

**Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física
Programa de Pós-Graduação em Física**

LUIZ EDUARDO DE SOUSA FREIRE

**Derivação de interações efetivas de elétrons em membrana
bidimensional (grafeno) utilizando transformações de Hubbard-
Stratonovich**

**Goiânia
2015**

**Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física
Programa de Pós-Graduação em Física**

LUIZ EDUARDO DE SOUSA FREIRE

**Derivação de interações efetivas de elétrons em membrana
bidimensional (grafeno) utilizando transformações de
Hubbard-Stratonovich**

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Programa de Pós-graduação em Física da
Universidade Federal de Goiás, como parte dos
requisitos para a obtenção do grau de mestrado.

Área de concentração: Física Teórica

Orientador: **Prof. Dr. Fábio Luís Braghin**

**Goiânia
2015**

**Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física
Programa de Pós-Graduação em Física**

LUIZ EDUARDO DE SOUSA FREIRE

**Derivação de interações efetivas de elétrons em membrana
bidimensional (grafeno) utilizando transformações de
Hubbard-Stratonovich**

BANCA EXAMINADORA

.....
Prof. Dr. Fábio Luis Braghin (Orientador)
Universidade Federal de Goiás

.....
Prof. Dr. Eduardo Cantera Marino
Universidade Federal do Rio de Janeiro

.....
Prof. Dr. Hermann Freire F. L. e Silva
Universidade Federal de Goiás

.....
Prof. Dr. Ricardo Avelino Gomes (Suplente)
Universidade Federal de Goiás

Goiânia
2015

AGRADECIMENTOS

- Ao meu orientador Fábio L. Braghin;
- À banca: Eduardo Marino, Hermann Freire e Ricardo Avelino (suplente);
- Ao Cnpq, à Universidade Federal de Goiás e ao Instituto de Física;
- Aos meus professores, em especial, Pablo, Salviano e Nicodemos;
- À família, em especial, aos meus pais Eber e Tânia, meu irmão Pedro e meus tios Eduardo e Else (*in memoriam*) - pelos incentivos e suportes durante todos os trabalhos; aos primos, em especial: Mateus, Douglas e Cecília;
- Aos amigos: Alexandre, Vitor, Milton, Leandro, Pedro Paulo, Pedro Augusto, Leticia “Let”, Renata, Lorena, Darley, Fábio, Tiago, Bruna, Lana, Luís Fernando, José Luís, Eric, Dannilo, Ana Livia, Isabela, Henrique, Medina, Emmanuel, Patrícia, Lucas Souza, Idney, Luis Eduardo, Camilo, Sirlene, Ludmilla (*in memoriam*) e aos demais amigos, da física, demais projetos, de Silvânia, Goiânia e Brasília;
- E a todos aqueles que de alguma forma contribuíram para este trabalho.

"Nature uses only the longest threads to weave her patterns, so that each small piece of her fabric reveals the organizations of the entire tapestry."

– *Richard P. Feynman*

RESUMO

Neste trabalho investigamos membranas bidimensionais, tal como o grafeno, usando Teoria Quântica de Campos, mais especificamente pelo formalismo de integrais de trajetória e usando transformações de Hubbard-Stratonovich. Com o grafeno como motivação, usamos modelos para os elétrons em uma camada de grafeno, quando estes interagem com fônons da rede, deformações de Kekulé e campos de gauge. Começamos analisando uma teoria em que bósons e férmions interagem entre si por meio de um acoplamento tipo Yukawa. Apresentamos um método já conhecido para eliminar os graus de liberdade fermiônicos do sistema e usamos as transformações de Hubbard-Stratonovich para derivar uma teoria efetiva bosônica. Para isto, inserimos um campo auxiliar no modelo e mostramos que a teoria efetiva para este campo é equivalente à teoria efetiva para o campo bosônico físico. Assim, calculamos e simulamos as equações de *gap* para este sistema em 1+1, 2+1 e 3+1 dimensões e comparamos com o modelo de Gross-Neveu para interações quárticas entre férmions em 1+1 dimensões. Vemos que para dada constante de acoplamento, férmions massivos perdem toda sua massa ao interagir com os bósons, efeito causado por quebra de simetria. Em seguida, apresentamos o modelo de gauge quirais de Jackiw-Pi para o grafeno, onde interações tipo Yukawa estão presentes. Contudo, uma generalização é proposta por Frederico *et al.* em que auto-interações bosônicas de ordens mais altas e interações bósons/férmions mais gerais são consideradas. Novamente, usamos as transformações de Hubbard-Stratonovich para derivar modelos efetivos para os férmions e as equações de *gap*. Identificamos a invariância por transformações quirais do grupo $U(1)$ para o caso limite do modelo de Jackiw-Pi. Em seguida, investigamos um modelo para os fônons da rede no grafeno, mais especificamente, a partir dos trabalhos de Katsnelson *et al* e Guinea *et al.* Neste ponto, termos anarmônicos são incluídos na lagrangiana do sistema no intento de descrever modificações na estrutura da rede. Eliminamos os graus de liberdade escalares do sistema, que são aqueles responsáveis por descrever os modos de energia dentro e fora do plano e, assim, obtivemos uma teoria efetiva para a parte eletrônica. Como no modelo anterior, inferimos uma mudança no potencial efetivo e derivamos as respectivas equações de *gap*. Por fim, apresentamos o potencial de Coulomb ao derivar uma teoria efetiva para férmions quando estes interagem com um campo de gauge. Assim, comparamos este resultado com os modelos estudados e analisamos as interações fermiônicas efetivas presentes nas lagrangianas obtidas.

ABSTRACT

In this paper we investigate two-dimensional membranes, such as graphene, using Quantum Field Theory, more specifically by the path integral formalism and using Hubbard-Stratonovich transformations. With graphene as a motivation, we use models for electrons in a graphene layer, when they interact with phonons, Kekule deformation and gauge fields. We start by considering a theory in which bosons and fermions interact via a Yukawa type coupling. We present a method already known to eliminate the degrees of freedom of the fermionic system and use the Hubbard-Stratonovich transformations to derive an effective bosonic theory. For this, we introduce an auxiliary field in the model and show that the effective theory for this field is equivalent to the effective theory for the physical bosonic field. Thus, we calculated and obtained the gap equations for this system in 1+1, 2+1 and 3+1 dimensions and then compared with the Gross-Neveu model for quartic interactions between fermions in 1+1 dimensions. We see that for a particular coupling constant the massive electrons lose all their mass by interacting with bosons, an effect caused by symmetry breaking. We then present the chiral gauge model of Jackiw-Pi for graphene, where Yukawa type interactions are present. However, this theory is a particular case of a more general model proposed by Frederico *et al.* where bosonic self-interactions at higher orders and bosons/fermions with more general interactions are considered. Again, we use the Hubbard-Stratonovich transformations to derive effective models for fermions and the gap equations. We identified chiral invariance transformations of the group $U(1)$ for the limiting case of Jackiw-Pi model. Finally, we investigated a model for phonons in the graphene background, more specifically building on the papers by Katsnelson *et al.* Guinea *et al.*. At this point, anharmonic terms are included in the Lagrangian of the system in an attempt to describe changes in the background structure. We eliminate the degrees of freedom of the scalar system, which are responsible for describing power modes on and off plane and thus obtained an effective theory for the electronic part. As in the previous model, we see a change in the effective potential and derive their gap equations. Finally, we present the Coulomb potential to derive an effective theory for fermions when they interact with a gauge field. Thus, we compare this result with the studied models and analyzed the effective fermionic interactions present in the obtained Lagrangians.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	15
2	Elementos teóricos	18
2.1	Integrais de caminho e métodos funcionais	19
2.1.1	Integrais de caminho de Feynman	19
2.1.2	Métodos funcionais para campos escalares	21
2.1.3	Métodos funcionais para campos fermiônicos	23
2.1.4	Métodos funcionais para campos de Gauge	24
2.2	Transformação de Hubbard-Stratonovich	26
2.2.1	Modelo de Gross-Neveu	26
2.2.2	Inserção de um campo escalar auxiliar	27
2.3	Lagrangiana de Yukawa	29
2.4	Modelos teóricos para o grafeno	34
2.4.1	Modelo de gauge quirial para o grafeno	34
2.4.2	Extensão ao modelo de gauge quirial	37
2.4.3	Modelo de fônons para o grafeno com inserção de termos anarmônicos	39
3	RESULTADOS E DISCUSSÕES	42
3.1	Modelo efetivo para interações tipo Yukawa	42
3.1.1	Equações de <i>gap</i>	43
3.1.2	Teoria efetiva para os férmions	46
3.2	Transformação de Hubbard-Stratonovich ao modelo de gauge quirial	48
3.2.1	Inserção de campos auxiliares ao modelo	48
3.2.2	Teoria efetiva para férmions	50
3.2.3	Caso limite: modelo de Jackiw-Pi	52
3.2.4	Teoria efetiva para os bósons	54
3.3	Deformações na rede do grafeno com inserção de termos anarmônicos	55
3.4	Comparações com o potencial de Coulomb	58
4	Conclusões E perspectivas	62
5	Referências bibliográficas	64
	APÊNDICES	67
	A - Integração Funcional	67
	B - Álgebra de Grassman	68

C - Determinantes de dimensão finita	71
D - Propriedades úteis das matrizes γ	72
E - Estrutura de uma camada de grafeno e modelo de tight-binding	72
F - Diferenciação Funcional	78
G - Código Wolfram Mathematica para equações de <i>gap</i>	79

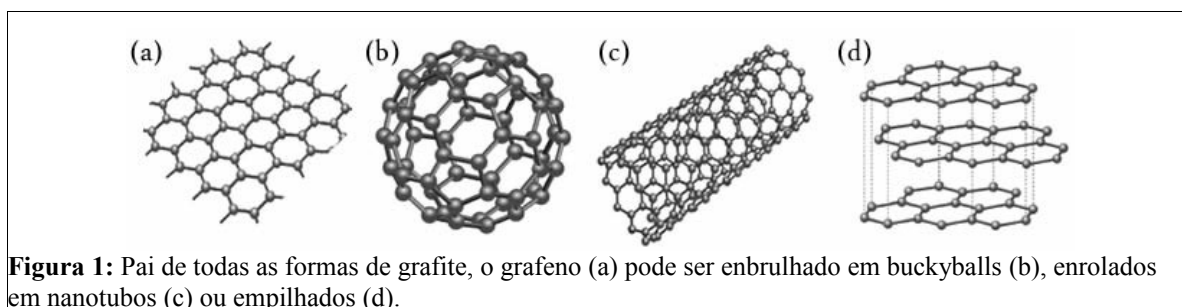
1 INTRODUÇÃO

Com todos os avanços teóricos da teoria quântica de campos e desde a consolidação da existência de átomos e do comportamento onda-partícula, não tardou para que vários físicos começassem a aplicá-la para investigar diversos sistemas. Na grande área da matéria condensada, por exemplo, são investigadas as propriedades macroscópicas da matéria, que são consequências da interação de cada átomo de um material com os demais e com o meio no qual está inserido. A Física da Matéria Condensada foi, portanto, cadenciada por essa relação entre o macro e o micro e chegamos ao século XXI com uma compreensão da natureza dos sólidos e dos fluidos considerando as interações eletromagnéticas entre os átomos. Com isso, foi crucial para diversos avanços tecnológicos conhecidos. Em pesquisas realizadas nesta área estão o transistor, o laser, a mídia magnética, a nanotecnologia, dentre muitas outras. Na fronteira desse campo de pesquisa destacam-se as investigações acerca da supercondutividade, sistemas complexos, polímeros, ligas e outros, além de sistemas de baixa dimensionalidade como filmes finos, nanotubos de carbono, fulerenos, pontos quânticos, etc [1-3].

Dentre tantas aplicações de sistemas em que a teoria quântica de campos pode ser usada, destacamos um material que ganhou bastante atenção e interesse nos últimos anos: o grafeno. Este material consiste em uma estrutura simples de carbono, bidimensional e da espessura de um átomo e que, quando foi descoberto, suas propriedades superaram qualquer expectativa do conhecimento da matéria. Embora sua descoberta seja recente, o modelo teórico tem sido estudado há mais de 60 anos, quando em 1947 o canadense Philip Russell Wallace já explicava a ligação química e a estrutura de bandas eletrônicas do grafite [4, 5].

Posteriormente, o grafeno se mostrou um modelo teórico com capacidades incomparáveis, uma vez que consiste apenas em uma fina membrana empacotados numa rede bidimensional na forma de favos de mel, tão fino quanto resistente e eletricamente condutor. O grafeno pode ser visto como uma peça fundamental para a construção de outras estruturas de carbono, isto porque pode ser embrulhado em fulerenos 0D (adimensional), enrolados em nanotubos 1D ou empilhados em grafite 3D (Figura 1). Logo, o grafeno (ou grafite 2D) tem sido amplamente usado para descrever propriedades de vários materiais baseados em carbono. Além disso, também já foi mostrado que o grafeno fornece um excelente modelo de matéria condensada para a Eletrodinâmica Quântica em 2+1 dimensões, no qual, foi onde o impulsionou como um próspero modelo teórico para investigação. Entretanto, o grafeno foi previsto para nunca existir em seu estado livre por ser termodinamicamente instável, sendo

descrito como um material acadêmico. Acreditavam ainda que seria um material instável, no que diz respeito à formação de estruturas curvadas tais como fulerenos e nanotubos [6].



Mas a história esteve a favor do grafeno e esse sistema se tornou realidade a partir de 2004, quando o físico russo Andre Geim, da Universidade de Manchester, sugeriu a um de seus alunos de doutorado, Konstantin Novoselov, como tese de doutorado, a análise das camadas de grafite presentes nos materiais descartados durante a coleta de amostras para pesquisa. Então o inimaginável aconteceu e entre as centenas de lâminas analisadas, foram evidenciadas algumas camadas cristalinas e planas, quase bidimensionais, de grafite. Em outras palavras, o grafeno em estado puro.

Recentemente, em 2005, os primeiros resultados foram publicados [7, 8] e logo em seguida, dois experimentos [9, 10] provaram que os portadores de carga no grafeno atuavam como férmions de Dirac sem massa. Desde então começaram as explorações sobre as capacidades eletrônicas do grafeno, o que gerou grande repercussão no campo da física do estado sólido e das tecnologias de materiais, além de premiar Geim e Novoselov com o Prêmio Nobel de Física no ano de 2010. Entre algumas de suas propriedades, mesmo em fase experimental, destacam-se a capacidade de auto refrigeração; a condutividade térmica e elétrica; uma incomparável elasticidade e dureza; a resistência cem vezes maior do que o aço; a capacidade de gerar eletricidade quando atingido pela luz, entre outras [6].

Trabalhos recentes ressaltam que o caráter quiral dos portadores de carga do grafeno é a característica fundamental para vários fenômenos. E, por outro lado, mais efeitos foram observados quando o grafeno não está em seu estado puro. Por exemplo, a distorção de sua estrutura vem sido bastante explorada, pois já é conhecido que pode ser usada para abrir *gaps* de energia significantes no espectro eletrônico [11]. Também, por ter uma única camada atômica, o grafeno também é mais frágil às influências externas, como deformações mecânicas [12].

Para realizar uma formulação teórica para o grafeno, alguns métodos da teoria quântica de campos tem sido aplicados. O princípio fundamental é de que as excitações das

quase-partículas satisfazem a equação de Dirac e a velocidade da luz é substituída pela velocidade de Fermi $v_F = c/300$ [13]. Sua estrutura e relação de dispersão serão apresentadas neste trabalho através do modelo de *tight-binding* para estruturas cristalinas.

Por outro lado, no ponto de vista da teoria quântica de campos, uma ferramenta para tratar as equações que descrevem a dinâmica do sistema consiste nas transformações de Hubbard-Stratonovich. Este método é extremamente útil pois, para as interações consideradas nas teorias de campos, existe uma classe limitada de modelos que permitem solucionar os problemas, onde é necessário fazer aproximações. A técnica mais comum é baseada em teoria de perturbação, no qual requer um pequeno parâmetro. A estratégia do método, que é especialmente elegante para o tratamento de teorias quânticas com a formulação das integrais de caminho de Feynman, baseia-se na introdução de variáveis coletivas - campos auxiliares - por uma transformação integral exata que permite eliminar, via integração, os graus de liberdade elementares. Muitas vezes, o acoplamento dos campos auxiliares é fraco tal que expansões perturbativas da ação efetiva não linear faz sentido e permite resultados interessantes já em baixas ordens da expansão [14, 15].

Desta maneira, podemos usar as transformações de Hubbard-Stratonovich para buscar teorias efetivas para os elétrons em uma membrana bidimensional (grafeno) inserindo um campo auxiliar. Portanto, neste trabalho apresentamos três modelos que vem sendo usados para descrever interações e modificações da estrutura do grafeno. O primeiro modelo consiste em formular uma teoria quiral para o grafeno, o segundo e mais geral e leva em conta campos bosônicos complexos e o terceiro, investiga distorções da membrana devido ao acoplamento anarmônico dos modos da rede fora e dentro do plano [16-19]. Logo, o objetivo do trabalho consiste em tratar estes modelos através das transformações de Hubbard-Stratonovich, a fim de encontrar teorias efetivas para os elétrons do grafeno.

2 ELEMENTOS TEÓRICOS

Neste capítulo apresentamos a quantização de campos pelo método das integrais de trajetória de Feynman [20-26]. Começamos pela formulação para a mecânica quântica, onde brevemente discutimos o conceito de propagador e suas interpretações. Em seguida, analisamos um sistema onde o campo possui uma fonte geradora e que a amplitude de transição de um estado de energia para outro é proporcional ao funcional gerador.

Para tal formulação, são mostradas as quantizações para três tipos de campos: o primeiro é o campo escalar, regido pela equação de Klein-Gordon; o segundo é o campo fermiônico, descrito pela equação de Dirac; e o último é a teoria para o campo vetorial, ou campo de gauge.

Na sequência apresentamos as transformações de Hubbard-Stratonovich. Para ilustrá-lo, apresentamos o modelo de Gross-Neveu em 1+1 dimensões, onde interações quárticas entre férmions são investigadas e cujo resultado é análogo ao do sistema com bósons/férmions que interagem entre si através de um acoplamento do tipo Yukawa. A partir deste modelo, encontramos a ação efetiva do sistema através da inserção de um campo auxiliar.

O acoplamento do tipo Yukawa para d dimensões é então apresentado. Neste momento, será mostrado uma forma de eliminar os graus de liberdade fermiônicos e assim, obtemos uma teoria efetiva onde apenas as variáveis bosônicas aparecem explicitamente. Serão discutidos ainda neste tópico, brevemente, a renormalização para $d = 4$ e a renormalização pela inserção de um *cut-off* covariante. Esta última é uma maneira alternativa de tratar o problema da divergência que aparece nas integrais do momento e será usado para tratar as langragianas em estudo neste trabalho.

Por fim, apresentamos modelos para o grafeno. Sua estrutura eletrônica é discutida nos apêndices através do modelo de *tight-binding*, pelo qual também determinamos sua relação de dispersão. Até este ponto, só é tratado do grafeno em seu estado puro. Contudo, nas últimas seções desse capítulo, apresentaremos três modelos que investigam propriedades específicas do grafeno quando este é sujeito a alguma alteração em sua estrutura eletrônica, os quais usaremos as transformações de Hubbard-Stratonovich para derivar interações efetivas para os férmions da rede.

2.1 Integrais de caminho e métodos funcionais

Nesta seção, iremos apresentar a ideia fundamental de um formalismo alternativo da mecânica quântica: as integrais de caminho de Feynman. Neste ponto, discutiremos o

significado físico de um propagador e como incluir a atuação de agentes externos na lagrangiana do sistema. Em seguida, serão apresentadas as quantizações de campos escalares, fermiônicos e de gauge, por meio do cálculo dos funcionais geradores de cada teoria [20].

2.1.1 Integrais de caminho de Feynman

Na formulação usual da mecânica quântica, as quantidades \vec{x} e \vec{p} são substituídas por operadores que obedecem as relações de comutação de Heisenberg e que atuam no espaço de Hilbert. Por outro lado, a formulação de Feynman para as integrais de caminho é baseada diretamente na noção de um propagador K , núcleo de um operador integral, responsável por evoluir uma função de onda de um ponto inicial $\psi(\vec{x}', t_0)$ e produzir uma função de onda em um ponto terminal $\psi(\vec{x}'', t)$:

$$\psi(\vec{x}'', t) = \int d^3x K(\vec{x}'', t; \vec{x}', t_0) \psi(\vec{x}', t_0) \quad . \quad (1)$$

Esta equação define o propagador, que pode ser construído a partir das autofunções de energia e seus autovalores. A evolução temporal de uma função de onda se torna totalmente previsível se a função de onda em um instante inicial e o propagador forem conhecidos. Desta forma, podemos dizer que a mecânica ondulatória de Schrödinger é uma teoria tão determinística como qualquer outra teoria clássica cujo sistema não é perturbado.

Por outro lado, podemos interpretar o propagador como uma amplitude de transição onde sistema vai de um ponto inicial qualquer até um ponto final. Para isto, escrevemos o propagador na representação de Heisenberg, onde temos:

$$K(\vec{x}'', t; \vec{x}', t_0) = \langle \vec{x}''; t | \vec{x}'; t_0 \rangle_H \quad . \quad (2)$$

Este resultado indica, em outras palavras, a probabilidade da partícula ir do ponto (\vec{x}', t_0) ao ponto (\vec{x}'', t) no espaço-tempo, de forma que o termo amplitude de transição é bem apropriado.

De maneira mais geral, podemos evoluir o sistema em um ponto inicial $(\vec{x}^{(1)}, t^{(1)})$ a um ponto terminal $(\vec{x}^{(n)}, t^{(n)})$, dividindo o percurso em $n-1$ intervalos:

$$\langle \vec{x}^{(n)}, t^{(n)} | \vec{x}^{(1)}, t^{(1)} \rangle = \int d^3x^{(n)} \langle \vec{x}^{(n)}, t^{(n)} | \vec{x}^{(n-1)}, t^{(n-1)} \rangle \dots \langle \vec{x}^{(2)}, t^{(2)} | \vec{x}^{(1)}, t^{(1)} \rangle \quad , \quad (3)$$

onde o ordenamento temporal $t^{(n)} > t^{(n-1)} > \dots > t^{(1)}$ é levado em conta. Esta relação é conhecida como propriedade de composição e levou a uma formulação independente da Mecânica Quântica, realizada por Richard Feynman em 1948.

Em seu trabalho, Feynman mostrou que a amplitude de transição entre um ponto x_i no instante t_i e um ponto x_N no instante t_N é proporcional à exponencial de i vezes a ação:

$$\langle x_N, t_N | x_1, t_1 \rangle = \int_{x_1}^{x_2} \mathcal{D}[x(t)] \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_N} \mathcal{L}(x, \dot{x}) \right], \quad (4)$$

onde é definido o seguinte operador integral:

$$\int_{x_1}^{x_2} \mathcal{D}[x(t)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right]^{\frac{N-1}{2}} \int dx_{N-1} \int dx_{N-2} \dots \int dx_2. \quad (5)$$

Com este resultado, Feynman apresentou uma formulação alternativa para a mecânica quântica e que carrega consigo ideias importantes tais quais: o princípio da superposição, a propriedade de composição da amplitude de transição e a correspondência clássica. Mais além, pode ainda ser mostrado a equivalência entre as integrais de trajetória e a mecânica clássica.

A partir deste ponto, com intuito de simplificar os cálculos, mudamos o sistema de unidades e passaremos a usar o sistema de unidades naturais onde a velocidade da luz, a constante de Planck e a constante de Boltzmann é igual a uma unidade. Vamos considerar também uma alteração na lagrangiana pela presença de uma fonte de campos dependente do tempo, $J(t)$. Neste contexto, chamaremos qualquer agente externo de fonte, responsável por provocar uma transição de um autoestado de energia a outro. Por outro lado, no escopo da teoria quântica de campos, uma fonte dependente do tempo pode provocar a criação ou a aniquilação espontânea de partículas. Em todo caso, a fonte pode ser modelada através da seguinte modificação na lagrangiana $\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L} + J(t)x(t)$.

A fonte $J(t)$ é definida em um intervalo de tempo finito $t \in [t_1, t_2]$. Para instantes de tempo T_1 e T_2 , tais que, $T_2 > t_2$ e $T_1 < t_1$, não há atuação da fonte. Supomos ainda que a partícula está no estado fundamental no tempo $T_1 \rightarrow -\infty$ e assim, procuramos responder qual a amplitude de transição na qual a partícula permanecerá no estado fundamental no tempo $T_2 \rightarrow \infty$. O resultado para o funcional gerador é dado pela expressão a seguir:

$$Z[J] = N \int \mathcal{D}[x] \exp \left\{ i \int d^4x [\mathcal{L} + J(t)x(t)] \right\}, \quad (6)$$

onde a constante de normalização é definida pelo funcional gerador na ausência de agentes externos, isto é, $J \rightarrow 0$.

2.1.2 Métodos funcionais para campos escalares

Para quantizar o campo escalar, começamos pela transição da teoria quântica para uma teoria de campos [21]. Para isto, fazemos a substituição $x(t) \rightarrow \phi(x^\mu)$, onde trocamos a posição em função do tempo e no lugar, colocamos um funcional de funções de posição para o

sistema. Também, supomos que o campo escalar $\phi(x)$ possui uma fonte $J(x)$ e então, podemos definir a amplitude de transição vácuo-vácuo na presença desta fonte:

$$Z[J] = \int \mathcal{D}[\phi] \exp\left[i \int d^4x (\mathcal{L}_0 + J\phi)\right] \propto \langle 0, \infty | 0, -\infty \rangle, \quad (7)$$

onde a constante de normalização não é explicitada. Na exponencial, temos a densidade lagrangiana de Klein-Gordon livre e um termo de fonte. Explicitamente:

$$\mathcal{L}_0(\phi) = \frac{1}{2} \left[(\partial_0 \phi)^2 - (\vec{\nabla} \phi)^2 - m^2 \phi^2 \right]. \quad (8)$$

Neste ponto, dividimos ambos, espaço e tempo, em pequenos segmentos. Logo, o espaço de Minkowski é quebrado em cubos 4-dimensionais de volume δ^4 , no qual ϕ é constante para cada um destes volumes, isto é:

$$\phi \sim \phi(x_i, y_j, z_k, t_l)$$

e onde as derivadas são aproximadas da seguinte maneira:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial x} \right|_{i,j,k,l} \approx \frac{1}{\delta} [\phi(x_i + \delta, y_j, z_k, t_l) - \phi(x_i, y_j, z_k, t_l)].$$

Agora, fazendo a troca formal dos índices (i, j, k, l) para um índice n e escrevemos:

$$\mathcal{L}(\phi(x_i, y_j, z_k, t_l), \partial_\mu \phi(x_i, y_j, z_k, t_l)) = \mathcal{L}(\phi_n, \partial_\mu \phi_n) = \mathcal{L}_n$$

e se i, j, k e l cada, possuem N valores, então n tem N^4 valores. Portanto, a ação se torna:

$$S \approx \sum_{n=1}^{N^4} \delta^4 \mathcal{L}_n$$

e a amplitude vácuo-vácuo é:

$$Z[J] = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^{N^4} \mathcal{D}[\phi_n] \exp\left[i \sum_{n=1}^{N^4} \delta^4 (\mathcal{L}_n + J_n \phi_n)\right]. \quad (9)$$

Vamos agora, calcular $Z[J]$ para um campo escalar livre, isto é, para a lagrangiana de Klein-Gordon:

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} [\partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - m^2 \phi^2] \quad (10)$$

e a amplitude correspondente tomando o limite $N \rightarrow \infty$ é:

$$Z_0[J] = \int \mathcal{D}[\phi] \exp\left\{i \int d^4x \left[\frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - m^2 \phi^2 + \phi J\right]\right\}. \quad (11)$$

Usando a integração por partes:

$$\int d^4x \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi = (\phi \partial^\mu \phi)|_{\phi(\pm\infty)} - \int d^4x \phi \partial^2 \phi$$

e convertendo o primeiro termo a uma integral de superfície, usando a versão 4-dimensional do teorema de Gauss, este termo desaparecerá para $\phi \rightarrow 0$ no infinito, então temos:

$$\int d^4 x \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi = - \int d^4 x \phi \partial^2 \phi ,$$

de forma que o funcional gerador resulta em,

$$Z_0[J] = \int \mathcal{D}[\phi] \exp \left\{ -i \int d^4 x \left[\frac{1}{2} \phi D \phi - \phi J \right] \right\} , \quad (12)$$

onde o operador D será usado nesta forma a partir de agora, afim de simplificar as equações.

Sua forma, dada explicitamente é:

$$D = \partial^2 + m^2 . \quad (13)$$

Neste momento é conveniente fazermos a seguinte mudança:

$$\phi' \rightarrow \phi + \phi_0 \quad (14)$$

e usando o fato de que:

$$\int d^4 x \phi_0 D \phi = \int d^4 x \phi D \phi_0 ,$$

temos que:

$$\int d^4 x \left[\frac{1}{2} \phi D \phi + \phi J \right] \rightarrow \int d^4 x \left[\frac{1}{2} \phi D \phi + \phi D \phi_0 + \frac{1}{2} \phi_0 (\partial^2 + m^2) \phi_0 + \phi_0 J + \phi J \right] ,$$

onde escolhemos ϕ_0 tal que,

$$D \phi_0 = J(x) \quad (15)$$

e a integral resultante fica:

$$\frac{1}{2} \int d^4 x [\phi D \phi + \phi_0 J] . \quad (16)$$

A solução da equação (15) é:

$$\phi_0(x) = - \int \Delta_F(x-y) J(y) d^4 y , \quad (17)$$

onde a $\Delta_F(x-y)$ é o propagador de Feynman, que obedece a relação:

$$D \Delta_F(x-y) = -\delta^4(x-y) . \quad (18)$$

Substituindo (18) em (17), obtemos os seguintes termos:

$$\frac{1}{2} \int d^4 x [\phi D \phi] + \frac{1}{2} \int J(x) \Delta_F(x-y) J(y) d^4 x d^4 y ,$$

e o funcional gerador, por fim fica:

$$\begin{aligned} Z[J] &= \exp \left[-\frac{i}{2} \int d^4 x d^4 y J(x) \Delta_F(x-y) J(y) \right] \int \mathcal{D}[\phi] \exp \left[-\frac{i}{2} \int d^4 x [\phi D \phi] \right] , \\ &= \det^{-1/2}(iD) \exp \left[\frac{i}{2} \int d^4 x d^4 y [J(x) \Delta_F(x-y) J(y)] \right] \end{aligned} \quad (19)$$

onde a última passagem é a solução do funcional gerador para o campo de Klein-Gordon livre, cuja forma é uma integração gaussiana e está explicitada no Apêndice A. Mas desde que estamos interessados apenas em amplitudes de transição normalizadas, o valor do

determinante pode ser inserida como uma constante de normalização. Além disto, não é difícil mostrar que o propagador de Feynman na representação de Fourier é:

$$\Delta_F(x-y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 k \frac{1}{k^2 - m^2 + i\epsilon} \exp[-ik(x-y)] \quad , \quad (20)$$

onde introduzimos o termo $i\epsilon$ para **remover os** dois pólos em $\pm m$. Podemos também, fazer uma mudança de espaço e representar o funcional gerador no espaço Euclidiano. Isto consiste em transformar o tempo em uma componente imaginária:

$$x_4 = i x_0 \quad ,$$

cujo limite é $x_4 \rightarrow \infty$. Assim, a diferencial da distância é:

$$ds^2 = - \sum_{\mu=1}^4 (dx^\mu)^2$$

e, definindo

$$k_4 = -i k_0 \quad ,$$

temos, no espaço Euclidiano:

$$(a) \quad k^2 = -k_E^2$$

$$(b) \quad d^4 k_E = d^3 k dk_4 = -i d^4 k \quad .$$

Logo, o propagador de Feynman fica:

$$\Delta_F(x-y) = -\frac{i}{(2\pi)^4} \int d^4 k_E \frac{1}{k_E^2 + m^2} \exp[-i k_E(x-y)] \quad (21)$$

e, por fim, a amplitude de transição Euclidiano pode ser escrita como:

$$Z_E[J] = \int \mathcal{D}[\phi] \exp \left[- \int d^4 x_E \left(\frac{1}{2} (\partial_E^\mu \phi)^2 + m^2 \phi^2 - J \phi \right) \right] \quad . \quad (22)$$

2.1.3 Métodos funcionais para campos fermiônicos

Na quantização de campos fermiônicos, os funcionais geradores se tornam integrais funcionais sob variáveis de Grassman. Mais detalhes sobre esta álgebra estão apresentados no Apêndice B [21, 25, 26]. Começamos a quantização introduzindo a lagrangiana para o campo de Dirac livre:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i \gamma^\mu \partial_\mu - m_e) \psi \equiv \bar{\psi} S_0^{-1} \psi \quad , \quad (23)$$

onde,

$$S_0^{-1} = i \gamma^\mu \partial_\mu - m_e \quad (24)$$

é o operador de Dirac livre e será usado na sua forma compacta.

O funcional gerador para os campos de Dirac livres, sem levar em conta a normalização, mas na presença de fontes $\bar{\eta}, \eta$ é:

$$Z[\eta, \bar{\eta}] = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \exp \left\{ i \int d^4 x \left[\bar{\psi} S_0^{-1} \psi + \bar{\eta} \psi + \bar{\psi} \eta \right] \right\} , \quad (25)$$

onde definimos o núcleo:

$$Q(\bar{\psi}, \psi) = \bar{\psi} S_0^{-1} \psi + \bar{\eta} \psi + \bar{\psi} \eta \quad (26)$$

e encontramos os campos que o minimizam:

$$(a) \quad \bar{\psi}_m = -\bar{\eta} S_0 ;$$

$$(b) \quad \psi_m = -S_0 \eta .$$

Logo, podemos escrever o valor mínimo do núcleo Q como:

$$Q_m = -\bar{\eta} S_0 \eta$$

e o núcleo em função de seu valor mínimo:

$$Q(\bar{\psi}, \psi) = Q_m + (\bar{\psi} - \bar{\psi}_m) S_0^{-1} (\psi - \psi_m) . \quad (27)$$

Desta maneira, podemos reescrever o funcional gerador na seguinte forma:

$$Z[\eta, \bar{\eta}] = \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \exp \left\{ i \int d^4 x \left[Q_m + (\bar{\psi} - \bar{\psi}_m) S_0^{-1} (\psi - \psi_m) \right] \right\} , \quad (28)$$

no qual, podemos fazer a seguinte transformação de variáveis:

$$(a) \quad \bar{\alpha} = \bar{\psi} - \bar{\psi}_m ;$$

$$(b) \quad \alpha = \psi - \psi_m$$

e obtemos portanto:

$$Z[\eta, \bar{\eta}] = \exp(i \int d^4 x Q_m) \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \exp \left\{ i \int d^4 x \left[\bar{\alpha} S_0^{-1} \alpha \right] \right\} , \quad (29)$$

cuja solução da integração funcional que aparece é mostrada em mais detalhes no Apêndice B, explicitamente, na equação (B.37):

$$Z[\eta, \bar{\eta}] = \det(-i S_0^{-1}) \exp \left\{ -i \int d^4 x d^4 y \left[\bar{\eta}(x) S_0(x-y) \eta(y) \right] \right\} , \quad (30)$$

onde o operador S_0 na representação de Fourier é:

$$S_0(x-y) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int d^4 k \frac{i \exp[-ik(x-y)]}{\gamma_\mu k^\mu - m + i\epsilon} .$$

2.1.4 Métodos funcionais para campos de Gauge

Nesta seção, apresentaremos o propagador do fóton para a teoria da eletrodinâmica quântica (EDQ), onde quantizaremos campos vetoriais, ou campos de gauge [21-23]. Como será visto, a liberdade de fazer transformações de gauge provoca dificuldades que não aparecem nos campos escalares e fermiônicos. Para isto, seja o funcional gerador do campo vetorial a seguir:

$$Z[J] = \int D[A_\mu] \exp \{ i \int d^4 x [\mathcal{L} + J^\mu A_\mu] \} , \quad (31)$$

onde J^μ é a fonte do campo de gauge, definido pelo campo vetorial A_μ e a lagrangiana livre da QED é:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} . \quad (32)$$

onde $F_{\mu\nu}$ é o tensor de força:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu . \quad (33)$$

Podemos fazer uma integração por partes na ação do termo livre da lagrangiana, onde eliminamos os termos de superfície e o assim obtemos:

$$-\frac{1}{4} \int d^4 x F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} = \frac{1}{2} \int d^4 x A^\mu [g_{\mu\nu} \partial^2 - \partial_\mu \partial_\nu] A^\nu ,$$

onde $g_{\mu\nu}$ é o tensor métrico do espaço de Minkowski e, portanto:

$$Z[J] = \int D[A_\mu] \exp \left[i \int d^4 x \frac{1}{2} A^\mu [g_{\mu\nu} \partial^2 - \partial_\mu \partial_\nu] A^\nu + J^\mu A_\mu \right] . \quad (34)$$

Contudo, o operador que aparece na lagrangiana não é inversível embora a lagrangiana da eletrodinâmica quântica **é invariante** sob transformações de gauge do tipo:

$$A_\mu \rightarrow A_\mu + \partial_\mu \Lambda ,$$

contudo, a integração é sobre todos os campos vetoriais A^μ , incluindo aqueles relacionados somente pela transformação de gauge. Isto dá infinitas contribuições a Z . Logo, para obtermos um valor finito de Z devemos fixar um calibre particular, de tal forma que a integral sobre A^μ não estende sobre todos valores valores simplesmente relacionados pela transformação. Para isto, definimos a condição do gauge de Lorentz:

$$\partial_\mu A^\mu = 0 ,$$

que nos dá a seguinte Lagrangiana:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} A^\mu [g_{\mu\nu} \partial^2] A^\nu , \quad (35)$$

onde o operador que aparece nesta expressão possui inversa, conhecido como propagador de Feynman:

$$[g_{\mu\nu} \partial^2]^{-1} \rightarrow D_F(x, y)_{\mu\nu} = -g_{\mu\nu} \Delta_F(x, y; m=0) . \quad (36)$$

Com estas considerações, para manter a forma da lagrangiana original, adicionamos um termo fixador de gauge:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \mathcal{L}_{GF} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \frac{1}{2\alpha} (\partial_\mu A^\mu)^2 , \quad (37)$$

onde a constante α é arbitrária e finita, cujo significado é adicionar à lagrangiana um conjunto de termos fixadores de Gauge. Assim, podemos reescrever o funcional gerador:

$$Z[J] = \int D[A_\mu] \exp \left\{ \frac{i}{2} \int d^4 x \left[A^\mu \left(g_{\mu\nu} \partial^2 + (\alpha^{-1} - 1) \partial_\mu \partial_\nu \right) A^\nu \right] \right\} , \quad (38)$$

onde, por simplificação, denotaremos o operador:

$$D_{\mu\nu}^{-1} = g_{\mu\nu} \partial^2 + (\alpha^{-1} - 1) \partial_\mu \partial_\nu , \quad (39)$$

que possui inversa, dada pela expressão:

$$D_{\mu\nu} = \partial^{-2} \left[g_{\mu\nu} + (\alpha - 1) \partial^{-2} \partial^\mu \partial^\nu \right] ,$$

nos quais, a constante α que aparece no termo de gauge recebe nomenclaturas particulares para este operador. Se $\alpha = 1$: propagador de Feynman (gauge de Feynman), ou se, $\alpha = 0$: gauge de Landau. Neste trabalho, usaremos o calibre de Lorentz em que $(\partial_\mu A^\mu) = 0$ e independe do valor de α .

Por fim, uma vez que o operador que aparece no integrando é inversível, podemos integrar o funcional gerador. O método é análogo ao caso do campo escalar e o resultado é:

$$\begin{aligned} Z[J] &= \int D[A_\mu] \exp i \left[\int d^4 x \left(\frac{1}{2} A_\mu D^{\mu\nu} A_\nu + J^\mu A_\mu \right) \right] \\ &= \det^{-1/2} (D_{\mu\nu}) \exp \left[\frac{i}{2} \int d^4 x d^4 y \left(J^\mu(x) D_{\mu\nu}^{-1}(x-y) J^\nu(y) \right) \right] . \end{aligned} \quad (40)$$

2.2 Transformação de Hubbard-Stratonovich

Até o momento, apresentamos sistemas que contém apenas campos físicos livres na presença de suas fontes, sejam os campos escalares, fermiônicos ou vetoriais. Contudo, podemos adicionar ao sistema de interesse, um campo auxiliar, que pode ser eliminado da teoria sem perda de generalidade, conhecido como transformação de Hubbard-Stratonovich [14, 15]. Nesta seção iremos apresentar este método por meio do modelo de David J. Gross e André Neveu, que na referência [27] investiga teorias de campos fermiônicos em 1+1 dimensões considerando interações quárticas.

2.2.1 Modelo de Gross-Neveu

O modelo consiste em um sistema fermiônico, onde as fontes são consideradas e que possui uma interação quártica entre os férmions mediada por uma constante de acoplamento atrativa G :

$$\mathcal{L}(\bar{\psi}, \psi) = \bar{\psi} S_0^{-1} \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi + \frac{G^2}{2} (\bar{\psi} \psi)^2, \quad (41)$$

cujos funcional gerador Z é:

$$Z[\bar{\eta}, \eta] = \int D[\bar{\psi}, \psi] \exp \left[i \int d^4 x \left(\bar{\psi} S_0^{-1} \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi + \frac{G}{2} (\bar{\psi} \psi)^2 \right) \right]. \quad (42)$$

No artigo [27], Gross-Neveu mostram que uma quebra de simetria dinâmica ocorre para qualquer valor da constante de acoplamento e as teorias resultantes produzem massa fermiônica dinamicamente. A busca por esta quebra de simetria é realizada por técnicas funcionais e a combinação escalar anti-férmion/férmion desenvolve um valor esperado de vácuo não nulo $\langle \bar{\psi} \psi \rangle$. Para entender esta situação, considere uma interação de Yukawa (que será explorada em maiores detalhes na seção seguinte):

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i \gamma^\mu \partial_\mu - m_e) \psi + m G \phi \bar{\psi} \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi, \quad (43)$$

onde temos a parte cinética de um campo fermiônico, a parte cinética de um campo bosônico, suas fontes e a interação entre os dois campos mediante uma constante de acoplamento G . Gross-Neveu mostra que se tendermos $m \rightarrow \infty$, a interação de Yukawa acima se torna equivalente a interação original (41). O limite $m \rightarrow \infty$ pode ser tomado fazendo a seguinte transformação no campo escalar:

$$\sigma = m \phi$$

e deixando $m \rightarrow \infty$. A lagrangiana resultante é:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi} (i \gamma^\mu \partial_\mu - m_e) \psi - \frac{1}{2} \sigma^2 - G \sigma \bar{\psi} \psi, \quad (44)$$

que resulta nas mesmas funções de Green para os férmions que a lagrangiana inicial. Isto pode ser visto pelo funcional gerador, integrando os graus de liberdade de σ na lagrangiana (44).

2.2.2 Inserção de um campo escalar auxiliar

Na integração funcional, o termo de ordem quártica que aparece na Lagrangiana (41) não permite uma integração direta uma vez que sabemos fazer integrações apenas no formato gaussiano. Uma maneira de contornar esse problema é considerando um campo auxiliar φ tal que o seguinte resultado é válido sempre:

$$1 = N_0 \int D[\varphi] \exp \left[-\frac{i}{2} \int d^4 x \varphi^2 \right]. \quad (45)$$

Fazendo o seguinte deslocamento no campo auxiliar:

$$\varphi \rightarrow \varphi - c \bar{\psi} \psi ,$$

onde c é uma constante arbitrária, obtemos:

$$1 = N_0 \int \mathcal{D}[\varphi] \exp \left[-\frac{i}{2} \int d^4 x \left(\varphi^2 - 2c \bar{\psi} \varphi \psi + c^2 (\bar{\psi} \psi)^2 \right) \right] . \quad (46)$$

Multiplicamos esta identidade em (42) e obtemos:

$$Z[\bar{\eta}, \eta] = N_0 \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \exp \left[i \int d^4 x \bar{\psi} S_0^{-1} \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi + \frac{G}{2} (\bar{\psi} \psi)^2 \right] \\ \times \int \mathcal{D}[\varphi] \exp \left[-\frac{i}{2} \int d^4 x \varphi^2 - 2c \bar{\psi} \varphi \psi + c^2 (\bar{\psi} \psi)^2 \right] ,$$

mas como c é uma constante arbitrária, escolhemos $c = G$. Logo,

$$Z[\bar{\eta}, \eta] = N_0 \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, \varphi] \exp \left[i \int d^4 x \left(\bar{\psi} (S_0^{-1} + G \varphi) \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi - \frac{1}{2} \varphi^2 \right) \right] \quad (47)$$

e agora fazemos a integração nas variáveis fermiônicas, de modo que, temos uma teoria para o campo auxiliar φ :

$$Z[\bar{\eta}, \eta] = N_0 \int \mathcal{D}[\varphi] \det \left[-i(S_0^{-1} + G \varphi) \right] \exp \left[-i \int d^4 x \left(\frac{\varphi^2}{2} + \bar{\eta} (S_0^{-1} + G \varphi)^{-1} \eta \right) \right] . \quad (48)$$

Este resultado mostra uma forma de contornar o problema do termo quártico e assim, temos uma teoria para o campo auxiliar apenas, onde os graus de liberdade físicos do sistema foram eliminados. Conseqüentemente, o funcional gerador para o sistema na ausência de fontes fermiônicas é:

$$Z = N_0 \int \mathcal{D}[\varphi] \det \left[-i(S_0^{-1} + G \varphi) \right] \exp \left[-i \int d^4 x \frac{\varphi^2}{2} \right] . \quad (49)$$

Agora que temos uma teoria efetiva para o campo auxiliar, podemos determinar a densidade lagrangiana efetiva [28], dada pela relação:

$$Z = N \int \mathcal{D}[\varphi] \exp \left[i \int d^4 x \mathcal{L}_{\text{eff}} \right] . \quad (50)$$

Mas desde que o operador que aparece no determinante é diagonal, podemos usar do fato que (mais detalhes no Apêndice C):

$$\det \left[-i(S_0^{-1} + G \varphi) \right] = \exp \left[\text{Tr} \ln \left[-i(S_0^{-1} + G \varphi) \right] \right] , \quad (51)$$

onde o Tr é a soma sobre os índices das matrizes de Dirac e a soma dos autovalores do operador. Assim, temos uma teoria efetiva apenas com os graus de liberdade bosônicos:

$$\mathcal{L}_{\text{eff}} = -i \text{tr} \ln \left[-i(S_0^{-1} + G \varphi) \right] - \frac{\varphi^2}{2} . \quad (52)$$



2.3 Lagrangiana de Yukawa

Nesta seção, vamos discutir um método usado para transformar uma lagrangiana que envolve dois tipos diferentes de campos em uma lagrangiana com apenas um campo explícito [21, 25, 26, 29]. Para isto, apresentamos uma teoria que contém um acoplamento entre bósons e férmions, conhecido como acoplamento de Yukawa para 3+1 dimensões. Sua lagrangiana é:

$$\mathcal{L}(\bar{\psi}, \psi, \phi) = \bar{\psi} S_0^{-1} \psi - \frac{1}{2} \phi D \phi - V(\phi) + \phi J + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi - g \phi \bar{\psi} \psi, \quad (53)$$

onde os operadores D e S_0^{-1} são dados pelas equações (13) e (24), respectivamente. O termo $V(\phi)$ contém os termos de auto-interações do campo bosônico e g é a constante de acoplamento. As dimensões dos campos e da constante de acoplamento são mostradas na tabela abaixo. Para $d = 4$, a constante g é adimensional e, portanto, a teoria é renormalizável.

Tabela 1 – Unidades de medidas para os campos e para a constante de acoplamento em cada dimensão.

<i>Dimensão</i>	$[\phi]$	$[\psi]$	$[g]$
1+1	1	$M^{1/2}$	0
2+1	$M^{1/2}$	0	$M^{1/2}$
3+1	0	$M^{3/2}$	1

Em geral, as fórmulas para dimensões dos campos e da constante de acoplamento em unidades de massa são:

(a) $[\phi] = M^{d/2-1}$

(b) $[\psi] = [\bar{\psi}] = M^{(d-1)/2}$

(c) $[g] = M^{2-d/2}$

e o funcional gerador da teoria é:

$$Z[\bar{\eta}, \eta, J] = N \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, \phi] \exp \left[i \int d^d x (\mathcal{L}(\bar{\psi}, \psi, \phi)) \right],$$

onde N é a constante de normalização. Esta expressão pode ser reescrita da seguinte maneira, de forma a explicitar a integração dos graus de liberdade fermiônicos:

$$Z[\bar{\eta}, \eta, J] = N \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi] \exp \left[i \int d^d x (\bar{\psi} (S_0^{-1} - g \phi) \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi) \right] \times \int \mathcal{D}[\phi] \exp \left[i \int d^d x \left(-\frac{1}{2} \phi D \phi - V(\phi) + J \phi \right) \right]. \quad (54)$$

Se estamos interessados em processos que não contém férmions físicos nas linhas externas do diagrama de Feynman, então é vantajoso reescrever Z tal que os campos fermiônicos não aparecem mais explicitamente. Isto pode ser feito porque a lagrangiana do sistema é

quadrática no campo fermiônico, logo, podemos usar o método da integração gaussiana para quantizar o campo dos férmions. Ao fazer isto, obtemos:

$$Z_\phi[\bar{\eta}, \eta, J] = N \int \mathcal{D}[\phi] \det[-i(S_0^{-1} - g\phi)] \times \\ \times \exp\left[-i \int d^d x \left(\bar{\eta} \frac{1}{S_0^{-1} - g\phi} \eta + \frac{1}{2} \phi D\phi + V(\phi) - J\phi \right)\right],$$

onde podemos ainda reescrever esta equação de forma mais compacta:

$$Z_\phi = N \int \mathcal{D}[\phi] \det[-iM(\phi)] \exp\left[-i \int d^d x \left(\bar{\eta} M^{-1}(\phi) \eta + \frac{1}{2} \phi D\phi + V(\phi) - J\phi \right)\right], \quad (55)$$

onde,

$$(a) \quad M(\phi) = i \gamma^\mu \partial_\mu - m_\phi \quad ;$$

$$(b) \quad m_\phi = m_e + g\phi \quad . \quad (56)$$

Aqui vemos que o determinante do férmion M é uma função de ϕ . Ademais, esta equação não depende mais explicitamente dos graus de liberdade fermiônicos, contudo, ela é completamente equivalente ao funcional gerador inicial. O foco agora está nos processos que contém apenas bósons nas linhas externas. Deste modo, podemos estabelecer as fontes fermiônicas como zero. Ao fazer isto, desistimos de qualquer possibilidade de calcular qualquer processo onde há linhas externas fermiônicas, pois para este cálculo, dependemos das derivadas funcionais com respeito as fontes dos férmions. Porém, através da presença do determinante do férmion M nós continuamos a ter os efeitos dos *loops* fermiônicos para o campo escalar ϕ . Assim, o funcional gerador resulta em:

$$Z_\phi[J] = N \int \mathcal{D}[\phi] \exp\left[i \int d^d x \left(-i \text{tr} \ln[-iM(\phi)] - \frac{1}{2} \phi D\phi - V(\phi) + J\phi \right)\right], \quad (57)$$

onde usamos o fato de que M é uma matriz diagonal e assim:

$$\det[-iM] = \exp[\text{Tr} \ln(-iM)] \quad .$$

A equação (57) mostra formalmente que todos os graus de liberdade fermiônicos foram removidos. Alternativamente, nós também podemos dizer que estamos trabalhando com uma nova ação efetiva para o setor bosônico:

$$S_\phi = \int d^d x \left(-i \text{tr} \ln[-iM(\phi)] - \frac{1}{2} \phi D\phi - V(\phi) \right), \quad (58)$$

onde o traço que aparece na ação efetiva é realizado somente sobre os índices de Dirac. Quando queremos incluir o traço sobre as coordenadas do espaço-tempo (ou, equivalente no espaço do momento), denotamos por Tr , em maiúsculo:

$$Tr = \text{tr} \int d^d x \quad .$$

Assim, podemos escrever a densidade lagrangiana como:

$$\mathcal{L}_\phi = -i \text{tr} \ln [-i M(\phi)] - \frac{1}{2} \phi D \phi - V(\phi) \quad , \quad (59)$$

cujos os resultados ainda estão exatos. Contudo, o verdadeiro estado fundamental do setor bosônico é determinado pelo potencial $V(\phi)$ e o termo de massa, mas pode não coincidir com o mínimo deste potencial. Logo, supomos o valor constante ϕ_0 , invariante por translações, que minimiza o potencial V como um campo referência no qual é possível fazer uma expansão perturbativa, caso desejado. Supomos que existe um campo constante ϕ_0 que minimiza o potencial e assim, introduzimos na ação um termo correspondente devido a este campo. Definindo,

$$m_0 = m_e + g \phi_0 \quad , \quad (60)$$

a densidade lagrangiana fica:

$$\mathcal{L}_\phi = -\frac{1}{2} \phi D \phi - V(\phi) - i \text{tr} \ln [-i (i \gamma^\mu \partial_\mu - m_\phi)] + i \text{tr} \ln [-i (i \gamma^\mu \partial_\mu - m_0)] \quad ,$$

ou ainda,

$$\mathcal{L}_\phi = -\frac{1}{2} \phi (\partial^2 + m^2) \phi - V(\phi) - i \text{tr} \ln \left[\frac{i \gamma^\mu \partial_\mu - m_\phi}{i \gamma^\mu \partial_\mu - m_0} \right] \quad ,$$

onde podemos facilmente reescrever o logaritmo como:

$$\text{tr} \ln \left[\frac{i \gamma^\mu \partial_\mu - m_\phi}{i \gamma^\mu \partial_\mu - m_0} \right] = \frac{1}{2} \text{tr} \ln \left[1 + \frac{m_\phi^2 - m_0^2 - i g \gamma_\mu \partial^\mu \phi}{\partial^2 + m_0^2} \right] \quad ,$$

de modo que a lagrangiana efetiva fica:

$$\mathcal{L}_\phi = -\frac{1}{2} \phi (\partial^2 + m^2) \phi - V(\phi) - \frac{i}{2} \text{tr} \ln \left[1 + \frac{m_\phi^2 - m_0^2 - i g \gamma_\mu \partial^\mu \phi}{\partial^2 + m_0^2} \right] \quad , \quad (61)$$

que pode ser simplificada renomeando os operadores dentro do logaritmo:

$$\mathcal{L}_\phi = -\frac{1}{2} \phi (\partial^2 + m^2) \phi - V(\phi) - \frac{i}{2} \text{tr} \ln [1 - DW] \quad , \quad (62)$$

onde os operadores são:

$$(a) \quad D = -\frac{1}{\partial^2 + m_0^2} \quad ;$$

$$(b) \quad W = m_\phi^2 - m_0^2 - i g \gamma_\mu \partial^\mu \phi \quad . \quad (63)$$

Aqui vemos que o operador D não é nada mais que o propagador de Feynman $\Delta_F(x - y)$ para um campo ϕ_0 com uma massa efetiva m_0 de tal maneira que nenhuma aproximação foi feita e a teoria continua exata. Notamos ainda um termo extra na lagrangiana efetiva que

acrescenta ao potencial do campo bosônico e assim, temos uma teoria para bósons com o seguinte potencial efetivo:

$$V_{eff}(\phi) = V(\phi) + \frac{i}{2} tr \ln [1 - DW] \quad . \quad (64)$$

Por fim, escrevemos também a ação efetiva em termos dos operadores D e W :

$$S_\phi = -\frac{i}{2} Tr \ln [1 - DW] - \int d^d x \left[\frac{1}{2} \phi (\partial^2 + m^2) \phi + V(\phi) \right] \quad . \quad (65)$$

Vamos agora desenvolver uma expansão do logaritmo que aparece nesta lagrangiana. Sabemos que:

$$-tr \ln (1 - DW) = tr \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} (DW)^n \quad , \quad (66)$$

no qual, o traço nesta equação indica que cada termo na expansão contém um *loop* fechado fermiônico. Esta equação é então chamada de expansão de *1-loop* e representa uma expansão perturbativa na ação efetiva. Ao integrar os graus de liberdade fermiônicos, obtivemos uma teoria efetiva que leva todos os diagramas fermiônicos de *1-loop* já em conta. A expansão é esperada para convergir mais rapidamente quanto mais perto o campo real ϕ está de ϕ_0 e menor são os gradientes de ϕ . Logo, nosso objetivo aqui é escrever o termo do traço como uma integral sobre a densidade de espaço-tempo no qual poderá ser interpretado como um termo de correção à densidade lagrangiana, resultando numa lagrangiana efetiva que contém os efeitos de *1-loop* dos férmions. Para isto, temos que separar os termos do traço em produtos de operadores que são locais em x e p . Neste caso o traço pode ser separado [29]:

$$Tr [F(\hat{p}) G(\hat{x})] = tr \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} F(p) \int d^d x G(x) \quad . \quad (67)$$

A equação (66) no formato apresentado não permite uma aplicação direta deste resultado. Enquanto W é diagonal em x e D em p , estes dois operadores são misturados em ordens mais altas da expansão. A separação pode ser feita e o resultado obtido é [29]:

$$-tr(1 - DW) = tr(DW) + \frac{1}{2} tr(D^2 W^2) + \frac{1}{2} tr(D^3 [D^{-1}, W] W) + O(W^3) \quad . \quad (68)$$

Notamos que todos os termos do lado direito tem uma dependência separada no momento e na posição. Então, elas podem ser escritas como o produto das integrais no espaço e no momento.

Resta agora discutir os termos da expansão e, para isto, começamos com o primeiro termo da equação (68), $tr(DW)$, que é explicitamente:

$$Tr(DW) = Tr [D(m_\phi^2 - m_0^2 - ig \gamma_\mu \partial^\mu \phi)] \quad ,$$

podemos escrever ainda,

$$m_\phi^2 - m_0^2 - ig \gamma_\mu \partial^\mu \phi = g^2 (\phi^2 - \phi_0^2) + 2 m_e g (\phi - \phi_0) - ig \gamma_\mu \partial^\mu \phi$$

e o traço é sempre nulo sobre as matrizes gama de Dirac ($tr \gamma_\mu = 0$) (ver Apêndice D), portanto:

$$Tr(DW) = \alpha D g [g (\phi^2 - \phi_0^2) + 2 m_e (\phi - \phi_0)] \quad (69)$$

onde α é o valor do traço sobre a matriz identidade em d dimensões, cujo valor é obtido no estudo das propriedades da álgebra de Clifford para cada dimensão. Aqui, apresentamos os valores de α : $\alpha = 2$ para $d = 1+1$ e $d = 2+1$ e $\alpha = 4$ para $d = 3+1$. Assim,

$$Tr(DW) = \alpha g \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2 - m_0^2} \int d^d x [g (\phi^2 - \phi_0^2) + 2 m_e (\phi - \phi_0)] \quad (70)$$

Este termo agora está na forma desejada, isto é, dado pela integral espaço-temporal sobre os campos. Contudo, a integral no momento que aparece diverge quadraticamente para $d = 4$. Assim como este termo, para 4 dimensões, o próximo termo também divergirá:

$$Tr(D^2 W^2) = g^2 \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{(k^2 - m_0^2)^2} \int d^d x [g (\phi^2 - \phi_0^2) + 2 m_e (\phi - \phi_0)]^2 \quad (71)$$

Na contagem das potências, para $d = 4$, pode ser visto que para o segundo termo da expansão, a integral divergirá logaritmicamente. Já o segundo termo proporcional a W^2 ,

$$Tr(D^3 [D^{-1}, W] W) = Tr[D^3 (-\partial^2 W - 2(\partial^\mu W) \partial_\mu)] \quad (72)$$

e todos os termos de ordens superiores são convergentes porque eles contêm cada vez mais ordens do propagador D . Isto significa que nós temos apenas dois termos divergentes, (70, 71), na expansão. Eles podem ser removidos introduzindo contra-termos apropriados na lagrangiana original e, então, podemos definir uma densidade lagrangiana efetiva, finita e renormalizada, no setor bosônico da teoria. Fazemos isto adicionando os dois termos divergentes na lagrangiana:


$$\hat{\mathcal{L}}_\phi = -\frac{1}{2} \phi \partial^2 \phi - V(\phi) - \frac{i}{2} tr \ln [1 - DW] - \frac{i}{2} tr \ln \left[DW + \frac{1}{2} (DW)^2 \right] \quad (73)$$

Por fim, vemos que os dois termos divergentes podem ser regularizados através da inserção de contra-termos cuja estrutura já está presente na lagrangiana bosônica original, removendo apenas os dois primeiros termos da expansão do logaritmo. A teoria de Yukawa é então renormalizável para esta dimensão, desde que o potencial $V(\phi)$ é bem comportada e contém no máximo até a quarta ordem de ϕ [29].

Contudo, há uma segunda maneira para a regularizar as integrais de momento divergentes. O processo consiste em definir um limite superior constante Λ para a integração

no momento, chamado *cut-off*. No presente trabalho, usaremos esta maneira de regularizar as integrais que será discutida mais adiante.

2.4 Modelos teóricos para o grafeno

Nesta seção, discutimos alguns modelos que tem sido de bastante interesse ao investigar as propriedades do grafeno, os quais serão explorados neste trabalho através das transformações de Hubbard-Stratonovich. Os modelos apresentados são: teoria de um campo de gauge quirral, modelo de Jackiw-Pi [16]; um modelo mais geral que este, no qual é levado em conta termos de auto-interações do campo bosônico complexo até oitava ordem, modelo de T. Frederico *et al.* [17]; e os modelos de Katsnelson e Guinea [18, 19], onde os fônons da rede são descritos através de campos escalares, no plano e fora do plano da rede, e o campo de gauge é função destes campos escalares. Ademais, maiores detalhes sobre o modelo de *tight-binding* para o grafeno, sua estrutura em estado livre e a sua relação de dispersão é mostrado no Apêndice E. 

2.4.1 Modelo de gauge quirral para o grafeno

Em 2007, C.Y. Hou, C. Chamon e C. Mudry (HCM) **sabendo que existem** dois pontos de Dirac para uma sistema de estrutura hexagonal de carbono, tipo grafeno. Logo, uma equação de Dirac de duas componentes deve ser capaz de governar o movimento do elétron próximo a cada ponto de Dirac. Contudo, uma distorção da rede perturba o movimento do elétron, de tal maneira, que acopla os dois pontos de Dirac e abre um *gap* no espectro de energia do sistema. No escopo da equação de Dirac, isto é realizado pelo acoplamento do campo de Dirac Ψ a um campo escalar φ , no qual, este último campo permite medir a distorção da rede. A teoria original de HCM, esta interação é descrita pela seguinte densidade hamiltoniana no espaço das coordenadas:

$$H = \int d^3 \mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) K \psi(\mathbf{r}) \quad , \quad (74)$$

onde $\psi(\mathbf{r})$ é um espinor de quatro componentes descrevendo os férmions de Dirac no grafeno:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_+^a \\ \psi_+^b \\ \psi_-^a \\ \psi_-^b \end{pmatrix} \quad ,$$

onde os índices a e b referem às duas sub-redes triangulares do arranjo favo-de-mel e os índices $+$ e $-$ aos dois pontos inequivalentes da primeira zona de Brillouin. A matriz K é representada neste modelo como:

$$K = \begin{pmatrix} 0 & -2i\partial_z & g\varphi(\mathbf{r}) & 0 \\ -2i\partial_z^* & 0 & 0 & g\varphi(\mathbf{r}) \\ g\varphi^*(\mathbf{r}) & 0 & 0 & 2i\partial_z \\ 0 & g\varphi^*(\mathbf{r}) & 2i\partial_z^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (75)$$

onde $2i\partial_z = i(\partial_x - i\partial_y)$ e g é a constante de acoplamento. Nesta representação, $\varphi(\mathbf{r})$ é também conhecido por campo de Kekulé e seu módulo fornece um *gap* de massa de uma partícula para os férmions de Dirac. Também é usual denominar o modelo, que leva em conta a distorção da estrutura, como textura de Kekulé.

A partir desse modelo, Jackiw-Pi [16] propuseram introduzir um potencial de gauge e acoplá-lo aos férmions de Dirac de maneira quirial. Isto torna a teoria invariante sob transformações de gauge quirais locais, as quais agem nos campos escalar e de Dirac.

Para este modelo é necessário, primeiramente, reescrever a matriz K em termos das matrizes de Dirac, que possuem a forma:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \boldsymbol{\alpha} &= (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}; \\ \text{(b)} \quad \beta &= \begin{pmatrix} 0 & I \\ I & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (76)$$

Vale ressaltar que são usadas matrizes 4x4 embora a álgebra mínima de Dirac requer matrizes 2x2. Contudo, existem 4 graus de liberdades, dois em cada sub-rede. Como há duas dimensões espaciais, usamos apenas as duas primeiras matrizes α , onde $i = 1, 2$ ou x, y ; enquanto que o papel da terceira será explicado posteriormente. Podemos ainda, construir a matriz quirial γ_5 como uma quantidade hermitiana:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \gamma_5^j &= -i\alpha^1\alpha^2\alpha^3 = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}; \\ \text{(b)} \quad (\gamma_5^j)^2 &= I \end{aligned} \quad (77)$$

e as matrizes gama como:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \gamma_j &= \beta\alpha = \begin{pmatrix} 0 & -\boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}; \\ \text{(b)} \quad \gamma_j^0 &= \beta; \\ \text{(c)} \quad \gamma_j^5 &= i\gamma_j^0\gamma_j^1\gamma_j^2\gamma_j^3. \end{aligned} \quad (78)$$

Aqui usamos os índices J para explicitar o modelo de Jackiw-Pi. As matrizes α_i anti-comutam entre si e com β , enquanto que, γ_5 anticomuta com β e comuta com α_i . Assim, podemos escrever a matriz K como:

$$H = \int d^3 \mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) \left[\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + g \beta (\varphi^r - i \varphi^i \gamma_J^5) \right] \psi(\mathbf{r}) \quad , \quad (79)$$

onde todas as quantidades vetoriais são bidimensionais, $\mathbf{p} = -i \vec{\nabla}$ e φ é o campo escalar complexo $\varphi = \varphi^r + i \varphi^i$. Quando φ é um valor constante φ_0 , este termo se torna responsável por gerar um termo de massa para os férmions (*gap*). Fazendo as seguintes transformações de gauge quiral e local na densidade Hamiltoniana (79):

$$\begin{aligned} (a) \quad & \varphi \rightarrow \varphi \exp[2iq\omega] \quad ; \\ (b) \quad & \psi \rightarrow \exp[iq\omega \gamma_J^5] \psi \quad ; \\ (c) \quad & \psi_{\pm} \rightarrow \exp[\pm iq\omega] \psi_{\pm} \quad , \end{aligned} \quad (80)$$

onde q é a carga quiral e ω é uma constante de fase. As condições para a constante ω que assegura a invariância quiral será discutida em maiores detalhes mais adiante.

No intento de manter o termo cinético invariante sobre uma transformação de gauge local, acoplamos um potencial de gauge A que transforma $A \rightarrow A + \nabla \omega$. Assim, a densidade Hamiltoniana de Dirac final, com o potencial de gauge quiral adicional pode ser escrito como:

$$\psi^* K_A \psi = \psi^* \left[\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - q \gamma_J^5 A) + g \beta (\varphi^r - i \gamma_J^5 \varphi^i) \right] \psi \quad , \quad (81)$$

ou ainda,

$$\psi^* K_A \psi = \psi_+ \gamma_5 (\mathbf{p} - q A) \psi_+ + \bar{\psi}_- \gamma_J (\mathbf{p} + q A) \psi_- + g \varphi \bar{\psi}_+ \psi_- + g \varphi^* \bar{\psi}_- \psi_+ \quad , \quad (82)$$

onde q é uma constante de acoplamento descrevendo a carga quiral e as componentes quirais são:

$$\psi_{\pm} = \frac{1}{2} (1 \pm \gamma_J^5) \psi \quad . \quad (83)$$

Como mencionado, este sistema possui uma simetria global em relação ao número de férmions. Consequentemente, a teoria possui uma simetria local quiral $U(1)$ e uma simetria global $U(1)$ para a quantidade de férmions. Em 2+1 dimensões, nenhuma anomalia quiral interfere com a simetria quiral de gauge [16]. Além disto, com o potencial de gauge adicional A , o problema de autovalores de Dirac deste modelo difere do modelo HCM:

$$\left[\boldsymbol{\alpha} \cdot (\mathbf{p} - q \gamma_J^5 A) + g \beta (\varphi^r - i \gamma_J^5 \varphi^i) \right] \psi = E \psi \quad , \quad (84)$$

como $\alpha^3 \equiv R$ anticomuta com a estrutura matricial do lado esquerdo, temos que se, ψ_E é uma autofunção com autovalor E , $R\psi_E$ pertence ao autovalor $-E$ e modos zero de energia podem ser escolhidos como auto-estados de R [30].

Por fim, a densidade lagrangiana para o modelo de Jackiw-Pi pode ser obtida:

$$\mathcal{L}_{JP} = \bar{\psi}_+ \gamma_J^\mu (i D_\mu^+) \psi_+ + \bar{\psi}_- \gamma_J^\mu (i D_\mu^-) \psi_- - g \varphi \bar{\psi}_+ \psi_- - g \varphi^* \bar{\psi}_- \psi_+ , \quad (85)$$

onde,

$$i D_\mu^\pm = i \partial_\mu \mp q A_\mu . \quad (86)$$

Vemos na lagrangiana (85) que os férmions estão acoplados com um campo de gauge quirial, onde a carga quirial muda seu sinal dependendo de qual ponto de Dirac o férmion está próximo. Além disto, os termos de interação desses férmions com a distorção da rede tem uma estrutura tipo acoplamento de Yukawa e acopla férmions que estão próximos aos dois pontos de Dirac.

2.4.2 Extensão do modelo de gauge quirial

Nesta seção, vamos abordar o modelo explorado por T. Frederico *et. al.* [17], no qual o grupo investigou modelos efetivos contínuos para o grafeno no escopo da teoria quântica de campos. Estes modelos incluem um campo escalar complexo e um campo vetorial de gauge. Neste trabalho, diferentes teorias de gauge são consideradas e seus padrões de *gap* para as excitações escalares, vetoriais e fermiônicas mudam de acordo com o grupo de transformações consideradas. Como consequência, estas teorias permitem distinguir teorias de gauge experimentalmente.

Na interpretação do modelo, o campo escalar complexo e o campo de gauge resumem toda a dinâmica das auto-interações da estrutura de carbono e o valor esperado da auto-interação fermiônica. Ademais, a utilização de potenciais escalares e fermiônicos, além de campos de gauge, já vem sido usados para descrever fenômenos tais como distorções da rede, defeitos estruturais, defeitos pontuais e efeitos de auto-dopagem associado com a quebra de simetria elétron/buraco próximo aos pontos de Dirac [31].

O grafeno possui portadores de carga embora seja eletricamente neutro, então é comum associar um campo carregado com a estrutura de carbono. Se o campo escalar resume as auto-interações da estrutura de carbono, ele pode representar a propagação de fônons na rede de carbono. Fônons interagem com os graus de liberdade fermiônicos e assim pode ser acoplado com a densidade de elétrons/buracos da rede, isto é:

$$\bar{\psi}\psi = -(\psi_+^b)^\dagger \psi_-^a - (\psi_+^a)^\dagger \psi_-^b - (\psi_-^a)^\dagger \psi_+^b - (\psi_-^b)^\dagger \psi_+^a ,$$

onde é usada a representação quirial das matrizes de Dirac. Contudo, além do acoplamento escalar, pode ser feito um acoplamento pseudo-escalar, descrito por:

$$\bar{\psi}\gamma_5\psi = -(\psi_+^b)^\dagger \gamma_5\psi_-^a - (\psi_+^a)^\dagger \gamma_5\psi_-^b - (\psi_-^a)^\dagger \gamma_5\psi_+^b - (\psi_-^b)^\dagger \gamma_5\psi_+^a ,$$

onde vale destacar que as interações escalares e pseudo escalares acoplam com as sub-redes triangulares e aos dois pontos de Dirac de formas diferentes.

Neste modelo, assume-se que os portadores de cargas são férmions relativísticos sem massa descrito por um spinor de quatro componentes. A densidade lagrangiana da interação entre férmions e campos escalares pode ser escrita como:

$$\mathcal{L}_0 = \bar{\psi}i\gamma^\mu\partial_\mu\psi + \partial^\mu\varphi^\dagger\partial_\mu\varphi - P(\varphi^\dagger, \varphi)\bar{\psi}\psi - P_5(\varphi^\dagger, \varphi)\bar{\psi}\gamma_5\psi - V(\varphi^\dagger, \varphi) , \quad (87)$$

onde os polinômios $P(\varphi^\dagger, \varphi)$ e $P_5(\varphi^\dagger, \varphi)$ definem as interações entre os férmions e a estrutura de carbono. A liberdade sobre a combinação linear destes termos permitirá definir diferentes acoplamentos para cada uma das quiralidades fermiônicas possíveis. Os polinômios escalar e pseudo-escalar são:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad P(\varphi^\dagger, \varphi) &= g_1(\varphi + \varphi^\dagger) + g_2\varphi^\dagger\varphi ; \\ \text{(b)} \quad P_5(\varphi^\dagger, \varphi) &= h_1(\varphi - \varphi^\dagger) + ih_2\varphi^\dagger\varphi \end{aligned} \quad (88)$$

e o potencial V define as auto-interações da estrutura:

$$V(\varphi^\dagger, \varphi) = \mu^2(\varphi^\dagger\varphi) + \frac{\lambda_4}{2}(\varphi^\dagger\varphi)^2 + \frac{\lambda_6}{3}(\varphi^\dagger\varphi)^3 + \frac{\lambda_8}{4}(\varphi^\dagger\varphi)^4 , \quad (89)$$

onde o termo de quarta ordem do bilinear do campo escalar não aparece no modelo original do artigo e o introduzimos no intento de estudar os efeitos que esta interação pode provocar.

A energia potencial para o campo complexo pode acomodar valores esperados no vácuo $\langle\varphi\rangle$. Se o valor esperado for diferente de zero, então o modelo pode gerar massa fermiônica por quebra espontânea de simetria [17]. Por outro lado, se o valor esperado for nulo $\langle\varphi\rangle=0$, então os elétrons no grafeno continuam sem abertura de *gap* no seu espectro de energia. Então, podemos identificar o grafeno no estado puro quando $\langle\varphi\rangle=0$ e logo, por exemplo, ao sofrer uma distorção mecânica em sua estrutura, o valor esperado passa a ser diferente de zero.

Fazemos as seguintes transformações quirais, usadas por Jackiw-Pi:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \psi &\rightarrow e^{i\omega\gamma_5}\psi ; \\ \text{(b)} \quad \varphi &\rightarrow e^{i\eta}\varphi , \end{aligned}$$

que, para primeira ordem em ω e η , obtemos os seguintes termos extras na lagrangiana (87):

$$[2i\omega P_5(\varphi^\dagger, \varphi) + i\eta g_1(\varphi - \varphi^\dagger)]\bar{\psi}\psi + [2i\omega P(\varphi^\dagger, \varphi) + i\eta h_1(\varphi + \varphi^\dagger)]\bar{\psi}\gamma_5\psi \quad ,$$

que para mantermos sua invariância, podemos definir $g_2 = h_2 = 0$, $g_l = \pm h_l$ e $\eta = \pm 2\omega$. Estas transformações definem um grupo U(1) no qual dizemos que a lagrangiana é invariante sobre esse grupo desde que estas condições sejam satisfeitas. Quando o sinal é negativo para g_l e η , voltamos na teoria original de Jackiw-Pi descrita na seção anterior. Além disto, para $h_1 = h_2 = g_2 = 0$, $\varphi^\dagger = \varphi$, $V = 0$ e $g_l = g/2$, voltamos a lagrangiana (53) da interação entre férmions e bósons com acoplamento tipo Yukawa.

2.4.3 Modelo de fônons para o grafeno com inserção de termos anarmônicos

No trabalho de Katsnelson *et al.* [18] é investigado a estabilidade da rede de membranas cristalinas 2D em baixas temperaturas, tal como o grafeno. O grupo discute que o impacto das corrugações nas propriedades mecânicas do grafeno é um objeto de enorme interesse, onde ondulações tem sido medidas no grafeno, embora ainda não é bem sabido, do ponto de vista experimental, se essas ondulações são devidas às condições térmicas do material ou às deformações de sua estrutura [18]. Uma vez que a membrana cristalina é um sistema fortemente anarmônico, seus efeitos devem ser levados em conta mesmo em uma aproximação quase-anarmônica. Contudo, estes efeitos tem sido quase que exclusivamente investigados em um regime clássico. No limite quântico, o acoplamento anarmônico entre os modos da rede fora e dentro do plano possui consequências diferentes do regime clássico.

Desta maneira, começamos nossa análise para uma teoria clássica de membranas cristalinas elásticas e finas. Os fônons da membrana podem ser expressas em termos de um campo vetorial no plano 2D \vec{u} e um campo escalar fora do plano h . A densidade lagrangiana para este sistema é:

$$\mathcal{L}[\vec{u}, h] = \mathcal{L}_h^0[h] + \mathcal{L}_u^0[\vec{u}] + \mathcal{L}_{\text{int}}^{(3)}[\vec{u}, h] + \mathcal{L}_{\text{int}}^{(4)}[h] \quad , \quad (90)$$

onde, $\mathcal{L}_h^0[h]$ e $\mathcal{L}_u^0[\vec{u}]$ são as densidades lagrangianas quadráticas para os campos fora e dentro do plano,

$$(a) \quad \mathcal{L}_h^0[h] = \frac{1}{2}\rho\dot{h}^2 + \frac{1}{2}\kappa(\partial^2 h)^2 \quad ;$$

$$(b) \quad \mathcal{L}_u^0[\vec{u}] = \frac{1}{2}\rho\dot{\vec{u}}^2 + \frac{1}{2}\Gamma^{ijkl}\partial_i u_j \partial_k u_l \quad . \quad (91)$$

Os dois últimos termos, $\mathcal{L}_{\text{int}}^{(3)}[\vec{u}, h]$ e $\mathcal{L}_{\text{int}}^{(4)}[h]$ são os termos anarmônicos. $\mathcal{L}_{\text{int}}^{(3)}[\vec{u}, h]$ contém interações cúbicas entre os modos fora e dentro do plano. enquanto que $\mathcal{L}_{\text{int}}^{(4)}[h]$ leva em conta interações quárticas locais para o campo fora do plano. Explicitamente:

$$\begin{aligned}
\text{(a)} \quad \mathcal{L}_{\text{int}}^{(3)}[\vec{u}, h] &= \frac{1}{2} \Gamma^{ijkl} \partial_i u_j (\partial_k h \partial_l h) \quad ; \\
\text{(b)} \quad \mathcal{L}_{\text{int}}^{(4)}[h] &= \frac{1}{8} \Gamma^{ijkl} (\partial_i h \partial_j h) (\partial_k h \partial_l h) \quad .
\end{aligned} \tag{92}$$

Nestas expressões, ρ é a densidade de massa, κ é a constante de rigidez da rede e o tensor elástico Γ é:

$$\Gamma^{ijkl} = \lambda (\delta^{ij} \delta^{kl}) + \mu (\delta^{ik} \delta^{jl} + \delta^{il} \delta^{jk}) \quad ,$$

onde μ e λ são os coeficientes de Lamé. Os índices latinos (i, j, \dots) denotam as coordenadas espaciais x e y , além de que, vale a regra para índices repetidos, os quais possuem uma soma implícita.

Na aproximação clássica, ambos termos anarmônicos são relevantes. A inclusão do último termo é necessário para que a ação tenha um limite inferior na ação e, conseqüentemente, que a teoria tenha um estado fundamental bem definido.

Um termo devido à parte eletrônica pode ser adicionada na lagrangiana cuja forma é apresentada por F. Guinea *et al* [19], em um trabalho que investiga os efeitos de corrugações no grafeno. Nesse artigo, é analisado o campo de gauge induzido pela altura das flutuações de uma camada de grafeno na presença de um substrato, isto é, o campo induzido pela mudança dos modos descritos pelo vetor fora do plano h . Contudo, nesse trabalho é apresentado a forma hamiltoniana que representa o sistema, logo, usamos a versão lagrangiana como no trabalho de Katsnelson *et al.* [18]. Assim, adicionamos à lagrangiana (90) o termo devido à contribuição eletrônica:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{\text{elet}} &= v_F \bar{\psi}_1 [\sigma_x (-i \partial_x - A_x) + \sigma_y (-i \partial_y - A_y)] \psi_1 - \\
&\quad - v_F \bar{\psi}_2 [\sigma_x (-i \partial_x + A_x) + \sigma_y (-i \partial_y + A_y)] \psi_2 \quad ,
\end{aligned} \tag{93}$$

onde ψ_1 e ψ_2 são os dois spinores de Dirac que descrevem os pontos inequivalentes da rede hexagonal de Brillouin. O campo de gauge acopla com sinal oposto com as duas espécies de férmions de Dirac e está relacionado com as componentes do campo vetorial \vec{u} e o campo h do seguinte modo:

$$\begin{aligned}
\text{(a)} \quad A_x &= \frac{\beta}{a} \left[\partial_x u_x - \partial_y u_y + \frac{1}{2} (\partial_x h)^2 - \frac{1}{2} (\partial_y h)^2 \right] \quad ; \\
\text{(b)} \quad A_y &= -\frac{\beta}{a} \left[\partial_y u_x + \partial_x u_y + (\partial_x h) (\partial_y h) \right] \quad .
\end{aligned} \tag{94}$$

Além disto, a é o comprimento da ligação entre dois átomos vizinhos de carbono, β é um parâmetro adimensional que caracteriza o acoplamento entre os elétrons de Dirac e as

deformações da rede (seu valor é aproximadamente de 2 a 3), v_F é a velocidade de Fermi, $v_F = 3ta/2$, onde $t \sim 3 eV$, $\kappa \sim 1 eV$ e os coeficientes de Lamé, $\lambda, \mu \sim 1 eV \text{ \AA}^2$ [19].

Portanto, a lagrangiana total que descreve o sistema é:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2}\rho\dot{h}^2 + \frac{1}{2}\kappa(\partial^2 h)^2 + \frac{1}{2}\Gamma^{ijkl}\partial_i u_j \partial_k u_l + \frac{1}{2}\Gamma^{ijkl}\partial_i u_j (\partial_k h \partial_l h) + \\ & + \frac{1}{8}\Gamma^{ijkl}(\partial_i h \partial_j h)(\partial_k h \partial_l h) + v_F \bar{\psi}_1 [\sigma_x(-i\partial_x - A_x) + \sigma_y(-i\partial_y - A_y)] \psi_1 - \\ & - v_F \bar{\psi}_2 [\sigma_x(-i\partial_x + A_x) + \sigma_y(-i\partial_y + A_y)] \psi_2. \end{aligned} \quad (95)$$

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo, apresentamos os resultados obtidos ao derivar modelos efetivos para férmions. Começamos com um sistema em d dimensões de férmions e bósons com acoplamento tipo Yukawa. Neste caso, vemos que podemos obter uma teoria apenas para o campo auxiliar da transformação e o comparamos com os resultados da Seção 2.3 em que o campo escalar físico aparece explicitamente. Inferimos que o campo auxiliar se comporta de maneira análoga ao campo escalar físico e logo, as equações de *gap* tem o mesmo comportamento. Desta forma, usamos métodos numéricos para soluções destas equações e analisamos o padrão da massa fermiônica gerada por quebra de simetria e comparamos esse sistema com o modelo de Gross-Neveu.

Em seguida, usamos as transformações de Hubbard-Stratonovich para derivar teorias efetivas para os férmions no intento de eliminar termos de auto-interações de ordens mais altas. Aplicamos esse método para os modelos apresentados, que descrevem características quirais e dos fônons do grafeno. Em todos os casos, determinamos as relações dos campos auxiliares com os campos físicos. Comparamos os resultados entre si e com o potencial de Coulomb e derivamos as equações de *gap* para os campos presentes no sistema.

Por fim, procuramos entender como são as interações efetivas induzidas na superfície do grafeno e discutimos as perspectivas do trabalho em relação aos resultados obtidos.

3.1 Modelo efetivo para interações tipo Yukawa

Nesta seção estudamos as interações tipo Yukawa para d dimensões. Começamos derivando as equações de *gap* para o campo escalar físico da Seção 2.3 em torno de um ponto constante. Em seguida, simulamos as curvas deste campo em função de um *cut-off* covariante e discutimos os resultados. Em seguida, fazemos o oposto da teoria e buscamos eliminar os graus de liberdade bosônicos, de tal modo que obtemos uma teoria para os férmions. Vemos que, para este caso, é possível usar as transformações de Hubbard-Stratonovich de maneira a eliminar os graus de liberdade fermiônicos e obter uma teoria efetiva que depende apenas do campo escalar auxiliar. Comparamos esta teoria efetiva com aquela para o campo escalar físico e notamos o mesmo comportamento. Portanto, analisamos os resultados obtidos em paralelo com o trabalho de Gross-Neveu para interações quárticas.

3.1.1 Equações de gap

Na Seção 2.3 foi derivada a ação efetiva para o setor bosônico da teoria com acoplamento tipo Yukawa. Aqui, vamos calcular as equações de *gap*, a fim de determinar o estado fundamental da teoria. Para isto, negligenciamos quaisquer termos de auto-interação do campo bosônico e consideramos apenas o termo da ordem do operador W da expansão do logaritmo. Assim, a partir da lagrangiana (62) e da expansão (66), podemos escrever a ação efetiva como:

$$S_\phi = \int d^d x \left[-\frac{1}{2} \phi D \phi + \frac{i}{2} \text{Tr}(DW) \right] \quad (96)$$

e aplicando o resultado para o $\text{Tr}(DW)$, expressão (70):

$$S_\phi = -\frac{1}{2} \int d^d x (\phi D \phi) + \frac{i}{2} \left[\alpha g \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2 - m_0^2} \int d^d x [g(\phi^2 - \phi_0^2) + 2m_e(\phi - \phi_0)] \right]. \quad (97)$$

Minimizando a ação efetiva em relação a um campo $\phi(z)$,

$$\frac{\delta S_\phi}{\delta \phi(z)} = 0$$

(mais detalhes sobre derivação funcional são encontrados no Apêndice F), temos que:

$$-\int d^d x D \phi(x) \delta^d(x-z) + F(\Lambda) \int d^d x [2g\phi(x) + 2m_e] \delta^d(x-z) = 0, \quad ,$$

onde separamos a função $F(\Lambda)$ na qual a regularizaremos pela inserção de um *cut-off* covariante Λ :

$$F(\Lambda) = \frac{i}{2} \alpha g \int_0^\Lambda \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2 - m_0^2}. \quad (98)$$

Por fim, aplicamos a função em um ponto onde o campo é um valor constante ϕ_0 :

$$\phi(z) = \int d^d x \phi(x) \delta^d(x-z) \approx \phi_0$$

e a equação do *gap* fica:

$$-m^2 \phi_0 + 2F(\Lambda)[m_e + g\phi_0] = 0. \quad (99)$$

Vemos nesta equação um termo constante $-m^2\phi_0$ e um termo que depende da regularização da integral no espaço do momento – e que será diferente para cada dimensão do espaço – multiplicada pela massa do férmion acrescida de um valor $g\phi_0$. O termo entre colchetes indica uma massa efetiva para o férmion devido ao campo ϕ_0 .

Falta apenas determinar o valor da função $F(\Lambda)$ para cada dimensão do espaço. Como discutido, a integral que aparece no momento diverge e a regularizaremos, para todas dimensões, inserindo um limite superior de integração. Ainda assim, para resolver essas

integrals são necessários outros dois truques matemáticos. O primeiro consiste em fazer uma mudança de espaço, mais especificamente, do espaço de Minkowski para o espaço Euclidiano. E no segundo, fazemos uma mudança de coordenadas, parametrizando em uma d-esfera:

$$F(\Lambda) = \frac{1}{(2\pi)^d} \frac{i}{2} \alpha g \int d^d k \frac{1}{k^2 - m_0^2} = -\frac{\alpha g}{2^{d+1} \pi^d} \int d\Omega \int dk_E \frac{k_E^{d-1}}{k_E^2 + m_0^2} \quad (100)$$

A primeira integral em $d\Omega$ consiste no ângulo sólido da d-esfera e a segunda integral, refere-se ao raio k_E . Os valores das integrais de ângulo sólido e das integrais de k_E são mostrados na Tabela 2 e o resultado para as funções $F(\Lambda)$ na Tabela 3:

Tabela 2 – Integrais de ângulo sólido e das integrais de k_E para cada dimensão.

<i>Dimensão</i>	$\int d\Omega$	<i>Integral de k_E</i>
3+1	$2\pi^2$	$\int dx \frac{x^3}{x^2+a^2} = \frac{1}{2} [x^2 - a^2 \ln(a^2+x^2)] + C$
2+1	4π	$\int dx \frac{x^2}{x^2+a^2} = x - a \tan^{-1}\left(\frac{x}{a}\right) + C$
1+1	π	$\int dx \frac{x}{x^2+a^2} = \frac{1}{2} \ln(a^2+x^2) + C$

Tabela 3 – Resultado das funções $F(\Lambda)$ para cada dimensão.

<i>Dimensão</i>	$\int d\Omega$
3+1	$-\frac{g}{8\pi^2} \left[\Lambda^2 - m_0^2 \ln\left(1 + \frac{\Lambda^2}{m_0^2}\right) \right]$
2+1	$-\frac{g}{2\pi^2} \left[\Lambda - m_0 \tan^{-1}\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) \right]$
1+1	$-\frac{g}{4\pi} \ln\left(1 + \frac{\Lambda^2}{m_0^2}\right)$

Desta maneira, a equação de *gap* (99) para cada dimensão fica:

$$\begin{aligned}
 [d=4] \quad m^2 \phi_0 + \frac{g m_0}{4\pi^2} \left[\Lambda^2 - m_0^2 \ln\left(1 + \frac{\Lambda^2}{m_0^2}\right) \right] &= 0 \\
 [d=3] \quad m^2 \phi_0 + \frac{g m_0}{\pi^2} \left[\Lambda - m_0 \tan^{-1}\left(\frac{\Lambda}{m_0}\right) \right] &= 0
 \end{aligned} \quad (101)$$

$$[d = 2] \quad m^2 \phi_0 + \frac{g m_0}{2\pi} \ln \left(1 + \frac{\Lambda^2}{m_0^2} \right) = 0$$

onde definimos a massa efetiva: $m_0 = m_e + g\phi_0$.

Evidentemente, vemos que independente da dimensão, há um termo constante e outro termo que depende do *cut-off* covariante e da massa efetiva dos férmions. Analisamos estas equações de *gap*, que são transcendentais, através de métodos numéricos. O programa utilizado para calcular os valores das equações transcendentais foi o Wolfram Mathematica 9, cujo código está mostrado no Apêndice G, e os gráficos foram feitos no Origin 8.5. Para todos os casos, a massa inicial do férmion foi mantida constante igual a 5 KeV, enquanto que a massa do bóson foi fixada, inicialmente, menor que a massa do férmion (1 KeV) e posteriormente maior que a massa do férmion (10 KeV). A constante de acoplamento g foi definida igual a uma unidade e variamos o *cut-off* de 0 a 1000 KeV. Os gráficos do campo ϕ_0 em função do *cut-off* Λ para cada dimensão são apresentados na figura a seguir:

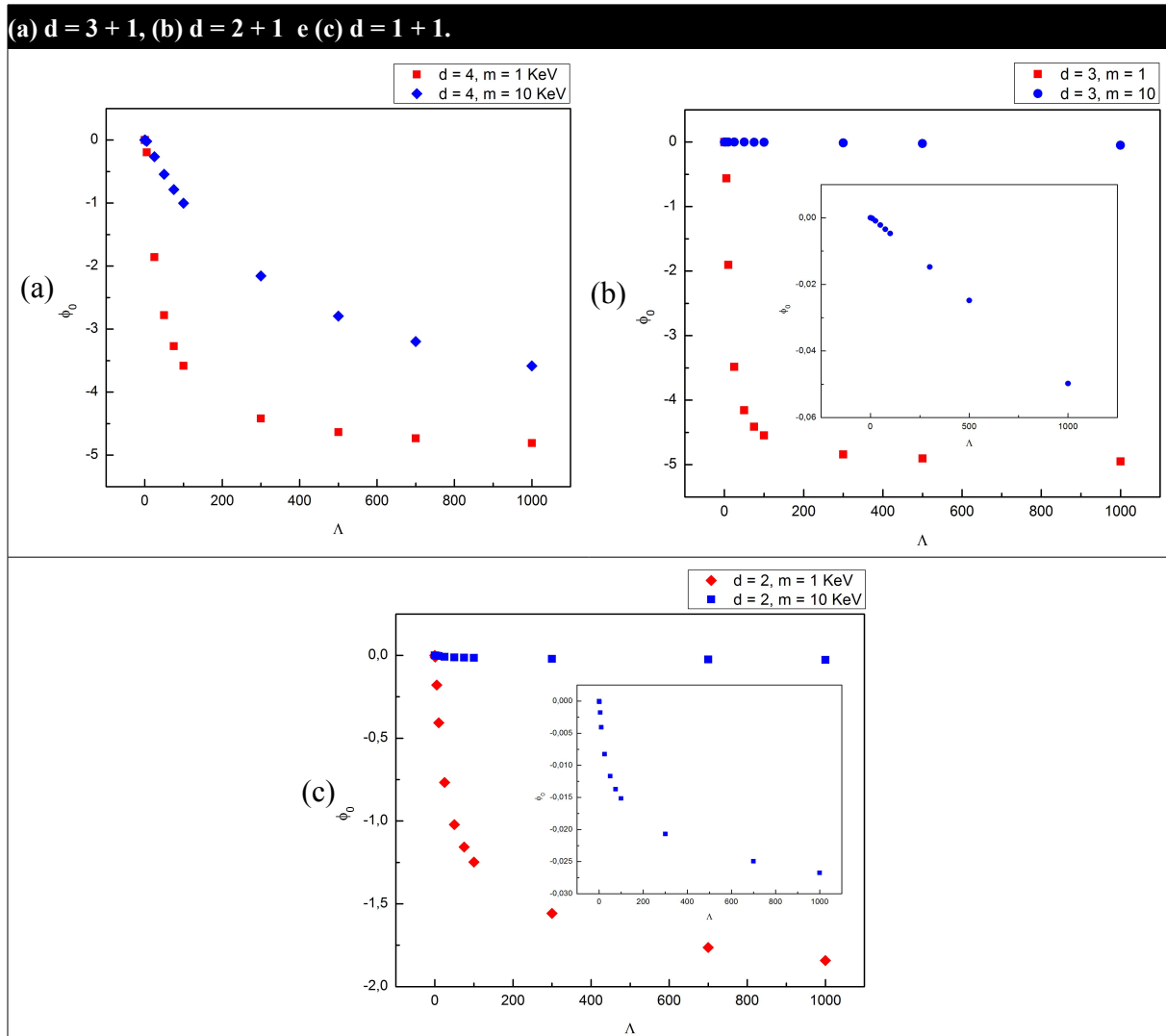


Figura 2 – Gráficos do campo ϕ_0 em função de um *cut-off* para $g = 1$. (a) $d = 3+1$, (b) $d = 2+1$ e (c) $d = 1+1$.

A primeira consequência que podemos inferir dos gráficos é que devido a constante de acoplamento ser positiva e o campo ϕ_0 negativo, a massa efetiva dos férmions diminui com o aumento do *cut-off*. Também é facilmente verificável que quando a massa do férmion é maior que a massa do bóson, a variação da massa fermiônica devido ao campo ϕ_0 é mais intensa. Evidentemente, das equações (101), vemos que no limite em que o *cut-off* é zero, não há nenhuma mudança na massa fermiônica efetiva e também que, a função $\phi_0(\Lambda)$ é assintótica em $\phi_0 = -5 \text{ KeV}$. Este último ponto é consequência do fato de que a massa inicial fermiônica é de 5 KeV e caso, $\phi_0 > 5 \text{ KeV}$, fisicamente, o férmion não pode perder um valor de massa maior que sua própria massa.

3.1.2 Teoria efetiva para os férmions

O funcional gerador para o acoplamento de Yukawa, até o momento, foi calculado eliminando os graus de liberdades fermiônicos e logo, obtemos um modelo efetivo para os bósons. Neste trabalho, estamos interessados em eliminar os graus de liberdade bosônicos, de tal maneira que derivamos uma teoria efetiva para os férmions. Da lagrangiana (53), integramos os graus de liberdade dos bósons e, portanto, o funcional gerador resultante é:

$$Z_{\bar{\psi}\psi} = N \int D[\bar{\psi}, \psi] \exp \left\{ i \int d^d x \left[\bar{\psi} S_0^{-1} \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi + \frac{1}{2} g^2 \bar{\psi} \psi D^{-1} \bar{\psi} \psi \right] \right\} \quad (102)$$

e assim como na teoria efetiva para os bósons, podemos definir as fontes dos campos escalares iguais a zero, lembrando que agora, desistimos de obter informações explícitas das interações dos bósons na ação efetiva, isto é, não estamos interessados nos diagramas de Feynman com bósons nas linhas externas. Assim obtemos uma teoria que depende apenas dos graus de liberdade fermiônicos explicitamente, cuja ação efetiva é:

$$S_{\bar{\psi}\psi} = \int d^d x \left[\bar{\psi} S_0^{-1} \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi + \frac{1}{2} g^2 \bar{\psi} \psi D^{-1} \bar{\psi} \psi \right]. \quad (103)$$

Observamos que o último termo que aparece na ação efetiva é uma interação quártica entre férmions mediada pelo inverso do operador de Klein-Gordon. Esta ação é análoga para a ação do modelo de Gross-Neveu para $1+1$ dimensões, onde há uma interação quártica entre os férmions, lagrangiana (42). A diferença é, de fato, a presença do operador de acoplamento D^{-1} , que aparece devido à inclusão do termo cinético do campo bosônico na lagrangiana (53). Podemos dizer, então, que o modelo de Gross-Neveu é um caso particular do modelo estudado desconsiderando da lagrangiana original, a parte livre do campo escalar. Ou então,

consiste em adicionar na lagrangiana (42) um termo $-\phi^2/2$ e quantizar o campo bosônico. Este fato está de acordo com a afirmação de Gross-Neveu de que a interação tipo Yukawa, quando o campo bosônico da interação é quantizado, resulta os mesmos efeitos que um sistema fermiônico com interação quártica [27].

Assim como foi mostrado para a teoria de Gross-Neveu ao eliminar o termo quártico, podemos eliminar o termo quártico na presença do operador de acoplamento D^{-1} de (103) através de uma transformação de Hubbard-Stratonovich adequada. Para isto, inserimos um campo escalar auxiliar tal que:

$$1 = N_0 \int \mathcal{D}\varphi \exp \left[-\frac{i}{2} \int d^d x (D\varphi^2) \right] \quad (104)$$

e fazemos o seguinte deslocamento no campo:

$$\varphi \rightarrow \varphi + c D^{-1} \bar{\psi} \psi ,$$

onde c é uma constante arbitrária. Desta forma,

$$1 = N_0 \int \mathcal{D}[\varphi] \exp \left\{ -\frac{i}{2} \int d^d x [D\varphi^2 + 2c \varphi \bar{\psi} \psi + c^2 \bar{\psi} \psi D^{-1} \bar{\psi} \psi] \right\}$$

e incluímos esta identidade no funcional gerador, obtendo:

$$Z = N \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, \varphi] \exp \left[i \int d^d x \mathcal{L}(\bar{\psi}, \psi, \varphi) \right] ,$$

onde,

$$\mathcal{L}_{\bar{\psi}, \psi} = \bar{\psi} S_0^{-1} \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi + \frac{1}{2} g^2 \bar{\psi} \psi D^{-1} \bar{\psi} \psi - \frac{1}{2} D \varphi^2 - c \varphi \bar{\psi} \psi - \frac{1}{2} c^2 \bar{\psi} D^{-1} \bar{\psi} \psi$$

e estabelecemos a condição arbitrária $c = g$ e, portanto,

$$Z = N \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, \varphi] \exp \left[i \int d^d x \bar{\psi} (S_0^{-1} - g \varphi) \psi + \bar{\psi} \eta + \bar{\eta} \psi - \frac{1}{2} D \varphi^2 \right] . \quad (105)$$

Integrando os férmions e fazendo as fontes fermiônicas iguais a zero, temos uma teoria onde apenas o campo auxiliar φ é explicitado:

$$Z = N \det^{-1/2}[iD] \int \mathcal{D}[\varphi] \det[-iS^{-1}] \exp \left[i \int d^d x -\frac{1}{2} D \varphi^2 \right] , \quad (106)$$

onde,

$$S^{-1} = i \gamma^\mu \partial_\mu - m_\varphi ;$$

$$m_\varphi = m_e + g \varphi ,$$

análoga à equação (56) e assim, obtemos uma teoria efetiva para o campo auxiliar cuja ação efetiva é:

$$S_\varphi = - \int d^d x \left[i \operatorname{tr} \ln(-iS^{-1}) + \frac{1}{2} \varphi D \varphi \right] . \quad (107)$$

Pelas mesmas razões discutidas na Seção 2.3, definimos o valor constante ϕ_0 , invariante por translações, no intento de dar ao potencial efetivo um ponto de mínimo constante. Logo, subtraímos a ação correspondente pela correção devido à ϕ_0 . Definindo,

$$m_0 = m_e + g \phi_0$$

temos que,

$$\mathcal{L}_\phi = -\frac{1}{2} \varphi D \varphi - i \text{tr} \ln \left[-i \left(i \gamma^\mu \partial_\mu - m_\phi \right) \right] + i \text{tr} \ln \left[-i \left(i \gamma^\mu \partial_\mu - m_0 \right) \right],$$

ou ainda,

$$\mathcal{L}_\phi = -\frac{1}{2} \varphi D \varphi - i \text{tr} \ln \left[\frac{i \gamma^\mu \partial_\mu - m_\phi}{i \gamma^\mu \partial_\mu - m_0} \right] = -\frac{1}{2} \varphi D \varphi - \frac{i}{2} \text{tr} \ln \left[1 + \frac{m_\phi^2 - m_0^2 - i g \gamma_\mu \partial^\mu \varphi}{\partial^2 + m_0^2} \right] \quad (108)$$

que tem exatamente a mesma forma da lagrangiana na equação (61), onde a menos do potencial $V(\phi)$, basta trocar $\phi \rightarrow \varphi$. Portanto aqui temos uma teoria efetiva para o campo escalar auxiliar, onde todos os graus de liberdade físicos do sistema foram eliminados explicitamente. Logo, temos uma equivalência entre os modelos efetivos do campo bosônico físico e do campo bosônico auxiliar e, por consequência, todos os resultados obtidos para as equações de *gap*, independentemente da dimensão, são exatamente os mesmos. Em outras palavras, embora o campo auxiliar escalar não representa uma quantidade física no modelo original, faz o mesmo papel do campo bosônico quando os graus de liberdade fermiônicos são eliminados.

3.2 Transformação de Hubbard-Stratonovich ao modelo de gauge quiral

Nesta seção apresentamos os resultados obtidos ao usar as transformações de Hubbard-Stratonovich no modelo de T. Frederico *et al* [17]. Inicialmente, introduzimos campos auxiliares para eliminar os termos de auto-interações do campo bosônico de quarta, sexta e oitava ordem. Em seguida, verificamos o limite em que a ação efetiva encontrada se reduz ao modelo de Jackiw-Pi. Mostramos que é possível, para este caso específico, eliminar também os graus de liberdade fermiônicos e assim, encontrar uma teoria efetiva apenas para os campos auxiliares. E, por fim, encontramos também uma ação efetiva para o setor bosônico.

3.2.1 Inserção de campos auxiliares ao modelo

Começamos esta seção reescrevendo a lagrangiana do modelo de modo mais explícito para 2+1 dimensões. Das equações (87-89), temos:

$$\mathcal{L}_0 = \bar{\psi} i \gamma^\mu \partial_\mu \psi + \partial^\mu \varphi^\dagger \partial_\mu \varphi - [g_1(\varphi + \varphi^\dagger) + g_2 \varphi^\dagger \varphi] \bar{\psi} \psi - [h_1(\varphi - \varphi^\dagger) + i h_2 \varphi^\dagger \varphi] \bar{\psi} \gamma_5 \psi - \mu^2(\varphi^\dagger \varphi) - \frac{\lambda_4}{2}(\varphi^\dagger \varphi)^2 - \frac{\lambda_6}{3}(\varphi^\dagger \varphi)^3 - \frac{\lambda_8}{4}(\varphi^\dagger \varphi)^4 \quad (109)$$

Uma vez que estamos interessados em teorias efetivas para os férmions, integrar os graus de liberdade bosônicos torna-se necessário. Contudo, a presença dos termos de auto-interação dos bósons de segunda ordem e superiores, torna a integração inviável do ponto de vista algébrico. Para contornar o problema, fazemos duas transformações de Hubbard-Stratonovich, isto é, inserimos dois campos auxiliares escalares, ϕ e χ , que serão responsáveis por eliminar os termos de auto-interação de ordens mais altas. Os campos auxiliares e os deslocamentos de cada um deles são:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad 1 &= N_1 \int \mathcal{D}\phi \exp\left[-\frac{i}{2} \int d^3x (\phi^2)\right], \quad \phi \rightarrow \phi - a \varphi^\dagger \varphi, \\ \text{(b)} \quad 1 &= N_2 \int \mathcal{D}\chi \exp\left[-\frac{i}{2} \int d^3x (\chi^2)\right], \quad \chi \rightarrow \chi - b(\varphi^\dagger \varphi)^2 - c(\varphi^\dagger \varphi). \end{aligned} \quad (110)$$

Ao incluir estes termos no funcional gerador da teoria original, passamos a ter uma teoria com dois campos físicos e dois campos auxiliares. O funcional gerador pode então ser reescrito como:

$$Z_1 = N \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, \varphi^\dagger, \varphi, \phi, \chi] \exp\left[i \int d^3x \mathcal{L}_1(\bar{\psi}, \psi, \varphi^\dagger, \varphi, \phi, \chi)\right],$$

onde,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_1(\bar{\psi}, \psi, \varphi^\dagger, \varphi, \phi, \chi) &= \bar{\psi} i \gamma^\mu \partial_\mu \psi + \partial^\mu \varphi^\dagger \partial_\mu \varphi - \mu^2 \varphi^\dagger \varphi - P(\varphi) \bar{\psi} \psi - P_5(\varphi) \bar{\psi} \gamma_5 \psi \\ &\quad - (\mu^2 - a\phi - c\chi)(\varphi^\dagger \varphi) - (2b\chi - a^2 - c^2)(\varphi^\dagger \varphi)^2 - \left(\frac{\lambda_6}{3} + bc\right)(\varphi^\dagger \varphi)^3 \\ &\quad - \left(\frac{\lambda_8}{4} + \frac{b^2}{2}\right)(\varphi^\dagger \varphi)^4 - \frac{1}{2}(\phi^2 + \chi^2) \end{aligned} \quad (111)$$

e desta equação vemos as condições necessárias para eliminarmos os termos de auto-interações de ordens mais altas:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \lambda_8 + 2b^2 = 0 &\rightarrow b = i\sqrt{\frac{\lambda_8}{2}}, \\ \text{(b)} \quad \lambda_6 + 3bc = 0 &\rightarrow c = i\sqrt{\frac{2\lambda_6^2}{9\lambda_8}}, \\ \text{(c)} \quad a(\chi) = [2b\chi - c^2 - \lambda_4]^{1/2} &\rightarrow a(\chi) = \left[2i\sqrt{\frac{\lambda_8}{2}}\chi - \frac{2\lambda_6^2}{9\lambda_8} - \lambda_4\right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (112)$$

logo, as constantes oriundas dos deslocamentos dos campos auxiliares são determinadas em função das constantes λ_i presentes no potencial $V(\phi)$ e do campo χ . Definimos também um termo efetivo μ_1 :

$$\mu_1^2 = \mu^2 + \mu_0^2(\phi, \chi) = \mu^2 - a(\chi)\phi - c\chi \quad . \quad (113)$$

Com estas condições, podemos reescrever a densidade lagrangiana (111) de forma mais simples:

$$\mathcal{L}_1 = \bar{\psi} i \gamma^\mu \partial_\mu \psi - \varphi^\dagger (\partial^2 + \mu_1^2) \varphi - P(\varphi) \bar{\psi} \psi - P_5(\varphi) \bar{\psi} \gamma_5 \psi - \frac{1}{2}(\phi^2 + \chi^2) \quad , \quad (114)$$

na qual, para o termo cinético do campo escalar complexo, fizemos uma integração por partes eliminando os termos de superfície e assim, vemos uma mudança na estrutura do propagador para este campo, onde temos o termo efetivo μ_1 . E, como esperado, os termos de ordens mais altas de auto-interação do campo bosônico foram eliminados.

Neste momento, é bastante importante determinar qual a relação dos campos auxiliares com os campos físicos. Para isto, minimizamos a ação efetiva referente a lagrangiana (114) com respeito aos campos auxiliares e obtemos:

$$\begin{aligned} \text{a) } \frac{\delta S_{ef}}{\delta \phi} = 0 &\rightarrow \phi = a \varphi^\dagger \varphi \quad , \\ \text{b) } \frac{\delta S_{ef}}{\delta \chi} = 0 &\rightarrow \chi = b (\varphi^\dagger \varphi)^2 + c \varphi^\dagger \varphi \quad . \end{aligned} \quad (115)$$

Naturalmente, as relações obtidas para os campos auxiliares estão de acordo com os deslocamentos propostos.

3.2.2 Teoria efetiva para férmions

A lagrangiana na expressão (114) permite a integração dos graus de liberdade bosônicos. Para ficar mais evidente a forma gaussiana da lagrangiana, a escrevemos da seguinte maneira:

$$\mathcal{L}_1 = \bar{\psi} S_0^{-1} \psi - \varphi^\dagger D_1 \varphi + \varphi^\dagger (h_1 \bar{\psi} \gamma_5 \psi - g_1 \bar{\psi} \psi) + \varphi (-h_1 \bar{\psi} \gamma_5 \psi - g_1 \bar{\psi} \psi) - \frac{1}{2}(\phi^2 + \chi^2) \quad , \quad (116)$$

onde por simplicidade, definimos

$$\begin{aligned} \text{(a) } S_0^{-1} &= i \gamma_\mu \partial^\mu \quad ; \\ \text{(b) } D_1 &= \partial^2 + \mu_1^2 + i h_2 \bar{\psi} \gamma_5 \psi + g_2 \bar{\psi} \psi \end{aligned} \quad (117)$$

e então, fazemos a integração e obtemos a lagrangiana efetiva para os campos fermiônicos:

$$\mathcal{L}_{\bar{\psi},\psi} = i \operatorname{tr} \ln(-D_1) + \bar{\psi} S_0^{-1} \psi + h_1^2 \bar{\psi} \gamma_5 \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi - g_1^2 \bar{\psi} \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \psi - \frac{1}{2}(\phi^2 + \chi^2) \quad , \quad (118)$$

onde o primeiro termo depende de interações fermiônicas e que serão discutidas com mais detalhes a seguir e o segundo termo é a parte cinética do campo de Dirac sem massa. Já no terceiro termo aparece interações de bilineares de férmions pseudo-escalares mediada pelo inverso do propagador D_l . O quarto termo aparece devido às interações do campo fermiônico com o campo bosônico acoplados tipo Yukawa, conforme visto na seção anterior. E, por fim, o último termo leva em conta a parte livre dos campos auxiliares.

Por fim, expandimos agora o logaritmo do operador D_l e para isto escrevemos:

$$\operatorname{tr} \ln[D_1] = \operatorname{tr} \ln[M(1 + i h_2 M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi + g_2 M^{-1} \bar{\psi} \psi)] \equiv \operatorname{tr} [\ln(M) + \ln(1 + X)] \quad ,$$

onde, $M = -\partial^2 - \mu_1^2$ e $X = i h_2 M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi + g_2 M^{-1} \bar{\psi} \psi$. Como a matriz M não depende dos campos fermiônicos, nos resta calcular o $\operatorname{tr}[\ln(1+X)]$. Aqui apresentamos o resultado da expansão até quarta ordem:

$$\ln(1 + X) \approx -A_1 + \frac{1}{2} A_2 - \frac{1}{3} A_3 + \frac{1}{4} A_4 \dots \quad .$$

Os coeficientes da expansão são:

$$\begin{aligned} (a) \quad A_1 &= i h_2 M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi + g_2 M^{-1} \bar{\psi} \psi \\ (b) \quad A_2 &= -h_2^2 (M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi)^2 + g_2^2 (M^{-1} \bar{\psi} \psi)^2 + 2 i h_2 g_2 (M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi)(M^{-1} \bar{\psi} \psi) \\ (c) \quad A_3 &= i h_2^3 (M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi)^3 + 3 g_2 h_2^2 (M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi)^2 (M^{-1} \bar{\psi} \psi) - \\ &\quad - 3 i h_2 g_2^2 (M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi)(M^{-1} \bar{\psi} \psi) - g_2^3 (M^{-1} \bar{\psi} \psi)^3 \\ (d) \quad A_4 &= h_2^4 (M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi)^4 + g_2^4 (M^{-1} \bar{\psi} \psi)^4 - 4 g_2^2 h_2^2 (M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi)^2 (M^{-1} \bar{\psi} \psi)^2 - \\ &\quad - 4 i h_2^3 g_2 (M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi)^3 (M^{-1} \bar{\psi} \psi) + 4 i h_2 g_2^3 (M^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi)(M^{-1} \bar{\psi} \psi)^3 \end{aligned} \quad (119)$$

Logo, a lagrangiana efetiva para os férmions (118) pode ser reescrita alternativamente como:

$$\mathcal{L}_{\bar{\psi},\psi} = i \operatorname{tr} \sum_{n=1}^4 \frac{1}{n} (-A_n)^n + \bar{\psi} S_0^{-1} \psi + h_1^2 \bar{\psi} \gamma_5 \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi - g_1^2 \bar{\psi} \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \psi - \frac{1}{2}(\phi^2 + \chi^2) \quad ,$$

na qual os coeficientes da expansão são constantes e devido ao traço, temos apenas contribuições entre bilineares escalares dos férmions.

3.2.3 Caso limite: modelo de Jackiw-Pi

Como discutido anteriormente, o modelo de gauge quiral proposto em [17] é mais geral que o modelo de Jackiw-Pi [16]. Contudo, se fizermos $g_2 = h_2 = 0$, voltaremos na teoria

original de Jackiw-Pi. A primeira consequência deste limite é que o operador D_I se reduz a $-M$:

$$D_1 = -M = \partial^2 + \mu_1^2$$

e, assim, a lagrangiana efetiva para os férmions fica:

$$\mathcal{L}_1 = \bar{\psi} S_0^{-1} \psi + h_1^2 \bar{\psi} \gamma_5 \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi - g_1^2 \bar{\psi} \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \psi - \frac{1}{2}(\phi^2 + \chi^2) \quad (120)$$

onde, como na equação (118), aparecem os termos livres dos campos auxiliares e aqui temos interações entre os bilineares escalares e pseudo-escalares de férmions. Além disto, como o determinante agora não depende dos campos, pode ser incluída na constante de normalização. Contudo, como $h_I = -g_I$ como já foi discutido, transformações quirais do grupo $U(1)$ mantêm o potencial efetivo invariante como o esperado.

Esta teoria permite também eliminar as interações quárticas entre férmions e obter uma teoria apenas quadrática nestes campos. Para eliminar tais interações, recorreremos novamente a transformação de Hubbard-Stratonovich e adicionamos dois campos auxiliares tais que:

$$(a) \quad 1 = N_4 \int D\sigma_1 \exp \left[-\frac{i}{2} \int d^3x \sigma_1 D \sigma_1 \right] ;$$

deslocamento: $\sigma_1 \rightarrow \sigma_1 + \alpha D^{-1} \bar{\psi} \psi$ (121)

$$(b) \quad 1 = N_5 \int D\sigma_2 \exp \left[-\frac{i}{2} \int d^3x \sigma_2 D \sigma_2 \right] .$$

deslocamento: $\sigma_2 \rightarrow \sigma_2 + \beta D^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi$.

E o funcional gerador na presença desses campos fica:

$$Z = N \int \mathcal{D}[\bar{\psi}, \psi, \phi, \chi, \xi, \sigma_1, \sigma_2] \exp \left(i \int d^3x \mathcal{L}_2 \right) ,$$

onde,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_2 = & i \operatorname{tr} \ln(-D_1) + \bar{\psi} S_0^{-1} \psi + h_1^2 \bar{\psi} \gamma_5 \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi - g_1^2 \bar{\psi} \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \psi - \frac{1}{2}(\phi^2 + \chi^2 + \xi^2) \\ & - \frac{1}{2}(\sigma_1 D_1 \sigma_1 + \sigma_2 D_1 \sigma_2) + \bar{\psi}(\alpha \sigma_1 + \beta \sigma_2 \gamma_5) \psi - \frac{1}{2} \alpha^2 \bar{\psi} \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \psi - \frac{1}{2} \beta^2 \bar{\psi} \gamma_5 \bar{\psi} \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi \end{aligned}$$

definindo as constantes arbitrárias alfa e beta como:

$$(a) \quad \frac{\alpha}{2} + g_1^2 = 0 ,$$

$$(b) \quad \frac{\beta}{2} - h_1^2 = 0 , \quad (122)$$

a ação S_2 referente a lagrangiana a cima se reduz a:

$$S_2[\bar{\psi}, \psi] = i \text{Tr} \ln(-D_1) + \int d^3x \left[\bar{\psi} S^{-1} \psi - \frac{1}{2}(\phi^2 + \chi^2) + \bar{\psi}(\alpha \sigma_1 + \beta \sigma_2 \gamma_5) \psi \right], \quad (123)$$

onde,

$$S^{-1} = (S_0^{-1} + \sigma_1 D_1 \sigma_1 + \sigma_2 D_1 \sigma_2) \quad (124)$$

e, assim, esta ação depende dos graus de liberdade fermiônicos e dos campos auxiliares escalares.

Agora, derivamos a ação efetiva em relação aos campos sigma e vemos como são suas relações com os campos fermiônicos:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \frac{\partial S_2}{\partial \sigma_1} = 0 &\rightarrow \langle \sigma_1 \rangle = \alpha \langle D_1^{-1} \bar{\psi} \psi \rangle ; \\ \text{(b)} \quad \frac{\partial S_2}{\partial \sigma_2} = 0 &\rightarrow \langle \sigma_2 \rangle = \beta \langle D_1^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi \rangle . \end{aligned} \quad (125)$$

Estas equações sem as médias informam as relações entre os campos auxiliares e os campos originais. Neste caso, ambos bilineares fermiônicos correspondem às diferentes correlações férmion/anti-férmion escalares e pseudoescalares. Se as médias forem iguais a zero, quer dizer que o estado fundamental permanece inalterado e nenhuma simetria é quebrada no sistema [17]. Caso contrário, as médias são diferentes de zero e se temos no estado fundamental, campos fermiônicos constantes, esses compostos de bilineares são responsáveis por abrir um *gap* no espectro de energia do grafeno. Assim, minimizamos a ação em torno de campos fermiônicos constantes e obtemos as seguintes equações de Euler-Lagrange:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \frac{\delta S_2}{\delta \bar{\psi}(z)} = 0 &\rightarrow \left[-2i \frac{g_2}{D_1} + S^{-1} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \sigma_i (i h_2 \gamma_5 + g_2) \sigma_i \right] \psi(x) = 0 ; \\ \text{(b)} \quad \frac{\partial S_2}{\partial \psi} = 0 &\rightarrow \bar{\psi}(x) \left[-2i \frac{g_2}{D_1} + S^{-1} - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \sigma_i (i h_2 \gamma_5 + g_2) \sigma_i \right] = 0 . \end{aligned} \quad (126)$$

Aqui apenas apresentamos as equações e uma análise mais detalhada é uma das perspectivas na extensão deste trabalho, assim como comparar este modelo na presença das interações quártica com este modelo que possui apenas interações quadráticas na presença do campo auxiliar σ .

3.2.4 Teoria efetiva para os bósons

Por fim e por completude, derivamos uma teoria efetiva para o campo bosônico. Escrevendo a lagrangiana (109) da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_0 = & \bar{\psi} i \gamma^\mu \partial_\mu \psi + \partial^\mu \varphi^\dagger \partial_\mu \varphi - \bar{\psi} \left[g_1 (\varphi + \varphi^\dagger) + g_2 \varphi^\dagger \varphi - h_1 (\varphi - \varphi^\dagger) \gamma_5 + i h_2 \varphi^\dagger \varphi \gamma_5 \right] \psi \\ & - \mu^2 (\varphi^\dagger \varphi) - \frac{\lambda_4}{2} (\varphi^\dagger \varphi)^2 - \frac{\lambda_6}{3} (\varphi^\dagger \varphi)^3 - \frac{\lambda_8}{4} (\varphi^\dagger \varphi)^4 \end{aligned} \quad (128)$$

a integração sobre o campo fermiônico fica em evidência e o resultado da lagrangiana efetiva é:

$$\mathcal{L}_\varphi = -i \text{Tr} \ln [i \gamma_\mu \partial^\mu + G_1] - \varphi^\dagger (\partial^2 + \mu^2) \varphi - \frac{\lambda_4}{2} (\varphi^\dagger \varphi)^2 - \frac{\lambda_6}{3} (\varphi^\dagger \varphi)^3 - \frac{\lambda_8}{4} (\varphi^\dagger \varphi)^4, \quad (129)$$

onde,

$$G_1 = g_1 (\varphi + \varphi^\dagger) + g_2 \varphi^\dagger \varphi - h_1 (\varphi - \varphi^\dagger) \gamma_5 + i h_2 \varphi^\dagger \varphi \gamma_5 \quad (130)$$

e assim, temos uma teoria que depende apenas dos graus de liberdade bosônicos. Evidentemente, a expansão do logaritmo que aparece na lagrangiana efetiva gerará termos de auto-interação entre o campo bosônico. Estes termos se adicionarão com os termos de auto-interação do potencial. A presença da matriz γ_5 no operador G_l mantém o caráter quiral dos portadores de carga e o propagador da parte cinética se mantém inalterado.

Por fim, calculamos as equações de Euler-Lagrange para o campo bosônico em torno de um ponto $\varphi(z)$. Aqui, apresentamos os resultados:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad & -i \text{tr} \frac{g_1 - h_1 \gamma_5 + g_2 \varphi^\dagger(x) + i h_2 \varphi^\dagger \gamma_5}{S_0^{-1} + G(\varphi, \varphi^\dagger)} - \varphi^\dagger(x) (\partial^2 + \mu^2) - \sum_{i=0}^2 \lambda_{4+2i} \varphi^\dagger(x) (\varphi^\dagger \varphi)^{1+i} = 0 \\ \text{(b)} \quad & -i \text{tr} \frac{g_1 + h_1 \gamma_5 + g_2 \varphi(x) + i h_2 \varphi \gamma_5}{S_0^{-1} + G(\varphi, \varphi^\dagger)} - (\partial^2 + \mu^2) \varphi(x) - \sum_{i=0}^2 \lambda_{4+2i} (\varphi^\dagger \varphi)^{1+i} \varphi(x) = 0. \end{aligned} \quad (131)$$

No limite do modelo de Jackiw-Pi, estas equações se reduzem a:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad & -i \text{tr} \frac{g_1 (1 + \gamma_5)}{S_0^{-1} + G(\varphi, \varphi^\dagger)} - \varphi^\dagger(x) (\partial^2 + \mu^2) - \sum_{i=0}^2 \lambda_{4+2i} \varphi^\dagger(x) (\varphi^\dagger \varphi)^{1+i} = 0 \\ \text{(b)} \quad & -i \text{tr} \frac{g_1 (1 - \gamma_5)}{S_0^{-1} + G(\varphi, \varphi^\dagger)} - (\partial^2 + \mu^2) \varphi(x) - \sum_{i=0}^2 \lambda_{4+2i} (\varphi^\dagger \varphi)^{1+i} \varphi(x) = 0 \end{aligned} \quad (132)$$

Novamente, as equações de *gap* não são exploradas aqui. O motivo central é que estamos interessados em teorias para os férmions e aqui apresentamos, apenas por completude, uma teoria para os bósons. Contudo, o estudo destas equações poderá ser realizado em trabalhos futuros a fim de comparação, uma vez que descreve a mesma teoria original que a teoria efetiva para os férmions.

3.3 Deformações na rede do grafeno com inserção de termos anarmônicos

Nesta seção derivamos uma teoria efetiva para os férmions para deformações de uma membrana cristalina 2D, tal como o grafeno, através da inserção de termos anarmônicos

acoplados a um campo de gauge. Começamos apresentando a lagrangiana do sistema levando em conta todos os termos apresentados na Seção 2.4.3:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2}\rho\dot{h}^2 + \frac{1}{2}\kappa(\partial^2 h)^2 + \frac{1}{2}\Gamma^{ijkl}\partial_i u_j \partial_k u_l + \frac{1}{2}\Gamma^{ijkl}\partial_i u_j (\partial_k h \partial_l h) + \\ & + \frac{1}{8}\Gamma^{ijkl}(\partial_i h \partial_j h)(\partial_k h \partial_l h) + v_F \bar{\Psi}_1 [\sigma_x(-i\partial_x - A_x) + \sigma_y(-i\partial_y - A_y)] \Psi_1 - \\ & - v_F \bar{\Psi}_2 [\sigma_x(-i\partial_x + A_x) + \sigma_y(-i\partial_y + A_y)] \Psi_2 \end{aligned} \quad (133)$$

Novamente, os termos de interações entre os modos h e \vec{u} não permitem uma integração direta dos graus de liberdade escalares. Para isto, realizamos uma transformação de Hubbard-Stratonovich ao inserir um campo auxiliar tensorial de segunda ordem:

$$1 = N \int D\varphi \exp \left[-\frac{i}{2} \int d^3x \Gamma^{ijkl} \varphi_{ij} \varphi_{kl} \right] ;$$

$$\varphi_{ij} \rightarrow \varphi_{ij} + a(\partial_i h \partial_j h) + b(\partial_i u_j) ,$$

de forma que a contribuição deste na lagrangiana original será:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{HS} = & -\frac{1}{2}\varphi_{ij}\varphi_{kl} - a\varphi_{ij}(\partial_k h \partial_l h) - b\varphi_{ij}(\partial_k u_l) + 2ab(\partial_i u_j)(\partial_k h \partial_l h) + \\ & + b^2(\partial_i u_j)(\partial_k u_l) + a^2(\partial_i h \partial_j h)(\partial_k h \partial_l h) \end{aligned} , \quad (134)$$

assim, determinamos as condições $a = \frac{1}{2}$ e $b = 1$ ou $a = -\frac{1}{2}$ e $b = -1$. Logo, a lagrangiana total na presença do campo auxiliar é:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{1}{2}\rho\dot{h}^2 + \frac{1}{2}\kappa(\partial^2 h)^2 + \frac{1}{2}\rho\dot{\vec{u}}^2 - \frac{1}{2}\varphi_{ij}\varphi_{kl} - a\varphi_{ij}(\partial_k h \partial_l h) - b\varphi_{ij}(\partial_k u_l) + \\ & + v_F \bar{\Psi}_1 [\sigma_x(-i\partial_x - A_x) + \sigma_y(-i\partial_y - A_y)] \Psi_1 - v_F \bar{\Psi}_2 [\sigma_x(-i\partial_x + A_x) + \sigma_y(-i\partial_y + A_y)] \Psi_2 \end{aligned}$$

onde as interações entre os modos h e \vec{u} foram eliminados.

Temos agora que reescrever os termos dependentes dos campos de Dirac de forma mais adequada para integração. Os dois últimos termos da lagrangiana anterior, substituindo as expressões para A_x e A_y , podem ser reescritos:

$$\begin{aligned} \rightarrow & v_F \bar{\Psi}_1 [\sigma_x(-i\partial_x - A_x) + \sigma_y(-i\partial_y - A_y)] \Psi_1 - v_F \bar{\Psi}_2 [\sigma_x(-i\partial_x + A_x) + \sigma_y(-i\partial_y + A_y)] \Psi_2 = \\ & = v_F \bar{\Psi}_1 [\sigma_x(-i\partial_x) + \sigma_y(-i\partial_y)] \Psi_1 - v_F \bar{\Psi}_2 [\sigma_x(-i\partial_x) + \sigma_y(-i\partial_y)] \Psi_2 + \\ & + v_F \bar{\Psi}_1 [\sigma_x(-A_x) + \sigma_y(-A_y)] \Psi_1 - v_F \bar{\Psi}_2 [\sigma_x(A_x) + \sigma_y(A_y)] \Psi_2 \end{aligned}$$

e definindo o operador S^{-1} como:

$$S^{-1} = v_F [\sigma_x(-i\partial_x) + \sigma_y(-i\partial_y)] , \quad (135)$$

podemos escrever os dois últimos termos como:

$$\begin{aligned} \rightarrow \frac{\beta}{a} v_F \{ & \bar{\Psi}_1 \left[\sigma_x \left(-\partial_x u_x + \partial_y u_y - \frac{1}{2} (\partial_x h)^2 + \frac{1}{2} (\partial_y h)^2 \right) + \sigma_y (\partial_y u_x + \partial_x u_y + \partial_x h \partial_y h) \right] \psi_1 - \\ & - \bar{\Psi}_2 \left[\sigma_x \left(\partial_x u_x - \partial_y u_y + \frac{1}{2} (\partial_x h)^2 - \frac{1}{2} (\partial_y h)^2 \right) - \sigma_y (\partial_y u_x - \partial_x u_y - \partial_x h \partial_y h) \right] \psi_2 \} + \\ & + \bar{\Psi}_1 S^{-1} \psi_1 - \bar{\Psi}_2 S^{-1} \psi_2 \end{aligned}$$

Para simplificar, definimos as correntes fermônicas como:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad j_{ix} &= \beta_a v_F \bar{\Psi}_i \sigma_x \Psi_i \quad ; \\ \text{(b)} \quad j_{iy} &= \beta_a v_F \bar{\Psi}_i \sigma_y \Psi_i \end{aligned} \quad (136)$$

e os termos dependentes do campo de Dirac podem ser reescritos de forma mais compacta como:

$$\begin{aligned} \rightarrow \bar{\Psi}_1 S^{-1} \psi_1 - \bar{\Psi}_2 S^{-1} \psi_2 - u_x [\partial_x j_x + \partial_y j_y] - u_y [\partial_x j_y + \partial_y j_x] - \\ - \frac{1}{2} h [\partial_x [(j_x \partial_x) - (j_y \partial_y)] - \partial_y [(j_x \partial_y) + (j_y \partial_x)]] h \end{aligned} \quad (137)$$

onde,

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad j_x &= j_{1x} + j_{2x} = \bar{\Psi}_i \Lambda_x \Psi_i \quad ; \\ \text{(b)} \quad j_y &= j_{1y} + j_{2y} = \bar{\Psi}_i \Lambda_y \Psi_i \quad ; \\ \text{(c)} \quad \Lambda_i &= \frac{\beta}{a} v_F \sigma_i \quad , \quad i = x, y, \end{aligned} \quad (138)$$

e ademais, definindo os operadores:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad J_1 &= -[\partial_x j_x + \partial_y j_y] \quad ; \\ \text{(b)} \quad J_2 &= -[\partial_x j_y + \partial_y j_x] \quad ; \\ \text{(c)} \quad A_2 &= [\partial_x [(j_x \partial_x) - (j_y \partial_y)] - \partial_y [(j_x \partial_y) + (j_y \partial_x)]] \quad , \end{aligned} \quad (139)$$

temos portanto, que os dois últimos termos da lagrangiana podem ser escritos na forma:

$$\rightarrow \bar{\Psi}_1 S^{-1} \psi_1 - \bar{\Psi}_2 S^{-1} \psi_2 + u_x J_1 + u_y J_2 - \frac{1}{2} h A_2 h \quad . \quad (140)$$

Os demais termos da lagrangiana podem ser escritos de maneira a deixá-los no formato integrável através de integrações por partes. Começamos pelos termos livres dos modos h e u :

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad \frac{1}{2} \int d^3 x (\rho \dot{h}^2) &= -\frac{1}{2} \int d^3 x [h (\rho \partial_i^2) h] \quad ; \\ \text{(b)} \quad \frac{1}{2} \int d^3 x \kappa (\partial^2 h)^2 &= -\frac{1}{2} \int d^3 x [h (-\kappa \partial_i^2 \partial_j^2 \delta^{ij}) h] \quad ; \\ \text{(c)} \quad \frac{1}{2} \int d^3 x (\rho \dot{u}^2) &= -\frac{1}{2} \int d^3 x [u_i (\rho \partial_i^2 \delta^{ij}) u_j] = -\frac{1}{2} \int d^3 x [u_i B_0 u_i] \quad , \end{aligned} \quad (141)$$

onde o operador B_0 é:

$$B_0 = \rho \partial_i^2 \delta^{ij} . \quad (142)$$

O termo de interação das derivadas do modo h com o campo auxiliar pode ser reescrito como:

$$-a \int d^3 x \left[\Gamma^{ijkl} \varphi_{ij} (\partial_k h \partial_l h) \right] = -\frac{1}{2} \int d^3 x h \left[-a \Gamma^{ijkl} (\partial_k (\varphi_{ij} \partial_l) + \partial_l (\varphi_{ij} \partial_k)) \right] h ,$$

ou ainda escrevemos o termo como,

$$\rightarrow -\frac{1}{2} \int d^3 x h A_3 h ,$$

onde,

$$A_3 = -a \Gamma^{ijkl} (\partial_k (\varphi_{ij} \partial_l) + \partial_l (\varphi_{ij} \partial_k)) . \quad (143)$$

E, o termo de interação da derivada do modo u com o campo tensorial auxiliar:

$$-b \int d^3 x \left[\Gamma^{ijkl} (\partial_k u_l) \varphi_{ij} \right] = \int d^3 x \left[b \Gamma^{ijkl} (\partial_k \varphi_{ij}) u_l \right] = \int d^3 x J_3 u_l$$

com,

$$J_3 = b \Gamma^{ijkl} (\partial_k \varphi_{ij}) . \quad (144)$$

Juntando (141-a) e (141-b), colocamos os dois termos em apenas um, de forma mais compacta, como:

$$\rightarrow -\frac{1}{2} \int d^3 x (h A_1 h) ,$$

onde,

$$A_1 = \rho \partial_i^2 - \kappa \partial_i^2 \partial_j^2 \delta^{ij} . \quad (145)$$

Portanto, escrevemos a lagrangiana total de forma compacta como:

$$\mathcal{L}' = -\frac{1}{2} h A h + u_i B_0 u_j + (J_i + J_3) u_i - \frac{1}{2} \Gamma^{ijkl} \varphi_{ij} \varphi_{kl} + \bar{\psi}_1 S^{-1} \psi_1 - \bar{\psi}_2 S^{-1} \psi_2 ; \quad (146)$$

com $A = A_1 + A_2 + A_3$ e o funcional gerador é portanto:

$$Z = N \int D[h, \vec{u}, \bar{\psi}, \psi, \varphi] \exp \left\{ i \int d^3 x \mathcal{L}' \right\}$$

e as integrações em \vec{u} e h podem ser realizadas separadamente. Ao realizá-las, obtemos uma ação efetiva que não depende dos graus de liberdade escalares da teoria original:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{eff}[\varphi, \bar{\psi}, \psi] = & \frac{i}{2} \text{tr} \ln(iA) + \frac{1}{2} (J_1 + J_3) B_0^{-1} (J_1 + J_3) + \frac{1}{2} (J_2 + J_3) B_0^{-1} (J_2 + J_3) \\ & - \frac{1}{2} \Gamma^{ijkl} \varphi_{ij} \varphi_{kl} + \bar{\psi}_1 S_0^{-1} \psi_1 - \bar{\psi}_2 S_0^{-1} \psi_2 \end{aligned} . \quad (147)$$

Para derivar as equações de *gap*, consideramos o limite em que tendemos as correntes fermiônicas a zero, $j \rightarrow 0$, apenas A_3 e J_3 dependem do campo auxiliar, $A_2 = 0$, $J_1 = J_2 = 0$ e

A_l mantém sua forma original. Assim, as equações de Euler-Lagrange para o campo fermiônico:

$$\begin{aligned}
\text{(a)} \quad \frac{\delta S_{eff}}{\delta \psi_i} = 0 &\rightarrow \frac{1}{2} Tr \frac{1}{A} \frac{\delta A_2}{\delta \psi_k(z)} + \int d^3 x \frac{\delta J_1}{\delta \psi_k(z)} B_0^{-1}(J_1 + J_3) + \\
&+ \int d^3 x \frac{\delta J_2}{\delta \psi_k(z)} B_0^{-1}(J_2 + J_3) + \sum_{i=1}^2 (-1)^{i+1} \int d^3 x \bar{\psi}_i S_0^{-1} = 0 \quad ; \\
\text{(b)} \quad \frac{\delta S_{eff}}{\delta \bar{\psi}_i} = 0 &\rightarrow \frac{1}{2} Tr \frac{1}{A} \frac{\delta A_2}{\delta \bar{\psi}_k(z)} + \int d^3 x \frac{\delta J_1}{\delta \bar{\psi}_k(z)} B_0^{-1}(J_1 + J_3) + \\
&+ \int d^3 x \frac{\delta J_2}{\delta \bar{\psi}_k(z)} B_0^{-1}(J_2 + J_3) + \sum_{i=1}^2 (-1)^{i+1} \int d^3 x S_0^{-1} \psi_i = 0 \quad , \quad (148)
\end{aligned}$$

onde,

$$\begin{aligned}
\text{(a)} \quad \frac{\delta J_1}{\delta \psi_i(z)} &= -[\partial_x(\bar{\psi}_i \Lambda_x) + \partial_y(\bar{\psi}_i \Lambda_y)] \delta^4(x-z) \delta_{i,k} \quad ; \\
\text{(b)} \quad \frac{\delta J_1}{\delta \bar{\psi}_i(z)} &= -[\partial_x(\Lambda_x \psi_i) + \partial_y(\Lambda_y \psi_i)] \delta^4(x-z) \delta_{i,k} \quad ; \\
\text{(c)} \quad \frac{\delta J_2}{\delta \psi_i(z)} &= -[\partial_x(\bar{\psi}_i \Lambda_y) + \partial_y(\bar{\psi}_i \Lambda_x)] \delta^4(x-z) \delta_{i,k} \quad ; \\
\text{(d)} \quad \frac{\delta J_2}{\delta \bar{\psi}_i(z)} &= -[\partial_x(\Lambda_y \psi_i) + \partial_y(\Lambda_x \psi_i)] \delta^4(x-z) \delta_{i,k} \quad ; \\
\text{(e)} \quad \frac{\delta A_2}{\delta \psi_i(z)} &= [\partial_x[\bar{\psi}_i \Lambda_x \partial_x - \bar{\psi}_i \Lambda_y \partial_y] - \partial_y[\bar{\psi}_i \Lambda_x \partial_y - \bar{\psi}_i \Lambda_y \partial_x]] \delta^4(x-z) \delta_{i,k} \quad ; \\
\text{(f)} \quad \frac{\delta A_2}{\delta \bar{\psi}_i(z)} &= [\partial_x[\Lambda_x \psi_i \partial_x - \Lambda_y \psi_i \partial_y] - \partial_y[\Lambda_x \psi_i \partial_y - \Lambda_y \psi_i \partial_x]] \delta^4(x-z) \delta_{i,k} \quad .
\end{aligned}$$

Portanto, ao buscar uma solução para o estado fundamental, supomos em primeira análise, campos fermiônicos constantes. As equações a cima mostram que esses campos obedecem basicamente a equação de Dirac. Por outro lado, a equação do *gap* para o campo tensorial é:

$$\frac{\delta S_{eff}}{\delta \varphi_{ab}} = 0 \rightarrow \Gamma^{abkl} \left[\frac{2 \partial_k \partial_l}{A(\varphi)} + \varphi_{kl} \right] = 0 \quad , \quad (149)$$

onde,

$$A(\varphi) = \rho \partial_i^2 - \kappa \partial_i^2 \partial_j^2 \delta^{ij} - a \Gamma^{ijkl} (\partial_k(\varphi_{ij} \partial_l) + \partial_l(\varphi_{ij} \partial_k)) \quad . \quad (150)$$

As quatro equações de *gap* para o campo tensorial auxiliar são dadas pela expressão (149). As soluções destas equações poderão ser exploradas em mais detalhes em trabalhos futuros. Neste momento é importante ressaltar as interações fermiônicas da ação efetiva (147). Primeiramente, essa ação depende explicitamente dos graus de liberdade fermiônicos e de um campo tensorial. O primeiro termo pode ser expandido e produzirá interações entre correntes

fermiônicas do mesmo tipo e interações entre tipos diferentes de férmions, além de interações entre correntes de férmions e o campo tensorial auxiliar. Os termos resultantes da expansão se somarão com as interações presentes no segundo e no terceiro termo da ação efetiva. Uma vez que J_1 e J_2 dependem das correntes fermiônicas e J_3 do campo tensorial, teremos interações da mesma natureza que aquelas existentes no primeiro termo. Por fim, os três últimos termos são, respectivamente, as partes livres do campo tensorial e dos campos fermiônicos. O potencial efetivo da teoria será explorado em maiores detalhes na seção seguinte.

3.4 Comparações com o potencial de Coulomb

Nesta seção vamos investigar um sistema onde temos uma propagação fermiônica mediada por um campo de gauge. A parte livre do campo de gauge é dada pela equação (37), onde usaremos o gauge de Lorentz, cujas componentes espaciais inclui o gauge de Coulomb clássico $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. A derivada no propagador dos férmions é substituída pela derivada covariante $\partial_\mu \rightarrow \partial_\mu + iq A_\mu$, onde q é a constante de acoplamento desta interação. Assim, a lagrangiana do sistema, para d dimensões, é:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} A^\mu D_{\mu\nu}^{-1} A^\nu + \bar{\psi} S_0^{-1} \psi - q \bar{\psi} \gamma^\mu \psi A_\mu, \quad (151)$$

que, ao integrar os graus de liberdade do campo de gauge, obtemos uma teoria efetiva para os férmions. A ação efetiva resultante é:

$$\mathcal{L} = \frac{i}{2} \text{Tr} \ln(D_{\mu\nu}^{-1}) + \bar{\psi} S_0^{-1} \psi + \frac{q^2}{2} \bar{\psi} \gamma^\mu \psi D_{\mu\nu} \bar{\psi} \gamma^\nu \psi. \quad (152)$$

Desta equação vemos um termo que depende do propagador do campo de gauge, o termo cinético para o campo fermiônico mediado pelo propagador de Dirac e o surgimento de uma interação quártica entre férmions acopladas pelo quadrado de q . Diferentemente das interações quárticas obtidas nos modelos anteriores, aqui vemos a presença de bilineares vetoriais de férmions que constituem as correntes fermiônicas $j^\mu = \bar{\psi} \gamma^\mu \psi$. Logo, temos que o potencial de Coulomb é:

$$V_C = \frac{q^2}{2} \bar{\psi} \gamma^\mu \psi D_{\mu\nu} \bar{\psi} \gamma^\nu \psi. \quad (153)$$

Para a teoria de bósons/férmions acoplados via Yukawa, obtivemos o seguinte potencial efetivo para os férmions:

$$V_Y = \frac{g^2}{2} \bar{\psi} \psi D^{-1} \bar{\psi} \psi, \quad (154)$$

onde a interação quártica é mediada pelo inverso do propagador de Klein-Gordon e temos bilineares escalares de férmions. Ao adicionarmos um campo de gauge no modelo de Yukawa, naturalmente o potencial efetivo final será $V_C + V_Y$ e teremos contribuições de correntes fermiônicas, tanto escalares, quanto vetoriais. Este é o perfil que se obtém das interações fermiônicas ao quantizar os campos de gauge quiral e bosônico do modelo de Jackiw-Pi, equação (85), onde nesta teoria, q é a carga quiral do campo de gauge associado.

Por outro lado, no modelo quiral mais geral (de Frederico *et al.* [17]), a partir da lagrangiana efetiva (118), temos o seguinte potencial efetivo:

$$V_F = i \text{tr} \ln(-D_1) + h_1^2 \bar{\psi} \gamma_5 \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi - g_1^2 \bar{\psi} \psi D_1^{-1} \bar{\psi} \psi \quad . \quad (155)$$

Nesta expressão, fica evidente interações entre correntes fermiônicas escalares e pseudo-escalares, onde esta última leva em conta o caráter quiral dos portadores de carga. O operador D_l depende de interações fermiônicas dos mesmos tipo e que, como discutido, gerará mais contribuições a estas interações. A natureza do propagador efetivo D_l^{-1} é complexa, visto que depende dos campos fermiônicos. Contudo, vemos que no caso limite ao modelo de Jackiw-Pi, temos:

$$V_{F,JP} = h_1^2 \bar{\psi} \gamma_5 \psi D^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi - g_1^2 \bar{\psi} \psi D^{-1} \bar{\psi} \psi \quad , \quad (156)$$

que no modelo de Frederico, ao incluir o campo de gauge com sua participação ao mediar a propagação fermiônica, o potencial resultante é:

$$V_{F,G,JP} = V_C + h_1^2 \bar{\psi} \gamma_5 \psi D^{-1} \bar{\psi} \gamma_5 \psi - g_1^2 \bar{\psi} \psi D^{-1} \bar{\psi} \psi \quad , \quad (157)$$

obtendo assim, uma teoria que depende de correntes fermiônicas escalares, pseudo-escalares e vetoriais. Fisicamente, as interações escalares advém da inclusão de um campo de gauge, ou da interação dos férmions da rede com fótons; as interações pseudo-escalares são resultados do caráter quiral dos portadores de carga; e as interações fermiônicas surgem da interação dos férmions com o campo bosônico. Além disto, uma vez que $g_l = -h_l$ para o modelo de Jackiw-Pi, podemos associar a constante g_l com a carga quiral q em (80).

Interações de férmions com campos escalares também foram apresentadas nos modelos de Katsnelson *et al.* [18] e Guinea *et al.* [19]. Neste modelo, os campos escalares representam os fônons da rede, os quais quantizamos para obter uma teoria efetiva para os férmions. Vimos que o potencial efetivo desta teoria possui termos em segunda ordem nos férmions, que propagarão mediante a presença do campo auxiliar tensorial ϕ_{ij} , e termos em quarta ordem nos férmions, ou de segunda ordem nas correntes fermiônicas, que possuem o perfil de interações quárticas já apresentadas. Em suma, a fim de simplificação da equação e comparação, podemos expressar o potencial efetivo do modelo da seguinte maneira:

$$V_{KG} = \bar{\psi}_1 F_1(\varphi) \psi_1 + \bar{\psi}_2 F_2(\varphi) \psi_2 + j_1 G_1 j_1 + j_2 G_2 j_2 + j_1 G_3 j_2 + O(\varphi^2) \quad , \quad (158)$$

onde os termos de ordens mais altas de φ_{ij} são devidos aos termos de ordens mais altos da expansão do logaritmo na equação (147).

As correntes presentes em V_{KB} são, conforme as equações (136, 138), vetoriais. As funções F_1 e F_2 definem acoplamentos dos férmions com as componentes do tensor auxiliar, que se quantizados, podem resultar em interações quárticas escalares entre os férmions. Neste modelo, não foi considerado o caráter quirial dos portadores de carga.

Por fim, vale ressaltar que em 2+1 dimensões, o potencial de Coulomb aparece com uma modificação no campo de gauge. Para estruturas planas, como o grafeno, um estudo mais profundo se faz necessário. Isto se dá porque os portadores de cargas situam em um plano e o campo eletromagnético do sistema preenche um espaço tridimensional, sendo necessário fazer ajustes na lagrangiana do sistema. Essa é a teoria da pseudo-eletrodinâmica, desenvolvida por E. Marino [37, 38] e será estudada posteriormente, a fim de realizar uma análise mais profunda dos resultados obtidos em 2+1 dimensões.

4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Começamos aqui destacando o método empregado para o tratamento da quantização das interações entre campos de ordens mais altas. Evidentemente, as transformações de Hubbard-Stratonovich são, de fato, ferramentas matemáticas bastante úteis para a eliminação de graus de liberdade físicos de um sistema. A priori, sem este método, é bastante complicado tratar de integrais de trajetória quando o integrando do funcional gerador não é gaussiano. Logo, tanto para o modelo de gauge quiral mais geral, quanto para o modelo de fônons, seria inviável derivar uma teoria efetiva para os férmions. Contudo, com essas transformações, os modelos efetivos para os férmions aqui apresentados sugerem uma nova perspectiva ao tratar os modelos originais. Isto porque os modelos derivados neste trabalho explicitam um grau de liberdade específico do sistema e mostram as dinâmicas das interações fermiônicas em uma membrana bidimensional, como o grafeno, sob um novo ângulo.

Para a teoria de bósons/férmions interagindo por um acoplamento tipo Yukawa vemos uma característica análoga àquela observada por Gross-Neveu: ao eliminar os graus de liberdade bosônicos do sistema, obtemos uma teoria onde há uma interação quártica entre os férmions. No nosso modelo, esta interação quártica de fato aparece, mas com a presença de um operador de acoplamento, oriundo da parte cinética do campo escalar físico. Observamos também que o campo auxiliar inserido no modelo para eliminar tal interação quártica, quando todos os graus de liberdade físicos do sistema são eliminados, possui o mesmo perfil para uma teoria efetiva para os bósons físicos. Isto leva às mesmas equações de *gap*, as quais inferimos que para uma constante de acoplamento positiva, há perda da massa fermiônica devido a uma quebra de simetria e este comportamento independe da dimensão considerada.

Considerando agora os modelos para o grafeno, iniciamos pela teoria de Jackiw-Pi [16] que inclui o caráter quiral dos portadores de carga. Verificamos que a teoria efetiva para os férmions derivada para este modelo mantém sua invariância sob transformações do grupo $U(1)$.

Um modelo mais geral que esse, de Frederico *et al.* [17], leva em conta termos de auto-interações entre os campos bosônicos do sistema, além de estruturas mais gerais para os acoplamentos bósons/férmions. Neste ponto, novamente, as transformações de Hubbard-Stratonovich se mostram fundamentais para a quantização dos graus de liberdade escalares e permitiu derivar uma teoria efetiva para os férmions. Inferimos um potencial efetivo para a teoria que leva em conta, além do potencial de Coulomb, termos extras de interações entre bilineares de férmions, tanto de naturezas escalares, quanto pseudo-escalares. Embora

tenhamos calculado as equações de *gap*, uma análise mais aprofundada a respeito de suas soluções se faz necessária em trabalhos futuros.

Por outro lado, investigamos um modelo que descreve os fônons na rede do grafeno quando este sofre uma mudança na sua estrutura, que foi descrito pela inserção de termos anarmônicos na lagrangiana. Para este modelo, integramos todos os graus de liberdade escalares físicos do sistema, ou de modo mais específico, as variáveis responsáveis por descrever os modos da rede dentro e fora do plano. Esta passagem, mais uma vez, apenas foi possível devido ao método das transformações de Hubbard-Stratonovich, que diferentemente dos casos anteriores, inserimos um campo tensorial. Consequentemente, obtivemos uma teoria efetiva para a parte eletrônica do sistema. As características deste campo tensorial e as soluções das equações de *gap* para este modelo também são objetos de estudo na continuidade deste trabalho.

Em suma, entre estes sistemas, mostramos alguns modelos em que as transformações de Hubbard-Stratonovich se mostram bastante úteis, permitindo tanto obter teorias efetivas que devem ser ainda mais exploradas do ponto de vista teórico, quanto para obter resultados práticos para sistemas da matéria condensada, tal como o grafeno.

5 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] MONTVAY, I.; MÜNSTER, G. *Quantum Fields in a Lattice*. Cambridge University, 1994.
- [2] LEVY, N. *et al.*, *Strain-induced pseudo-magnetic fields greater than 300 tesla in graphene nanobubbles*. *Science*, v. 329, p. 544, 2010.
- [3] GUIMARÃES, F.S.M. *et al.*, *Graphene as a non-magnetic spin current lens*. *Journal of Physics: Condensed Matter*. v. 23, n. 17, 2011.
- [4] JACKSON, J. D. WALLACE P. R., *and Theoretical Physics at McGill in the 1950's: A personal perspective*. *La Physique au Canada*, v. 66, n. 4, p. 299, 2010.
- [5] WALLACE, P. R., *Band Theory of Graphite*. *Phys. Rev.*, 71, p. 622-634, 1947.
- [6] GEIM A. K.; NOVOSELOV K. S., *The Rise of Graphene*. Manchester Centre for Mesoscience and Nanotechnology.
- [7] NOVOSELOV, K. S. *et al.* *Electric field effect in atomically thin carbon films*. *Science* 306, p. 666-669, 2004.
- [8] NOVOSELOV, K. S. *et al.* *Two-dimensional atomic crystals*. *Proc. Natl Acad. Sci. USA*, v. 102, p. 10451-10453, 2005.
- [9] NOVOSELOV, K. S. *et al.* *Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene*. *Nature*, v. 438, p. 197-200, 2005.
- [10] ZHANG, Y. *et al.* *Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene*. *Nature*, v. 438, p. 201-204, 2005.
- [11] GUINEA, F.; KATSNELSON, M. I.; GEIM, A. K.. *Energy gaps and a zero-field quantum Hall effect in graphene by strain engineering*. *Nature Physics*, v. 6, 2010.
- [12] SUZUURA, H.; ANDO, T. Phonons and electron-phonon scattering in carbon nanotubes. *PHYSICAL REVIEW B*, v. 65, 2002.
- [13] FIALKOVSKY, V.; VASSILEVICH, D. V. *Quantum field theory in graphene*. *International Journal Of Modern Physics A*, Singapore, v. 27, n. 15, p. 437-459, 2012.
- [14] J. HUBBARD. *Calculation of Partition Functions*. *Phys. Rev. Lett.* **3**, 77, 1959.
- [15] STRATONOVICH R. L. *On a Method of Calculating Quantum Distribution Functions*. *Soviet Physics Doklady*, Vol. 2, p.416, 1957.
- [16] JACKIW R., PI S.-Y, *Chiral gauge theory for graphene*. *Physical Review Letters*, 98.266402, 2007.

- [17] FREDERICO, T. *et al.*, *Vortex and gap generation in gauge models of graphene*. Physical Review B 83, 155419, 2011.
- [18] KATSNELSON M. I. *et al.*, *Thermodynamics of quantum crystalline membranes*. ArXiv:1406.2637v2, 2014.
- [19] GUINEA F. *et al.*, *Gauge field induced by ripples in graphene*. Physical Review B 77, 205421, 2008.
- [20] SAKURAI J. J.; NAPOLITANO J. *Mecânica Quântica Moderna*. Editora Bookman. 2ª Ed., 2013.
- [21] RYDER, L. H. *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press. 2ª Ed., 2005.
- [22] GRIFFITHS D. *Introduction to Elementary Particles*. Editora Wiley-VCH. 2ª Ed., 2012.
- [23] SCHWABL F. *Advanced Quantum Mechanics*. Springer. 4ª Ed., 2008.
- [24] DAS A. *Lectures on Quantum Field Theory*. World Scientific. 2ª Ed. 2006.
- [25] RAMOND P. *Field Theory: A Modern Primer*. Editora Westview. 2ª Ed., 1989.
- [26] ITZYKSON C.; ZUBER J-B.; *Quantum Field Theory*. McGraw-Hill International Book Company. 1ª Ed. 1980.
- [27] GROSS D. J., NEVEU A., *Dynamical symmetry breaking in asymptotically free field theories*. Physical Review **B**, Vol. 10, No. 10, 1974.
- [28] RUFFINI R., XUE S.S; *Effective Lagrangian of Quantum Electrodynamics*; Journal of the Korean Physical Society, Vol. 49, No. 2, 2006, pp. 715-721.
- [29] MOSEL U., *Path Integrals in Field Theory*. Springer, 1943.
- [30] PASCHOAL R. C. *et al.*, *A supersymmetric model for graphene*. ArXiv:1002.2660v2, 2010.
- [31] SEMENOFF G. W., *Chiral symmetry breaking in graphene*. Phys. Scr. T146 014016 (9pp), 2012.
- [32] McCANN E., *Electronic properties of monolayer and bilayer graphene*. ArXiv: 1205.4849v1, 2012.
- [33] FUCHS J-N., GOERBIG M. O., *Introduction to the physical properties of graphene*. Lectures Notes, 2008.
- [34] ORTIX C. *et al*, *Kekule textures, pseudo-spin one Dirac cones and quadratic band crossings in a graphene-hexagonal indium chalcogenide bilayer*. ArXiv: 1412.8072v1, 2014.

[35] COSTA FILHO R. N. *et al*, *The electronic properties of graphene and graphene ribbons under simple ribbons strain*. J. Phys.: Cond. Matter 24 375301 (9 pp), 2012.

[36] BERGMAN D. L., *Realization of a vortex in the Kekule texture of molecular graphene, at a Y junction where 3 domains meet*. ArXiv: 102.4731v3, 2012.

[37] MARINO E. C., *Quantum Electrodynamics of Particles on a Plane and the Chern-Simons Theory*. Nucl. Phys. B 408, 551 (1993).

[38] MARINO E. C., *Euclidean functional integral approach for disorder variables and kinks*. Phys. Lett. B 263, 63 (1991).

APÊNDICES

A - Integração Funcional

Aqui vamos mostrar como generalizar a fórmula usual da integração Gaussiana sobre um número finito de variáveis a fim de formular para integrais funcionais. Começamos com a integral Gaussiana de uma variável clássica:

$$\int dx \exp\left[\frac{-ax^2}{2}\right] = \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \quad (\text{A.1})$$

onde os limites de integração são de $-\infty$ a ∞ e será omitido. Agora fazemos o produto de n destas integrais, onde $a_i > 0$:

$$\int dx_1 \dots dx_n \exp\left[\frac{-1}{2} \sum_n a_n x_n^2\right] = \frac{(2\pi)^{n/2}}{\prod_{i=1}^n a_i^{1/2}} \quad (\text{A.2})$$

Seja A uma matriz diagonal com elementos a_1, a_2, \dots, a_n e, x um vetor n -dimensional (x_1, x_2, \dots, x_n) . Então, o expoente na expressão anterior é o produto interno:

$$\sum_n a_n x_n^2 = (x, Ax) \quad (\text{A.3})$$

e o determinante de A é:

$$\det(A) = a_1 a_2 \dots a_n = \prod_{i=1}^n a_i \quad (\text{A.4})$$

A equação (A.2) fica:

$$\int d^n x \exp\left[\frac{-(x, Ax)}{2}\right] = (2\pi)^{n/2} [\det(a)]^{-1/2} \quad (\text{A.5})$$

e desde que vale para qualquer matriz diagonal, também valerá para qualquer matriz não singular, simétrica, real e positiva. Definimos a medida:

$$(dx) = d^n x (2\pi)^{-n/2} \quad (\text{A.6})$$

segue que,

$$\int (dx) \exp\left[\frac{-(x, Ax)}{2}\right] = [\det(a)]^{-1/2} \quad (\text{A.7})$$

Esta equação é válida rigorosamente, resultante da integração espacial de uma dimensão a um vetor de espaço com dimensão finita. Agora vamos generalizar para um espaço de dimensão infinita. Uma justificação matemática cuidadosa para isto é assumir que se a generalização é o caso de uma única variável real $f(t)$, então o produto interno:

$$(f, f) = \int dt [f(t)]^2 \quad (\text{A.8})$$

onde, para nosso caso são funções reais do espaço-tempo, então:

$$(\phi, \phi) = \int d^4x [\phi(x)]^2 \quad (\text{A.9})$$

e, portanto:

$$\int \mathcal{D}\phi \exp\left[-\frac{1}{2} \int d^4x \phi(x) A \phi(x)\right] = [\det(A)]^{-1/2} \quad (\text{A.10})$$

Estas equações podem ser extendidas ainda para formas quadráticas:

$$Q(x) = \frac{1}{2}(x, Ax) + (b, x) + c \quad (\text{A.11})$$

onde o mínimo de $Q(x)$ ocorre para,

$$\bar{x} = -A^{-1}b \quad (\text{A.12})$$

logo, podemos escrever $Q(x)$ como:

$$Q(x) = Q(\bar{x}) + \frac{1}{2}[x - \bar{x}, A(x - \bar{x})] \quad (\text{A.13})$$

e teremos portanto,

$$\int (dx) \exp\left[-\left(\frac{1}{2}(x, Ax) + (b, x) + c\right)\right] = \exp\left[\frac{1}{2}(b, A^{-1}b) - c\right] [\det(A)]^{-1/2} \quad (\text{A.14})$$

cuja generalização para integração funcional é:

$$\begin{aligned} \int \mathcal{D}\phi \exp\left[-\frac{1}{2} \int d^4x \phi(x) A \phi(x) + B(x)\phi(x) + C\right] &= \\ &= \exp\left[-\frac{C}{2} + \frac{1}{2} \int d^4x B(x) A^{-1} B(x)\right] [\det(A)]^{-1/2} . \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

B - Álgebra de Grassman

Na aproximação canônica, tratamos os campos como operadores e logo definimos relações de anti-comutação para estes, de forma que o princípio de Pauli será satisfeito:

$$\{\psi(x), \psi(y)\} = 0 \quad (\text{B.1})$$

Os funcionais geradores para as funções de Green são escritas como uma integral funcional sob todos os campos, nos quais são tratadas como funções clássicas: números c . A álgebra destes números é conhecido como álgebra de Grassman e obedece:

$$\{C_i, C_j\} = C_i C_j + C_j C_i = 0 \quad (\text{B.2})$$

onde $i, j = 1, 2, \dots, n$. Em particular:

$$C_i^2 = 0 \quad (\text{B.3})$$

A expansão da função mais geral destes números contém apenas um número finito de termos e para duas variáveis temos:

$$f(C_1, C_2) = a_0 + a_1 C_1 + a_2 C_2 - a_3 C_2 C_1, \quad (\text{B.4})$$

onde a_0, \dots, a_3 são números c ordinários. Definimos a diferenciação pela esquerda como:

$$\begin{aligned} (\text{a}) \quad \frac{\partial f}{\partial C_1} &= \frac{\partial^L f}{\partial C_1} = a_1 + a_3 C_2; \\ (\text{b}) \quad \frac{\partial f}{\partial C_2} &= \frac{\partial^L f}{\partial C_2} = a_2 - a_3 C_1. \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Desta forma, calculamos algumas propriedades:

$$\begin{aligned} (\text{a}) \quad C_1 \frac{\partial f}{\partial C_1} &= a_1 C_1 + a_3 C_1 C_2; \\ (\text{b}) \quad C_1 f &= a_0 C_1 + a_2 C_1 C_2; \\ (\text{c}) \quad \frac{\partial(C_1 f)}{\partial C_1} &= a_0 + a_2 C_2, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

então,

$$\begin{aligned} (\text{a}) \quad (C_1 \frac{\partial}{\partial C_1} + \frac{\partial}{\partial C_1} C_1) f &= f, \\ (\text{b}) \quad (C_1 \frac{\partial}{\partial C_1} + \frac{\partial}{\partial C_1} C_1) &= 1, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

que é o operador identidade. Em geral, temos:

$$\begin{aligned} (\text{a}) \quad \{C_i, \frac{\partial}{\partial C_j}\} &= \delta_{ij}; \\ (\text{b}) \quad \{\frac{\partial}{\partial C_i}, \frac{\partial}{\partial C_j}\} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Agora vamos definir a integração, para isto definimos os diferenciais tais que:

$$\begin{aligned} (\text{a}) \quad \{C_i, dC_j\} &= 0; \\ (\text{b}) \quad \{dC_i, dC_j\} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Múltiplas integrais podem ser interpretadas como iterações, por exemplo:

$$(\int dC_1)^2 = \int dC_1 \int dC_2 = - \int dC_1 \int dC_1 = -(\int dC_1)^2, \quad (\text{B.10})$$

cujas propriedades são válidas:

$$\begin{aligned} (\text{a}) \quad \int dC_1 &= \int dC_2 = \int dC_i = 0; \\ (\text{b}) \quad \int dC_1 dC_2 + \int dC_2 dC_1 &= 0; \\ (\text{c}) \quad \int dC_1 C_1 &= \int dC_2 C_2 = \int dC_i C_i = 1. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Em relação à função f temos:

$$\int dC_1 f = a_1 + a_3 C_2 = \frac{\partial f}{\partial C_1}. \quad (\text{B.12})$$

Observamos que a integração e a diferenciação desta função nos dá o mesmo resultado. Agora, deixe η e seu conjugado serem variáveis de Grassman, tais que:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad & \int d\eta = \int d\bar{\eta} = 0 \quad ; \\ \text{(b)} \quad & \int d\eta d\eta = \int d\bar{\eta} d\bar{\eta} = 1 \quad ; \\ \text{(c)} \quad & \eta^2 = \bar{\eta}^2 = 0 \quad . \end{aligned} \tag{B.13}$$

Seja a função exponencial expandida até primeira ordem,

$$\exp(-\bar{\eta}\eta) = 1 - \bar{\eta}\eta \tag{B.14}$$

e agora a integramos:

$$\int d\bar{\eta} d\eta \exp(-\bar{\eta}\eta) = \int d\bar{\eta} d\eta - \int d\bar{\eta} d\eta \bar{\eta}\eta = 1 \quad . \tag{B.15}$$

Generalizamos agora, para duas dimensões, temos que:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad & \eta = \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} \quad ; \\ \text{(b)} \quad & \bar{\eta} = [\bar{\eta}_1 \quad \bar{\eta}_2] \quad , \end{aligned} \tag{B.16}$$

cujos produtos são:

$$\bar{\eta}\eta = \bar{\eta}_1\eta_1 + \bar{\eta}_2\eta_2 \tag{B.17}$$

e o quadrado do produto,

$$(\bar{\eta}\eta)^2 = 2\bar{\eta}_1\eta_1\bar{\eta}_2\eta_2 \quad , \tag{B.18}$$

pois,

$$\bar{\eta}_1\eta_1\bar{\eta}_2\eta_2 = -\bar{\eta}_1\bar{\eta}_2\eta_1\eta_2 = \bar{\eta}_1\bar{\eta}_2\eta_2\eta_1 = -\bar{\eta}_1\bar{\eta}_2\eta_1\eta_2 = \bar{\eta}_1\eta_1\bar{\eta}_2\eta_2 \quad . \tag{B.19}$$

Agora a função exponencial expandida até segunda ordem é:

$$\exp(-\bar{\eta}\eta) = 1 - \bar{\eta}\eta + \frac{1}{2}(\bar{\eta}\eta)^2 = 1 - \bar{\eta}_1\eta_1 + \bar{\eta}_2\eta_2 + \bar{\eta}_1\eta_1\bar{\eta}_2\eta_2 \tag{B.20}$$

e sua integração,

$$\int d\bar{\eta} d\eta \exp(-\bar{\eta}\eta) = \int d\bar{\eta}_1 d\eta_1 d\bar{\eta}_2 d\eta_2 \bar{\eta}_1\eta_1\bar{\eta}_2\eta_2 = 1 \quad . \tag{B.21}$$

Fazendo a seguinte transformação de variáveis,

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad & \eta = M\alpha \quad ; \\ \text{(b)} \quad & \bar{\eta} = N\bar{\alpha} \quad , \end{aligned} \tag{B.22}$$

onde M e N são matrizes 2×2 , temos:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad & \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} \quad ; \\ \text{(b)} \quad & \begin{bmatrix} \bar{\eta}_1 \\ \bar{\eta}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N_{11} & N_{12} \\ N_{21} & N_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{\alpha}_1 \\ \bar{\alpha}_2 \end{bmatrix} \quad . \end{aligned} \tag{B.23}$$

Temos portanto que:

$$\eta_1 \eta_2 = (M_{11} \alpha_1 + M_{12} \alpha_2)(M_{21} \alpha_1 + M_{22} \alpha_2) = \det(M) \alpha_1 \alpha_2 . \quad (\text{B.24})$$

Para que se mantêm as regras de integrações:

$$\int d \eta_1 d \eta_2 \eta_1 \eta_2 = \int d \alpha_1 d \alpha_2 \alpha_1 \alpha_2 , \quad (\text{B.25})$$

devemos requerir que,

$$d \eta_1 d \eta_2 = \det^{-1}(M) d \alpha_1 d \alpha_2 , \quad (\text{B.26})$$

obtemos:

$$\int d \bar{\eta} d \eta \exp(-\bar{\eta} \eta) = \det^{-1}(MN) \int d \bar{\alpha} d \alpha \exp(-\bar{\alpha} N^T M \alpha) = 1 . \quad (\text{B.27})$$

Definindo a matriz A da seguinte maneira:

$$A = N^T M , \quad (\text{B.28})$$

obtemos:

$$\int d \bar{\alpha} d \alpha \exp(-\bar{\alpha} A \alpha) = \det(A) . \quad (\text{B.29})$$

Agora para descrevermos campos fermiônicos, devemos fazer a transição para a álgebra de Grassman de dimensão infinita, cujos geradores agora denotamos por $C(x)$, cujas regras são válidas:

- (a) $\{C(x), C(y)\} = 0$;
- (b) $\frac{\partial^{L,R} C(x)}{\partial C(y)} = \delta^4(x-y)$;
- (c) $\int dC(x) = 0$; (B.30)
- (d) $\int dC(x) C(x) = 0$.

C - Determinantes de dimensão finita

Seja A uma matriz $n \times n$, podemos escrever:

$$A = P^{-1} D P , \quad (\text{C-1})$$

onde D é uma matriz diagonal cujas entradas são autovalores e P é uma matriz ortogonal cujas colunas correspondem aos autovetores. Nós encontramos que seu determinante é:

$$\det(A) = \det(P^{-1} D P) = \det(P^{-1}) \det(D) \det(P) = \det(D) = \prod_{j=1}^n A_j . \quad (\text{C-2})$$

Vamos agora, olhar para uma propriedade importante:

$$\text{tr}[\ln(D)] = \ln(\lambda_1) + \ln(\lambda_2) + \dots + \ln(\lambda_n) , \quad (\text{C-3})$$

onde λ_j é o j -ésimo autovalor da matriz D . E agora, calculamos a exponencial do traço:

$$\exp[\text{tr}[\ln(D)]] = \exp[\ln(\lambda_1) + \ln(\lambda_2) + \dots + \ln(\lambda_n)] = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n = \det(A) . \quad (\text{C-4})$$

D - Propriedades úteis das matrizes γ

Muitos problemas como será visto no trabalho, se reduz ao trabalho de calcular produtos de matrizes γ^μ ou o traço destas matrizes. Isto é facilitado por uma lista de propriedades, nas quais as provas não serão explicitadas e aqui, só serão mostrados as propriedades para $d = 4$. A extensão para outras dimensões foge do escopo do trabalho. Vamos começar com três propriedades de traços em geral: sejam A e B duas matrizes e α um número qualquer:

$$\begin{aligned} (a) \quad & Tr(A+B) = Tr(A) + Tr(B) \quad ; \\ (b) \quad & Tr(\alpha A) = \alpha Tr(A) \quad ; \\ (c) \quad & Tr(AB) = Tr(BA) \quad . \end{aligned} \tag{D.1}$$

É de extrema importância notar que:

$$g_{\mu\nu} g^{\mu\nu} = 4 \tag{D.2}$$

e recorrer a relação fundamental de anti-comutação das matrizes γ , junto a seguinte regra associada:

$$\begin{aligned} (a) \quad & \gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2 g^{\mu\nu} \quad ; \\ (b) \quad & (\gamma^\mu a_\mu)(\gamma^\nu b_\nu) + (\gamma^\nu b_\nu)(\gamma^\mu a_\mu) = 2(a^\mu b_\mu) \quad . \end{aligned} \tag{D.3}$$

Destes segue uma série de teoremas de contração:

$$\begin{aligned} (a) \quad & \gamma^\mu \gamma_\mu = 4 \quad ; \\ (b) \quad & \gamma_\mu \gamma^\nu \gamma^\mu = -2 \gamma^\nu \quad ; \\ (c) \quad & \gamma_\mu (\gamma^\nu a_\nu) \gamma^\mu = -2 \gamma^\nu a_\nu \quad ; \\ (d) \quad & \gamma_\mu \gamma^\nu \gamma^\lambda \gamma^\mu = 4 g^{\nu\lambda} \end{aligned} \tag{D.4}$$

e uma coleção de teoremas de traço, onde o primeiro é: o traço do produto de um número ímpar de matrizes γ é zero. Segue que:

$$\begin{aligned} (a) \quad & Tr(1) = 4 \quad ; \\ (b) \quad & Tr(\gamma^\mu \gamma^\nu) = 4 g^{\mu\nu} \quad ; \\ (c) \quad & Tr[(\gamma^\mu a_\mu)(\gamma^\nu b_\nu)] = 4 a^\mu b_\mu \quad ; \\ (d) \quad & Tr[\gamma^\mu \gamma^\nu \gamma^\lambda \gamma^\sigma] = 4(g^{\mu\nu} g^{\lambda\sigma} - g^{\mu\lambda} g^{\nu\sigma} + g^{\mu\sigma} g^{\nu\lambda}) \quad ; \\ (e) \quad & Tr[(\gamma^\mu a_\mu)(\gamma^\nu b_\nu)(\gamma^\lambda c_\lambda)(\gamma^\sigma d_\sigma)] = 4[(a^\mu b_\mu)(c^\nu d_\nu) - (a^\lambda c_\lambda)(b^\sigma d_\sigma) + (a^\rho d_\rho)(b^\delta c_\delta)] \quad . \end{aligned} \tag{D.5}$$

E - Estrutura de uma camada de grafeno e modelo de *tight-binding*

Como base para construção de modelos baseados em carbono, tais como grafite, *buckyballs* e nanotubos de carbonos, o grafeno tem sido usado no estudo dos férmions de

Dirac em sistemas da matéria condensada. Teoricamente, o modelo de *tight-binding* para o grafeno já vem sendo estudado há mais de 60 anos, inicialmente com Wallace, que modelou suas estruturas de banda. Contudo, desde que o grafeno foi experimentalmente obtido e o efeito Hall foi observado em sistemas com uma e duas camadas de grafeno, houve um crescente interesse no comportamento quiral dos elétrons no grafeno [16, 32 -36].

Nesta seção, iniciamos apresentando a estrutura de uma camada de grafeno, que consiste em átomos de carbono arranjados em uma estrutura bidimensional com formato de favo-de-mel formando uma rede hexagonal, conforme mostra a Figura 3.

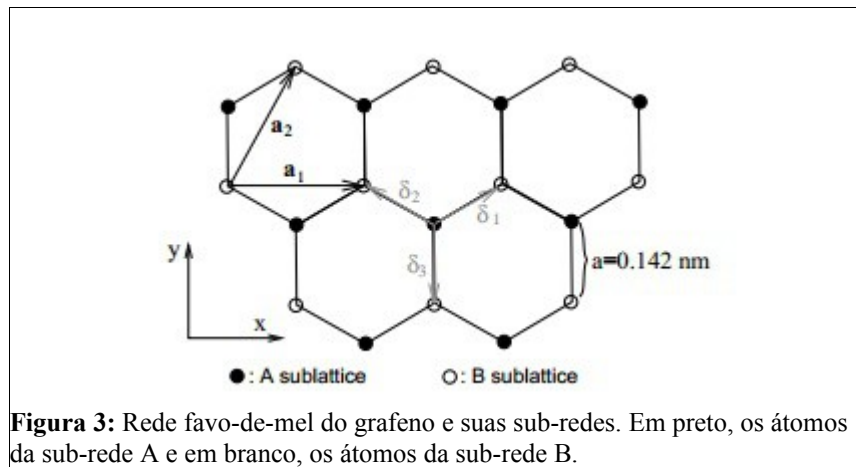


Figura 3: Rede favo-de-mel do grafeno e suas sub-redes. Em preto, os átomos da sub-rede A e em branco, os átomos da sub-rede B.

Esse arranjo pode ser visto como a superposição de duas sub-redes triangulares A e B , cujos geradores da primeira rede são \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , enquanto que os vetores δ_i conectam qualquer sítio da sub-rede A aos sítios de seus vizinhos mais próximos pertencentes a B :

$$\begin{aligned}
 & \mathbf{a}_1 = \sqrt{3} a \hat{x} & \delta_1 &= \frac{a}{2} (\sqrt{3} \hat{x} + \hat{y}) \\
 \text{A: } & \mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} a (\hat{x} + \sqrt{3} \hat{y}) & \text{B: } \delta_2 &= \frac{a}{2} (-\sqrt{3} \hat{x} + \hat{y}) \quad , \\
 & & \delta_3 &= -a \hat{y}
 \end{aligned} \tag{E-1}$$

onde a é a distância entre as ligações de carbono. Para o grafeno, $a = 1,42 \text{ \AA}$, o módulo do vetor de base é $l = 0,24 \text{ nm}$, a área da célula unitária $A = 0,051 \text{ nm}^2$ e a densidade de átomos de carbono é $n_C = 2/A = 39 \text{ nm}^{-2}$ [32].

Vale ressaltar que a estrutura de favo-de-mel não forma uma rede de Bravais porque as posições A e B não são equivalentes, isto é, não é possível conectá-los por um vetor de rede $\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$, com n_1 e n_2 inteiros. Contudo, as posições atômicas de A ou B isoladamente, formam uma rede hexagonal de Bravais.

A rede recíproca é definida com respeito à rede triangular de Bravais, Figura 4, no qual pode ser construída pelos vetores:

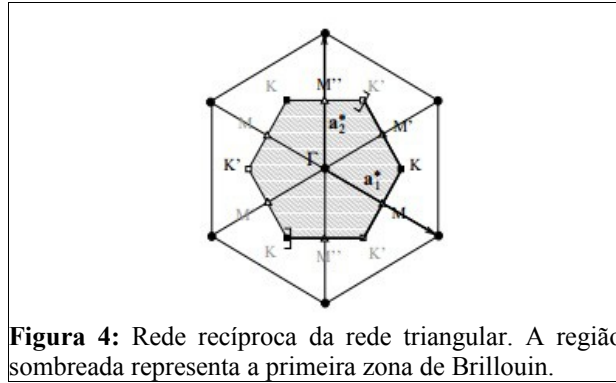


Figura 4: Rede recíproca da rede triangular. A região sombreada representa a primeira zona de Brillouin.

$$\mathbf{a}_1^* = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \left(\hat{x} - \frac{\hat{y}}{\sqrt{3}} \right), \quad \mathbf{a}_2^* = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \hat{y} \quad . \quad (\text{E-2})$$

Fisicamente, todos os sítios da rede recíproca representam vetores de onda equivalentes. Qualquer onda propagando na rede com um vetor de onda diferindo pelo vetor de rede recíproco tem a mesma fase a menos de um múltiplo de 2π entre os vetores de rede direta e recíproca, devido à relação:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{a}_j^* = 2\pi \delta_{ij} \quad ,$$

para $i, j = 1, 2$. A primeira zona de Brillouin (*BZ* – do inglês, *Brillouin Zone*), consiste na região sombreada e na parte espessa do hexágono na Figura 4. Esta zona representa um conjunto de pontos inequivalentes no espaço recíproco, isto é, pontos nos quais não podem ser conectados a outros pontos por um vetor da rede recíproca, ou também, de excitações na rede fisicamente distinguíveis [32, 33]. Excitações com grande comprimento de onda são situadas na vizinhança do ponto Γ , que equivale ao centro da *BZ*. Ademais, os seis vértices da primeira *BZ* consiste em dois pontos inequivalentes, K e K' , representados por:

$$\pm \mathbf{K} = \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \hat{x} \quad , \quad (\text{E-3})$$

enquanto que, os quatro vértices restantes podem ser conectados através de uma translação do vetor de rede recíproco.

- Modelo de *tight-binding* para o grafeno

Neste tópico apresentamos uma descrição geral do modelo de *tight-binding* para um sistema com n orbitais atômicos ϕ_j em uma célula unitária, representadas pelos índices $j = 1, \dots, n$. Considerando que o sistema tem uma invariância translacional, escrevemos as funções de Bloch $\Phi(\mathbf{k}, \mathbf{r})$, que depende da posição e do vetor de onda, como:

$$\Phi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N \phi_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j,i}) \exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{j,i}] \quad , \quad (\text{E-4})$$

onde somamos sobre as N diferentes células unitárias e $\mathbf{R}_{j,i}$ representa o j -ésimo orbital na i -ésima célula unitária. Em geral, podemos escrever a função de onda como uma combinação linear das n funções de Bloch:

$$\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_{l=1}^n c_{j,l}(\mathbf{k}) \Phi_l(\mathbf{k}, \mathbf{r}) ,$$

onde, $c_{j,i}$ são os coeficientes da expansão e a energia $E_j(\mathbf{k})$ da j -ésima banda é:

$$E_j(\mathbf{k}) = \frac{\langle \Psi_j | H | \Psi_j \rangle}{\langle \Psi_j | \Psi_j \rangle} = \frac{\sum_{i,l} H_{i,l} c_{j,i}^* c_{j,l}}{\sum_{i,l} S_{i,l} c_{j,i}^* c_{j,l}} ,$$

com,

$$H_{i,l} = \langle \Phi_i | H | \Phi_l \rangle \quad \text{e} \quad S_{i,l} = \langle \Phi_i | \Phi_l \rangle \quad (\text{E-5})$$

Onde H é denominada como matrix de transferência e S como matriz de sobreposição.

Minimizando a energia:

$$\frac{\partial E_j}{\partial c_{j,m}^*} = 0 ,$$

obtemos,

$$\sum_{l=1}^n (H_{m,l} - E_j S_{m,l}) c_{j,l} = 0 ,$$

que pode ser escrita na forma matricial como:

$$H \phi_j = E_j S \phi_j \quad (\text{E-6})$$

onde,

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} , \quad S = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1n} \\ S_{21} & S_{22} & \cdots & S_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} & \cdots & S_{nn} \end{pmatrix} , \quad \psi = \begin{pmatrix} c_{j,1} \\ c_{j,2} \\ \vdots \\ c_{j,n} \end{pmatrix}$$

e, portanto, E_j pode ser determinada resolvendo a equação secular:

$$\det(H - E_j S) = 0 . \quad (\text{E-7})$$

Aplicamos agora o modelo *tight-binding* descrito no apêndice anterior a uma camada de grafeno. Como existem dois átomos em uma célula unitária do grafeno, A e B , o modelo inclui duas funções de Bloch, $n = 2$. Para simplificação, substituímos $j = 1$ por $j = A$ e $j = 2$ por $j = B$.

Substituindo (E-4) na expressão (E-5) nos permite escrever os elementos da matriz diagonal corresponde a subrede como:

$$H_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{A,j} - \mathbf{R}_{A,i})] \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,j}) \rangle \quad (\text{E-8})$$

onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ é o vetor de onda no plano do grafeno. Além disto, esta equação inclui uma dupla soma sobre todos os sítios A da rede. Se assumirmos que a contribuição determinante é aquela do mesmo sítio, isto é, $j = i$, então:

$$H_{AA} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) \rangle$$

como o elemento de matriz que aparece nesta expressão tem o mesmo valor para todo sítio A , o escrevemos como um parâmetro ϵ :

$$H_{AA} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \epsilon = \epsilon \quad (\text{E-9})$$

Por outro lado, a subrede B tem a mesma estrutura da subrede A , ou seja, os átomos de carbono das duas subredes são quimicamente idênticos. Podemos dizer então que:

$$H_{AA} = H_{BB} = \epsilon \quad (\text{E-10})$$

O cálculo dos elementos da diagonal da matriz S procede de maneira análoga, onde se conclui que:

$$S_{AA} = S_{BB} = 1 \quad (\text{E-11})$$

Novamente, das equações (E-4) e (E-5), podemos escrever os elementos de matriz fora da diagonal principal. Temos então:

$$H_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{B,j} - \mathbf{R}_{A,i})] \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B,j}) \rangle \quad (\text{E-12})$$

Esta expressão descreve o processo de troca dos átomos (*hopping*) entre as sub-redes A e B e contém a soma sobre todos os sítios A ($j = 1, \dots, N$) nas posições $\mathbf{R}_{A,i}$ e todos os sítios B ($j = 1, \dots, N$) em $\mathbf{R}_{B,j}$. Assumimos aqui que a contribuição dominante neste caso advém apenas da troca entre os primeiro vizinhos e, se olharmos para um átomo do sítio A , ele terá 3 átomos vizinhos na sub-rede B , que será indexada por l ($l = 1, 2, 3$). Assim, a expressão anterior pode ser reduzida a:

$$H_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{B,l} - \mathbf{R}_{A,i})] \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B,l}) \rangle \quad (\text{E-13})$$

Os elementos de matrizes nesta expressão tem o mesmo valor para par da vizinhança, isto é, independe dos índices i e l . Definimos assim o parâmetro de *hopping* t como:

$$t = \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | H | \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B,l}) \rangle$$

onde $t < 0$.

Podemos então, escrever os elementos não diagonais de H como:

$$H_{AB} \approx t f(\mathbf{k}) \quad (\text{E-14})$$

onde,

$$f(\mathbf{k}) = \sum_{l=1}^3 \exp[i \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\delta}_l]$$

e o vetor $\boldsymbol{\delta}_l = \mathbf{R}_{B,l} - \mathbf{R}_{A,i}$, representado na Figura 3.

Analogamente a estes cálculos, pode ser verificado que:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad H_{BA} &\approx t f^*(\mathbf{k}) \\ \text{(b)} \quad S_{BA} &= S_{AB}^* = s_0 f^*(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (\text{E-15})$$

onde,

$$s_0 = \langle \phi_A(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{A,i}) | \phi_B(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{B,l}) \rangle . \quad (\text{E-16})$$

- Relação de dispersão do grafeno

Nas seções anteriores foi mostrado em mais detalhes que as energias dos átomos podem ser obtidas pela solução da equação secular $\det(H_1 - E S_1) = 0$, onde as matrizes H_1 e S_1 foram calculadas para o grafeno. Os resultados obtidos foram:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad H_1 &= \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} & t f(\mathbf{k}) \\ t f^*(\mathbf{k}) & \epsilon_{2p} \end{pmatrix} \\ \text{(b)} \quad S_1 &= \begin{pmatrix} 1 & s_0 f(\mathbf{k}) \\ s_0 f^*(\mathbf{k}) & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{E-17})$$

de forma que a equação secular fica,

$$\det \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} - E & -(-t + E s_0) f(\mathbf{k}) \\ -(-t + E s_0) f^*(\mathbf{k}) & \epsilon_{2p} - E \end{pmatrix} = 0 , \quad (\text{E-18})$$

e resolvendo o determinante, temos:

$$(E - \epsilon_{2p})^2 - (|E - \epsilon_{2p}| s_0 + \epsilon_{2p} s_0 + \gamma_0)^2 |f(\mathbf{k})|^2 = 0 \quad (\text{E-19})$$

cuja solução desta equação quadrática resulta nas energias:

$$E_{\pm} = \frac{\epsilon \pm \gamma_0 |f(\mathbf{k})|}{1 \mp s_0 |f(\mathbf{k})|} . \quad (\text{115})$$

A Figura 5 mostra a estrutura de banda E_{\pm} próxima a zona de Brillouin, para os parâmetros $t = -3,033 \text{ eV}$, $s_0 = 0,129$, $\epsilon = 0$ [32].

Um corte particular através da estrutura de banda é mostrada na FIGURA 6, onde as bandas são plotadas como função da componente do vetor de onda k_x ao longo da linha $k_y = 0$, a linha que passa pelo centro da zona de Brillouin Γ e em dois vértices, K_- e K_+ .

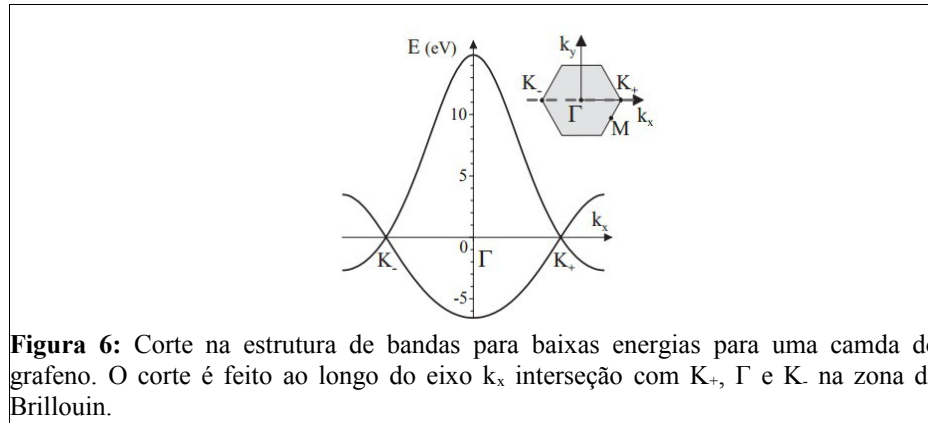


Figura 6: Corte na estrutura de bandas para baixas energias para uma camada do grafeno. O corte é feito ao longo do eixo k_x interseção com K_+ , Γ e K_- na zona de Brillouin.

Existem duas bandas de energia, que referem às bandas de condução (E_+) e de valência (E_-). O detalhe é que esta estrutura de banda não possui *gap* entre as bandas de condução e valência. Ao invés, as bandas passam pelos seis vértices da zona de Brillouin e são conhecidos como pontos K e dois são explicitamente, K_- e K_+ . Perto destes pontos, a dispersão é linear e as propriedades eletrônicas podem ser descritas por uma Hamiltoniana de Dirac [32, 33].

F - Diferenciação Funcional

Nesta seção definimos a diferenciação funcional. Por analogia com a diferenciação ordinária, a derivada de um funcional $F[f]$ com respeito a função $f(y)$ é definida por:

$$\frac{\delta F[f(x)]}{\delta f(y)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[f(x) + \epsilon \delta(x-y)] - F[f(x)]}{\epsilon} \quad (\text{F.1})$$

Como exemplo, considere o funcional:

$$F[f] = \int dx f(x) \quad (\text{F.2})$$

então,

$$\frac{\delta F[f]}{\delta f(y)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left[\int dx [f(x) + \epsilon \delta(x-y)] - \int dx f(x) \right] = \int dx \delta(x-y) = 1 \quad (\text{F.3})$$

Um segundo exemplo, considere agora:

$$F_x[f] = \int dy G(x, y) f(y) \quad (\text{F.4})$$

onde aqui, x do lado esquerdo deve ser tratado como um parâmetro. Então:

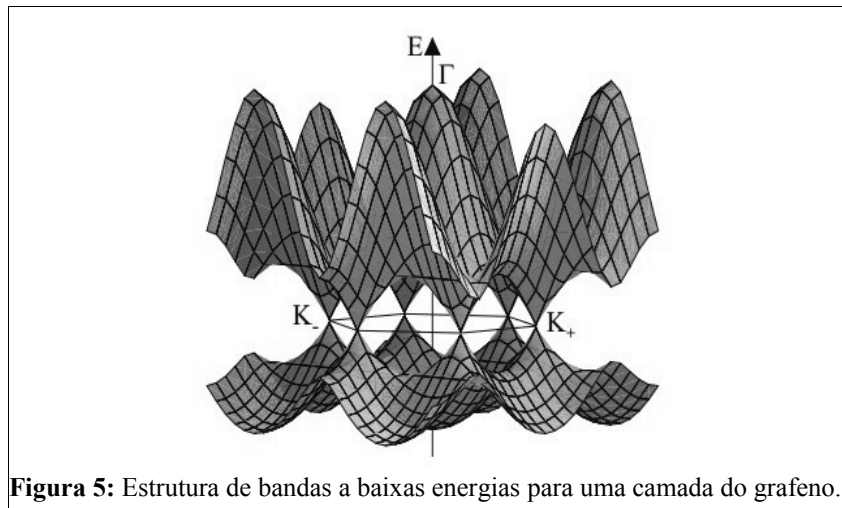


Figura 5: Estrutura de bandas a baixas energias para uma camada do grafeno.

$$\begin{aligned} \frac{\delta F_x[f]}{\delta f(z)} &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \left[\int dy G(x, y) [f(y) + \epsilon \delta(y-z)] - \int dy G(x, y) f(y) \right] \\ &= \int dy G(x, y) \delta(y-z) = G(x, z) \end{aligned} \quad (\text{F.5})$$

G - Código Wolfram Mathematica para equações de *gap*

(a) $d = 4, g = 1, m = 1$

```
For[i = 0, i < 1001, i++,
Print[i ,
FindRoot[x + ((5 + x)/(4 Pi ^ 2 )) ((i^2) - (5 + x)^2 Log[
1 + ((i ^ 2) / (5 + x)^2)] ) == 0, {x, -50, 50}]]]
```

(b) $d = 4, g = 1, m = 10$

```
For[i = 0, i < 1001, i++,
Print[i ,
FindRoot[100 x + ((5 + x)/(4 Pi ^ 2 )) ((i^2) - (5 + x)^2 Log[
1 + ((i ^ 2) / (5 + x)^2)] ) == 0, {x, -50, 50}]]]
```

(c) $d = 3, g = 1, m = 1$

```
For[i = 0, i < 2001, i++,
Print[i ,
FindRoot[x + ((5 + x)/(Pi ^ 2)) (i - (5 + x) ArcTan[i / (5 + x)]) ==
0, {x, -50, 50}]]]
```

(d) $d = 3, g = 1, m = 10$

```
For[i = 0, i < 2001, i++,
  Print[i ,
    FindRoot[100 x + ((5 + x)/(Pi ^2)) (i - (5 + x) ArcTan[
      i / (5 + x)]) == 0, {x, -50, 50}]]]
```

(e) $d = 2, g = 1, m = 1$

```
For[i = 0, i < 1001, i++,
  Print[i ,
    FindRoot[x + ((5 + x)/(2 Pi )) Log[1 + (i ^2)/(5 + x)^2] ==
      0, {x, -50, 50}]]]
```

(f) $d = 2, g = 1, m = 10$

```
For[i = 0, i < 1001, i++,
  Print[i ,
    FindRoot[100 x + ((5 + x)/(2 Pi )) Log[1 + (i ^2)/(5 + x)^2] ==
      0, {x, -50, 50}]]]
```