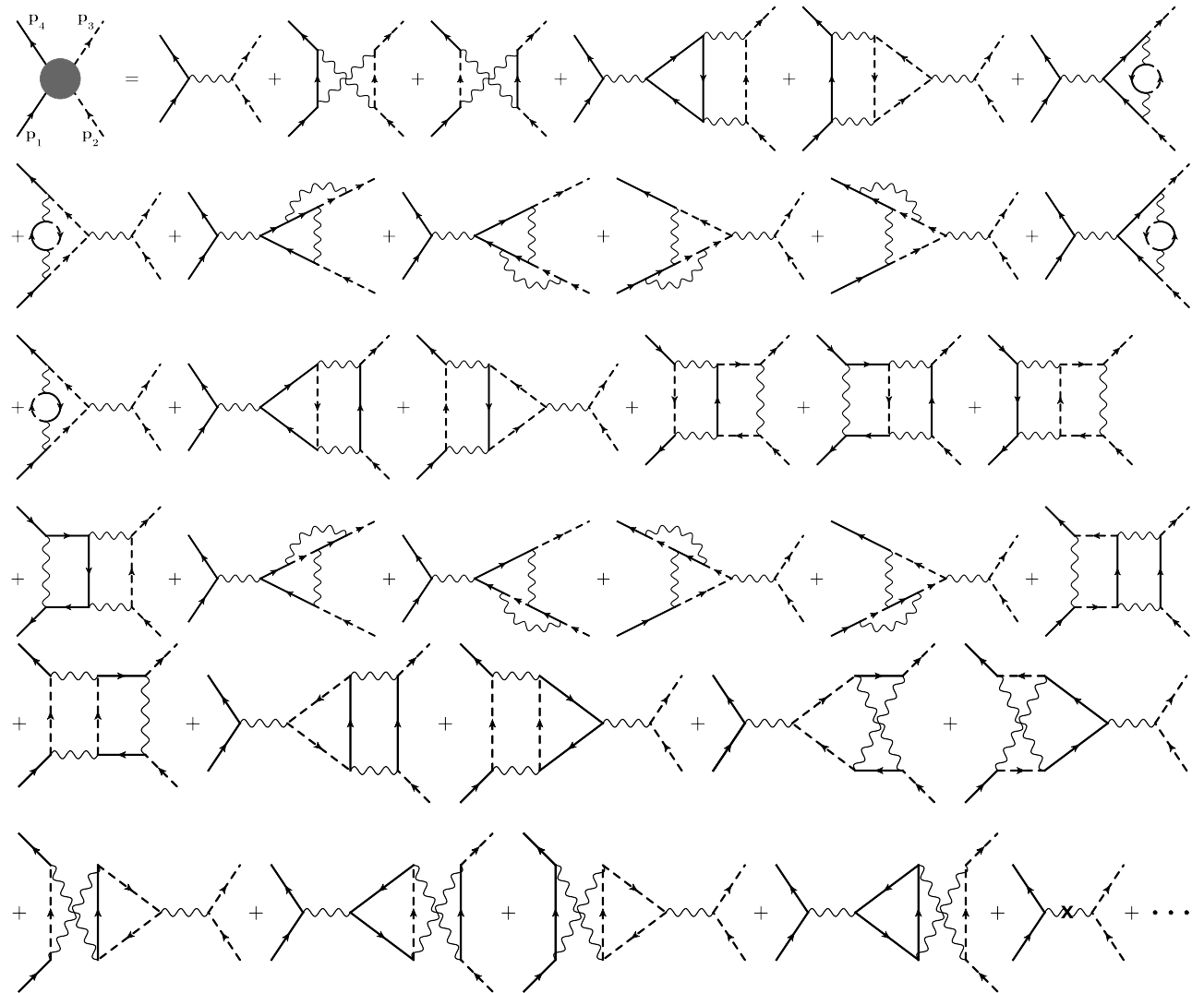


Figura 5.11: Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_{1R} na aproximação de dois loops.

Da mesma forma como foi feito para se determinar os contratermos da teoria de perturbação em um loop, precisamos agora calcular, com a ajuda da ação interagente renormalizada $S_{\text{int}}^R(2\text{loop})$, a função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ perturbativamente para cada canal do modelo. Essa expansão é feita, como antes, recorrendo-se ao método diagramático de Feynman, mas agora o número de diagramas com divergência logarítmica no limite de baixa energia é bem superior ao encontrado antes. Esses diagramas ainda se dividem entre aqueles que possuem divergência

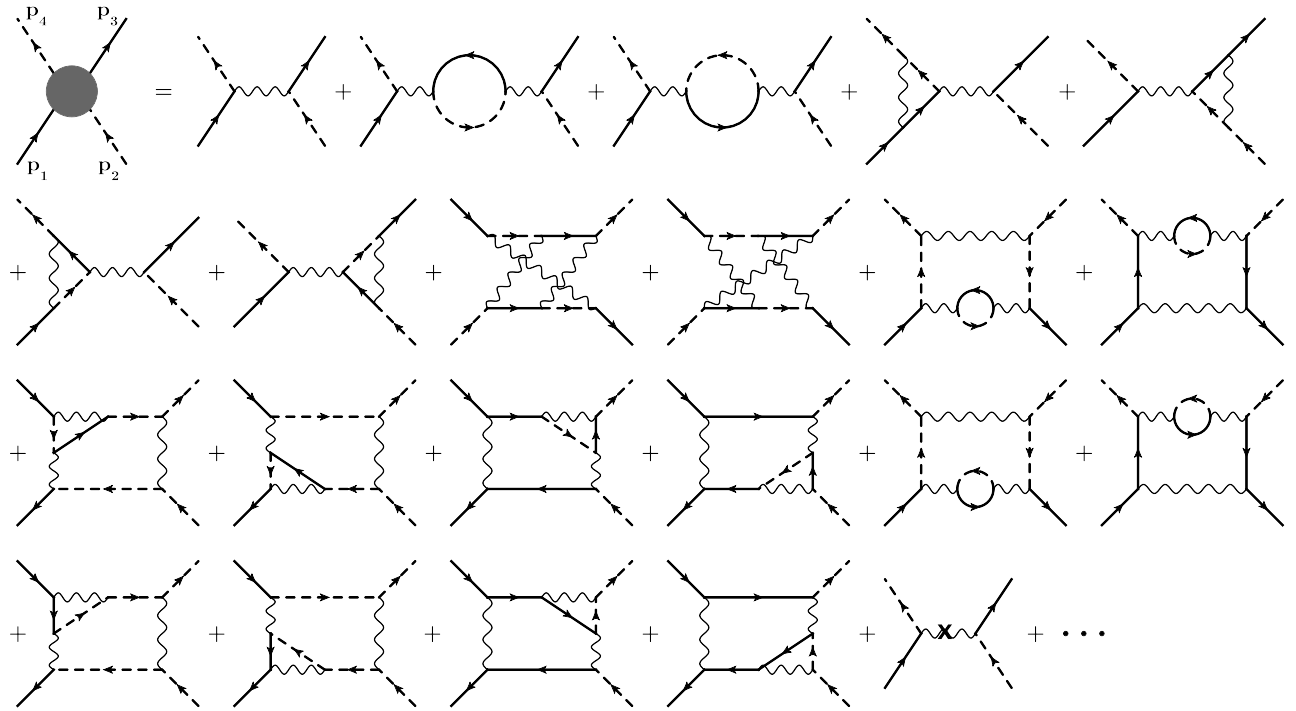


Figura 5.12: Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento “para trás” U_{2R} na aproximação de dois loops.

do tipo $\ln(\Omega/p_0)$ (divergência logarítmica simples) e os que divergem segundo $\ln^2(\Omega/p_0)$ (divergência logarítmica quadrática) que, à primeira vista, parecem ser mais relevantes para a série perturbativa. Contudo, os diagramas deste último tipo são todos cancelados na série perturbativa pelos diagramas formados pelos contratermos, restando assim apenas os diagramas com divergência logarítmica simples [34].

Nas Figs. 5.11, 5.12 e 5.13, mostramos todos os diagramas que contribuem efetivamente até dois loops para a função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ nos canais de espalhamento renormalizados frontal U_{1R} , “para trás” U_{2R} e frontal U_{4R} . O canal de interação Umklapp, descrito pela constante de acoplamento U_{3R} , não possui diagramas de dois loops que divergem com $\ln(\Omega/p_0)$ no limite de baixa energia, ficando a função vértice nesse canal na aproximação de dois loops idêntica à obtida na situação de um loop. Seguindo, então, as mesmas prescrições definidas anteriormente, os contratermos da teoria podem enfim ser calculados e os seus valores são dados

por

$$\begin{aligned}\Delta U_{1R}(\omega) &= -\frac{N_0}{2} (U_{1R}^2 + U_{3R}^2) \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right) + \frac{N_0^2}{2} (3U_{1R}^2 + 2U_{2R}^2 - 2U_{1R}U_{2R} + 3U_{3R}^2) U_{4R} \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right) \\ &\quad + \frac{N_0^2}{2} (U_{2R} - U_{1R}) U_{3R}^2 \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right),\end{aligned}\quad (5.51)$$

$$\Delta U_{2R}(\omega) = N_0 (U_{2R} - U_{1R}) U_{2R} \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right) + \frac{N_0^2}{2} (U_{2R}U_{3R}^2 + 2U_{2R}^2U_{4R} - 2U_{1R}U_{2R}U_{4R}) \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right),\quad (5.52)$$

$$\Delta U_{3R}(\omega) = -N_0 (2U_{1R} - U_{2R} - U_{4R}) U_{3R} \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right),\quad (5.53)$$

$$\begin{aligned}\Delta U_{4R}(\omega) &= \frac{N_0}{2} (U_{3R}^2 + U_{4R}^2) \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right) + \frac{N_0^2}{2} (4U_{1R} - U_{2R} + U_{4R}) U_{3R}^2 \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right) \\ &\quad + \frac{N_0^2}{2} (4U_{1R}^3 - 3U_{1R}^2U_{2R} + 2U_{2R}^3) \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right).\end{aligned}\quad (5.54)$$

As equações do grupo de renormalização até dois loops para os quatro acoplamentos do modelo de duas bandas decorrem, simplesmente, da substituição dos contratermos definidos acima nas Eqs. (5.52) juntamente com a equação do peso da quasipartícula (ver Eq. (5.51)). Fazendo a mudança de variáveis $\omega = \Omega \exp(-2l)$, obtemos que

$$\frac{d}{dl} \bar{U}_{1R} = \bar{U}_{1R}^2 + \bar{U}_{3R}^2 - \bar{U}_{2R}\bar{U}_{3R}^2 - (3\bar{U}_{1R}^2 + 2\bar{U}_{2R}^2 - 2\bar{U}_{1R}\bar{U}_{2R} - 3\bar{U}_{3R}^2) \bar{U}_{4R},\quad (5.55)$$

$$\frac{d}{dl} \bar{U}_{2R} = 2(\bar{U}_{1R} - \bar{U}_{2R})(\bar{U}_{2R} + \bar{U}_{2R}\bar{U}_{4R}) - 2\bar{U}_{2R}\bar{U}_{3R}^2,\quad (5.56)$$

$$\frac{d}{dl} \bar{U}_{3R} = 2\bar{U}_{3R}(2\bar{U}_{1R} - \bar{U}_{2R} - \bar{U}_{4R}) - \bar{U}_{3R}^3,\quad (5.57)$$

$$\frac{d}{dl} \bar{U}_{4R} = -(\bar{U}_{3R}^2 + \bar{U}_{4R}^2) - (4\bar{U}_{1R} - \bar{U}_{2R} + 2\bar{U}_{4R}) \bar{U}_{3R}^2 - (4\bar{U}_{1R}^3 - 3\bar{U}_{1R}^2\bar{U}_{2R} + 2\bar{U}_{3R}^3),\quad (5.58)$$

onde novamente $\bar{U}_{iR} = N_0 U_{iR}$ são acoplamentos renormalizados adimensionais definidos em termo da densidade de estados N_0 de um gás de elétrons livres 2d e estamos considerando o caso $E_F < \omega < \Omega$. As equações acima do GR de dois loops para os acoplamentos devem ser comparadas com as equações em um loop (ver Eqs. (5.29)–(5.33)) a fim de sabermos qual o efeito da inclusão da auto-energia. Todavia, antes de fazer isso, vamos primeiro derivar as equações do GR para as chamadas susceptibilidades do modelo, responsáveis pela determinação

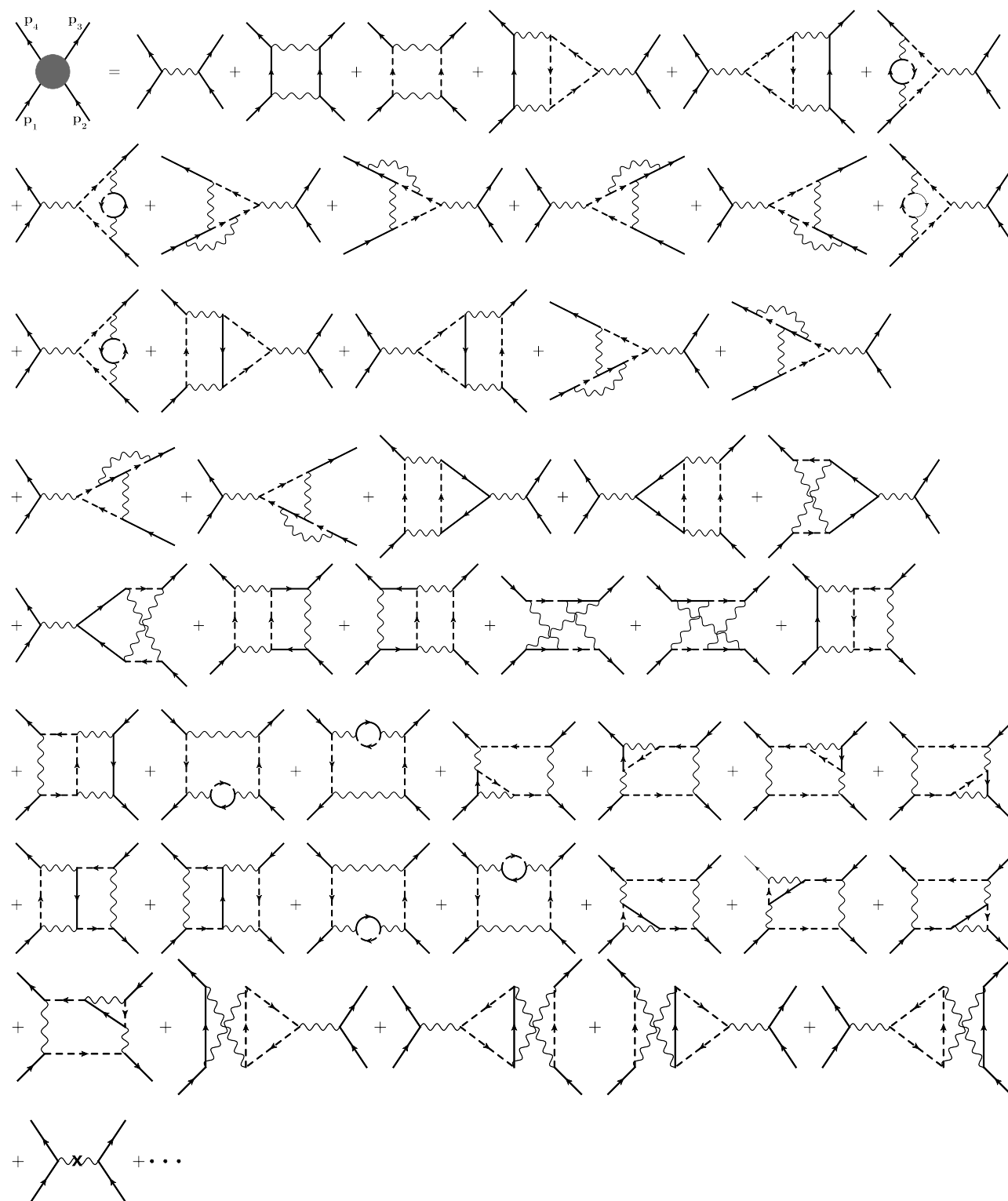


Figura 5.13: Função vértice $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{p}_i, p_{0i}\})$ do canal de espalhamento frontal U_{4R} na aproximação de dois loops.

dos possíveis ordenamentos em que um sistema descrito pelo mesmo pode se encontrar no limite de baixa energia.

5.5 Cálculo das susceptibilidades onda de densidade e supercondutora

Nesta seção, iniciaremos o estudo pelo método do grupo de renormalização (GR) das instabilidades supercondutora (SC) e onda de densidade (OD) presentes no modelo de duas bandas. Para isso, vamos introduzir dois campos infinitesimais h_{SC} e h_{OD} que acoplam com as funções respostas responsáveis pelo aparecimento dessas duas instabilidades. Isso equivale a adicionar à ação total “nua” S do nosso modelo, a seguinte ação externa

$$\begin{aligned} S_{\text{ext}} &= h_{SC} \sum_{\alpha,\beta} \int_{p,q} \left[\mathcal{T}_{SC}^{(c)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \bar{c}_\alpha(\mathbf{p}) \bar{c}_\beta(\mathbf{q} - \mathbf{p}) + c.c. \right] \\ &+ h_{SC} \sum_{\alpha,\beta} \int_{p,q} \left[\mathcal{T}_{SC}^{(f)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \bar{f}_\alpha(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) \bar{f}_\beta(\mathbf{q} - \mathbf{p} + \mathbf{Q}) + c.c. \right] \\ &+ h_{OD} \sum_{\alpha,\beta} \int_{p,q} \left[\mathcal{T}_{OD}^{\alpha\beta}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \bar{c}_\alpha(\mathbf{p} + \mathbf{q}) f_\beta(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) + c.c. \right], \end{aligned} \quad (5.59)$$

onde $\mathcal{T}_{SC}^{(c)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ e $\mathcal{T}_{SC}^{(f)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ são as funções respostas “nuas” da instabilidade supercondutora e $\mathcal{T}_{OD}^{\alpha\beta}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ é a função resposta também “nua” da instabilidade onda de densidade [36, 47]. Essa ação também está definida para a escala de energia da ordem do “cutoff” Ω e deve, por isso, ser regularizada para a escala de energia de interesse. Isso é feito renormalizando, primeiramente, os seus campos fermiônicos e, a seguir, as suas constantes de acoplamento. Dessa forma, as funções resposta têm de ser modificadas da seguinte maneira

$$\mathcal{T}_{SC}^{(i)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = Z^{-1} \left[\mathcal{T}_{SC}^{R(i)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \Delta \mathcal{T}_{SC}^{R(i)}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \right], \quad (5.60)$$

$$\mathcal{T}_{OD}^{\alpha\beta}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = Z^{-1} \left[\mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \Delta \mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \right], \quad (5.61)$$

onde $i = c, f$ e $\Delta \mathcal{T}_{SC}^{R(i)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ e $\Delta \mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ representam os contratermos das funções resposta necessários para tornar a teoria de perturbação finita. A presença do peso da quasipartícula Z nas expressões acima implica que já estamos considerando as contribuições de dois loops para a ação S_{ext} .

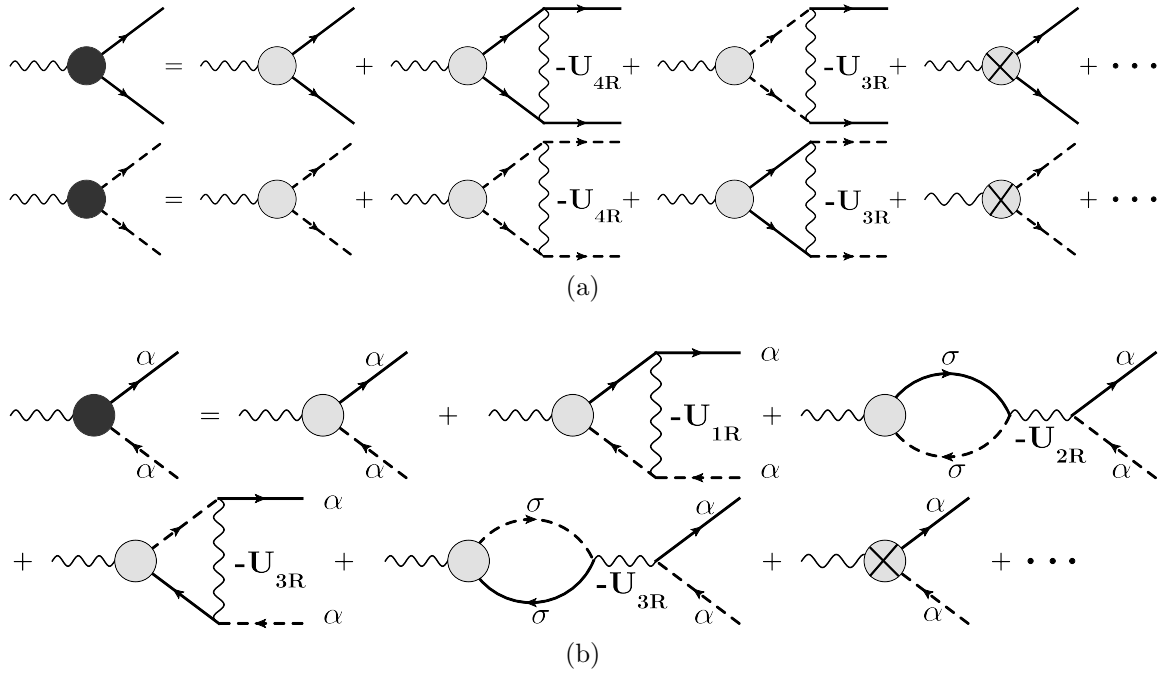


Figura 5.14: Diagramas de Feynman de um loop para o cálculo das funções irreduzíveis $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q} \approx 0)$ (círculos escuros) relacionadas à instabilidade supercondutora (a) e à instabilidade onda de densidade (b). As funções respostas renormalizadas $\mathcal{T}_{SC}^{R(c)}$, $\mathcal{T}_{SC}^{R(f)}$ e $\mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}$ são representadas, na figura, por círculos cinzas e os seus contratermos ($\Delta\mathcal{T}_{SC}^{R(c)}$, $\Delta\mathcal{T}_{SC}^{R(f)}$ e $\Delta\mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}$) por círculos cinzas com cruzes.

A ação na Eq. (5.61) serve para definir uma outra quantidade da teoria quântica de campos conhecida como função vértice irreduzível $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Essa função pode ser expandida em função dos diagramas de Feynman de três pernas como pode ser visto nas Figs. 5.14a e 5.14b. Observamos também que para o modelo de duas bandas não existem diagramas de dois loops com divergência logarítmica para $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ de forma que os efeitos de ordem superior para esse caso vêm das equações para os acoplamentos e do peso da quasipartícula. Então, podemos escrever

$$\Gamma_{SC(c)}^{(2,1)}(p_0) = -\mathcal{T}_{SC}^{R(c)} + N_0 \left(U_{4R} \mathcal{T}_{SC}^{R(c)} + U_{3R} \mathcal{T}_{SC}^{R(f)} \right) \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right) - \Delta\mathcal{T}_{SC}^{R(c)}, \quad (5.62)$$

$$\Gamma_{SC(f)}^{(2,1)}(p_0) = -\mathcal{T}_{SC}^{R(f)} + N_0 \left(U_{4R} \mathcal{T}_{SC}^{R(f)} + U_{3R} \mathcal{T}_{SC}^{R(c)} \right) \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right) - \Delta\mathcal{T}_{SC}^{R(f)}, \quad (5.63)$$

$$\Gamma_{OD\alpha\alpha}^{(2,1)}(p_0) = -\mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\alpha} - N_0 \left\{ \sum_{\sigma=\alpha,\beta} \delta_{\sigma,\alpha} [U_{1R} \mathcal{T}_{OD}^{R\sigma\sigma} + U_{3R} (\mathcal{T}_{OD}^{R\sigma\sigma})^*] - U_{2R} \mathcal{T}_{OD}^{R\sigma\sigma} - U_{3R} (\mathcal{T}_{OD}^{R\sigma\sigma})^* \right\} \times \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right) - \Delta\mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\alpha}, \quad (5.64)$$

onde estamos fazendo $\mathbf{p} = \mathbf{k}_F$ e $\mathbf{q} = 0$; os índices de spin α e β , naturalmente, pertencem ao conjunto $\{\uparrow, \downarrow\}$. Para derivar as equações do GR para as funções resposta, precisamos agora determinar os seus contratermos, isto é, precisamos estabelecer uma condição de renormalização para cada uma das funções irreduzíveis $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ que aparece no modelo que estamos estudando. Supondo que a escala de energia que estamos interessados seja dada por ω , vamos então impor que

$$\Gamma_{SC(c)}^{(2,1)}(\mathbf{p} = \mathbf{k}_F, \mathbf{q} = 0, p_0 = \omega) = -\mathcal{T}_{SC}^{R(c)}(\omega), \quad (5.65)$$

$$\Gamma_{SC(f)}^{(2,1)}(\mathbf{p} = \mathbf{k}_F, \mathbf{q} = 0, p_0 = \omega) = -\mathcal{T}_{SC}^{R(f)}(\omega), \quad (5.66)$$

$$\Gamma_{OD\alpha\alpha}^{(2,1)}(\mathbf{p} = \mathbf{k}_F, \mathbf{q} = 0, p_0 = \omega) = -\mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\alpha}(\omega). \quad (5.67)$$

As Eqs. (5.67)–(5.69) acima juntamente com as Eqs. (5.64)–(5.66) fornecem todos os contratermos das funções resposta das instabilidades supercondutora e onda de densidade que necessitamos para regularizar a teoria de perturbação associada com a ação S_{ext} . Eles são dados simplesmente por

$$\Delta\mathcal{T}_{SC}^{R(c)}(\omega) = N_0 \left(U_{4R}\mathcal{T}_{SC}^{R(c)} + U_{3R}\mathcal{T}_{SC}^{R(f)} \right) \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right), \quad (5.68)$$

$$\Delta\mathcal{T}_{SC}^{R(f)}(\omega) = N_0 \left(U_{4R}\mathcal{T}_{SC}^{R(f)} + U_{3R}\mathcal{T}_{SC}^{R(c)} \right) \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right), \quad (5.69)$$

$$\Delta\mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\alpha}(\omega) = N_0 \left\{ \sum_{\sigma=\alpha,\beta} \delta_{\sigma,\alpha} [U_{1R}\mathcal{T}_{OD}^{R\sigma\sigma} + U_{3R}(\mathcal{T}_{OD}^{R\sigma\sigma})^*] - U_{2R}\mathcal{T}_{OD}^{R\sigma\sigma} - U_{3R}(\mathcal{T}_{OD}^{R\sigma\sigma})^* \right\} \times \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right). \quad (5.70)$$

Podemos agora derivar as equações do grupo de renormalização para as funções respostas renormalizadas. Observando as Eqs. (5.62) e (5.63) e sabendo que as funções respostas “nuas” não têm qualquer dependência com a escala de energia ω é simples deduzir que

$$\omega \frac{d}{d\omega} \mathcal{T}_{SC}^{R(i)}(\omega) = -\omega \frac{d}{d\omega} \Delta\mathcal{T}_{SC}^{R(i)}(\omega) + \omega \frac{d \ln Z}{d\omega} \mathcal{T}_{SC}^{R(i)}(\omega), \quad (5.71)$$

$$\omega \frac{d}{d\omega} \mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}(\omega) = -\omega \frac{d}{d\omega} \Delta\mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}(\omega) + \omega \frac{d \ln Z}{d\omega} \mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\beta}(\omega), \quad (5.72)$$

e, da mesma forma, com a substituição dos termos acima, obter as seguintes equações

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{SC}^{R(c)} = - \left(\bar{U}_{4R} + \frac{\bar{U}_{3R}^2}{2} \right) \mathcal{T}_{SC}^{R(c)} - \bar{U}_{3R} \mathcal{T}_{SC}^{R(f)}, \quad (5.73)$$

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{SC}^{R(f)} = - \left(\bar{U}_{4R} + \frac{\bar{U}_{3R}^2}{2} \right) \mathcal{T}_{SC}^{R(f)} - \bar{U}_{3R} \mathcal{T}_{SC}^{R(c)}, \quad (5.74)$$

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\alpha} = \left(\bar{U}_{1R} - \frac{\bar{U}_{3R}^2}{2} \right) \mathcal{T}_{OD}^{R\alpha\alpha} - \bar{U}_{2R} \left\{ \sum_{\sigma=\alpha,\beta} \mathcal{T}_{OD}^{R\sigma\sigma} - \bar{U}_{3R} \delta_{\alpha,-\beta} \left(\mathcal{T}_{OD}^{R\beta\beta} \right)^* \right\}, \quad (5.75)$$

onde as derivadas são com relação ao passo de GR l definido, como anteriormente, por $\omega = \Omega \exp(-2l)$.

De posse das equações do GR para as funções resposta, podemos explorar as suas simetrias com relação à posição das bandas de elétrons e buracos assim como com relação às projeções de spin. Para isso, vamos definir os seguintes vértices

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)} = \mathcal{T}_{SC}^{R(c)} - \mathcal{T}_{SC}^{R(f)}, \\ \mathcal{T}_{SC}^{R(s)} = \mathcal{T}_{SC}^{R(c)} + \mathcal{T}_{SC}^{R(f)}, \\ \mathcal{T}_{ODC(ODS)}^R = \mathcal{T}_{OD}^{R\uparrow} \pm \mathcal{T}_{OD}^{R\downarrow}, \\ \mathcal{T}_{ODC(ODS)\pm}^R = \mathcal{T}_{ODC(ODS)}^R \pm \mathcal{T}_{ODC(ODS)}^{R*}, \end{array} \right.$$

onde $\mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)}$ e $\mathcal{T}_{SC}^{R(s)}$ representam, respectivamente, instabilidades supercondutoras do tipo onda- s estendida e onda- s convencional²; \mathcal{T}_{ODC}^R e \mathcal{T}_{ODS}^R caracterizam, nessa ordem, estados ordenados com excitações coletivas conhecidos como onda de densidade de carga (ODC) e onda de densidade de spin (ODS) (os sinais $+$ e $-$ que aparecem no subscrito desses dois últimos termos identificam, nessa ordem, a parte real e imaginária dos mesmos). Dessa forma, as equações do GR até dois loops para essas novas funções respostas são as seguintes

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)} = \left(\bar{U}_{3R} - \bar{U}_{4R} - \frac{\bar{U}_{3R}^2}{2} \right) \mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)}, \quad (5.76)$$

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{SC}^{R(s)} = - \left(\bar{U}_{3R} + \bar{U}_{4R} + \frac{\bar{U}_{3R}^2}{2} \right) \mathcal{T}_{SC}^{R(s)}, \quad (5.77)$$

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{ODC\pm}^R = \left(\bar{U}_{1R} - 2\bar{U}_{2R} \mp \bar{U}_{3R} - \frac{\bar{U}_{3R}^2}{2} \right) \mathcal{T}_{ODC\pm}^R, \quad (5.78)$$

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{ODS\pm}^R = \left(\bar{U}_{1R} \pm \bar{U}_{3R} - \frac{\bar{U}_{3R}^2}{2} \right) \mathcal{T}_{ODS\pm}^R. \quad (5.79)$$

²Na literatura, a instabilidade supercondutora onda- s convencional costuma ser representada pelo símbolo s^{++} .

Observando os termos que aparecem acima, notamos que o principal efeito das simetrizações propostas aqui foi colocar as equações para as funções respostas na forma diagonal. Isso também permite ver claramente o efeito da auto-energia do modelo, representado pelo termo quadrático da constante de acoplamento \bar{U}_{3R} que multiplica a função resposta. Numa dedução formal das equações do GR até um loop para essas quantidades, é possível ver que esse termo quadrático não aparece.

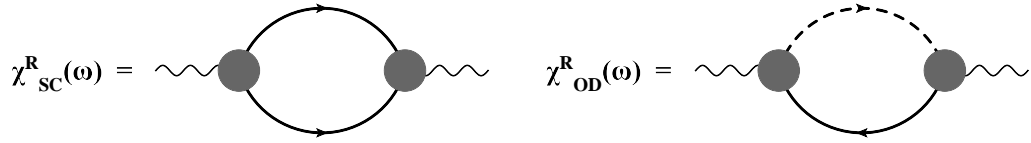


Figura 5.15: Diagramas de Feynman para o cálculo dos diferentes tipos de susceptibilidades renormalizadas supercondutora (χ_{SC}^R) e onda de densidade (χ_{OD}^R).

Por último, resta calcular as susceptibilidades associadas a cada uma das funções resposta definidas nas Eqs. (5.78) a (5.81). Na Fig. 5.15, mostramos os diagramas de Feynman envolvidos nesse cálculo e, como se pode ver facilmente, tratam-se das “bolhas” de polarização partícula-partícula e partícula-buraco. Dessa forma, as susceptibilidades ficam

$$\chi_{SC}^{R(s^\pm)}(\omega) = \frac{N_0}{2} \left[\mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)}(\omega) \right]^2 \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right), \quad (5.80)$$

$$\chi_{SC}^{R(s)}(\omega) = \frac{N_0}{2} \left[\mathcal{T}_{SC}^{R(s)}(\omega) \right]^2 \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right), \quad (5.81)$$

$$\chi_{ODC\pm}^R(\omega) = \frac{N_0}{2} \left[\mathcal{T}_{ODC\pm}^R(\omega) \right]^2 \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right), \quad (5.82)$$

$$\chi_{ODS\pm}^R(\omega) = \frac{N_0}{2} \left[\mathcal{T}_{ODS\pm}^R(\omega) \right]^2 \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right). \quad (5.83)$$

Repetindo, então, o mesmo procedimento utilizado na derivação da equação do GR para o peso da quasipartícula e utilizando a relação $\omega = \Omega \exp(-2l)$, obtemos que

$$\frac{d}{dl} \chi_{SC}^{R(s^\pm)} = N_0 \left[\mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)} \right]^2, \quad (5.84)$$

$$\frac{d}{dl} \chi_{SC}^{R(s)} = N_0 \left[\mathcal{T}_{SC}^{R(s)} \right]^2, \quad (5.85)$$

$$\frac{d}{dl} \chi_{ODC\pm}^R = N_0 \left[\mathcal{T}_{ODC\pm}^R \right]^2, \quad (5.86)$$

$$\frac{d}{dl} \chi_{ODS\pm}^R = N_0 \left[\mathcal{T}_{ODS\pm}^R \right]^2. \quad (5.87)$$

Essas são as equações do GR para as susceptibilidades associadas às funções resposta definidas anteriormente que temos que resolver no intuito de determinar as fases que podem estar presentes no estado fundamental dos sistemas descritos pelo nosso modelo. No entanto, isso somente será feito no próximo capítulo.

5.6 Cálculo das susceptibilidades de carga e spin uniformes

Continuando o estudo do modelo de duas bandas pelo método do grupo de renormalização (GR), vamos derivar, nesta seção, as equações que descrevem o comportamento de duas grandezas físicas conhecidas como susceptibilidades de carga e spin uniformes no limite de baixa energia. Para fazer isso, teremos de calcular a resposta linear do sistema à indução de um campo infinitesimal constante h_{unif} que se acopla com os operadores número de ocupação dos férmions perto da banda de buracos e da banda de elétrons [35]. Isso é feito adicionando à ação total “nua” S do modelo, a seguinte ação externa

$$S_{\text{unif}} = h_{\text{unif}} \sum_{\alpha} \int_p [\mathcal{T}_{(c)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p}) \bar{c}_{\alpha}(\mathbf{p}) c_{\alpha}(\mathbf{p}) + \mathcal{T}_{(f)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p}) \bar{f}_{\alpha}(\mathbf{p} + \mathbf{Q}) f_{\alpha}(\mathbf{p} + \mathbf{Q})]. \quad (5.88)$$

Na expressão de S_{unif} acima, as quantidades $\mathcal{T}_{(c)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p})$ e $\mathcal{T}_{(f)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p})$ correspondem, respectivamente, às funções respostas lineares “nuas” para os férmions- c e férmions- f e o índice α representa as possíveis configurações de spin de um férmion com spin 1/2. Da mesma forma que antes, podemos usar essa ação com o intuito de definir uma outra função vértice $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p})$ que, em teoria de perturbação, pode ser expandida em termos dos chamados diagramas de Feynman com três pernas. Os diagramas de um loop desse tipo não contêm divergência logarítmica no limite de baixa energia, fornecendo apenas uma contribuição da ordem da densidade de estado N_0 . Contudo, quando estendemos a nossa teoria de perturbação até a ordem de dois loops, vários diagramas divergentes aparecem nessa escala de valores de energia (ver Fig. 5.16). Tal cenário justifica, então, a utilização do método do grupo de renormalização até dois loops, levando em conta os efeitos da auto-energia do modelo, para que a nossa teoria forneça resul-

tados físicos consistentes. Dessa forma, seguindo o mesmo procedimento da seção anterior, as funções respostas “nuas” definidas aqui estão relacionadas com as suas respectivas grandezas renormalizadas por

$$\mathcal{T}_{(c)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p}) = Z^{-1} [\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p}) + \Delta\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p})], \quad (5.89)$$

$$\mathcal{T}_{(f)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p}) = Z^{-1} [\mathcal{T}_{R(f)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p}) + \Delta\mathcal{T}_{R(f)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p})], \quad (5.90)$$

onde $\Delta\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p})$ e $\Delta\mathcal{T}_{R(f)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p})$ são os contratermos necessários para tornar a teoria de perturbação finita.

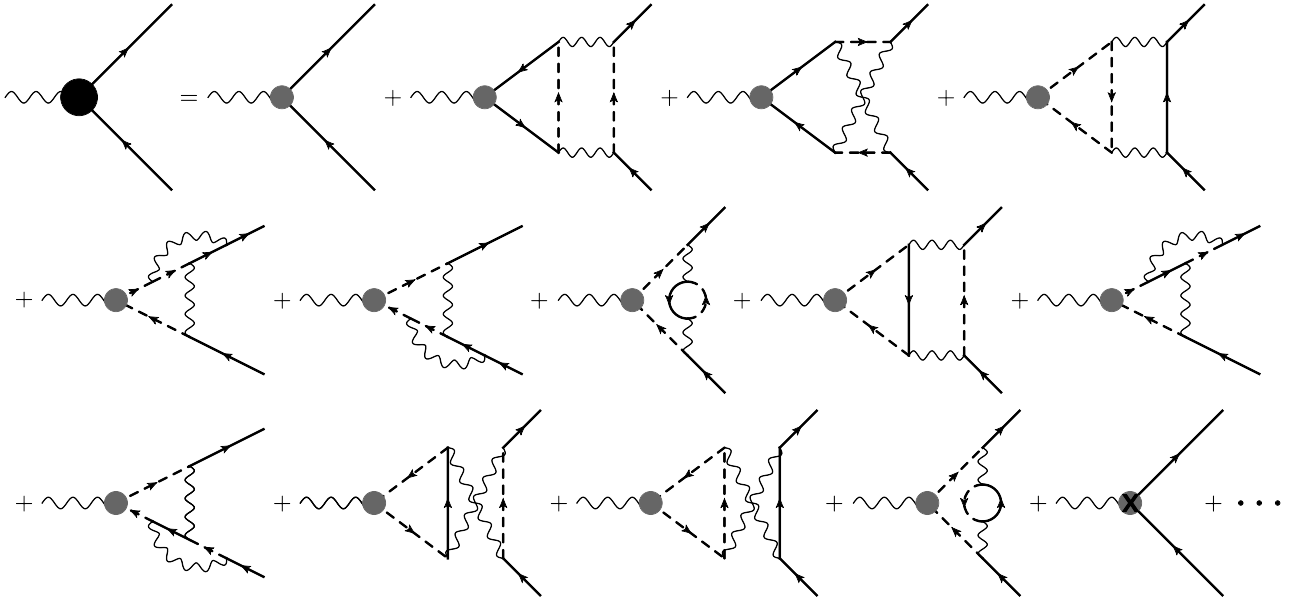


Figura 5.16: Função vértice irreduzível $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q} \approx 0)$ (círculo escuro à esquerda da igualdade) em função dos diagramas de Feynman até dois loops para o cálculo das susceptibilidades de carga e spin uniformes.

Na Fig. 5.16, mostramos todos os diagramas de dois loops que contribuem efetivamente para a função vértice irreduzível $\Gamma_{(c)\alpha\alpha}^{(2,1)}(\mathbf{p}, p_0)$. Calculando cada um deles com a ajuda das regras de Feynman adequadas para o modelo de duas bandas, obtemos que

$$\begin{aligned} \Gamma_{(c)\alpha\alpha}^{(2,1)}(\mathbf{p} = \mathbf{k}_F, p_0) &= -\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(p_0) + \frac{N_0^2}{4} \{U_{3R}^2 \mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(p_0) + 2(U_{2R} - U_{1R}) U_{2R} \mathcal{T}_{R(f)}^{\alpha\alpha}(p_0) \\ &+ \sum_{\sigma=\alpha,\beta} [2(U_{1R}^2 + U_{3R}^2) \mathcal{T}_{R(f)}^{\sigma\sigma}(p_0) - U_{3R}^2 \mathcal{T}_{R(c)}^{\sigma\sigma}(p_0)]\} \ln\left(\frac{\Omega}{p_0}\right) - \Delta\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(p_0), \end{aligned} \quad (5.91)$$

onde α e β são índices de spin opostos que pertencem ao conjunto $\{\uparrow, \downarrow\}$. Como próximo passo, devemos definir agora uma condição de renormalização para a função vértice acima. Vamos estabelecer, então, que

$$\Gamma_{(c)\alpha\alpha}^{(2,1)}(\mathbf{p} = \mathbf{k}_F, p_0 = \omega) = -\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(\omega). \quad (5.92)$$

Dessa forma, o contratermo correspondente à função vértice $\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}$ para a escala de energia ω é dado por

$$\begin{aligned} \Delta\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(\omega) &= \frac{N_0^2}{4} \{U_{3R}^2 \mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha} + 2(U_{2R} - U_{1R})U_{2R} \mathcal{T}_{R(f)}^{\alpha\alpha} \\ &+ \sum_{\sigma=\alpha,\beta} [2(U_{1R}^2 + U_{3R}^2) \mathcal{T}_{R(f)}^{\sigma\sigma} - U_{3R}^2 \mathcal{T}_{R(c)}^{\sigma\sigma}]\} \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right). \end{aligned} \quad (5.93)$$

Finalmente, usando o fato de a função resposta “nua” $\mathcal{T}_{(c)}^{\alpha\alpha}(\mathbf{p})$ ser independente da escala de energia ω juntamente com a Eq. (5.91), torna-se uma tarefa simples mostrar que

$$\omega \frac{d}{d\omega} \mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha} = \frac{N_0^2}{2} \left\{ U_{3R}^2 \mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha} + U_{2R}(U_{2R} - U_{1R}) \mathcal{T}_{R(f)}^{\alpha\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma=\alpha,\beta} [2(U_{1R}^2 + U_{3R}^2) \mathcal{T}_{R(f)}^{\sigma\sigma} - U_{3R}^2 \mathcal{T}_{R(c)}^{\sigma\sigma}] \right\}. \quad (5.94)$$

A derivação da equação do grupo de renormalização até dois loops para a função resposta $\mathcal{T}_{R(f)}^{\alpha\alpha}(\omega)$ segue o mesmo caminho do que foi feito para $\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(\omega)$, bastando permutar as funções resposta presentes na Eq. (5.96) acima para encontrar a sua expressão.

Podemos agora explorar a simetria com respeito às projeções de spin das equações do GR para $\mathcal{T}_{R(c)}^{\alpha\alpha}(\omega)$ e $\mathcal{T}_{R(f)}^{\alpha\alpha}(\omega)$. Com esse intuito, vamos definir, em termos dessas funções, os seguintes vértices

$$\mathcal{T}_{\text{Carga}}^{R(c)}(\omega) = \mathcal{T}_{R(c)}^{\uparrow\uparrow}(\omega) + \mathcal{T}_{R(c)}^{\downarrow\downarrow}(\omega), \quad (5.95)$$

$$\mathcal{T}_{\text{Spin}}^{R(c)}(\omega) = \mathcal{T}_{R(c)}^{\uparrow\uparrow}(\omega) - \mathcal{T}_{R(c)}^{\downarrow\downarrow}(\omega), \quad (5.96)$$

conhecidos também como funções respostas nos canais de carga e spin. Observe que eles foram definidos para pontos sobre a superfície de Fermi de buracos e que, da mesma forma, uma definição equivalente vale para definir as funções respostas nos mesmos canais para pontos

sobre a superfície de Fermi de elétrons. As equações do GR até dois loops para essas novas quantidades são dadas, então, por

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{\text{Carga}}^{R(c)} = - [2 (\bar{U}_{1R}^2 + \bar{U}_{3R}^2) + \bar{U}_{2R} (\bar{U}_{2R} - \bar{U}_{1R})] \mathcal{T}_{\text{Carga}}^{R(f)}, \quad (5.97)$$

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{\text{Carga}}^{R(f)} = - [2 (\bar{U}_{1R}^2 + \bar{U}_{3R}^2) + \bar{U}_{2R} (\bar{U}_{2R} - \bar{U}_{1R})] \mathcal{T}_{\text{Carga}}^{R(c)}, \quad (5.98)$$

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{\text{Spin}}^{R(c)} = -\bar{U}_{3R}^2 \mathcal{T}_{\text{Spin}}^{R(c)} - \bar{U}_{2R} (\bar{U}_{2R} - \bar{U}_{1R}) \mathcal{T}_{\text{Spin}}^{R(f)}, \quad (5.99)$$

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{\text{Spin}}^{R(f)} = -\bar{U}_{3R}^2 \mathcal{T}_{\text{Spin}}^{R(f)} - \bar{U}_{2R} (\bar{U}_{2R} - \bar{U}_{1R}) \mathcal{T}_{\text{Spin}}^{R(c)}, \quad (5.100)$$

onde usamos $\bar{U}_{iR} = N_0 U_{iR}$ ($i = 1, \dots, 4$) e a mudança de variáveis $\omega = \Omega \exp(-2l)$. Tendo em mãos a solução dessas equações para as funções respostas nos canais de carga e spin, podemos definir as susceptibilidades correspondentes. Na Fig. 5.17, mostramos como essas quantidades são representadas em termos dos diagramas de Feynman. Calculando tais diagramas, torna-se uma tarefa simples mostrar que as susceptibilidades uniformes de carga e spin são dadas, respectivamente, por

$$\chi_{\text{Carga}}^{R(i)}(l) = N_0 \left[\mathcal{T}_{\text{Carga}}^{R(i)}(l) \right]^2, \quad (5.101)$$

$$\chi_{\text{Spin}}^{R(i)}(l) = N_0 \left[\mathcal{T}_{\text{Spin}}^{R(i)}(l) \right]^2, \quad (5.102)$$

onde $i = c, f$. Observe que as susceptibilidades uniformes $\chi_{\text{Carga}}^{R(i)}$ e $\chi_{\text{Spin}}^{R(i)}$ não possuem equações do GR associadas. Contudo, elas dependem das funções respostas $\mathcal{T}_{\text{Carga}}^{R(i)}$ e $\mathcal{T}_{\text{Spin}}^{R(i)}$ que, diferentemente, são calculadas por meio de uma equação diferencial do GR.

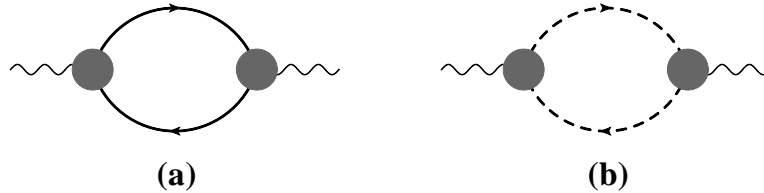


Figura 5.17: Diagramas de Feynman utilizados no cálculo das susceptibilidades uniformes $\chi_{\text{Carga}}^{R(i)}$ e $\chi_{\text{Spin}}^{R(i)}$ para partículas sobre a superfície de Fermi de buracos (a) e de elétrons (b).

A análise numérica das equações do grupo de renormalização derivadas nesta seção e nas anteriores será feita no próximo capítulo desta dissertação. Vale lembrar que a maior parte

dos resultados até dois loops apresentados aqui foi publicada pelo nosso grupo em um periódico internacional da área [48].

Capítulo 6

Resultados Numéricos

No capítulo anterior desta dissertação, derivamos as equações do grupo de renormalização (GR) até dois loops para os acoplamentos e para as diversas susceptibilidades definidas para o modelo de duas bandas. Para estabelecermos isso, tivemos que introduzir os efeitos da auto-energia nos parâmetros renormalizados do modelo e calcular algumas funções vértices irreduzíveis, na maioria das vezes, até terceira ordem nos acoplamentos.

A partir de agora, discutiremos a solução das equações do GR definidas até aqui e, conseqüentemente, o seu conteúdo físico. Como essas equações são acopladas, elas devem ser resolvidas simultaneamente. Empregamos, por isso, o método numérico de Runge-Kutta de quarta ordem sem controle de passo para obter o nosso conjunto de soluções numéricas. Tal método, quando aplicável, tem a vantagem de fornecer respostas rápidas a um problema proposto e a desvantagem de não fornecer uma visão geral como a de uma solução analítica. Outro problema apresentado por métodos numéricos é a sua imprecisão e, por isso, é necessário determinar o intervalo até onde o método numérico fornece bons resultados. A solução encontrada por nós, para esse último problema, foi usar um outro método numérico, conhecido como algoritmo de Dormand-Prince [50]. Ele é um método de quinta ordem capaz de fornecer valores com erro bem menor que o de Runge-Kutta. Estabelecemos então que quando a diferença de valores da solução de uma determinada equação do GR fornecida por esses dois métodos for relativamente grande, o fluxo das soluções do GR será parado.

6.1 O modelo de duas bandas em um loop

Utilizando o procedimento numérico mencionado acima, vamos dar início aqui à análise dos resultados fornecidos pelo método do grupo de renormalização (GR) em um loop para o modelo de duas bandas. Os resultados apresentados aqui servirão de base para o objetivo principal desta dissertação que consiste na análise dos resultados obtidos pelo método do GR de teoria de campos até dois loops para o mesmo modelo.

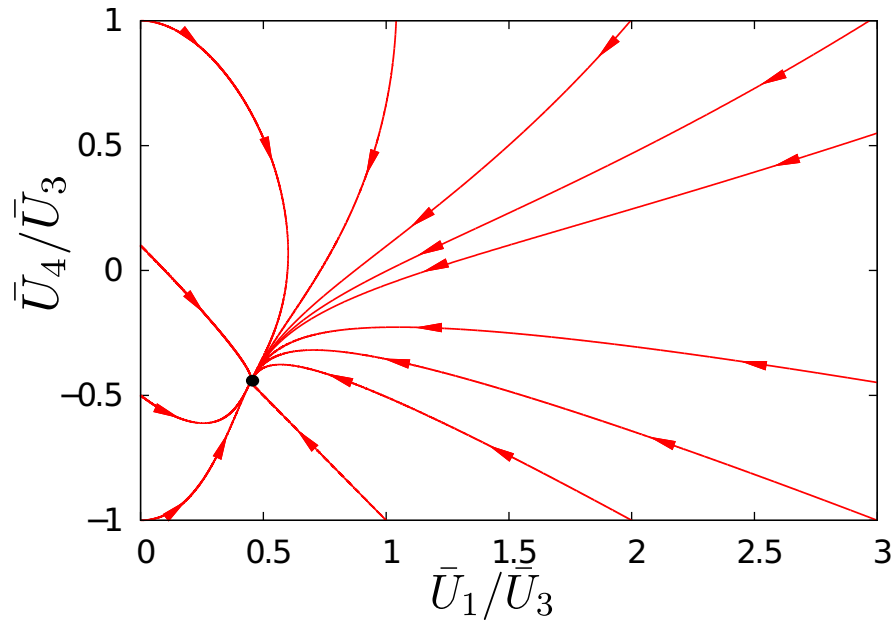


Figura 6.1: Solução das equações do grupo de renormalização até um loop nas variáveis $\bar{U}_{1R}/\bar{U}_{3R}$ e $\bar{U}_{4R}/\bar{U}_{3R}$. Na situação dada por $\bar{U}_{2R} = 0$ e $\bar{U}_{3R} > 0$ como condição inicial, o sistema flui, no limite de baixa energia, para um estado onde todos os acoplamentos divergem. Esse estado é representado por um ponto fixo cujos valores críticos dos acoplamentos comportam-se como $\bar{U}_{2R}/\bar{U}_{1R} = 0$, $\bar{U}_{3R}/\bar{U}_{1R} = \sqrt{5}$ e $\bar{U}_{4R}/\bar{U}_{1R} = -1$.

A solução das Eqs. (5.29)–(5.33) mostra que todos os acoplamentos do modelo de duas bandas divergem para alguma escala de energia finita ω_c . Essa divergência ocorre, em um regime de acoplamento repulsivo, com U_{1R} e U_{3R} assumindo valores positivos cada vez maiores ao passo que nos aproximamos da escala ω_c e, nesse ponto, a divergência dos mesmos ocorre com $U_{3R} = \sqrt{5}U_{1R}$. A divergência do acoplamento U_{2R} é menos acentuada que a dos dois acoplamentos anteriores, mas ele permanece sempre positivo ou, em outras palavras, fica na faixa dos acoplamentos repulsivos. Já o acoplamento U_{4R} , partindo de uma escala repulsiva,

decrece com o aumento do passo do GR, assume o valor zero e continua a decrescer até divergir para valores negativos na mesma escala de energia dos acoplamentos anteriores. Na Fig. 6.1, representamos o fluxo desses acoplamentos para diversas condições iniciais. Nota-se, nessa figura, a tendência de o sistema fluir, no regime de forte acoplamento, em direção a um ponto fixo, responsável pelas características de baixa energia do sistema. Podolsky *et al.* demonstraram que a Hamiltoniana total H do modelo de duas bandas no ponto fixo é invariante em relação a um grupo de simetria do tipo $SO(6)$ (para mais informações, veja o artigo da referência [49]).

A resposta sobre o tipo de instabilidade que domina o estado fundamental do modelo de duas bandas, na aproximação de um loop do GR, decorre do cálculo das susceptibilidades associadas aos diferentes tipos de ordenamentos nesse nível de aproximação. No capítulo anterior desta dissertação, derivamos as equações para o cálculo das susceptibilidades na aproximação de dois loops (ver Eqs. (5.78)–(5.81) e Eqs. (5.86)–(5.89)) e dissemos que elas se reduzem às susceptibilidades do GR até um loop quando desprezamos a contribuição devida à auto-energia nas funções respostas. Fazendo isso e levando em conta o conjunto de equações para os acoplamentos definido pelo GR até um loop (ver Eqs. (5.29)–(5.33)), pudemos calcular as diversas susceptibilidades do modelo acessíveis nesse nível de aproximação.

Na Fig. 6.2, mostramos dois gráficos representando a solução numérica dessas susceptibilidades para dois conjuntos de condições iniciais diferentes para os acoplamentos. Fizemos $\mathcal{T}_i^R(l=0) = 1$ e $\chi_i^R(l=0) = 0$ ($i = SC-s^\pm, SC-s, ODC\pm, ODS\pm$) para as funções respostas e susceptibilidades iniciais. Observa-se, em ambos os casos, que a componente real da susceptibilidade onda de densidade de spin χ_{ODS+}^R diverge mais rapidamente do que as outras susceptibilidades. A segunda susceptibilidade mais intensa, como se pode ver, é a componente imaginária da onda de densidade de carga χ_{ODC-}^R seguida de perto pela susceptibilidade supercondutora do tipo onda- s estendida $\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$. Essa susceptibilidade, por sua vez, torna-se cada vez mais importante com o aumento dos valores iniciais dos acoplamentos U_{2R} e U_{3R} . Basta então aumentar o valor desses acoplamentos em comparação com U_{1R} e U_{4R} até um certo

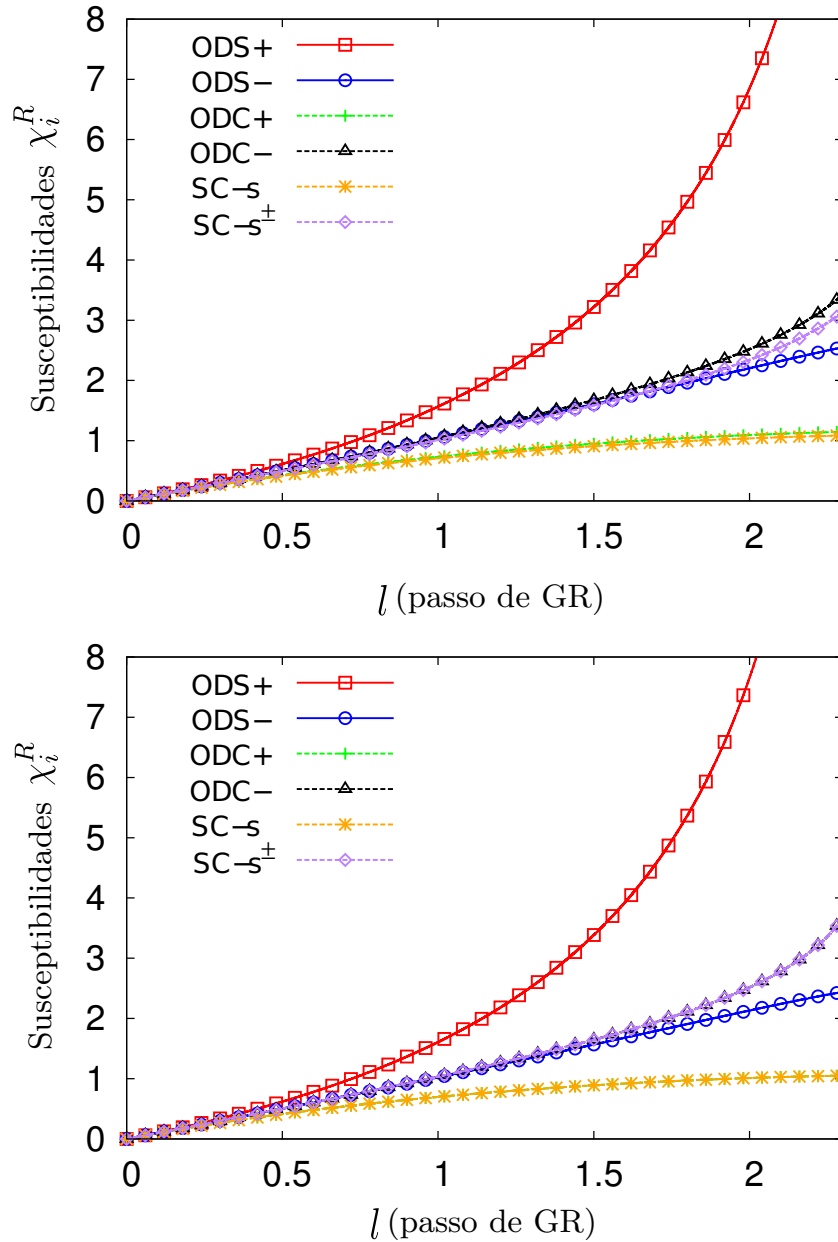


Figura 6.2: Susceptibilidades em unidades de N_0 para o modelo de duas bandas derivadas através do GR até um loop. Vemos, nos dois gráficos acima, que a susceptibilidade χ_{ODS+}^R supera todas as outras para as condições iniciais $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ e $\bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = 0.18$ (gráfico superior) e $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ (gráfico inferior). Os valores do passo de GR onde as susceptibilidades divergem são, respectivamente, $l_{\text{superior}} \approx 2.51$ e $l_{\text{inferior}} \approx 2.41$.

limite para que o estado fundamental do modelo de duas bandas seja caracterizado pela instabilidade supercondutora do tipo onda- s estendida. Contudo, sabemos, da prescrição inicial do modelo, que os acoplamentos U_{2R} e U_{3R} são sempre menores que os acoplamentos U_{1R} e U_{4R} . Sendo assim, o modelo de duas bandas com ausência de dopagem não possui um estado

supercondutor como estado fundamental, ficando este, na verdade, dominado por flutuações antiferromagnéticas correspondentes à susceptibilidade onda de densidade de spin $\chi_{\text{ODS}+}^R$ mencionada anteriormente.

Uma outra questão de importância fundamental é saber qual o tipo de interação que causa cada uma das susceptibilidades quando tentamos acessar o limite de baixa energia do modelo de duas bandas. Como estamos interessados em conectar esse modelo com o que é observado experimentalmente para os pnictídeos supercondutores, vamos nos concentrar nos dois tipos mais importantes de instabilidades presentes nesses materiais, ou seja, partiremos para a análise das susceptibilidades onda de densidade de spin (componente real) $\chi_{\text{ODS}+}^R$ e supercondutora onda- s estendida $\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$. A fim de atingir tal objetivo, temos primero que observar o comportamento das funções respostas relacionadas a essas susceptibilidades. Partindo das Eqs. (5.78) e (5.81), deduzidas para o cálculo do GR até dois loops, e excluindo o termo da contribuição decorrente da auto-energia, as equações para essas funções respostas, na aproximação de um loop do GR, são dadas simplesmente por:

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)} = (\bar{U}_{3R} - \bar{U}_{4R}) \mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)}, \quad (6.1)$$

$$\frac{d}{dl} \mathcal{T}_{\text{ODS}+}^R = (\bar{U}_{1R} + \bar{U}_{3R}) \mathcal{T}_{\text{ODS}+}^R. \quad (6.2)$$

Vemos então que as equações para as funções respostas $\mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)}$ e $\mathcal{T}_{\text{ODS}+}^R$ possuem autovalores proporcionais a $U_{3R} - U_{4R}$ e $U_{1R} + U_{3R}$, respectivamente. Se partirmos, por exemplo, da condição inicial $U_{3R}(l=0) = 0$, o acoplamento U_{3R} juntamente com U_{4R} fluem para zero no limite de baixa energia, enquanto U_{1R} diverge para valores positivos. Consequentemente, a função resposta $\mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)}$ não apresentará mais divergência, impossibilitando a ocorrência de uma instabilidade supercondutora nesse sistema. Observando isso e o fluxo dos acoplamentos na Fig. 6.1, verificamos que a interação do tipo Umklapp U_{3R} é a principal responsável pelo aparecimento das instabilidades antiferromagnética e supercondutora relacionadas, nessa ordem, às susceptibilidades $\chi_{\text{ODS}+}^R$ e $\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$. Tal conclusão parece independe dos detalhes da estrutura de bandas do modelo utilizado para tentar interpolar os resultados obtidos experimentalmente

para os pnictídeos supercondutores. Trabalhos com grupo de renormalização funcional de um loop que utilizam modelos mais sofisticados de quatro [25, 26] ou cinco bandas [27], levando em conta a existência de várias superfícies de Fermi de buracos e elétrons na zona de Brillouin e a possibilidade de os acoplamentos dependerem dos momentos confirmam tal afirmativa.

Na derivação das equações do GR até um loop, consideramos a existência de um vetor de nesting $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ entre as superfícies de Fermi de buracos e elétrons utilizadas no modelo de duas bandas. Isso só ocorre no caso de dopagem nula. Em dopagens finitas, as “bolhas” de polarização do tipo partícula-partícula divergiriam mais rapidamente que as “bolhas” de polarização do tipo partícula-buraco. Já que as “bolhas” do primeiro caso contabilizam para o aparecimento da instabilidade supercondutora, o sistema, para algum valor de dopagem, sofreria uma transição de fase quântica, passando de um regime antiferromagnético para um estado supercondutor. Isso realmente acontece para o modelo de duas bandas, sendo, nesse caso, a susceptibilidade supercondutora onda- s estendida $\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$ mais intensa que as demais [19, 20]. Em termos físicos, um sistema com esse tipo de instabilidade possui um gap supercondutor com sinais contrários sobre a superfície de Fermi de buracos e elétrons [12, 18]. Dados experimentais obtidos para os pnictídeos supercondutores através de ARPES, medidas de condutividade térmica e experimentos de espalhamento por nêutrons [51] são consistentes com essa simetria para o gap supercondutor, servindo também como base para justificar o modelo de duas bandas como um modelo mínimo capaz de capturar a física de baixa energia de tais materiais.

Uma vez que os acoplamentos em um loop fluem para um regime de forte acoplamento, discutiremos, na próxima seção desta dissertação, o efeito da inclusão de flutuações quânticas de ordem superior nas equações do GR que descrevem o modelo de duas bandas a fim de testar a robustez das conclusões obtidas com o GR na aproximação de um loop. Isso pode ser visto como uma linha alternativa de estudo dos modelos com fases antiferromagnética e supercondutora usados no entendimento da física de materiais supercondutores como os pnictídeos, uma vez que desprezamos a estrutura de bandas real desses materiais, mas melhoramos o nosso método de atacar o problema da origem e do comportamento das possíveis instabilidades presentes nesses

materiais.

6.2 O modelo de duas bandas em dois loops

Agora discutiremos os principais resultados decorrentes da aplicação das técnicas do grupo de renormalização (GR) de teoria de campos na aproximação até dois loops no modelo de duas bandas. Para isso, teremos de usar o procedimento numérico mencionado no início deste capítulo e resolver um sistema de equações diferenciais acopladas de dois loops envolvendo o peso da quasipartícula, os acoplamentos, as funções respostas e as diversas susceptibilidades.

Como passo inicial, vamos determinar o fluxo do GR das Eqs. (5.57)–(5.60) para os quatro acoplamentos renormalizados U_{iR} ($i = 1, \dots, 4$). Essas equações, por serem de dois loops, envolvem um número maior de termos quando comparadas com as equações correspondentes de um loop, mas a sua solução numérica não apresenta maiores dificuldades. Partindo do pressuposto de que esses acoplamentos são repulsivos para energias da ordem do “cutoff” Ω , a solução numérica dessas equações mostram que todos os acoplamentos divergem para alguma escala de energia finita ω_c , similarmente ao que foi obtido para o GR na aproximação de um loop. A mudança ocorre no valor relativo que esses acoplamentos assumem quando nos aproximamos da escala ω_c . Se anteriormente o acoplamento U_{3R} era da ordem do acoplamento U_{1R} quando nos aproximávamos do ponto fixo do GR até um loop, agora com o GR até dois loops a relação de ordem desses dois acoplamentos ocorre segundo $U_{3R}/U_{1R} \rightarrow 0$. O mesmo resultado vale para o acoplamento U_{2R} se comparado com o acoplamento U_{1R} , ou seja, $U_{2R}/U_{1R} \rightarrow 0$ quando o fluxo do GR até dois loops atinge a escala de energia ω_c . O acoplamento U_{4R} , para uma condição inicial repulsiva, continua divergindo para valores negativos à medida que nos aproximamos da escala ω_c , sendo que nesse ponto a sua relação com o acoplamento U_{1R} é dada por $U_{4R} \approx -1.2U_{1R}$. Esses resultados indicam que a simetria $SO(6)$ é levemente quebrada no novo ponto fixo para o modelo de duas bandas, mostrando, por meio disso, a relevância das flutuações quânticas de ordens superiores na descrição desse sistema.

Na Fig. 6.3, mostramos o diagrama de fluxo do GR até dois loops para esses acopla-

mentos utilizando as condições iniciais $U_{2R} = 0$ e $U_{3R} > 0$. Mesmo que o acoplamento U_{3R} seja atrativo inicialmente, o sistema fluirá, no regime de forte acoplamento, para um novo ponto fixo indicado nessa figura.

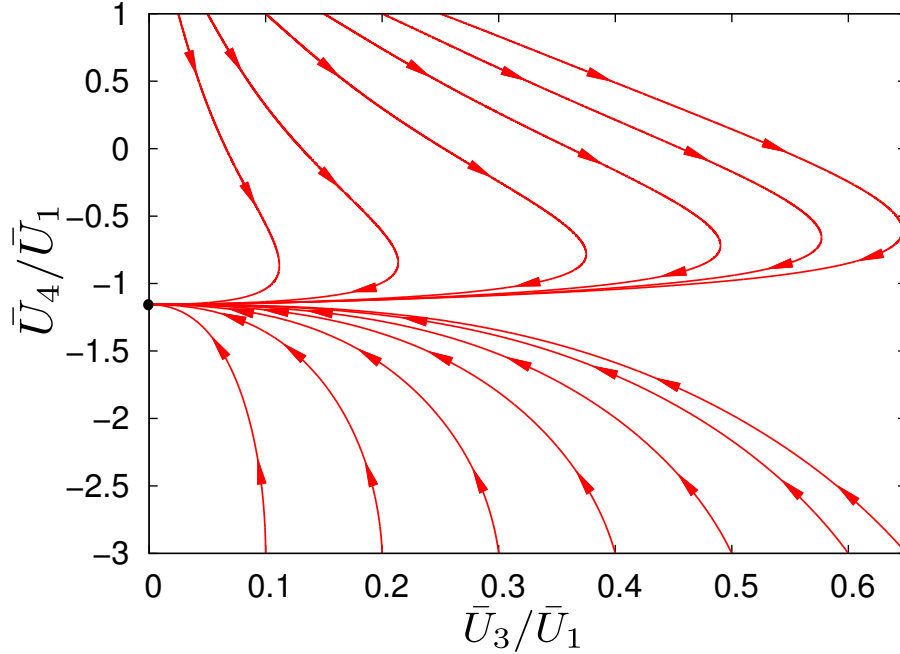


Figura 6.3: Solução das equações do grupo de renormalização até dois loops nas variáveis $\bar{U}_{3R}/\bar{U}_{1R}$ e $\bar{U}_{4R}/\bar{U}_{1R}$. Na situação dada por $\bar{U}_{2R} = 0$ e $\bar{U}_{3R} > 0$ como condição inicial, o sistema flui, no limite de baixa energia, para um novo ponto fixo onde todos os acoplamentos também divergem. Esse ponto crítico é representado pelos valores dos acoplamentos que comportam-se como $\bar{U}_{2R}/\bar{U}_{1R} = 0$, $\bar{U}_{3R}/\bar{U}_{1R} = 0$ e $\bar{U}_{4R}/\bar{U}_{1R} \approx -1.2$.

A solução das Eqs. (5.57)–(5.60) para os acoplamentos nos permite determinar o fluxo do GR até dois loops da Eq. (5.51) referente ao peso da quasipartícula. Para isso, vamos definir, como condição inicial, o peso da quasipartícula Z sendo identicamente igual a um para a situação onde estamos trabalhando com energias da ordem do “cutoff” Ω , ou seja, $Z(l = 0) = 1$. Na Fig. 6.4, mostramos, para uma situação de fraco acoplamento, o comportamento do peso da quasipartícula em função do passo de GR (l) até o sistema atingir a escala de energia ω_c . Nota-se que o mesmo não se afasta muito do seu valor inicial, permanecendo finito. Isso é uma característica que se verifica para todas as condições iniciais utilizadas na investigação dessa quantidade do modelo de duas bandas. Tal propriedade, como sabemos, sugere a existência de excitações do tipo quasipartículas fermiônicas bem definidas no

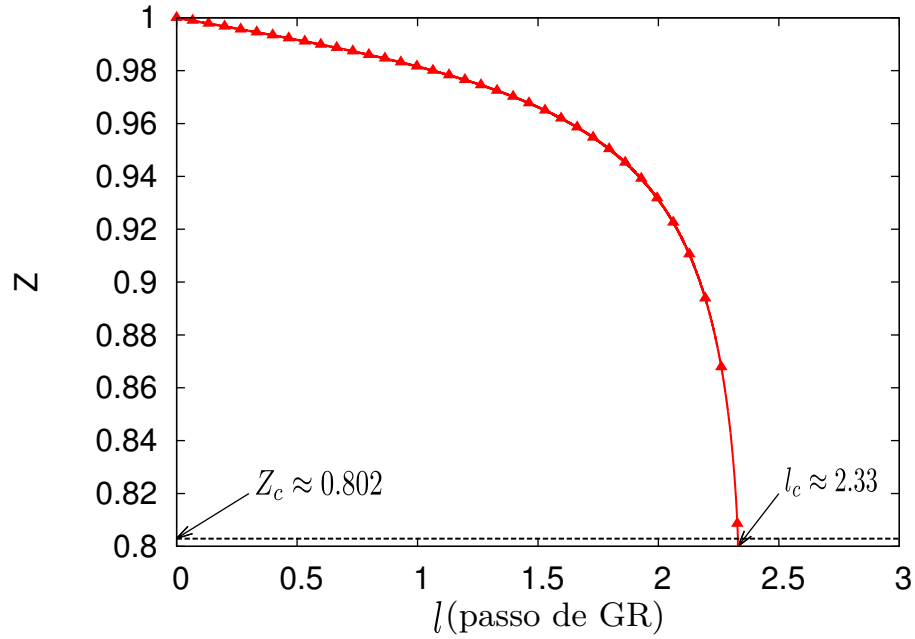


Figura 6.4: Solução numérica para o peso da quasipartícula Z utilizando as condições iniciais $\bar{U}_{1R}(0) = \bar{U}_{4R}(0) = 0.20$ e $\bar{U}_{2R}(0) = \bar{U}_{3R}(0) = 0.18$ para os acoplamentos. O valor $l_c \approx 2.33$ representa a escala de energia ω_c onde os acoplamentos do modelo de duas bandas começam a divergir e $Z_c \approx 0.802$ corresponde ao valor do peso da quasipartícula nesse ponto.

limite de baixa energia do sistema e a descrição do mesmo através da teoria do líquido de Fermi de Landau. Isso está também consistente com o fato de que o estado normal dos pnictídeos observado experimentalmente ser de fato sempre metálico [7–9].

Um efeito da renormalização do peso da quasipartícula Z pode ser visto no comportamento dos acoplamentos obtidos pelo método do GR até dois loops. No caso do GR até um loop, a interação do tipo Umklapp U_{3R} é a mais importante e também apontada como a principal responsável pelo aparecimento das instabilidades antiferromagnética e supercondutora nesses materiais. No cálculo do GR até dois loops, a inclusão de flutuações quânticas de ordem mais elevada nas equações do GR promoveu, como vimos, uma alteração da ordem de importância dos acoplamentos, tornando a interação interbanda frontal U_{1R} e a intrabanda U_{4R} as interações mais relevantes para o modelo. Esse resultado do GR até dois loops discorda dos dados obtidos pelo GR até um loop para modelos 2d de duas, quatro ou mesmo cinco bandas usados para descrever a física dos pnictídeos supercondutores.

Podemos prosseguir com a análise do modelo de duas bandas por meio do GR até dois loops calculando as susceptibilidades associadas aos diferentes tipos de ordenamento no modelo. Para isso, temos que resolver numericamente um sistema de equações diferenciais acopladas constituído pelas Eqs. (5.57)–(5.60) para os acoplamentos, as Eqs. (5.78)–(5.81) para as funções respostas e, por último, as Eqs. (5.86)–(5.89) referentes às susceptibilidades do tipo onda de densidade e supercondutora. Adotaremos as condições iniciais $\mathcal{T}_i^R(l=0) = 1$ ($i = SC-s^\pm, SC-s, ODC\pm, ODS\pm$) para todas as funções respostas e faremos $\chi_i^R(l=0) = 0$ para as susceptibilidades correspondentes, como fizemos para o caso de um loop. Esses valores assumidos pelas susceptibilidades indicam que, inicialmente, o sistema não é perturbado por um campo externo.

Partindo novamente de um regime de fraco acoplamento, obtemos primeiro o fluxo do GR para as funções respostas do modelo em função do passo de GR (l) como pode se visto na Fig. 6.5. Note que, para essa escolha de parâmetros iniciais, a função resposta associada à componente real da susceptibilidade onda de densidade de spin \mathcal{T}_{ODS+}^R é a que apresenta o maior crescimento, seguida, logo depois, pela função resposta onda- s estendida $\mathcal{T}_{SC}^{R(s^\pm)}$. Contudo, todas as funções respostas divergem, ao mesmo tempo, para a escala de energia ω_c onde, como já enfatizamos, o mesmo ocorre com os acoplamentos do modelo de duas bandas.

O fluxo do GR até dois loops para as susceptibilidades em função do passo de GR (l) segue o mesmo comportamento das funções respostas correspondentes. Dessa forma, a componente real da susceptibilidade onda de densidade de spin χ_{ODS+}^R ganha das outras susceptibilidades, como se pode notar na Fig. 6.6. A susceptibilidade supercondutora onda- s estendida $\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$ aparece agora claramente como a segunda susceptibilidade mais importante do modelo de duas bandas quando a diferença de valores iniciais entre os acoplamentos U_{1R} (ou U_{4R}) e U_{2R} (ou U_{3R}) não é muito grande. Embora o cálculo com o GR até dois loops não altera a ordem de importância das susceptibilidades obtidas com o mesmo procedimento em um loop, as susceptibilidades calculadas pelo GR até dois loops divergem mais lentamente. Esse resultado já era esperado, uma vez que consideramos a inclusão de flutuações quânticas

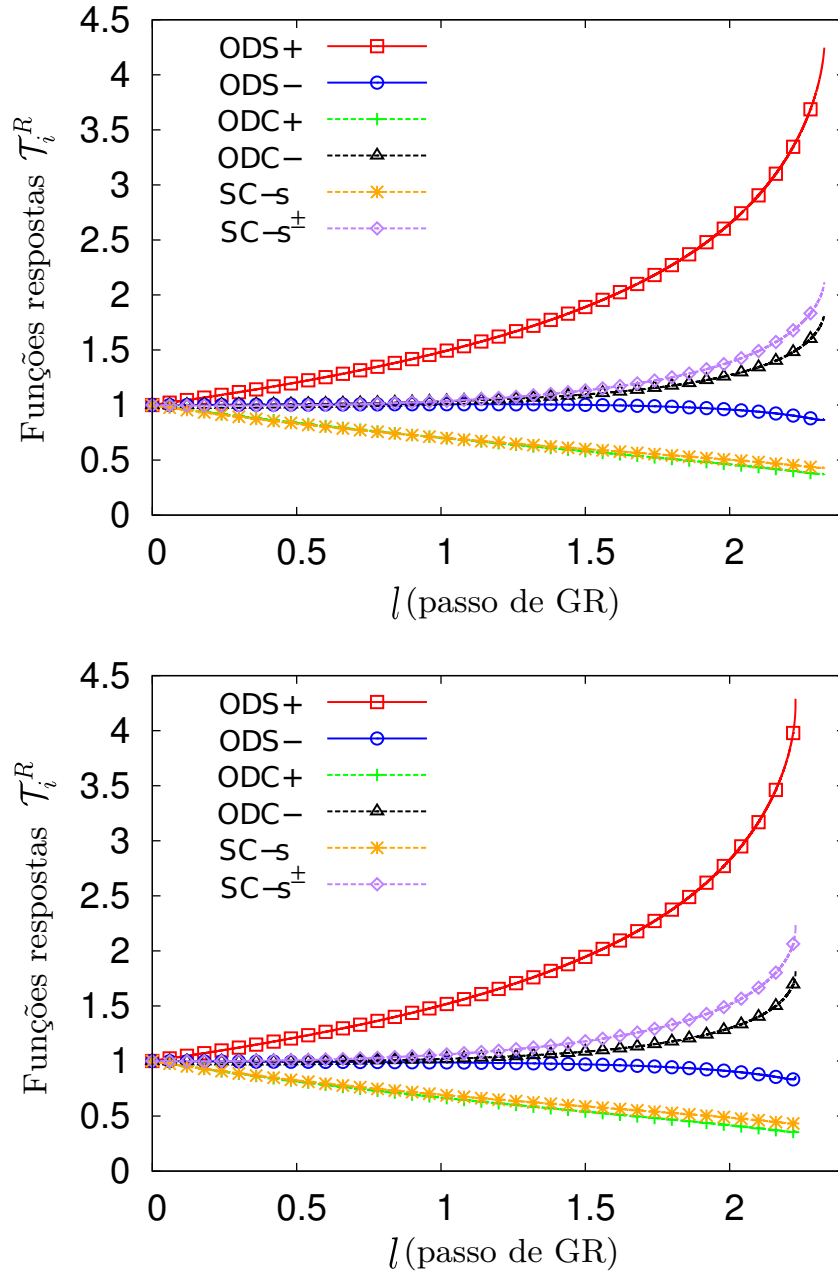


Figura 6.5: Funções respostas \mathcal{T}_i^R ($i = SC-s^\pm, SC-s, ODC\pm, ODS\pm$) para o modelo de duas bandas derivadas através do GR até dois loops. A função resposta \mathcal{T}_{ODS+}^R , nos dois gráficos acima, supera todas as outras para as condições iniciais $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ e $\bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = 0.18$ (gráfico superior) e $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ (gráfico inferior). Os valores do passo de GR onde essas funções respostas divergem são, respectivamente, $l_{\text{superior}} \approx 2.33$ e $l_{\text{inferior}} \approx 2.23$.

de ordem mais elevada em tal situação.

A relevância da susceptibilidade supercondutora onda- s estendida $\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$ sobre a onda- s convencional $\chi_{SC}^{R(s)}$ no regime de dopagem zero obtido pelo GR até dois loops indica que a susceptibilidade $\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$ se tornará a mais importante de um sistema descrito pelo modelo

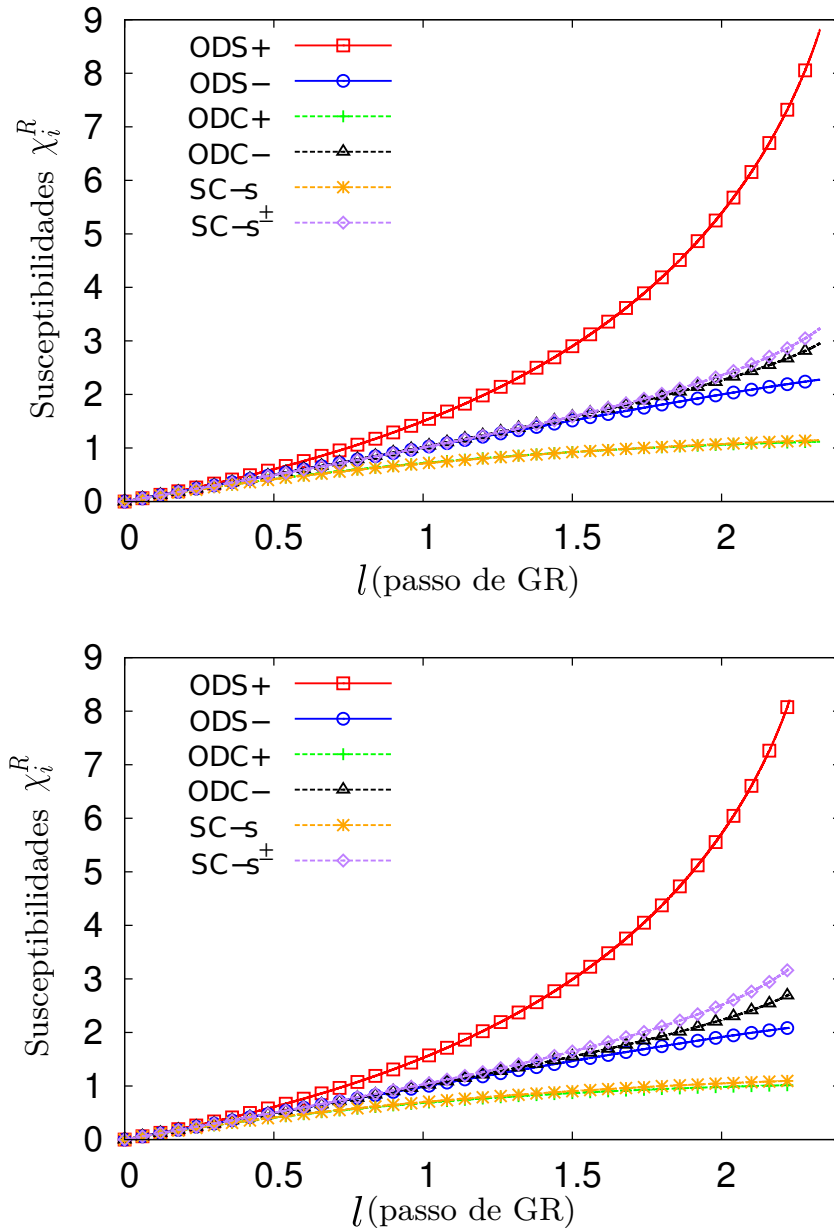


Figura 6.6: Susceptibilidades χ_i^R ($i = SC-s^\pm, SC-s, ODC\pm, ODS\pm$) em unidades de N_0 para o modelo de duas bandas derivadas através do GR até dois loops. Vemos, nos dois gráficos acima, que a susceptibilidade χ_{ODS+}^R supera todas as outras para as condições iniciais $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ e $\bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = 0.18$ (gráfico superior) e $\bar{U}_{1R} = \bar{U}_{2R} = \bar{U}_{3R} = \bar{U}_{4R} = 0.20$ (gráfico inferior). Os valores do passo de GR onde as susceptibilidades divergem são, respectivamente, $l_{\text{superior}} \approx 2.33$ e $l_{\text{inferior}} \approx 2.23$.

de duas bandas, passando a susceptibilidade onda de densidade de spin χ_{ODS+}^R para algum valor de dopagem finita no sistema. Como dissemos na seção anterior, o gap superconductor de um tal sistema deve possuir valores com sinais contrários sobre as superfícies de Fermi de buracos e elétrons para se adequar à simetria s^\pm da instabilidade supercondutora dominante.

Esse resultado, que foi conjecturado por Mazin *et al.* [18] para os pnictídeos supercondutores desde o início da sua descoberta, foi confirmado teoricamente através de métodos como o grupo de renormalização e também sugeridos experimentalmente por meio de experimentos de espectroscopia de fotoemissão (ARPES) nesses materiais.

Analisamos aqui também o papel de cada uma das interações, representadas pelos acoplamentos U_{iR} ($i = 1, \dots, 4$), no aparecimento das instabilidades no modelo de duas bandas. Como mencionamos na seção anterior, a aplicação do GR até um loop em diferentes modelos 2d para tentar explicar as características dos pnictídeos supercondutores (por exemplo, a sua temperatura crítica T_c), mostrou a relevância do acoplamento da interação Umklapp U_{3R} como o principal responsável pela ocorrência das instabilidades antiferromagnética e supercondutora, respectivamente, nos regimes subdopado e sobredopado desses materiais. O método do GR até dois loops nos permite verificar se tal conclusão é válida, ao menos, para o modelo tratado aqui. Para isso, temos de calcular as susceptibilidades derivadas por esse método considerando o caso onde o acoplamento U_{3R} é definido, inicialmente, igual a zero, ou seja, $U_{3R}(l=0) = 0$. Nessa situação, os nossos resultados mostram que tanto a susceptibilidade supercondutora onda- s estendida $\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$ quanto a componente real da susceptibilidade onda de densidade de spin χ_{ODS+}^R apresentam uma tendência de crescimento quando nos aproximamos do limite de baixa energia e divergem, ao mesmo tempo, para o passo do GR $l_c \approx 2.20$ quando $\bar{U}_{1R}(0) = \bar{U}_{4R}(0) = 0.40$ e $\bar{U}_{2R} = 0.35$. Contudo, a ocorrência disso torna as susceptibilidades ondas de densidade de carga e spin, assim como as supercondutoras, degeneradas, ou seja, $\chi_{ODS+}^R = \chi_{ODS-}^R$, $\chi_{ODC+}^R = \chi_{ODC-}^R$ e $\chi_{SC}^{R(s^\pm)} = \chi_{SC}^{R(s)}$ (ver Fig. 6.7). Verificamos também que esse comportamento ocorre para outros conjuntos de condições iniciais no regime de fraco acoplamento. Os nossos resultados de dois loops para o modelo de duas bandas mostram então que as instabilidades antiferromagnética e supercondutora ocorrem em consequência de interações distintas entre férmions localizados em torno das superfícies de Fermi de buracos e elétrons. A primeira instabilidade é devida à interação interbanda frontal U_{1R} e a segunda à interação intrabanda U_{4R} . A interação do tipo Umklapp U_{3R} contabiliza somente para o aparecimento de um gap supercondutor com sinais

contrários sobre as superfícies de Fermi de buracos e elétrons (simetria s^\pm). Tais fatos são contrários à expectativa de ocorrência da instabilidade supercondutora nos pnictídeos como consequência de um mecanismo de flutuações de spin (ou mediada magneticamente) [12,18] em analogia com o que se acredita ser o principal responsável pela instabilidade supercondutora $d_{x^2-y^2}$ nos cupratos.

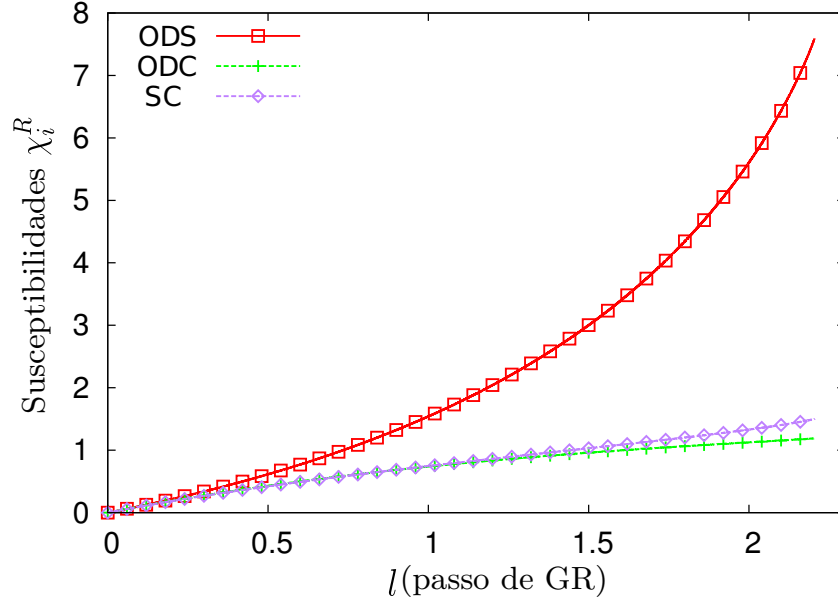


Figura 6.7: Susceptibilidades χ_{ODS}^R (χ_{ODS+}^R e χ_{ODS-}^R), χ_{ODC}^R (χ_{ODC+}^R e χ_{ODC-}^R) e χ_{SC}^R ($\chi_{SC}^{R(s^\pm)}$ e $\chi_{SC}^{R(s)}$) em unidades de N_0 para o modelo de duas bandas derivadas através do GR até dois loops para $\bar{U}_{1R}(0) = \bar{U}_{4R}(0) = 0.40$, $\bar{U}_{2R} = 0.35$ e $\bar{U}_{3R}(0) = 0$.

As últimas quantidades referentes às propriedades do modelo de duas bandas que vamos analisar nesta dissertação são as susceptibilidades de carga e spin uniformes. Temos, dessa vez, que resolver um sistema de equações diferenciais formado pelas Eqs. (5.57)–(5.60) para os acoplamentos e as Eqs. (5.99)–(5.102) para as funções respostas uniformes nos canais de carga e spin. As condições iniciais utilizadas na resolução dessas equações são as mesmas empregadas anteriormente para o cálculo das funções respostas não uniformes, ou seja, partiremos de um regime onde os acoplamentos são todos repulsivos e faremos $\mathcal{T}_{Carga}^{R(i)}(l=0) = \mathcal{T}_{Spin}^{R(i)}(l=0) = 1$, $i = c, f$. As susceptibilidades uniformes $\chi_{Carga}^{R(i)}$ e $\chi_{Spin}^{R(i)}$ (ver Eqs. (5.103) e (5.104)) nos canais de carga e spin estão relacionadas algebricamente com as suas funções respostas correspondentes

e, por essa razão, não precisam de uma prescrição inicial direta.

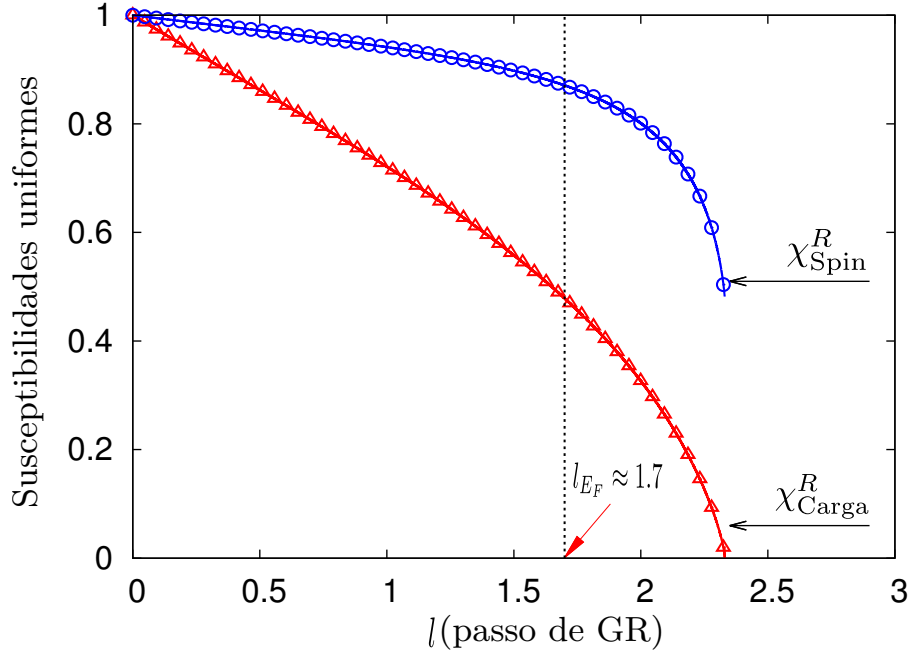


Figura 6.8: Fluxo do GR até dois loops para as susceptibilidades uniformes de carga χ_{Carga}^R e spin χ_{Spin}^R . Nesse caso, empregamos as condições iniciais $\bar{U}_{1R}(0) = \bar{U}_{4R}(0) = 0.20$ e $\bar{U}_{2R}(0) = \bar{U}_{3R}(0) = 0.18$ para os acoplamentos.

Na Fig. 6.8, mostramos o fluxo do GR para as susceptibilidades uniformes de carga χ_{Carga}^R e spin χ_{Spin}^R em um regime de acoplamento fraco. Observamos que a susceptibilidade χ_{Carga}^R aparentemente flui (com a aproximação de desprezar a escala de energia de Fermi E_F) em direção a zero quando nos aproximamos do limite de baixa energia, enquanto a susceptibilidade χ_{Spin}^R permanece finita durante o processo de renormalização do modelo de duas bandas. Tal comportamento parece discordar do resultado de um estado metálico sugerido pelo cálculo do peso da quasipartícula apresentado anteriormente. Contudo, observamos que as nossas equações do GR são somente válidas para o intervalo de valores de energia compreendido entre a energia de Fermi do sistema E_F e a largura de banda (ou “cutoff”) Ω . Dessa maneira, não podemos de forma alguma desprezar a escala de energia de Fermi E_F . Nos pnictídeos supercondutores, medidas feitas por meio de ARPES e experimentos de oscilação magnética estipulam que a razão entre essas duas escalas de energia fique, no máximo, em torno de $\Omega/E_F \approx 30$ [23]. Adotando essa razão de valores para o modelo de duas bandas, vemos que o passo de GR não

deve ir além de $l_{E_F} \approx 1.7$. Nesse caso, as susceptibilidades uniformes de carga χ_{Carga}^R e χ_{Spin}^R , calculadas pelo método do GR até dois loops, possuem valores finitos e isso concorda com o fato de que o estado normal desse modelo é metálico como foi previsto anteriormente através do cálculo do peso da quasipartícula para esse sistema.

Capítulo 7

Conclusão

Nesta dissertação, estudamos as propriedades de baixa energia do modelo de duas bandas por meio do grupo de renormalização (GR) de teoria de campos com o objetivo de relacioná-las ao que é observado experimentalmente para os pnictídeos supercondutores descobertos recentemente. Em um primeiro momento, mostramos como esse modelo considera as interações entre os estados de excitação próximos à sua superfície de Fermi e que uma formulação ingênua do método de teoria de perturbação, quando aplicado ao cálculo das funções vértices irreduzíveis, falha em caracterizá-lo. Isso ocorre em razão da presença de termos divergentes nos canais de interação partícula-partícula e partícula-buraco. Em seguida, redefinimos os acoplamentos iniciais do modelo, também chamados de acoplamentos “nus”, como a soma de acoplamentos renormalizados mais contratermos de forma a eliminar todas as divergências que aparecem no limite de baixa energia dessas funções. Depois, derivamos as equações para os acoplamentos renormalizados na aproximação de um loop. Como dissemos, esses resultados já são conhecidos na literatura e os reproduzimos aqui para exemplificar alguns dos procedimentos necessários à implementação da nossa metodologia.

Em um segundo momento, onde começa propriamente o nosso trabalho, consideramos o efeito da inclusão de correlações quânticas de ordem mais elevada no modelo de duas bandas. Para isso, tivemos que redefinir os campos fermiônicos “nus”, juntamente com os acoplamentos do modelo, em função também agora do peso da quasipartícula. Derivamos uma equação do GR para essa quantidade calculando a auto-energia do sistema até a ordem de dois loops.

Em vista disso, foi necessário calcular as funções vértices irreduzíveis de quatro pontos até a ordem de dois loops para obtermos as equações equivalentes do GR para os acoplamentos renormalizados. Como vimos, o número de diagramas de Feynman com divergência logarítmica usado na implementação do GR até dois loops é bem maior do que na situação de um loop.

Para analisarmos a presença das instabilidades onda de densidade e supercondutora no estado fundamental do modelo de duas bandas, adicionamos um termo à ação que descreve esse modelo e calculamos, em seguida, as equações para as diversas funções respostas renormalizadas adotando a metodologia do GR até dois loops. Posteriormente, derivamos as equações que descrevem o comportamento das diversas susceptibilidades relacionadas a essas funções respostas. Por último, obtemos também as equações do GR até dois loops para as susceptibilidades de carga e spin uniformes a fim de verificarmos se há a presença ou não de gaps nos canais de carga e spin no modelo de duas bandas.

As equações do GR deduzidas neste trabalho nas situações de um e dois loops são equações diferenciais ordinárias acopladas entre si. Para resolvê-las, optamos pelo uso de dois métodos numéricos: o algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem e o algoritmo de Dormand-Prince de quinta ordem. A razão para o uso desses dois esquemas foi por motivos de segurança para as nossas respostas, uma vez que uma solução com um erro relativamente grande poderia prejudicar a interpretação dos nossos resultados.

Através desse procedimento numérico, mostramos que os acoplamentos obtidos pelo métodos do GR de um e dois loops divergem com o aumento do passo de GR. Essa divergência, contudo, varia em cada um desses dois esquemas. Para GR até um loop, o acoplamento U_{3R} da interação Umklapp diverge mais rapidamente do que os outros acoplamentos do modelo. Já para GR até dois loops, esse papel é exercido pelos acoplamentos das interações interbanda U_{1R} e intrabanda U_{4R} . Os resultados obtidos para esse último caso assinalam que a Hamiltoniana do modelo de duas bandas, no ponto fixo, tem a simetria $SO(6)$ levemente quebrada, ao contrário da situação em um loop em que o ponto fixo é invariante pelo grupo de simetria $SO(6)$ como foi demonstrado por Podolsky *et al.* [49].

Um outro resultado decorrente dos cálculos com o GR até dois loops diz respeito ao peso da quasipartícula do modelo. Essa quantidade, como vimos, permanece sempre próxima do seu valor inicial até a escala de GR onde o método é válido. Isso é um indicativo de que tal sistema possui características metálicas, como é observado experimentalmente para os pnictídeos supercondutores [7–9].

Quanto às susceptibilidades do modelo, os nossos resultados decorrentes do GR de um e dois loops mostraram que a ordem de valores dessas quantidades permaneceu a mesma com o uso desses dois esquemas, sendo a susceptibilidade antiferromagnética a de maior relevância para o estado fundamental do modelo de duas bandas. A susceptibilidade supercondutora (do tipo onda- s estendida) aparece logo como uma segunda concorrente quando a diferença entre os acoplamentos iniciais não é muito grande. Observamos também que a interação Umklapp U_{3R} é a principal responsável pelo aparecimento da instabilidade supercondutora relacionada a essa susceptibilidade de acordo com o GR até um loop. Contudo, os resultados obtidos aqui pelo GR até dois loops mostraram que essa interação contribui para que a instabilidade supercondutora do tipo onda- s estendida (s^\pm) seja dominante em relação à instabilidade supercondutora do tipo onda- s normal (s^{++}), evitando uma degenerescência entre as duas. A presença de ambas instabilidades supercondutoras, de acordo com nossos resultados, deve-se a ação da interação intrabanda U_{4R} . No modelo de duas bandas, essas instabilidades podem não ser magneticamente mediadas, pois, de acordo com o GR até dois loops utilizado aqui, a instabilidade antiferromagnética não decorre dessa interação. Essa conclusão está de acordo com o resultado obtido na referência [20].

Por último, observamos que as susceptibilidades de carga e spin uniformes permanecem sempre finitas durante o processo de renormalização para $E_F < \omega < \Omega$. Isso, como dissemos, indica a ausência de gaps de carga e spin no modelo de duas bandas, confirmando a presença de um estado metálico para esse sistema, assim como já havíamos deduzido a partir da análise dos resultados para o peso da quasipartícula.

Em suma, concluímos que a metodologia do grupo de renormalização de teoria de

campos até dois loops revelou-se bem sucedida na análise das propriedades de baixa energia do modelo de duas bandas, ajudando a relacionar as características desse modelo com a natureza experimental de alguns pnictídeos supercondutores. Podemos, futuramente, usar essa mesma metodologia para a investigação das propriedades de outros modelos mais sofisticados usados para a descrição desses materiais. Em alguns desses casos, a dependência dos acoplamentos com o momento pode ser um fator fundamental para a análise da presença de nós sobre o gap supercondutor ou para a procura de outros tipos de instabilidades, que também podem variar com o momento, como é o caso da simetria supercondutora do tipo d .

Apêndice A

Transformação canônica para a Hamiltoniana do modelo de duas bandas

A transformação canônica que relaciona os operadores $\{\psi_{i,\mathbf{p},\sigma}^\dagger, \psi_{i,\mathbf{p},\sigma}\}$ ($i = 1, 2$) com os operadores $\{c_{\mathbf{p},\sigma}^\dagger, c_{\mathbf{p},\sigma}\}$ e $\{f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma}^\dagger, f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma}\}$ e diagonaliza a Hamiltoniana H (ver Eq. (5.1)) do modelo de duas bandas é definida da seguinte maneira:

$$\psi_{1,\mathbf{p},\sigma} = \cos(\theta_{\mathbf{p}})c_{\mathbf{p},\sigma} + \sin(\theta_{\mathbf{p}})f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma}, \quad (\text{A.1})$$

$$\psi_{2,\mathbf{p},\sigma} = \cos(\theta_{\mathbf{p}})f_{\mathbf{p}+\mathbf{Q},\sigma} - \sin(\theta_{\mathbf{p}})c_{\mathbf{p},\sigma}, \quad (\text{A.2})$$

onde ângulo $\theta_{\mathbf{p}}$ é dado por

$$\theta_{\mathbf{p}} = \frac{1}{2} \tan^{-1} \left(\frac{2\Gamma_{\mathbf{p}}}{\epsilon_{2,\mathbf{p}} - \epsilon_{1,\mathbf{p}}} \right). \quad (\text{A.3})$$

As relações de dispersão $\xi_c(\mathbf{p})$ e $\xi_f(\mathbf{p}+\mathbf{Q})$ são definidas, respectivamente, pelas seguintes relações:

$$\xi_c(\mathbf{p}) = \frac{\epsilon_{1,\mathbf{p}} + \epsilon_{2,\mathbf{p}}}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_{1,\mathbf{p}} - \epsilon_{2,\mathbf{p}})^2 + 4\Gamma_{\mathbf{p}}^2}, \quad (\text{A.4})$$

$$\xi_f(\mathbf{p}+\mathbf{Q}) = -\frac{\epsilon_{1,\mathbf{p}} + \epsilon_{2,\mathbf{p}}}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(\epsilon_{1,\mathbf{p}} - \epsilon_{2,\mathbf{p}})^2 + 4\Gamma_{\mathbf{p}}^2}, \quad (\text{A.5})$$

ou seja, $\xi_f(\mathbf{p}+\mathbf{Q}) = -\xi_c(\mathbf{p})$ como já havíamos mencionado no Capítulo 5 desta dissertação. Esses resultados decorrem da suposição de $\epsilon_{i,\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = -\epsilon_{i,\mathbf{p}}$ ($i = 1, 2$) e $\Gamma_{\mathbf{p}+\mathbf{Q}} = \Gamma_{\mathbf{p}}$ quando efetuamos a translação do vetor \mathbf{p} pelo vetor de nesting $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$.

Supondo agora que o raio das superfícies de Fermi de buracos e elétrons do modelo de duas bandas não seja grande, os acoplamentos da Hamiltoniana interação H_{int} na Eq. (5.4) obedecem aos seguintes resultados:

$$U_1 = \frac{1}{2} [(U_{11} + U_{12}) - \cos(2\theta_0) \cos(2\theta_{\mathbf{Q}})(U_{11} - U_{12})], \quad (\text{A.6})$$

$$U_2 = U_3 = \frac{U_{11}}{2}(1 - \cos(2\theta_0) \cos(2\theta_{\mathbf{Q}})) - \frac{U_{12}}{2} \text{sen}(2\theta_0) \text{sen}(2\theta_{\mathbf{Q}}), \quad (\text{A.7})$$

$$U_4 = \frac{U_{11} + U_{12}}{2} + \frac{U_{11} - U_{12}}{2} \cos^2(2\theta_0), \quad (\text{A.8})$$

$$U_5 = \frac{U_{11} + U_{12}}{2} + \frac{U_{11} - U_{12}}{2} \cos^2(2\theta_{\mathbf{Q}}). \quad (\text{A.9})$$

Utilizando a Eq. (A.3), obtemos que $\theta_{\mathbf{Q}} = \pi/2 - \theta_0$, e então:

$$U_1 = U_4 = U_5 = \frac{U_{11} + U_{12}}{2} + \frac{U_{11} - U_{12}}{2} \cos^2(2\theta_0), \quad (\text{A.10})$$

$$U_2 = U_3 = \frac{U_{11}}{2}(1 + \cos^2(2\theta_0)) - \frac{U_{12}}{2} \text{sen}^2(2\theta_0). \quad (\text{A.11})$$

Os resultados apresentados neste apêndice foram baseados no artigo de Chubukov *et al.* [19] para o modelo de duas bandas.

Bibliografia

- [1] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano e H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 3296 (2008).
- [2] H. Takahashi, K. Igawa, K. Arii, Y. Kamihara, M. Hirano e H. Hosono, *Nature* **453**, 376 (2008).
- [3] J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schrieffer, *Physical Review* **108**, 1175 (1957).
- [4] L. Boeri, O. V. Dolgov e A. A. Golubov, *Physical Review Letters* **101**, 026403 (2008).
- [5] C. Wang, L. Li, S. Chi, Z. Zhu, Z. Ren, Y. Li, Y. Wang, X. Lin, Y. Luo, S. Jiang, X. Xu, G. Cao e Z. Xu, *Europhysics Letters* **83**, 67006 (2008).
- [6] D. N. Basov e A. V. Chubukov, *Nature Physics* **7**, 271 (2011).
- [7] S. E. Sebastian, J. Gillett, N. Harrison, P. H. C. Lau, C. H. Mielke e G. G. Lonzarich, *Journal of Physics: Condensed Matter* **20** (2008).
- [8] C. de la Cruz, Q. Huang, J. W. Lynn, J. Li, W. Ratcliff, J. L. Zarestky, H. A. Mook, G. F. Chen, J. L. Luo, N. L. Wang e P. Dai, *Nature* **453**, 899 (2008).
- [9] F. Ma e Z.-Y. Lu, *Physical Review B* **78**, 033111 (2008).
- [10] W. L. Yang, A. P. Sorini, C.-C. Chen, B. Moritz, W.-S. Lee, F. Vernay, P. Olalde-Velasco, J. D. Denlinger, B. Delley, J.-H. Chu, J. G. Analytis, I. R. Fisher, Z. A. Ren, J. Yang, W. Lu, Z. X. Zhao, J. van den Brink, Z. Hussain, Z.-X. Shen e T. P. Devereaux, *Physical Review B* **80**, 014508 (2009).

- [11] V. I. Anisimov, D. M. Korotin, M. A. Korotin, A. V. Kozhevnikov, J. Kunes, A. O. Shorikov, S. L. Skornyakov e S. V. Streltsov, *Journal Physics: Condensed Matter* **21**, 075602 (2009).
- [12] I. I. Mazin e J. Schmalian, *Physica C* **469**, 614 (2009).
- [13] T. Kondo, A. F. Santander-Syro, O. Copie, Chang Liu, M. E. Tilman, E. D. Mun, J. Schmalian, S. L. Bud'ko, M. A. Tanatar, P. C. Canfield e A. Kaminski, *Physical Review Letters* **101**, 147003 (2008).
- [14] L. Wray, D. Qian, D. Hsieh, Y. Xia, L. Li, J. G. Checkelsky, A. Pasupathy, K. K. Gomes, C. V. Parker, A. V. Fedorov, G. F. Chen, J. L. Luo, A. Yazdani, N. P. Ong, N. L. Wang e M. Z. Hasan, *Physical Review B* **78**, 184508 (2008).
- [15] C. Liu, T. Kondo, R. M. Fernandes, A. D. Palczewski, E. D. Mun, N. Ni, A. N. Thaler, A. Bostwick, E. Rotenberg, J. Schmalian, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield e A. Kaminski, *Nature Physics* **6**, 419 (2010).
- [16] T. Kondo, R. M. Fernandes, R. Khasanov, C. Liu, A. D. Palczewski, N. Ni, M. Shi, A. Bostwick, E. Rotenberg, J. Schmalian, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield e A. Kaminski, *Physical Review B* **81**, 060507(R) (2010).
- [17] D. J. Singh e M.-H. Hu, *Physical Review Letters* **100**, 237003 (2008).
- [18] I. I. Mazin, D. J. Singh, M. D. Johannes e M. H. Du, *Physical Review Letters* **101**, 057003 (2008).
- [19] A. V. Chubukov, D. V. Efremov e I. Eremin, *Physical Review B* **78**, 134512 (2008).
- [20] A. V. Chubukov, *Physica C* **469**, 640 (2009).
- [21] Y. Ran, F. Wang, H. Zhai, A. Vishwanath e D.-H. Lee, *Physical Review B* **79**, 014505 (2009).

-
- [22] M. M. Korshunov, I. Eremin, D. V. Efremov, D. L. Maslov e A. V. Chubukov, *Physical Review Letters* **102**, 236403 (2009).
- [23] S. Maiti e A. V. Chubukov, *Physical Review B* **82**, 214515 (2010).
- [24] M. M. Korshunov e I. Eremin, *Physical Review B* **78**, 140509(R) (2008).
- [25] C. Platt, C. Honerkamp e W. Hanke, *New Journal of Physics* **11**, 055058 (2009).
- [26] R. Thomale, C. Platt, J. Hu, C. Honerkamp e A. Bernevig, *Physical Review B* **80**, 180505(R) (2009).
- [27] F. Wang, H. Zhai, Y. Ran, A. Vishwanath e D.-H. Lee, *Physical Review Letters* **102**, 047005 (2009).
- [28] K. Seo, B. A. Bernevig e J. Hu, *Physical Review Letters* **101**, 206404 (2008).
- [29] H. Zhai, F. Wang e D.-H. Lee, *Physical Review B* **80**, 064517 (2009).
- [30] R. Shankar, *Reviews of Modern Physics* **66**, 129 (1994).
- [31] R. Thomale, C. Platt, W. Hanke e A. Bernevig, *Physical Review Letters* **106**, 187003 (2011).
- [32] M. M. Peskin e D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory* (Perseus Books, Cambridge, 1995).
- [33] P. Kopietz, L. Bartosch e F. Schütz, *Introduction to the Functional Renormalization Group*, *Lecture Notes Physics* 798 (Springer, Berlin Heidelberg, 2010).
- [34] H. Freire, E. Corrêa e A. Ferraz, *Physical Review B* **71**, 165113 (2005).
- [35] H. Freire, E. Corrêa e A. Ferraz, *Physical Review B* **73**, 073103 (2006).
- [36] E. Correa, H. Freire e A. Ferraz, *Physical Review B* **78**, 195108 (2008).

- [37] H. Freire, E. Correa e A. Ferraz, *Physical Review B* **78**, 125114 (2008).
- [38] H. Bruus e K. Flensberg, *Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics: an introduction* (Oxford University Press, New York, 2004).
- [39] A. F. Fetter e J. D. Wallecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill Book Company, New York, 2003).
- [40] R. D. Mattuck, *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem* (Dover Publications, Toronto, 1992).
- [41] A. Altland e B. Simons, *Condensed Matter Field Theory* (Cambridge University Press, New York, 2010).
- [42] J. W. Negele e H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems* (Westview Press, Redwood City, 1988).
- [43] E. C. G. Stueckelberg e A. Petermann, *Helv. Phys. Acta* **26**, 499 (1953).
- [44] M. Gell-Mann e F. E. Low, *Physical Review* **95**, 1300 (1954).
- [45] C. G. Callan, *Physical Review D* **2**, 1541 (1970).
- [46] K. Symanzik, *Commun. Math. Phys.* **18**, 227 (1970).
- [47] A. T. Zheleznyak, V. M. Yakovenko e I. E. Dzyaloshinskii, *Physical Review B* **55**, 3200 (1997).
- [48] V. S. de Carvalho e H. Freire, *Europhysics Letters* **96**, 17006 (2011).
- [49] D. Podolsky, H.-Y. Kee e Y. B. Kim, *Europhysics Letters* **88**, 17004 (2009).
- [50] W. H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling e Brian V. Flannery, *Numerical Recipes* (Cambridge University Press, New York, 2007).

- [51] Veja, por exemplo, David C. Johnston, *Advances in Physics* **59**, 803 (2010), assim como os artigos citados nessa referência.