



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

INSTITUTO DE FÍSICA

TESE DE DOUTORADO

Aspectos de modelos eletrônicos bidimensionais fortemente correlacionados: aplicações em cupratos supercondutores

Por

Vanildo Silva de Carvalho

GOIÂNIA-GO

Junho de 2016

TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO PARA DISPONIBILIZAR AS TESES E DISSERTAÇÕES ELETRÔNICAS NA BIBLIOTECA DIGITAL DA UFG

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFG), regulamentada pela Resolução CEPEC Nº 832/2007, sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a Lei Nº 9610/98, o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou *download*, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

1. **Identificação do material bibliográfico:** Dissertação Tese

2. **Identificação da Tese ou Dissertação:**

(a) Nome completo do autor: Vanuildo Silva de Carvalho

(b) Título do trabalho: Aspectos de modelos eletrônicos bidimensionais fortemente correlacionados: aplicações em cupratos supercondutores

3. **Informações de acesso ao documento:**

Concorda com a liberação total do documento: Sim Não¹

Havendo concordância com a disponibilização eletrônica, torna-se imprescindível o envio do(s) arquivo(s) em formato digital PDF da tese ou dissertação.



Vanuildo Silva de Carvalho

Ciente e de acordo:



Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva

Orientador

Data: 06/07/2017

¹Neste caso, o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. A extensão deste prazo suscita justificativa junto à coordenação do curso. Os dados do documento não serão disponibilizados durante o período de embargo.

Casos de embargo: (i) solicitação de registro de patente; (ii) submissão de artigo em revista científica; (iii) publicação como capítulo de livro; (iv) e publicação da dissertação/tese em livro.

TESE DE DOUTORADO

Aspectos de modelos eletrônicos bidimensionais fortemente correlacionados: aplicações em cupratos supercondutores

Por

Vanildo Silva de Carvalho

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

Orientador:

Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva

GOIÂNIA-GO

Junho de 2016

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFG.

Silva de Carvalho, Vanuildo

Aspectos de modelos eletrônicos bidimensionais fortemente correlacionados: aplicações em cupratos supercondutores

[manuscrito] / Vanuildo Silva de Carvalho. - 2016.

xxiv, 132 f.: il.

Orientador: Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física (IF), Programa de Pós-Graduação em Física, Goiânia, 2016.

Bibliografia. Apêndice.

Inclui gráfico, tabelas, lista de figuras, lista de tabelas.

1. Teoria quântica de campos. 2. Sistemas Fermiônicos. 3. Supercondutividade. 4. Mecânica estatística. I. Freire Ferreira Lima e Silva, Hermann, orient. II. Título.

CDU 53



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





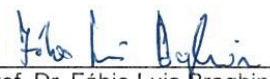
Ata Nº 26 de defesa de tese de
Vanildo Silva de Carvalho para
obtenção do título de Doutor em
Física.

Aos 06 dias do mês de junho de 2016, às 13h00min, no Anfiteatro do Instituto de Física da UFG, reuniu-se a Banca Examinadora indicada pela Coordenadoria do Programa de Pós-Graduação, aprovada pelo Conselho Diretor e designada pela Diretoria do Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás, composta pelo **Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva** (orientador e presidente da Banca – IF/UFG), **Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira** (IFSC/USP), **Prof. Dr. Eduardo Miranda** (IFGW/UNICAMP), **Prof. Dr. José Nicodemos Teixeira Rabelo** (IF/UFG) e **Prof. Dr. Fábio Luis Braghin** (IF/UFG) para julgar a tese de doutorado de **Vanildo Silva de Carvalho**, intitulada: "**Aspectos de modelos eletrônicos bidimensionais fortemente correlacionados: aplicações em cupratos supercondutores**". O Presidente abriu os trabalhos agradecendo a presença dos membros da Banca Examinadora e concedeu a palavra a **Vanildo Silva de Carvalho**, que expôs detalhadamente seu trabalho. Em seguida, os membros da Banca fizeram suas considerações e procederam à arguição do candidato. Concluída essa etapa, a Banca, em sessão fechada, deu prosseguimento ao julgamento do trabalho, atribuindo os seguintes conceitos:

Prof. Dr. Hermann F. Ferreira Lima e Silva (orientador)	<u>APROVADO</u>
Prof. Dr. Luiz Nunes de Oliveira (IFSC/USP)	<u>APROVADO</u>
Prof. Dr. Eduardo Miranda (IFGW/UNICAMP)	<u>APROVADO</u>
Prof. Dr. José Nicodemos Teixeira Rabelo (IF/UFG)	<u>APROVADO</u>
Prof. Dr. Fábio Luis Braghin (IF/UFG)	<u>APROVADO</u>

Novamente em sessão aberta, o presidente da Banca anunciou o resultado final do julgamento, declarando o candidato **Vanildo Silva de Carvalho** APROVADO pela Banca Examinadora. Nada mais havendo a tratar, a sessão foi encerrada e lavrou-se a presente ata que segue assinada pelos membros da Banca Examinadora.

Goiânia, 06 de junho de 2016.

 Prof. Dr. Hermann F. F. L. e Silva	 Prof. Dr. Luiz N. de Oliveira	 Prof. Dr. Eduardo Miranda
 Prof. Dr. José N. Teixeira Rabelo	 Prof. Dr. Fábio Luis Braghin	

Dedicado a Olga (*in memoriam*), Eleni, Priscila e Marleth.

Agradecimentos

Lend me your ears and I'll sing you a song

And I'll try not to sing out a key.

With a little help from my friends

Lennon & McCartney

Agora que o meu ciclo como estudante no Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás (UFG) está chegando ao fim, sinto-me feliz por estar realizando o sonho da minha adolescência, que era um dia fazer o curso de doutorado em Física, e ao mesmo tempo triste por ter que dizer adeus a todas as pessoas que, de alguma forma, acabaram se tornando minhas amigas ou mentores, durante esses dez anos como aluno nesta instituição.

Sendo assim, agradeço, especialmente, ao meu orientador, Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva, pela sua brilhante orientação durante o meu curso de Doutorado e também pelo seu empenho em me fazer uma pessoa menos pessimista com relação aos meus projetos de pesquisa. Agradeço, da mesma forma, à minha supervisora de doutorado sanduíche, Profa. Dra. Catherine Pépin, por ter me recebido no seu grupo de pesquisa na França e também por ter me incentivado a realizar pesquisa em Física de forma independente.

Não poderia deixar de expressar a minha gratidão, pelo apoio constante recebido em todos esses anos longe de casa, aos meus pais, Vandu e Eleni, aos meus irmãos, Duílio e Derlam, e à minha pequena e grande irmã, Priscila. Agradeço à minha namorada, Marleth Nunes, pelo seu carinho e também pela sua imensa ajuda na minha adaptação à vida na França.

Da mesma forma, não poderia deixar de mencionar aqui os meus agradecimentos à minha grande amiga, Cinthia Antunes, pelas nossas conversas e pelos seus conselhos, principalmente durante o meu período na Europa.

Quanto aos meus colegas e amigos de UFG que conheci durante a graduação, mestrado, doutorado e no meu período como residente na Casa do Estudante Samambaia, ficam aqui os meus sinceros agradecimentos a Kelen Noleto, Idney Brandão, Hugo Couto, Rosane Castro, Franco Delfino, Bruno de Brito, Renan Oliveira, Fausto Faria, Elisson Batista, Thiago Mureebe, Thais de Lima, Victor Pina, Wilma Flor, Bianca Ieda, Ostiano Nunes, Ilton Menezes e Alba Dutra. Vocês me fizeram crescer bastante como pessoa e serei eternamente grato por isso. Acho que nunca me esquecerei das nossas incríveis discussões sobre os mais variados temas pelo Campus Samambaia. Também não me esquecerei dos nossos momentos descontraídos, principalmente na hora do nosso café.

Pela sua extrema dedicação aos alunos e também pela sua amizade, presto aqui uma homenagem especial aos professores Álvaro de Almeida Caparica, Salviano Leão, Francisco Osório e José Nicodemos Teixeira Rabelo do Instituto de Física da UFG. Gostaria também de agradecer às pessoas da secretaria, que sempre se mostraram bem prestativas para me guiar na solução dos problemas burocráticos. Em especial, gostaria de agradecer o carinho e afeto das secretárias Sirlene Pereira e Ludmilla Otaviana (*in memoriam*).

Agradeço também à *Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal do Nível Superior* (CAPES) e ao programa *Ciência sem Fronteiras* (CsF) do governo federal pelo apoio financeiro recebido durante os três anos que permaneci no Brasil, como aluno de doutorado na UFG, e um ano na França, como aluno de doutorado sanduíche no Institut de Physique Théorique (IPhT) do *Commissariat à l'Énergie Atomique et aux Énergies Alternatives* (CEA) de Saclay. Não poderia deixar de expressar os meus agradecimentos ao International Institute of Physics (IIP), em Natal, pelo custeio da minha pequena estadia em 2014, que possibilitou várias discussões que deram início ao nosso trabalho sobre o efeito de quebra espontânea da simetria de reversão temporal nas fases eletrônicas exibidas pelo modelo de três bandas para os cupratos supercondutores.

Conteúdo

Capa	i
Dedicatória	vi
Agradecimentos	vii
Conteúdo	ix
Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xix
Resumo	xx
Abstract	xxii
Lista de Publicações	xxiv
1 Introdução	1
1.1 Fenomenologia dos cupratos supercondutores	1
1.2 Aspectos teóricos dos vários tipos de quebras espontâneas de simetria nos cupratos supercondutores	6
1.3 Considerações sobre a estrutura desta tese	9
2 Líquido de não-Fermi em um modelo fermiônico bidimensional de <i>hot spots</i>	12
2.1 O modelo fermiônico bidimensional de <i>hot spots</i>	14
2.2 Fluxo de grupo de renormalização na aproximação de um <i>loop</i>	19
2.3 Renormalização da velocidade de Fermi, dimensão anômala e processos unidimensionais	26
2.4 Fluxo de grupo de renormalização na aproximação de dois <i>loops</i>	36
2.5 Equação de Callan-Symanzik	44
2.6 Instabilidades do modelo fermiônico de <i>hot spots</i>	45
2.6.1 Supercondutividade e onda de densidade de carga e spin com vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ e $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$	45
2.6.2 Onda de densidade de pares e ordem de carga	59
2.6.3 Ordens de carga e spin uniformes	65

3	Competição entre a fase de corrente de <i>loop</i> do tipo Θ_{II} e a fase de carga com simetria $d_{x^2-y^2}$ na direção da diagonal em um modelo bidimensional com <i>hot spots</i>	70
3.1	Modelo de três bandas	71
3.2	Derivação do modelo de spin-férmion na presença de correntes de loop a partir do modelo de três bandas	71
3.3	Determinação das somas sobre as frequências de Matsubara nas equações auto-consistentes de campo médio	83
3.3.1	Equação auto-consistente de campo médio para o parâmetro de ordem onda de densidade quadrupolar (ODQ)	83
3.3.2	Equação auto-consistente de campo médio para o parâmetro de ordem de corrente de <i>loop</i> do tipo Θ_{II} (CL- Θ_{II})	87
3.4	Solução das equações auto-consistentes de campo médio	88
4	Coexistência entre a fase de corrente de <i>loop</i> do tipo Θ_{II} com onda de densidade de pares e ordem de carga com simetria $d_{x^2-y^2}$ em um modelo bidimensional com <i>hot spots</i>	92
4.1	Modelo e método	92
4.2	Solução das equações auto-consistentes de campo médio	97
5	Conclusões e perspectivas	104
A	Determinação das matrizes $\hat{\Gamma}_i$	109
B	Cálculo do determinante das funções matriciais de Green $G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ e $G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$	113
B.1	Determinante da função matricial de Green $G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$	113
B.2	Determinante da função matricial de Green $G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$	119
	Bibliografia	123

Lista de Figuras

- 1.1 (a) Diagrama de fases esquemático para os cupratos dopados com buracos mostrando as fases antiferromagnética isolante, supercondutora do tipo $d_{x^2-y^2}$ (SC), pseudogap (PG), metal anômalo e líquido de Fermi desses materiais. As três primeiras fases correspondem, nessa ordem, às temperaturas de transição T_N (temperatura de Néel), T_c e T^* . As linhas tracejadas na figura indicam regiões de *crossover* e o pequeno círculo preto indica um suposto ponto crítico quântico p_c que pode existir no interior do domo supercondutor. (b) Representação esquemática da superfície de Fermi (bordas da superfície em amarelo) dos cupratos para a fase de líquido de Fermi com as linhas tracejadas representando a zona antiferromagnética. Na fase de pseudogap, a superfície de Fermi entre os *hot spots* (círculos pretos numerados de 1 a 8) e os pontos antinodais (círculos vermelhos) é destruída. Por sua vez, as modulações de carga no interior do pseudogap ocorrem para os vetores de onda $(Q_0, 0)$ e $(0, Q_0)$. (c) Orbitais do cobre (Cu) e oxigênio (O) na célula unitária de CuO_2 para os cupratos. (d) Esquema de fluxo das correntes de *loop* na célula unitária de CuO_2 para a fase Θ_{II} . Os símbolos (\odot) e (\otimes) indicam o sentido do campo magnético gerado por essas correntes. 3

- 2.1 (a) Zona de Brillouin da rede quadrática com a superfície de Fermi (contorno da área em amarelo) para o modelo de Hubbard gerada pela dispersão $\xi(\mathbf{k})$ com interações entre primeiros e segundos vizinhos. De acordo com medidas experimentais de espectroscopia de fotoemissão, essa superfície de Fermi é a mesma dos cupratos supercondutores no regime super-dopado. (b) Superfície de Fermi do modelo fermiônico bidimensional truncada nos chamados *hot spots*, que são representados pelos círculos escuros. Esses pontos são aqui definidos como a intersecção da superfície de Fermi com a zona antiferromagnética (quadrado com linhas tracejadas), sendo os mesmos conectados pelo vetor de de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Os graus de liberdade fermiônicos nos oito *hot spots* são representados, na figura, pelos campos de Grassmann $\psi_{\ell,\sigma}$, com $\ell = 1, \dots, 8$ e projeção de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 16
- 2.2 Representação, utilizando a notação de g-ologia, das interações relevantes para o modelo fermiônico bidimensional de *hot spots*, definido através da teoria de campos $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$ na Eq. (2.2). Na nossa notação, os processos correspondentes à interação g_{1s} são representados por setas contínuas, enquanto aqueles relacionados à interação g_{1l} são definidos em termos de setas tracejadas. 18
- 2.3 Representação diagramática das bolhas de polarização partícula-partícula (a), $\Pi_{m\ell}(\mathbf{q}, q_0)$, e partícula-buraco (b), $\chi_{m\ell}(\mathbf{q}, q_0)$, que aparecem no cálculo das funções vértices $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_{0j}\})$ do modelo fermiônico de *hot spots*. As linhas contínuas correspondem às funções de Green do modelo, as linhas onduladas às interações g_i , e os índices ℓ e m referem-se a dois dos oito *hot spots* presentes na superfície de Fermi do modelo. 20
- 2.4 Função vértice irreduzível $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_i, k_{0i}\})$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) para os diversos tipos de interação do modelo fermiônico de *hot spots* calculada usando teoria de perturbação até a ordem de um *loop*. 22
- 2.5 Função vértice renormalizada $\Gamma_i^{R(4)}(\{\mathbf{k}_i, k_{0i}\})$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) para os diversos canais de interação do modelo fermiônico de *hot spots* calculada usando teoria de perturbação renormalizada até a ordem de um *loop*. O último diagrama representa os contra-termos $-i\Delta g_{iR}$ da teoria. 23

- 2.6 Expansão da auto-energia $-i\Sigma_\ell^R(\mathbf{k}, k_0)$ para as excitações fermiônicas na vizinhança do *hot spot* $\ell = 1$ em função dos diagramas de Feynman de dois *loops* com divergências logarítmicas no limite de baixa energia do sistema. Aqui, as linhas contínuas representam o propagador não-interagente do modelo $iG_\ell(\mathbf{k}, k_0)$, as linhas onduladas correspondem, a menos de um fator $-i$, às interações renormalizadas g_{iR} do modelo e o último diagrama é o contra-termo da auto-energia, que descreve, por sua vez, o efeito das constantes de renormalização Z_ψ , Z_v^x e Z_v^y . Além disso, todos os diagramas de dois *loops* apresentados aqui contribuem também para a renormalização das componentes da velocidade de Fermi $\mathbf{v}_1 = (v_x, v_y)$ do *hot spot* $\ell = 1$ 29
- 2.7 Representação da superfície de Fermi do modelo fermiônico de *hot spots* com o aspecto de “gargalo de garrafa”. Esse efeito ocorre devido à forte renormalização para zero da razão $\kappa_R = v_y^R/v_x^R$ entre as componentes da velocidade de Fermi nos *hot spots*, que leva ao aparecimento de *nesting* entre as regiões da superfície de Fermi separadas pelo vetor de onda do ordenamento antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. 30
- 2.8 Correção para a auto-energia $-i\Sigma_\ell^R(\mathbf{k}, k_0)$ devido às excitações fermiônicas na vizinhança do *hot spot* $\ell = 1$ no limite onde a componente da velocidade de Fermi \mathbf{v}_1 tangente à superfície de Fermi tende a zero. Nesse caso, o termo de correção para a auto-energia, denominado aqui por $-i\delta\Sigma_\ell^R(\mathbf{k}, k_0)$, é dado em termos de diagramas de dois *loops* devido às interações unidimensionais g_1 , g_2 e g_3 . Na figura, as linhas contínuas representam o propagador não-interagente do modelo $iG_\ell(\mathbf{k}, k_0)$ e as linhas onduladas, a menos de um fator $-i$, correspondem às interações renormalizadas do modelo. 32
- 2.9 Fluxo de grupo de renormalização em função da variável $l = \ln(\Lambda_0/\Lambda)$ para os acoplamentos do modelo fermiônico de *hot spots* na aproximação de um *loop*, com condições iniciais repulsivas $g_i(0) = 1/2$ 35
- 2.10 Expansão esquemática, dada em termos de diagramas de Feynman, da função vértice $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_{0j}\})$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) para os vários canais de interação g_i do modelo fermiônico de *hot spots* até a ordem de dois *loops*. Aqui, os índices ℓ_1, \dots, ℓ_4 referem-se a um dos oito *hot spots* do modelo, as linhas contínuas correspondem aos propagadores livres $iG_\ell(\mathbf{k}, k_0)$ e as linhas onduladas representam, por sua vez, os termos renormalizados $-ig_{iR}$ 38

- 2.11 Fluxo de grupo de renormalização em função da variável $l = \ln(\Lambda_0/\Lambda)$ para os acoplamentos do modelo fermiônico de *hot spots* na aproximação de dois *loops*, com condições iniciais repulsivas $g_i(0) = 1/2$ 41
- 2.12 Superfície de Fermi do modelo fermiônico de *hot spots* com os vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$, $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ e $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ das possíveis instabilidades onda de densidade e supercondutora que podem afetar o estado normal do sistema. 47
- 2.13 Função vértice supercondutora $\Gamma_{SC}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) expandida em termos dos diagramas de Feynman que contribuem efetivamente para o modelo fermiônico de *hot spots* até a ordem de dois *loops*. Aqui, os triângulos e o quadrado com um “×” inscrito indicam, a menos do fator imaginário $\pm i$, as funções respostas $\Delta_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}$ e o contra-termo $\delta\Delta_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}$ do canal supercondutor. Nesse caso, consideramos a interação entre férmions localizados nos *hot spots* $\ell = 1$ e $m = 3$, cujos spins são dados, respectivamente, pelas variáveis discretas σ e σ' 48
- 2.14 Função vértice onda de densidade $\tilde{\Gamma}_{OD}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) com vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ expandida em termos dos diagramas de Feynman que contribuem efetivamente para o modelo fermiônico de *hot spots* até a ordem de dois *loops*. Aqui, os triângulos e o quadrado com um “×” inscrito indicam, a menos do fator imaginário $-i$, as funções respostas $\tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}$ e o contra-termo $\delta\tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}$ do correspondente canal onda de densidade. Nesse caso, consideramos a interação entre férmions localizados nos *hot spots* $\ell = 1$ e $m = 3$, cujos spins são dados, respectivamente, pelas variáveis discretas σ e σ' 49
- 2.15 Função vértice onda de densidade $\Gamma_{OD}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) com vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ expandida em termos dos diagramas de Feynman que contribuem efetivamente para o modelo fermiônico de *hot spots* até a ordem de dois *loops*. Aqui, os triângulos e o quadrado com um “×” inscrito indicam, a menos do fator imaginário $-i$, as funções respostas $\chi_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}$ e o contra-termo $\delta\chi_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}$ do correspondente canal onda de densidade. Nesse caso, consideramos a interação entre férmions localizados nos *hot spots* $\ell = 1$ e $m = 2$, cujos spins são dados, respectivamente, pelas variáveis discretas σ e σ' 50
- 2.16 Sinais dos parâmetros de ordem supercondutor e onda de densidade com simetria s (a) e $d_{x^2-y^2}$ (b) na região em torno dos oito *hot spots*, que são definidos como a intersecção da superfície de Fermi com a zona antiferromagnética. 51

2.17	Fluxo de grupo de renormalização das susceptibilidades das fases SCS- d , $\widetilde{\text{ODC}}-d$, $\widetilde{\text{ODS}}-s$ e ODS- s do modelo fermiônico de <i>hot spots</i> na aproximação de dois <i>loops</i> , com as condições iniciais $g_{iR}(0) = 1/2$ para os acoplamentos renormalizados. Essas susceptibilidades são calculadas em unidades da densidade de estados $N(0)$ para a variável $l = \ln(\Lambda_0/\Lambda)$	58
2.18	(a) Função vértice supercondutora $\Gamma_{SC,45}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) expandida em termos dos diagramas de Feynman que contribuem efetivamente para o modelo fermiônico de <i>hot spots</i> até a ordem de dois <i>loops</i> . (b) Função vértice ordem de carga $\Gamma_{OC,45}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) com vetor de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ expandida em termos dos diagramas de Feynman que contribuem efetivamente para o modelo fermiônico de <i>hot spots</i> até a ordem de dois <i>loops</i>	62
2.19	Expansão da função de correlação $\Gamma_{OD,\ell,\ell}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza do lado esquerdo da igualdade) em termos dos diagramas de Aslamazov-Larkin [67, 77] de dois <i>loops</i> . Essa função de correlação está relacionada às funções respostas uniformes renormalizadas $\mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^{R\ell}$, que são representadas aqui na forma de triângulos nos diagramas de Feynman, enquanto o contra-termo $\delta\mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^{R\ell}$ dessas funções aparece indicado por um quadrado com um “ \times ” inscrito no último diagrama da expansão.	67
2.20	Fluxo do grupo de renormalização das susceptibilidades uniformes de carga (C) e spin (S) do modelo fermiônico de <i>hot spots</i> na aproximação de dois <i>loops</i> , com as condições iniciais $g_{iR}(0) = 1/2$ para os acoplamentos renormalizados.	68
3.1	Estrutura orbital e os tipos de interação presentes no modelo de três bandas para a célula unitária de CuO_2	72
3.2	Configuração das correntes de <i>loop</i> na célula unitária de CuO_2 para as fases de CL- Θ_I (a) e CL- Θ_{II} (b) proposta por Varma para explicar algumas das propriedades físicas do estado de pseudogap nos cupratos supercondutores. Em ambas as figuras (a) e (b), os símbolos (\odot) e (\otimes) indicam a orientação dos momentos magnéticos locais gerados pelas correntes de <i>loop</i>	74

- 3.3 Representação da zona de Brillouin com a superfície de Fermi (contorno da região em azul) que caracteriza a fase de líquido de Fermi dos cupratos supercondutores. Os pequenos círculos pretos correspondem aos chamados *hot spots*, que são definidos como a intersecção da superfície de Fermi com a zona antiferromagnética (linhas tracejadas). Na notação usada nesta figura, o *hot spot* indexado como 1 possui coordenadas no espaço recíproco definidas pelo vetor de onda dado por $\mathbf{k}_1 = (K_-, K_+)$, onde as suas componentes estão relacionadas pela condição $K_- + K_+ = \pi$. As coordenadas dos outros *hot spots* na zona de Brillouin podem ser obtidas por meio de \mathbf{k}_1 , através do uso de operações de simetria de rotação e reflexão. 75
- 3.4 (a) Contorno de integração \mathcal{C}_1 para o cálculo da soma de Matsubara que aparece na equação auto-consistente de campo médio para o parâmetro de ordem da fase ODQ. Os símbolos (\times) representam os polos da função distribuição de Fermi-Dirac $n_F(z) = (e^{\beta z} + 1)^{-1}$ e a linha azul ondulada no eixo horizontal $\text{Im}(z) = 0$ denota a região de singularidade (ou linha de corte) do propagador $D_{ef}(-iz, \mathbf{k})$. (b) Para resolver a soma de Matsubara nesse caso, o contorno de integração \mathcal{C}_1 deve ser distorcido de tal forma a se transformar no contorno \mathcal{C}_2 , que não tangencia nenhum dos polos de $n_F(z)$ assim como não cruza o eixo horizontal $\text{Im}(z) = 0$ 85
- 3.5 (a) Resultados de campo médio dos parâmetros de ordem R_{II} e b em função da interação entre primeiros vizinhos V_{pd} no limite de temperatura nula para o valor $\lambda = 20$ da interação spin-férmion. (b) Resultados de campo médio dos parâmetros de ordem R_{II} e b em função da interação spin-férmion λ no limite de temperatura absoluta nula para $V_{pd} = 14$. Ambos os resultados em (a) e (b) foram derivados através de integração numérica no espaço de momento das equações auto-consistentes para b e R_{II} dadas nas Eqs. (3.50) e (3.57) com uma rede de 320×320 pontos na zona de Brillouin. Aqui, $m_a = 10^{-2}$, $\gamma = 10^{-5}$ e os outros parâmetros do modelo são definidos por $t_{pd} = 1$, $t_{pp} = 0.5$, $U_p = 3$ e $\varepsilon_d - \varepsilon_p = 3$. A densidade fermiônica no orbital do oxigênio corresponde a $n_p = 0.6$ e a posição relativa dos *hot spots* é tal que $\delta = 0.93$ 90

- 4.1 (a) Representação esquemática da superfície de Fermi (curvas que contornam a área amarela) que caracteriza os cupratos supercondutores para parâmetros experimentalmente relevantes. Os vetores $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$, na direção dos eixos principais da zona de Brillouin, representam aqueles da ordem de carga observada experimentalmente em algumas famílias de cupratos supercondutores. Os pontos sobre a superfície de Fermi numerados de 1 a 8 nessa figura referem-se aos *hot spots*, que são definidos como a intersecção dessa superfície com a zona antiferromagnética do modelo. O *hot spot* com índice 1 possui vetor de onda $\mathbf{k}_1 = (K_-, K_+)$ no espaço recíproco e as suas componentes obedecem a relação $K_- + K_+ = \pi$. Os vetores de onda dos outros *hot spots* podem ser então obtidos através de operações de reflexão e rotação através de \mathbf{k}_1 . (b) Estrutura dos orbitais do cobre [$\text{Cu}(3d_{x^2-y^2})$] e oxigênio [$\text{O}(2p_x)$ e $\text{O}(2p_y)$] na célula unitária de CuO_2 para o modelo de três bandas (ou modelo de Emery). (c) Padrão das correntes de *loop* do tipo Θ_{II} na célula unitária. Os símbolos (\odot) e (\otimes) indicam a orientação dos momentos magnéticos locais gerados pelas correntes de *loop*. 95
- 4.2 (a) Valores de campo médio do parâmetro de ordem R_{II} para a fase de corrente de *loop* Θ_{II} (CL- Θ_{II}) e do parâmetro de ordem $b_{\text{OC-1}}$ para a ordem de carga unidirecional (OC-1) com simetria $d_{x^2-y^2}$ em função do acoplamento spin-férmion λ no limite de temperatura nula, com a interação V_{pd} entre os orbitais do cobre e oxigênio dada por $V_{pd} = \lambda$. (b) Valores de campo médio do parâmetro de ordem R_{II} para a fase de CL- Θ_{II} e do parâmetro de ordem $b_{\text{OC-2}}$ para a ordem de carga bidirecional (OC-2) com simetria $d_{x^2-y^2}$ em função do acoplamento spin-férmion λ no limite de temperatura nula, com a interação V_{pd} dada por $V_{pd} = \lambda$. Ambos os resultados em (a) e (b) foram obtidos através da integração numérica no espaço de recíproco das equações auto-consistentes de campo médio definidas em (4.17) e (4.18) para uma rede de 320×320 pontos na zona de Brillouin. Aqui, em particular, fizemos $m_a = 10^{-3}$, $\gamma = 10^{-5}$ e os outros parâmetros são definidos por $t_{pd} = 1$, $t_{pp} = 0.5$, $U_p = 3$ e $\varepsilon_d - \varepsilon_p = 3$. O número de ocupação no orbitais do oxigênio corresponde a $n_p \approx 0.3$ e o número de ocupação no orbital do cobre é dado por $n_d + 2n_p = 1 + x$, onde x é o parâmetro que controla a dopagem por buracos e $m_a \propto (x - x_c)$ com x_c sendo a dopagem crítica associada com o ponto crítico quântico do modelo. 102

4.3 (a) Resultados de campo médio do parâmetro de ordem b_{OC-2} para a ordem de carga bidirecional (OC-2) com simetria $d_{x^2-y^2}$ em função do acoplamento spin-férmion λ no limite de temperatura nula, com a interação V_{pd} entre os orbitais do cobre e oxigênio dada por $V_{pd} = \lambda$, para diversas escolhas da massa m_a dos modos bosônicos de onda de spin, que controla a dopagem por buracos no modelo. (b) Resultados de campo médio do parâmetro de ordem R_{II} para a fase de corrente de *loop* Θ_{II} (CL- Θ_{II}) em função do acoplamento spin-férmion λ no limite de temperatura nula, com a interação V_{pd} dada por $V_{pd} = \lambda$, para diversas escolhas de m_a . Ambas os gráficos em (a) e (b) foram obtidos por meio da integração numérica da equações auto-consistentes de campo médio em (4.17) e (4.18) para uma rede de 320×320 pontos na zona de Brillouin. Além disso, utilizamos $\gamma = 10^{-5}$, $t_{pd} = 1$, $t_{pp} = 0.5$, $U_p = 3$ e $\varepsilon_d - \varepsilon_p = 3$. O número de ocupação no orbitais do oxigênio corresponde a $n_p \approx 0.3$ e o número de ocupação no orbital do cobre é dado por $n_d + 2n_p = 1 + x$, onde x é o parâmetro que controla a dopagem por buracos e $m_a \propto (x - x_c)$ com x_c sendo a dopagem crítica associada com o ponto crítico quântico do modelo. 103

A.1 (a) Esquema da superfície de Fermi para os cupratos com os quatro pares de *hot spots* ($\ell = 1, \dots, 4$) conectados pelo vetor de onda antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ [ou $\mathbf{Q}' = (-\pi, \pi)$]. (b) Os quatro pares de *hot spots* podem ser divididos em dois quartetos ortogonais, denotados na figura pelos índices $\mathcal{L} = 1$ e $\mathcal{L} = 2$. Para estabelecer todas as conexões possíveis entres os oito *hot spots*, são necessários empregar três espaços de pseudospin SU(2), que nós representamos pelas letras Σ , Λ e L . O espaço de pseudospin Σ conecta diferentes *hot spots* em um mesmo par, enquanto o espaço Λ conecta os *hot spots* em diferentes pares, mas que possuem o mesmo vetor de onda antiferromagnético \mathbf{Q} . Já o espaço de pseudospin L estabelece a conexão entre os *hot spots* de quartetos ortogonais. 110

Lista de Tabelas

2.1	Pontos fixos (PF) das funções betas de dois <i>loops</i> $\beta_i(\{g_{jR}\})$ do modelo fermiônico de <i>hot spots</i> . O ponto fixo PF_1 corresponde à solução das equações de grupo de renormalização de dois <i>loops</i> com condições iniciais do tipo de Hubbard.	42
2.2	Autovalores m_i da matriz \mathbf{M} para cada um dos oito pontos fixos (PF) das funções betas de dois <i>loops</i> $\beta_i(\{g_{jR}\})$ do modelo fermiônico de <i>hot spots</i>	43
2.3	Expoentes críticos dos vários parâmetros de ordem do modelo fermiônico de <i>hot spots</i> para o ponto fixo de um <i>loop</i> definido na Eq. (2.85).	53
2.4	Expoentes críticos dos vários parâmetros de ordem do modelo fermiônico de <i>hot spots</i> para o ponto fixo PF_1 das funções betas de dois <i>loops</i> $\beta_i(\{g_{jR}\})$	54
B.1	Primeiro conjunto de funções bases necessário para calcular a energia livre funcional do modelo efetivo de três bandas, definido no Capítulo 3 desta tese. Na nossa notação, os índices ℓ e $\tilde{\ell}$ designam, respectivamente, os pares de funções $\{a_\ell(\mathbf{k}), b_\ell(\mathbf{k})\}$ e $\{\tilde{a}_\ell(\mathbf{k}), \tilde{b}_\ell(\mathbf{k})\}$	115
B.2	Segundo conjunto de funções bases necessário para calcular a energia livre funcional do modelo efetivo de três bandas, definido no Capítulo 3 desta tese. Aqui, essas funções são definidas em termos do parâmetro $\delta = (K_+ - K_-)/2$, que indica a posição relativa do <i>hot spot</i> na zona de Brillouin, e também em termos dos coeficientes $c_i(k_x)$ e $c_i(k_y)$ ($i = 1, 2$).	116

Aspectos de modelos eletrônicos bidimensionais fortemente correlacionados: aplicações em cupratos supercondutores

Por
Vanuildo Silva de Carvalho

Resumo

Investigamos aqui as propriedades de baixa energia de dois modelos eletrônicos fortemente correlacionados em duas dimensões espaciais. O primeiro deles consiste em uma versão do modelo de Hubbard em que são considerados apenas os graus de liberdade do sistema na vizinhança dos chamados *hot spots*, que são definidos como a intersecção da superfície de Fermi do modelo com a zona antiferromagnética. Inicialmente, definimos a nossa teoria linearizando a dispersão do modelo nos *hot spots* e consideramos todos os processos de interação entre essas regiões que conservam momento a menos de um vetor da rede recíproca. Para acessar a física do modelo, recorreremos então ao método de grupo de renormalização de teoria de campos e derivamos as equações de fluxo para os acoplamentos na aproximação de dois *loops*. Como resultado, obtemos que a superfície de Fermi do modelo sofre forte renormalização nos *hot spots*, ao mesmo tempo que os acoplamentos renormalizados fluem para um ponto fixo não trivial no limite de baixa energia. Sugerimos então que esse sistema pode ser visto como um exemplo de um líquido de não-Fermi em duas dimensões espaciais, devido à ausência de excitações fermiônicas do tipo quasipartícula bem definidas na região próxima aos *hot spots*. Além disso, resolvemos a equação de Callan-Symanzik para a função de Green de uma partícula na aproximação de dois *loops*, calculamos a densidade de estados nos *hot spots*, e derivamos as equações de grupo de renormalização para os parâmetros de ordem das possíveis instabilidades que podem, eventualmente, ocorrer no sistema em baixas energias. Verificamos que o sistema pode ser caracterizado, nesse regime, em termos de uma simetria emergente de pseudospin $[SU(2)]^4$, que leva ao aparecimento de ordens emaranhadas na região próxima ao ponto fixo não trivial do modelo. Mostramos também que as excitações fermiônicas nas regiões adjacentes aos *hot spots* adquirem um gap nos espectros de excitação de carga e spin. Devido a isso, argumentamos que a superfície de Fermi do modelo pode ser reconstruída, levando assim à formação de arcos de Fermi ou *pockets* eletrônicos.

O segundo modelo analisado nesta tese foi o modelo de três bandas de Emery, que descreve todos os processos de interação entre as excitações fermiônicas localizadas nos orbitais do cobre (Cu) e do oxigênio (O) na célula unitária de CuO_2 . Através de uma transformada

de Hubbard-Stratonovich, introduzimos dois parâmetros de ordem no sistema: um para a chamada fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} , que viola a simetria de reversão temporal \mathbb{Z}_2 , e outro para a fase emaranhada com simetria $d_{x^2-y^2}$ envolvendo a instabilidade supercondutora do tipo singleto e a ordem de densidade de carga quadrupolar, cujo vetor de onda aponta na direção da diagonal da zona de Brillouin. Minimizando a energia livre do modelo, derivamos as equações auto-consistentes de campo médio para esses parâmetros de ordem. A solução dessas equações para o regime de temperatura nula mostra que as duas fases competem entre si pela mesma região do espaço de fase e, conseqüentemente, o sistema tende a não exibir coexistência entre as mesmas. Argumentamos que esse efeito pode ser a principal razão para o fato de a fase onda de densidade quadrupolar nunca ter sido observada em experimentos realizados nos cupratos supercondutores. Em seguida, analisamos a competição entre as fases de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} , observada experimentalmente, e ordem de carga com simetria $d_{x^2-y^2}$ e vetores de onda na direção dos eixos principais da zona de Brillouin. Como resultado, obtemos que o sistema exibe coexistência apenas entre as fases de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} e ordem de carga bidirecional. Devido à existência de uma simetria de pseudospin nesse modelo, confirmamos também que a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} coexiste com a fase onda de densidade de pares bidirecional. Por fim, discutimos as implicações dos nossos resultados para a fase de pseudogap dos cupratos supercondutores, que emerge no chamado regime subdopado nesses sistemas.

Aspects of strongly correlated two-dimensional electronic models: applications in cuprate superconductors

By
Vanuildo Silva de Carvalho

Abstract

We investigate here the low-energy properties of two strongly correlated electronic models in two spatial dimensions. The first one consists in a version of the Hubbard model in which are considered just the degrees of freedom of the system in the neighborhood of the so-called hot spots, which are defined as the intersection of the Fermi surface of the model with the antiferromagnetic zone. Initially, we set our theory up by linearizing the dispersion model in hot spots and consider all the interacting processes between these regions that conserve momentum within a reciprocal-lattice wave vector. In order to access the physics of the model, we then turn to the renormalization group method of quantum field theory and derive the flow equations for the couplings in the two-loop approximation. As a result, we obtain that the Fermi surface is strongly renormalized in hot spots as the renormalized couplings flow to a non-trivial fixed point in the low-energy limit. Then we suggest that this system can be viewed as an example of a non-Fermi liquid in two spatial dimensions, due to the lack of well defined quasiparticle fermionic excitations in the region close to hot spots. Moreover, we solve the Callan-Symanzik equation for the one-particle Green function up to two-loop order, calculate the density of states in the hot spots, and derive the renormalization group equations for the order parameters of the potential instabilities which may eventually occur in the system at lower energies. We verify that the system can be characterized, in this regime, in terms of an emergent pseudospin symmetry $[SU(2)]^4$, which leads to the appearance of entangled orders in the region close to the non-trivial fixed point of the model. We also show that the fermionic excitations in the adjacent regions to the hot spots get a gap in both charge and spin excitation spectra. Because of this, we argue that the Fermi surface of the model can be reconstructed, leading therefore to the formation of either Fermi arcs or electronic pockets.

The second model analyzed in this thesis was the three-band Emery model, which describes all the interacting processes between fermionic excitations localized in both copper (Cu) and oxygen (O) orbitals in the CuO_2 unit cell. By making use of a Hubbard-Stratonovich transformation, we introduce two order parameters in the system: one for the so-called Θ_{II} -loop-current order, which violates \mathbb{Z}_2 time-reversal symmetry, and another one for the entangled

phase with $d_{x^2-y^2}$ symmetry involving the singlet superconducting instability and the quadrupole density wave order, whose wave vector points in the direction of the Brillouin zone diagonal. Minimizing the free energy of the model, we derive the self-consistent mean-field equations for these order parameters. The solution of these equations for the zero temperature regime shows that the two phases compete with themselves for the same region of the phase space and, consequently, the system tends not to display coexistence between them. We argue that this effect could be the main reason for the fact that the quadrupole density wave order has never been observed in experiments performed on the cuprate superconductors. Next, we analyze the competition between the Θ_{II} -loop-current order, which is experimentally observed, and charge order with $d_{x^2-y^2}$ symmetry and wave vectors in the direction of the main axes of the Brillouin zone. As a result, we obtain that the system only exhibits coexistence between the Θ_{II} -loop-current phase and the bidirectional charge order. Due to the existence of a pseudospin symmetry in this model, we also confirm that the Θ_{II} -loop-current phase coexists with the bidirectional pair density wave order. Finally, we discuss the implications of these results for the pseudogap phase of the cuprate superconductors, which appears in the underdoped regime in these systems.

Lista de Publicações

Os artigos publicados e que estão relacionados de alguma forma ao conteúdo da presente tese de doutorado são os seguintes:

1. Vanuildo S. de Carvalho and Hermann Freire, *Breakdown of Fermi liquid behavior near the hot spots in a two-dimensional model: A two-loop renormalization group analysis*, [Nuclear Physics B](#) **875**, 738 (2013).
2. Vanuildo S. de Carvalho and Hermann Freire, *Evidence of a short-range incommensurate d-wave charge order from a fermionic two-loop renormalization group calculation of a 2D model with hot spots*, [Annals of Physics](#) **348**, 32 (2014).
3. Catherine Pépin, Vanuildo S. de Carvalho, Thomas Kloss, and Xavier Montiel, *Pseudogap, charge order, and pairing density wave at the hot spots in cuprate superconductors*, [Physical Review B](#) **90**, 195207 (2014).
4. Hermann Freire, Vanuildo S. de Carvalho, and Catherine Pépin, *Renormalization group analysis of the pair-density-wave and charge order within the fermionic hot-spot model for cuprate superconductors*, [Physical Review B](#) **92**, 045132 (2015).
5. Vanuildo S. de Carvalho, Thomas Kloss, Xavier Montiel, Hermann Freire, and Catherine Pépin, *Strong competition between Θ_{II} -loop-current order and d-wave charge order along the diagonal direction in a two-dimensional hot spot model*, [Physical Review B](#) **92**, 075123 (2015).
6. Vanuildo S. de Carvalho, Catherine Pépin, and Hermann Freire, *Coexistence of Θ_{II} -loop-current order with checkerboard d-wave CDW/PDW order in a hot-spot model for cuprate superconductors*, [Physical Review B](#) **93**, 115144 (2016).
7. Thomas Kloss, Xavier Montiel, Vanuildo S. de Carvalho, Hermann Freire, and Catherine Pépin, *Charge orders, magnetism and pairings in the cuprate superconductors*, [Reports on Progress in Physics](#) **79**, 084507 (2016).

Capítulo 1

Introdução

The behavior of large and complex aggregations of elementary particles, it turns out, is not to be understood in terms of a simple extrapolation of the properties of a few particles.

Philip W. Anderson, *More is different*

Neste capítulo, discutiremos as propriedades exibidas pelos cupratos supercondutores, que foram estudadas durante as últimas três décadas desde a sua descoberta, em 1986. Inicialmente, apresentaremos de forma geral a fenomenologia do diagrama de fases eletrônico desses materiais nas variáveis de temperatura e dopagem, enfatizando as diferenças entre as diversas ordens eletrônicas de curto e longo alcance presentes nesses sistemas, que, como veremos, vão muito além da ordem supercondutora não-convencional. Em seguida, daremos início à discussão dos principais modelos utilizados para descrever os resultados experimentais observados para esses materiais no assim chamado limite de baixa energia, que corresponde ao limite de baixas frequências e longos comprimentos de onda. Por fim, descreveremos a metodologia adotada para a exposição dos temas tratados aqui e comentaremos também sobre como esta tese encontra-se organizada.

1.1 Fenomenologia dos cupratos supercondutores

O fenômeno de supercondutividade de altas temperaturas descoberto em certos óxidos de cobre há aproximadamente três décadas atrás continua sendo uma das maiores descobertas

da área de física da matéria condensada [1]. Os cupratos, como são chamados, são maus condutores de corrente elétrica à temperatura ambiente, em razão da existência de fortes repulsões eletrônicas entre os elétrons de condução. Como resultado, esses materiais apresentam ordenamento antiferromagnético de longo alcance para dopagem nula e também quando os mesmos são levemente dopados com elétrons ou buracos. Acima de um certo valor crítico de dopagem, a fase isolante antiferromagnética desaparece, dando lugar a uma fase supercondutora com parâmetro de ordem com simetria $d_{x^2-y^2}$ e temperatura crítica de transição T_c excedendo aquelas dos supercondutores descritos pela teoria de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) [2], em pelo menos uma ordem de grandeza. Antes do advento dos cupratos, acreditava-se que o magnetismo e a supercondutividade fossem fenômenos físicos antagônicos. Isso porque, em um meio magnético, as interações entre os elétrons são sempre repulsivas, enquanto no estado supercondutor há o surgimento de uma interação atrativa entre eles, permitindo assim a formação de pares eletrônicos – os chamados pares de Cooper – que se movem livremente no material. Em vista disso, ficou evidente desde o início da descoberta de supercondutividade nos cupratos que o mecanismo por trás desse fenômeno é totalmente inusual.

O diagrama de fases dos cupratos em função da temperatura T e dopagem p possui uma rica fenomenologia de ordens eletrônicas [3, 4, 5]. Entre as fases isolante antiferromagnética e a supercondutora e para temperaturas abaixo de $T^* = T^*(p)$ existe uma fase eletrônica denominada fase de pseudogap (ver Figura 1.1(a)). O sistema, nesse estado, apresenta uma rápida diminuição dos estados eletrônicos acessíveis nas regiões da superfície de Fermi próximas às regiões antinodais (áreas em torno de $(\pm\pi, 0)$ e $(0, \pm\pi)$ na Figura 1.1(b)) que, aparentemente, não está relacionada a nenhum tipo de quebra espontânea de simetria [6]. Recentemente, foram observadas flutuações de carga na região interna da fase pseudogap para cupratos que não possuem lantânio (La) em sua estrutura cristalina. Essas flutuações correspondem a ordenamentos de carga de curto alcance com vetor de onda $(\pm Q_0, 0)$ e $(0, \pm Q_0)$ na direção dos eixos principais da zona de Brillouin ligando os chamados *hot spots*, ou seja, as regiões do espaço recíproco onde a superfície de Fermi intersecta a zona antiferromagnética (ver Figura 1.1(b)). Foi observado

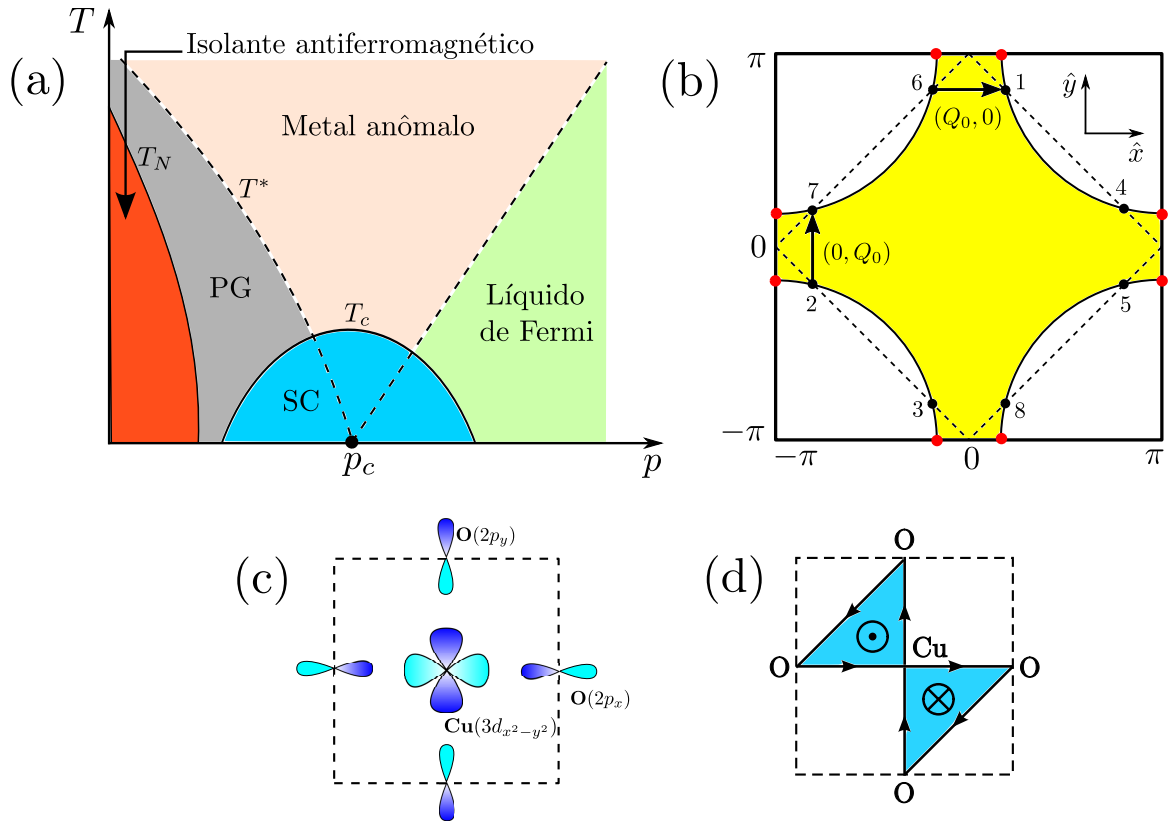


Figura 1.1: (a) Diagrama de fases esquemático para os cupratos dopados com buracos mostrando as fases antiferromagnética isolante, supercondutora do tipo $d_{x^2-y^2}$ (SC), pseudogap (PG), metal anômalo e líquido de Fermi desses materiais. As três primeiras fases correspondem, nessa ordem, às temperaturas de transição T_N (temperatura de Néel), T_c e T^* . As linhas tracejadas na figura indicam regiões de *crossover* e o pequeno círculo preto indica um suposto ponto crítico quântico p_c que pode existir no interior do domo supercondutor. (b) Representação esquemática da superfície de Fermi (bordas da superfície em amarelo) dos cupratos para a fase de líquido de Fermi com as linhas tracejadas representando a zona antiferromagnética. Na fase de pseudogap, a superfície de Fermi entre os *hot spots* (círculos pretos numerados de 1 a 8) e os pontos antinodais (círculos vermelhos) é destruída. Por sua vez, as modulações de carga no interior do pseudogap ocorrem para os vetores de onda $(Q_0, 0)$ e $(0, Q_0)$. (c) Orbitais do cobre (Cu) e oxigênio (O) na célula unitária de CuO_2 para os cupratos. (d) Esquema de fluxo das correntes de *loop* na célula unitária de CuO_2 para a fase Θ_{II} . Os símbolos \odot e \otimes indicam o sentido do campo magnético gerado por essas correntes.

também que essa ordem de carga possui fator de forma com simetria $d_{x^2-y^2}$ – a mesma simetria do parâmetro de ordem supercondutor nesses materiais – e que essas flutuações se tornam de longo alcance quando o sistema é submetido a campos magnéticos acima de um valor crítico. Nesse último caso, a própria superfície de Fermi se torna reconstruída, com a substituição dos arcos fermiônicos abertos por *pockets* de elétrons [7].

Além da já mencionada ordem de carga, um outro tipo de quebra espontânea de simetria presente na região do pseudogap foi detectado por meio de experimentos de difração de nêutrons polarizados [8, 9]. Esse tipo de ordem, presente em diversas famílias de cupratos, gera pequenos domínios magnéticos nos planos de Cu-O localizados na célula unitária formada por esses átomos. A sua temperatura de transição em função da dopagem segue o mesmo perfil de T^* no diagrama de fases para os cupratos, convergindo supostamente para um ponto crítico quântico no interior do domo supercondutor. Uma outra característica dessa ordem magnética é que ela viola a simetria C_4 de rotações de $\pi/2$ ao passo que preserva a simetria de translação, ou seja, o vetor de onda das suas modulações é nulo. De um ponto de vista teórico, esses resultados experimentais podem ser explicados através de um modelo efetivo de três bandas descrevendo as interações entre férmions localizados nos orbitais do Cu ($3d_{x^2-y^2}$) e do O ($2p_x$ e $2p_y$) (ver Figura 1.1(c)), que viola a simetria discreta \mathbb{Z}_2 de reversão temporal além da simetria C_4 [10]. Nesse esquema, os pequenos domínios magnéticos observados para temperaturas logo abaixo de T^* são decorrentes possivelmente da formação de correntes elétricas estacionárias fluindo na célula unitária de CuO_2 de acordo com o padrão mostrado na Figura 1.1(d), conhecido na literatura como fase de correntes de *loop* do tipo Θ_{II} (CL- Θ_{II}). O efeito da quebra da simetria de reversão temporal e de quiralidade para temperaturas muito próximas de T^* é também confirmado por medidas do efeito Kerr feitas por Kapitulnik e colaboradores [11]. Embora a fase de CL- Θ_{II} possa representar um novo estado quântico em sistemas fortemente correlacionados como os cupratos, somente as flutuações do seu parâmetro de ordem, contudo, são incapazes de descrever completamente toda a fenomenologia da fase de pseudogap. Isso porque elas não produzem um espectro de excitações eletrônicas com uma superfície de Fermi composta por arcos desconectados, como é observado experimentalmente para o estado de pseudogap.

Com o aumento da dopagem além de um certo valor crítico, a temperatura crítica supercondutora tende a diminuir até se anular completamente na chamada região superdopada do diagrama de fases. A partir desse ponto, o sistema se comporta como um sistema metálico, cujas funções espectrais possuem polos simples do tipo quasipartículas bem-definidas em baixas

energias em conformidade, portanto, com as características de um líquido de Fermi. De fato, experimentos de oscilações quânticas mostram que, nesse regime, o sistema exibe uma grande superfície de Fermi, sem a presença de gaps mesmo na região antinodal. Entre as fases de pseudogap e líquido de Fermi e para temperaturas acima de T_c , ocorre uma das fases mais exóticas do diagrama de fases dos cupratos. A fase de metal anômalo, como é conhecida, é caracterizada por propriedades físicas anômalas não condizentes com os esquemas teóricos existentes. Entre elas, destaca-se o comportamento linear da resistividade e a variação do coeficiente Hall com a temperatura. Medidas experimentais das funções espectrais mostram que elas possuem singularidades do tipo linha de corte ao invés de polos simples, o que implica na ausência de quasipartículas fermiônicas bem-definidas presentes em baixas energias. Por outro lado, esses resultados são descritos, fenomenologicamente, pela chamada teoria do líquido de Fermi marginal proposta por Varma e colaboradores logo após a descoberta dos cupratos supercondutores [12]. Ela postula que os férmions, na fase de metal anômalo, podem se acoplar a um campo bosônico contínuo com um espectro de excitação linear em T para frequências $\omega < T$ e constante para $\omega > T$. O sucesso dessa teoria levou à proposta da descrição do diagrama de fases dos cupratos em termos de um possível estado de criticalidade quântica, supondo, portanto, a existência de um ponto crítico quântico p_c no interior do domo supercondutor para algum valor de dopagem ou pressão. A fase ordenada – com quebra espontânea de simetria – do lado esquerdo desse ponto crítico corresponderia à fase de pseudogap, enquanto a fase desordenada do lado direito descreveria a fase de líquido de Fermi. As flutuações de um possível parâmetro de ordem ligado a esse ponto crítico dariam origem à fase supercondutora do tipo $d_{x^2-y^2}$ com o seu domo característico assim como a todas as propriedades anômalas da fase de metal anômalo. Experimentos de oscilações quânticas e efeito Kerr sugerem que as linhas de transição ligadas às instabilidades do pseudogap terminem realmente em um ponto crítico no interior do domo supercondutor [11, 13].

1.2 Aspectos teóricos dos vários tipos de quebras espontâneas de simetria nos cupratos supercondutores

Entre as abordagens teóricas para os cupratos, uma ideia largamente difundida para a explicação da sua rica fenomenologia de fases eletrônicas considera excitações coletivas antiferromagnéticas intermediando a interação atrativa entre os elétrons de condução nesses materiais. Isso se deve, principalmente, à proximidade existente entre as fases antiferromagnética e supercondutora. Dentro desse contexto, um importante passo para a descrição de sistemas fortemente interagentes bidimensionais, como é o caso dos cupratos, veio com a formulação por Abanov e Chubukov do modelo de spin-férmion [14, 15, 16]. Nesse modelo, a parte interagente da ação fermiônica é desacoplada através de uma transformada de Hubbard-Stratonovich e somente os campos fermiônicos de altas energias são integrados na derivação da teoria de baixa energia. Essa teoria efetiva, por sua vez, descreve o acoplamento das excitações fermiônicas localizadas em arcos próximos aos *hot spots* com um campo bosônico $\phi(\mathbf{r})$ das flutuações antiferromagnéticas de onda de densidade de spin (ODS), cujo vetor de onda é dado por $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. As propriedades de baixa energia desse modelo foram investigadas, primeiramente, através do método de grupo de renormalização com a inclusão de flutuações quânticas de um *loop* para uma dispersão fermiônica linear em torno dos *hot spots* [14]. Na vizinhança do ponto crítico antiferromagnético, a análise desse modelo por meio desse método mostrou que a superfície de Fermi sofre forte renormalização devido às flutuações antiferromagnéticas, tornando-se perpendicular ao vetor $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ na região dos *hot spots*. Nessas regiões, observa-se também que as excitações do tipo quasipartículas fermiônicas podem se tornar incoerentes, implicando assim na quebra do comportamento de líquido de Fermi.

Mais recentemente, Metlitski e Sachdev [17, 18] analisaram as propriedades de baixa energia do modelo de spin-férmion em duas dimensões do ponto de vista do grupo de renormalização com respeito à inclusão de flutuações quânticas até dois *loops*. Eles confirmaram que a teoria para a transição entre um metal normal e o estado de ODS flui para forte acoplamento

com a quebra do comportamento de líquido de Fermi nos *hot spots*. Próximo ao ponto crítico antiferromagnético do modelo, eles também mostraram que as flutuações supercondutoras com pares de Cooper do tipo singlete e simetria $d_{x^2-y^2}$, juntamente com as flutuações de carga com fator de forma $d_{x^2-y^2}$ e vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ na diagonal da zona de Brillouin, são promovidas pelas flutuações antiferromagnéticas e se tornam degeneradas energeticamente. Em uma generalização desses resultados, Efetov *et al.* [19] mostraram que o modelo de spin-férmion próximo à região de criticalidade é devidamente descrito em termos de uma fase emaranhada com parâmetro de ordem SU(2) envolvendo a ordem supercondutora (SC) e a referida ordem de carga que é, por eles, denominada onda de densidade quadrupolar (ODQ). A inclusão de flutuações quânticas em torno da teoria de campo médio mostra que esse sistema pode ser descrito em termos de um modelo efetivo bidimensional do tipo sigma não-linear. A ordem emaranhada SC/ODQ ocorreria para temperaturas elevadas onde flutuações térmicas destruiriam qualquer tipo de ordenamento de longo alcance. No regime de temperaturas inferiores a T_c , efeitos de curvatura da superfície de Fermi destruiriam a degenerescência entre as ordens SC e ODQ e a instabilidade SC seria promovida. O diagrama de fase nas variáveis de campo magnético e temperatura derivado para esse modelo [20] revelou estar de acordo com os resultados experimentais obtidos por medidas de velocidade do som para o composto $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ [21]. Além disso, esse modelo ainda prevê o aparecimento de um outra instabilidade de carga com vetor de onda ligando os pontos antinodais mais próximos devido a uma interação atrativa entre as excitações elementares mediada por flutuações supercondutoras [22].

A instabilidade ODQ foi também prevista por um modelo fermiônico bidimensional com termos de interação quárticos entre os férmions, em analogia ao modelo de Hubbard [23, 24]. Em adição a esse fato, o modelo também supõe uma dispersão fermiônica linear nos *hot spots* assim como leva em conta os possíveis acoplamentos entre as excitações elementares nessas regiões. Para o regime de acoplamento fraco a médio, a transição de fase quântica entre a fase de líquido de Fermi e o estado ODS foi estudada considerando a presença de flutuações quânticas, até a ordem dois *loops*, nos acoplamentos e na auto-energia fermiônica. Próximo ao ponto crítico

antiferromagnético, observa-se, por meio de uma análise de grupo de renormalização até dois *loops*, que todos os acoplamentos do modelo fluem para pontos fixos finitos no limite do infra-vermelho, com a superfície de Fermi se tornando perpendicular, nos *hot spots*, ao vetor de onda antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ [25], assim como já havia sido observado para o modelo de spin-férmion. Em decorrência dessas fortes flutuações antiferromagnéticas, o sistema passa a se comportar como um líquido de não-Fermi nas regiões dos *hot spots* com as funções de correlação exibindo a presença de singularidades do tipo linha de corte e o peso da quasipartícula fluindo para zero em baixas energias. Um outro efeito observado para esse modelo é a ocorrência de uma igualdade dos expoentes críticos associados às ordens SC e ODQ na região de energia próxima ao ponto fixo de infra-vermelho do sistema. Como resultado, existe também uma simetria de pseudospin SU(2) emergente de uma forma semelhante a que foi obtida para o modelo de spin-férmion [19].

Embora a fase ODQ tenha sido prevista por diferentes modelos bidimensionais como uma característica do diagrama de fase eletrônico dos cupratos, até o presente momento ela não foi detectada por nenhum dos aparatos experimentais existentes. Uma possível explicação para isso está relacionada à natureza de fraco acoplamento das interações geradoras dessa instabilidade que, evidentemente, contrasta com a física de forte acoplamento exibida pelos cupratos. De fato, refinamentos da teoria de flutuações antiferromagnéticas para a região de acoplamentos moderados a fortes mostram que a ordem de carga (OC) com vetor de onda $(\pm Q_0, 0)$ e $(0, \pm Q_0)$ ligando os *hot spots* na direção dos eixos principais da zona de Brillouin e fator de forma $d_{x^2-y^2}$ se torna a mais relevante quando comparada à ordem ODQ [25, 26, 27]. Além disso, juntamente com a instabilidade partícula-buraco OC, o sistema também se torna instável a um outro tipo de ordem supercondutora, denominada onda de densidade de pares (ODP), com fator de forma $d_{x^2-y^2}$ e vetor de onda do centro de massa do par de Cooper finito. De acordo com os resultados das referências [25, 26, 27], ambas as ordens OC e ODP possuem o mesmo tipo de emaranhamento – com uma simetria de pseudospin emergente – exibido pelo modelo de spin-férmion e o modelo de *hot spots* fermiônico.

Em um outro trabalho publicado recentemente [28], analisamos a presença das instabilidades ODQ e CL- Θ_{II} em um modelo efetivo de três bandas relevante para os cupratos. Em termos gerais, essa teoria é construída desacoplando as interações repulsivas nos orbitais do Cu-Cu e Cu-O através de uma transformada de Hubbard-Stratonovich, que leva, por sua vez, à definição dos parâmetros de ordem para as respectivas fases. A solução das equações auto-consistentes dos parâmetros de ordem para ODQ e CL- Θ_{II} , considerando os valores experimentais esperados para as interações do modelo, mostra que essas duas fases tendem a não coexistir na região próxima ao ponto crítico antiferromagnético do sistema. De acordo com as conclusões desse trabalho, isso seria possivelmente uma justificativa para o fato de nenhuma modulação de carga ter sido observada com o vetor de onda na direção da diagonal da zona de Brillouin. Além disso, a intensidade do momento magnético gerado pelo padrão Θ_{II} de correntes na célula unitária de CuO_2 e calculado usando esse modelo mostrou estar em bom acordo com os resultados experimentais de difração de nêutrons [8]. Recentemente, uma generalização do modelo de três bandas [29], para o caso em que ordem ODP/OC se manifesta, mostrou que a fase de CL- Θ_{II} coexiste, ao menos ao nível de campo médio, apenas para modulações supercondutoras e de carga com vetores de onda em ambas as direções dos eixos principais da zona de Brillouin, ou seja, ODP/OC bidirecionais. Para o regime superdopado do diagrama de fase dos cupratos onde as linhas de transição para flutuações de carga e de quebra de reversão temporal convergem para um suposto ponto crítico quântico dentro do domo supercondutor, experimentos de difração de raio-X em cupratos da família YBCO foram interpretados em termos de uma fase OC bidirecional, o que concorda com os nossos resultados [30].

1.3 Considerações sobre a estrutura desta tese

Nesta seção, explicamos, de forma geral, os temas tratados e a estrutura dos capítulos seguintes que compõem esta tese de doutorado.

No Capítulo 2, definimos de forma precisa o modelo bidimensional fermiônico de *hot spots* através dos possíveis processos de interação que possam ocorrer nesse sistema. Em se-

guida, mostramos que certas funções de correlação do modelo apresentam divergências logarítmicas no regime de baixa energia. Para eliminar essas não-analiticidades, seguimos a metodologia do grupo de renormalização de teoria de campos e incluímos no modelo termos de flutuação quântica até a ordem de dois *loops*. Através desse procedimento, derivamos implicações sobre as propriedades físicas do sistema no limite de grandes distâncias e longas escalas temporais. Entre essas propriedades, destacamos a renormalização da superfície de Fermi, o comportamento do tipo lei de potência da densidade de estados e a quebra do comportamento do tipo líquido de Fermi nas regiões próximas ao *hot spots* do modelo. Além disso, apresentamos um estudo sistemático das possíveis instabilidades do estado normal que aparecem na escala de baixa energia. Nessa situação, identificamos diversos tipos de ordens emaranhadas de curto alcance, que aparecem na região próxima ao ponto fixo não trivial do modelo em decorrência de uma simetria de pseudospin envolvendo pares de *hot spots* conectados pelo vetor de onda antiferromagnético.

No Capítulo 3, começamos a nossa discussão introduzindo o modelo de três bandas (ou modelo de Emery), que descreve as interações do tipo de Hubbard entre as excitações fermiônicas em um sistema com estrutura orbital semelhante à dos cupratos supercondutores no regime subdopado. Em seguida, construímos uma teoria efetiva de baixa energia para o modelo que descreve a competição entre a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} , que é observada experimentalmente, com a ordem de carga onda de densidade quadrupolar. Através da análise dos resultados de campo médio para os parâmetros de ordem dessas fases, fornecemos argumentos para justificar a aparente contradição entre teoria e experimento no que se refere à ausência de modulações de carga com vetor de onda na direção da diagonal da zona de Brillouin para a fase de pseudogap nos cupratos supercondutores.

No Capítulo 4, descrevemos o efeito da fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} na fase emaranhada com simetria $d_{x^2-y^2}$ envolvendo as instabilidades onda de densidade de pares e ordem de carga unidirecionais e bidirecionais, a partir de um modelo efetivo de três bandas descrito no Capítulo 3 desta tese. Mostramos então que os resultados decorrentes dessa aná-

lise concordam, ao menos qualitativamente, com dados experimentais que descrevem quebras espontâneas de simetria na região interna da fase de pseudogap dos cupratos supercondutores.

Finalmente, no Capítulo 5, apresentamos as nossas conclusões sobre os resultados apresentados nos capítulos anteriores e descrevemos as nossas perspectivas para trabalhos futuros.

Antes de finalizar esta seção, devemos esclarecer algumas questões referentes à metodologia empregada para a derivação dos nossos resultados. Basicamente, utilizamos os conceitos e ferramentas teóricas das disciplinas de estado sólido, teoria de muitos corpos e teoria quântica de campos, com ênfase nas seções de derivação de teorias efetivas para sistemas fermiônicos via transformada de Hubbard-Stratonovich e emprego do método de grupo de renormalização. Essa metodologia não é revisada nesta tese e, portanto, fica a cargo do leitor preencher os requisitos necessários para a leitura e compreensão dos temas tratados aqui. Nesse sentido, os livros textos que podem ajudar de alguma forma, na opinião do autor, são apresentados a seguir. No caso de estado sólido, os livros indicados são os de Ashcroft & Mermin [31], Kittel [32] e Mahan [33]. Já no caso de teoria de muitos corpos, os livros sugeridos são os de Abrikosov *et al.* [34], Mahan [35] e Fetter & Walecka [36]. Por fim, no caso de teoria quântica de campos, os livros recomendados são os de Ryder [37], Peskin & Schroeder [38], Zee [39], Altland & Simons [40] e Fradkin [41], onde essas duas últimas referências tratam da aplicação de algumas ferramentas de teoria quântica de campos na análise de sistemas de física da matéria condensada.

Capítulo 2

Líquido de não-Fermi em um modelo fermiônico bidimensional de *hot spots*

Images of the world are renormalization group fixed points.

David Mumford

A descoberta de estados quânticos exóticos em sistemas fortemente correlacionados de baixa dimensionalidade, como os cupratos supercondutores, e o conseqüente desenvolvimento de métodos teóricos e experimentais para a caracterização de tais sistemas [5] revolucionou o estudo das chamadas transições de fase quânticas [42, 43]. As primeiras tentativas para a compreensão das propriedades físicas de sistemas eletrônicos interagentes, na vizinhança de um ponto crítico quântico, iniciaram já na década de 1970 com o trabalho de Hertz [44]. Ele estudou a transição de fase entre um líquido de Fermi e um estado do tipo onda de densidade de spin (ODS), derivando uma ação efetiva para o parâmetro de ordem ODS por meio da integração dos graus de liberdade das excitações fermiônicas na vizinhança da superfície de Fermi. Os seus resultados foram, posteriormente, estendidos por Millis [45], que considerou o efeito de flutuações térmicas em torno do ponto crítico quântico do sistema. Contudo, uma análise subsequente da teoria de Hertz feita por Abanov e Chubukov [14, 16] mostrou que, embora as suas conclusões estejam basicamente corretas em dimensão $d = 3$, ela falha completamente na descrição das propriedades físicas de sistemas com dimensão $d = 2$. A razão para isso é que a superfície de Fermi, nesse caso em particular, sofre forte renormalização induzida pelos

modos bosônicos ODS, o que inviabiliza a integração dos graus de liberdade fermiônicos de baixa energia na vizinhança da superfície de Fermi do modelo para a derivação de uma teoria efetiva.

Para solucionar isso, Abanov *et al.* [14, 15] propuseram a descrição de sistemas eletrônicos bidimensionais em termos do modelo de spin-férmion, que leva em consideração o acoplamento dos modos bosônicos ODS com as regiões da superfície de Fermi conectadas pelo vetor de onda do ordenamento antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, ou seja, os *hot spots*. Através de uma análise de grupo de renormalização de um *loop* para esse modelo, eles mostraram que a velocidade de Fermi nos *hot spots* sofre forte renormalização quando o sistema se aproxima do seu ponto fixo antiferromagnético, levando, por sua vez, à quebra do comportamento do tipo líquido de Fermi no sistema. Esses resultados foram confirmados, por meio da inclusão de flutuações quânticas da ordem de dois *loops* na análise de grupo de renormalização, em um trabalho de Metlitski e Sachdev [17], que mostrou ainda a presença no modelo de uma ordem emaranhada emergente com simetria $d_{x^2-y^2}$ relacionando as fases supercondutora do tipo singleto e onda de densidade de carga com vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ na direção da diagonal da zona de Brillouin.

Em contraste, analisamos, neste capítulo, as propriedades de baixa energia de uma versão puramente fermiônica do modelo de spin-férmion de Abanov e Chubukov, que foi introduzida na literatura por Furukawa e Rice [46]. Esse modelo descreve as interações relevantes entre os graus de liberdade do sistema localizados nas regiões do espaço recíproco em torno dos *hot spots*. A nossa análise aqui se restringe ao regime de altas temperatura, que leva portanto a linearização do espectro de excitação do modelo nos *hot spots*. Tomando isso como ponto de partida, mostramos que o modelo possui divergências logarítmicas em um *loop* nas chamadas funções vértices irreduzíveis no regime infra-vermelho do sistema. Em seguida, implementamos a metodologia do grupo de renormalização de teoria de campos na aproximação de um *loop* para os acoplamentos do modelo. A solução das equações de grupo de renormalização mostra que as interações do modelo flui, em geral, para o regime de forte acoplamento. Devido a isso,

introduzimos correções quânticas de dois *loops* para a auto-energia e para as funções vértices do modelo e derivamos então as equações de grupo de renormalização para os acoplamentos na aproximação de dois *loops*. Como consequência, obtemos que a componente da velocidade de Fermi nos *hot spots* tangente à superfície de Fermi sofre forte renormalização e verificamos também que os acoplamentos fluem para um ponto fixo não trivial no limite de baixa energia, para condições iniciais definidas pelo modelo de Hubbard [35, 41]. Esses resultados sugerem que esse modelo fermiônico de *hot spots* não possui quasipartículas fermiônicas bem definidas na região próxima aos *hot spots*, o que demonstra o comportamento do tipo líquido de não-Fermi para o sistema. Além disso, resolvemos a equação de Callan-Symanzik para a função de Green de uma partícula na aproximação de dois *loops*, calculamos a expressão para a densidade de estados nos *hot spots*, e derivamos as equações de grupo de renormalização para os parâmetros de ordem dos diversos tipos de instabilidades que podem, eventualmente, ocorrer no modelo. Através disso, identificamos um tipo de simetria emergente no sistema, conhecida como simetria de pseudospin [17, 18], que leva ao aparecimento de ordens emaranhadas na região próxima ao ponto fixo não trivial do modelo com o fator de forma do seu parâmetro de ordem possuindo simetria SU(2). Por fim, o cálculo das susceptibilidades de carga e spin uniformes sugere que as excitações fermiônicas nas regiões adjacentes aos *hot spots* adquirem um gap de carga e spin. Isso pode, por sua vez, ser interpretado em termos da reconstrução da superfície de Fermi, que pode levar à formação de arcos de Fermi ou *pockets* eletrônicos.

Apresentamos também uma comparação qualitativa entre a física exibida pelo modelo fermiônico de *hot spots* e a fenomenologia do estado de pseudogap dos cupratos supercondutores, que, de acordo com resultados experimentais recentes, é caracterizado pela emergência de diversas ordens eletrônicas de curto alcance [5, 7]. A maioria dos nossos resultados encontra-se publicada nos trabalhos das referências [23, 24, 25].

2.1 O modelo fermiônico bidimensional de *hot spots*

Seja um sistema bidimensional formado por partículas fermiônicas interagentes em uma

rede quadrática definido pela Hamiltoniana do modelo de Hubbard [35, 41], cuja expressão é dada por

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi(\mathbf{k}) c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) c_{\sigma}(\mathbf{k}) + U \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_4} \delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) c_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_4) c_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{k}_3) c_{\downarrow}(\mathbf{k}_2) c_{\uparrow}(\mathbf{k}_1). \quad (2.1)$$

Aqui $c_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k})$ e $c_{\sigma}(\mathbf{k})$ são, respectivamente, os usuais operadores de criação e aniquilação de férmions com momento \mathbf{k} e projeções de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, sendo U a interação repulsiva quártica entre estados eletrônicos. Supondo a existência dos termos de interação t e t' entre primeiros e segundos vizinhos, adotaremos $\xi(\mathbf{k}) = -2t[\cos(k_x) + \cos(k_y)] - 4t' \cos(k_x) \cos(k_y) - \mu$ para a dispersão do modelo, com μ correspondendo ao potencial químico. Para valores de interação $t' < 0$, a dispersão $\xi(\mathbf{k})$ gera uma superfície de Fermi semelhante à dos cupratos supercondutores na fase de líquido de Fermi, como esquematizado na Figura 2.1.

Tendo em vista o estudo das propriedades de baixa energia do modelo induzidas por flutuações antiferromagnéticas com vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, nós consideraremos aqui apenas as propriedades físicas dos graus de liberdade do modelo em torno dos pontos da superfície de Fermi conectados diretamente por \mathbf{Q} . Esses pontos, em questão, são chamados na literatura de *hot spots* e para a superfície de Fermi semelhante à dos cupratos supercondutores correspondem a um total de oito pontos. Além disso, usaremos os campos fermiônicos de Grassmann $(\psi_{\ell, \sigma}^{\dagger}, \psi_{\ell, \sigma})$ com $\ell = 1, \dots, 8$ para representar os operadores fermiônicos da Hamiltoniana na Eq. (2.1). Por fim, aproximaremos a dispersão do modelo nos *hot spots* por sua forma linear $\xi_{\ell}(\mathbf{k}) = \mathbf{v}_{\ell} \cdot \mathbf{k}$, onde $\mathbf{v}_{\ell} = \nabla_{\mathbf{k}} \xi(\mathbf{k}) \Big|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_{\ell}}$ é a velocidade de Fermi para o *hot spot* com índice ℓ . O sistema pode então ser descrito em termos da seguinte densidade Lagrangiana

$$\mathcal{L}[\psi^{\dagger}, \psi] = \sum_{\ell=1}^8 \psi_{\ell, \sigma}^{\dagger} (i\partial_t - \xi_{\ell}(-i\nabla)) \psi_{\ell, \sigma} - \mathcal{H}_{\text{int}}, \quad (2.2)$$

onde agora os campos fermiônicos $\psi_{\ell, \sigma}^{\dagger} = \psi_{\ell, \sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}, t)$ são funções da posição \mathbf{r} e do tempo t . A Hamiltoniana \mathcal{H}_{int} descreve as várias interações entre os graus de liberdade nos *hot spots* (veja a Figura 2.2) e é definida em função de três outras Hamiltonianas, ou seja, $\mathcal{H}_{\text{int}} = \mathcal{H}_{\text{int}}^{(1)} + \mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)} + \mathcal{H}_{\text{int}}^{(3)}$. A Hamiltoniana $\mathcal{H}_{\text{int}}^{(1)}$ descreve apenas as assim chamadas interações g_1, g_2 ,

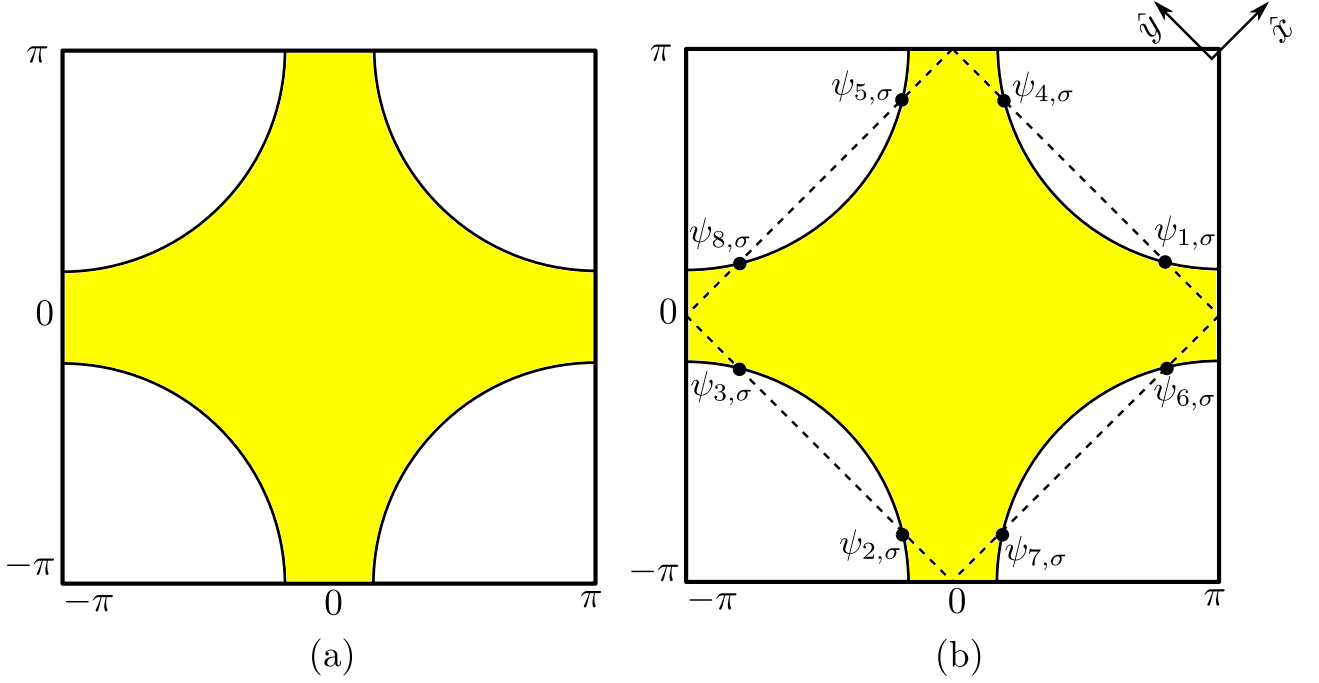


Figura 2.1: (a) Zona de Brillouin da rede quadrática com a superfície de Fermi (contorno da área em amarelo) para o modelo de Hubbard gerada pela dispersão $\xi(\mathbf{k})$ com interações entre primeiros e segundos vizinhos. De acordo com medidas experimentais de espectroscopia de fotoemissão, essa superfície de Fermi é a mesma dos cupratos supercondutores no regime superdopado. (b) Superfície de Fermi do modelo fermiônico bidimensional truncada nos chamados *hot spots*, que são representados pelos círculos escuros. Esses pontos são aqui definidos como a intersecção da superfície de Fermi com a zona antiferromagnética (quadrado com linhas tracejadas), sendo os mesmos conectados pelo vetor de de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. Os graus de liberdade fermiônicos nos oito *hot spots* são representados, na figura, pelos campos de Grassmann $\psi_{\ell,\sigma}$, com $\ell = 1, \dots, 8$ e projeção de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$.

g_{1c} , g_{2c} , g_{1x} e g_{2x} entre os férmions dos quartetos $\ell = 1, \dots, 4$ ou $\ell = 5, \dots, 8$, sendo representada por

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{int}}^{(1)} = & g_1(\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'}^\dagger \psi_{1,\sigma'} \psi_{2,\sigma} + \psi_{4,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{4,\sigma'} \psi_{3,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'}^\dagger \psi_{5,\sigma'} \psi_{6,\sigma} + \psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{8,\sigma'} \psi_{7,\sigma}) \\
& + g_2(\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \psi_{1,\sigma} + \psi_{4,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{3,\sigma'} \psi_{4,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{5,\sigma} + \psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{7,\sigma'} \psi_{8,\sigma}) \\
& + g_{1c}(\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{1,\sigma'} \psi_{3,\sigma} + \psi_{4,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'}^\dagger \psi_{4,\sigma'} \psi_{2,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{5,\sigma'} \psi_{7,\sigma} + \psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'}^\dagger \psi_{8,\sigma'} \psi_{6,\sigma}) \\
& + g_{2c}(\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{3,\sigma'} \psi_{1,\sigma} + \psi_{4,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \psi_{4,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{7,\sigma'} \psi_{5,\sigma} + \psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{8,\sigma}) \\
& + g_{1x}(\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{4,\sigma'} \psi_{2,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{8,\sigma'} \psi_{6,\sigma} + c.c.) \\
& + g_{2x}(\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \psi_{4,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{8,\sigma} + c.c.).
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Já os processos de interação que violam o momento da rede por um vetor de onda da rede recíproca, conhecidos como interações do tipo *Umklapp* e designadas aqui por g_3 , g_{3t} , g_{3u} , g_{3v} , g_{3w} , g_{3x} e g_{3p} , correspondem à Hamiltoniana $\mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)}$, que é definida para o presente modelo como

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{int}}^{(2)} = & \frac{g_3}{2} (\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{1,\sigma'}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \psi_{2,\sigma} + \psi_{4,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'}^\dagger \psi_{3,\sigma'} \psi_{3,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{5,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{6,\sigma} + \psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{8,\sigma'}^\dagger \psi_{7,\sigma'} \psi_{7,\sigma} + c.c.) \\
& + \frac{g_{3t}}{2} (\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{5,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{2,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{4,\sigma'} \psi_{6,\sigma} + \psi_{3,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{8,\sigma'} \psi_{4,\sigma} + \psi_{7,\sigma}^\dagger \psi_{1,\sigma'}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \psi_{8,\sigma} + c.c.) \\
& + \frac{g_{3u}}{2} (\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'}^\dagger \psi_{5,\sigma'} \psi_{2,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'}^\dagger \psi_{3,\sigma'} \psi_{6,\sigma} + \psi_{3,\sigma}^\dagger \psi_{8,\sigma'}^\dagger \psi_{7,\sigma'} \psi_{4,\sigma} + \psi_{7,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'}^\dagger \psi_{1,\sigma'} \psi_{8,\sigma} + c.c.) \\
& + \frac{g_{3v}}{2} (\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{5,\sigma'}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \psi_{6,\sigma} + \psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'}^\dagger \psi_{7,\sigma'} \psi_{3,\sigma} + \psi_{2,\sigma}^\dagger \psi_{8,\sigma'}^\dagger \psi_{1,\sigma'} \psi_{7,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{4,\sigma} + c.c.) \\
& + \frac{g_{3w}}{2} (\psi_{3,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'}^\dagger \psi_{4,\sigma'} \psi_{5,\sigma} + \psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{1,\sigma'}^\dagger \psi_{7,\sigma'} \psi_{2,\sigma} + \psi_{4,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{3,\sigma'} \psi_{8,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{1,\sigma} + c.c.) \\
& + g_{3x} (\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \psi_{3,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{8,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{7,\sigma} + c.c.) \\
& + g_{3p} (\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'}^\dagger \psi_{3,\sigma'} \psi_{2,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{8,\sigma'}^\dagger \psi_{7,\sigma'} \psi_{6,\sigma} + c.c.). \tag{2.4}
\end{aligned}$$

Por fim, a terceira Hamiltoniana $\mathcal{H}_{\text{int}}^{(3)}$ descreve as diferentes interações g_{1r} , g_{1s} e g_{1l} entre os graus de liberdade dos quartetos $\ell = 1, \dots, 4$ e $\ell = 5, \dots, 8$ de *hot spots*. De acordo com a nossa notação, essa Hamiltoniana pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{int}}^{(3)} = & \frac{g_{1r}}{2} (\psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \psi_{4,\sigma} + \psi_{3,\sigma}^\dagger \psi_{1,\sigma'}^\dagger \psi_{7,\sigma'} \psi_{5,\sigma} + \psi_{2,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{8,\sigma} + \psi_{7,\sigma}^\dagger \psi_{5,\sigma'}^\dagger \psi_{1,\sigma'} \psi_{3,\sigma} + c.c.) \\
& + g_{1s} (\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{8,\sigma'} \psi_{6,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \psi_{4,\sigma} + c.c.) \\
& + g_{1l} (\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger \psi_{6,\sigma'} \psi_{8,\sigma} + \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'}^\dagger \psi_{4,\sigma'} \psi_{2,\sigma} + c.c.). \tag{2.5}
\end{aligned}$$

Com respeito às simetrias do modelo fermiônico de *hot spots*, a Lagrangiana $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$ é claramente invariante por uma transformação global dos campos fermiônicos pelo grupo $U(1)$ que, em termos físicos, implica na conservação de carga no sistema. Além disso, o sistema possui invariância por rotação dos spins pelo grupo $SU(2)$, rotações do espaço recíproco por ângulos de $\pi/2$ (ou simetria C_4), reflexão através das diagonais da zona de Brillouin e também invariância por simetria de reversão temporal \mathbb{Z}_2 .

Os termos g_i ($i = 1, 2, 1c, 2c, 1x, 2x, 3, 3t, 3u, 3v, 3w, 3p, 3x, 1r, 1s, 1l$), que aparecem nas Hamiltonianas definidas nas Eqs. (2.3)–(2.5) e indicados esquematicamente na Figura 2.2, são conhecidos como acoplamentos *nus* da teoria $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$ e representam os processos de interação

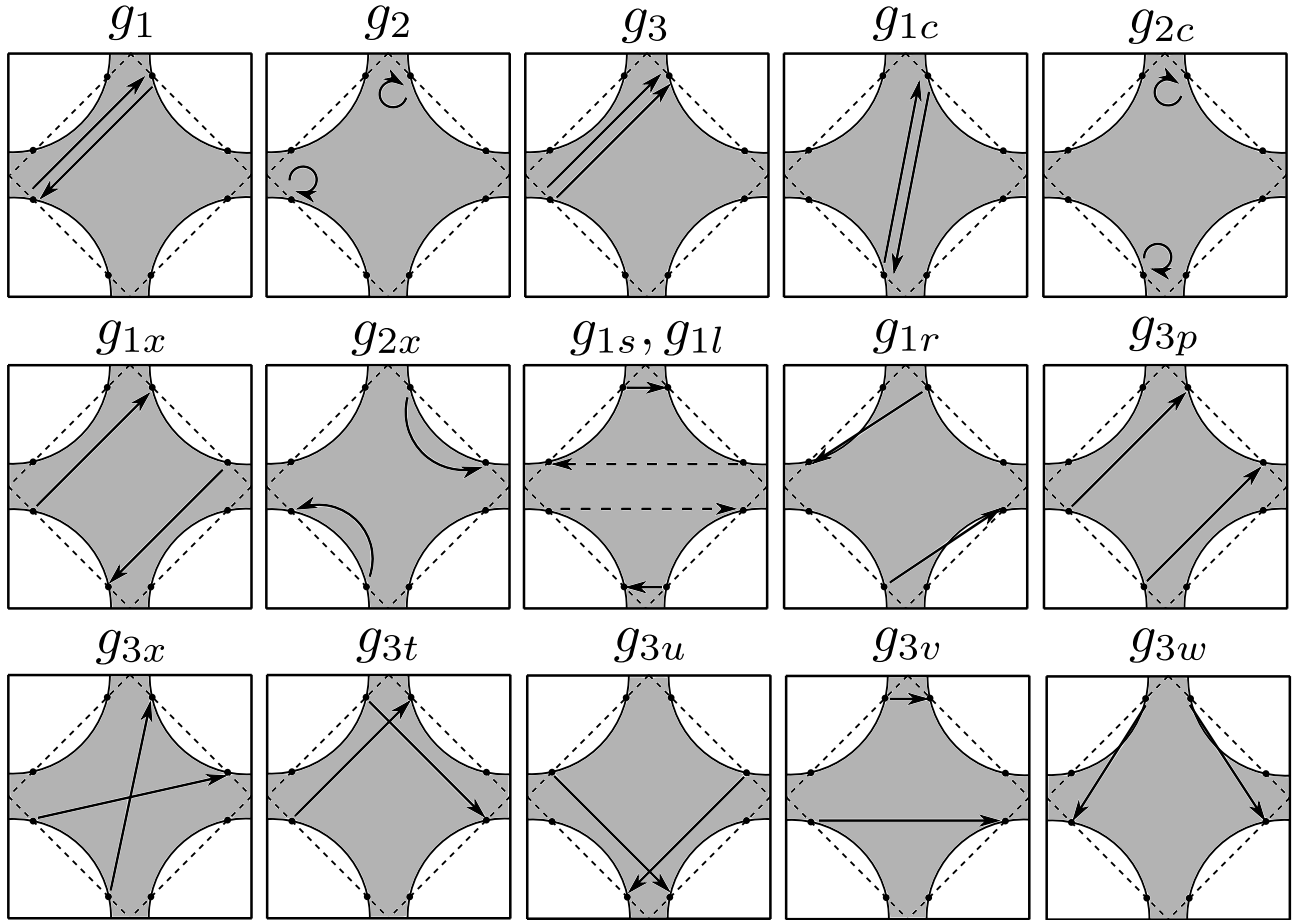


Figura 2.2: Representação, utilizando a notação de g-ologia, das interações relevantes para o modelo fermiônico bidimensional de *hot spots*, definido através da teoria de campos $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$ na Eq. (2.2). Na nossa notação, os processos correspondentes à interação g_{1s} são representados por setas contínuas, enquanto aqueles relacionados à interação g_{1l} são definidos em termos de setas tracejadas.

microscópicos relevantes do nosso modelo fermiônico de *hot spots*. Ao se tentar usar teoria de perturbação para se calcular as diversas quantidades físicas do modelo, como por exemplo as funções de correlação, utilizando a Lagrangiana na Eq. (2.2) para os acoplamentos *nus* g_i , verifica-se que essas quantidades físicas apresentam certas divergências logarítmicas (ou não-analiticidades) no limite de baixa energia do sistema, que não são condizentes com o que é medido experimentalmente. De acordo com a metodologia do grupo de renormalização, tais divergências logarítmicas podem ser possivelmente eliminadas do modelo regularizando a teoria por meio de um *cut-off* e, em seguida, redefinindo os seus parâmetros em termos de quantidades físicas acessíveis experimentalmente. Nas seções seguintes deste capítulo, explicaremos de forma

mais detalhada como empregar essa metodologia para descrever as propriedades físicas do modelo fermiônico bidimensional definido pelas Eqs. (2.2)–(2.5).

2.2 Fluxo de grupo de renormalização na aproximação de um *loop*

A Lagrangiana $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$ na Eq. (2.2) é o ponto de partida para se calcular as chamadas correções aos vértices induzidas no sistema por flutuações quânticas. Uma vez que o objetivo desta seção consiste em derivar as propriedades do modelo fermiônico de *hot spots* por meio da aplicação do método de grupo de renormalização na aproximação de um *loop*, vamos então calcular até segunda ordem, nos acoplamentos g_i , a função vértice irreduzível de quatro pontos $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_{0j}\})$ ($j = 1, \dots, 4$) para cada um dos canais do modelo, representados esquematicamente na Figura 2.2. Como consequência disso, dois tipos de estruturas, conhecidas na literatura como bolhas de polarização partícula-buraco e partícula-partícula, aparecerão nos diagramas de Feynman correspondentes. As bolhas do tipo partícula-buraco são formadas por duas linhas fermiônicas em direções contrárias. Por outro lado, as bolhas do tipo partícula-partícula possuem linhas fermiônicas com mesma orientação. As bolhas de polarização são importantes porque definem o tipo de fase que caracteriza um determinado sistema. De fato, bolhas do tipo partícula-partícula, divergentes no limite de baixa energia, estão ligadas ao aparecimento de uma instabilidade supercondutora, enquanto que uma instabilidade magnética é geralmente caracterizada pela existência de bolhas partícula-buraco divergentes.

Nesta tese, as bolhas de polarização partícula-partícula e partícula-buraco são definidas, nessa ordem, através das seguintes expressões

$$\Pi_{m\ell}(\mathbf{q}, q_0) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{dk_0}{2\pi} iG_m(\mathbf{k}, k_0) iG_\ell(-\mathbf{k} + \mathbf{q}, -k_0 + q_0), \quad (2.6)$$

$$\chi_{m\ell}(\mathbf{q}, q_0) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \frac{dk_0}{2\pi} iG_m(\mathbf{k}, k_0) iG_\ell(\mathbf{k} + \mathbf{q}, k_0 + q_0), \quad (2.7)$$

onde \mathbf{k} é o momento em torno dos *hot spots*, k_0 é a frequência e $G_\ell(\mathbf{k}, k_0)$ é a função de Green não interagente dos férmions $\psi_{\ell,\sigma}$, sendo aqui definida como a transformada de Fourier do inverso

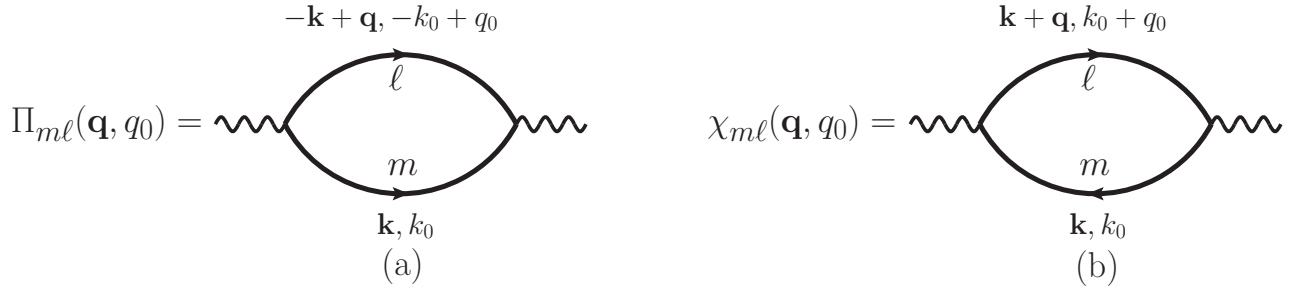


Figura 2.3: Representação diagramática das bolhas de polarização partícula-partícula (a), $\Pi_{m\ell}(\mathbf{q}, q_0)$, e partícula-buraco (b), $\chi_{m\ell}(\mathbf{q}, q_0)$, que aparecem no cálculo das funções vértices $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_{0j}\})$ do modelo fermiônico de *hot spots*. As linhas contínuas correspondem às funções de Green do modelo, as linhas onduladas às interações g_i , e os índices ℓ e m referem-se a dois dos oito *hot spots* presentes na superfície de Fermi do modelo.

do propagador livre da Lagrangiana $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$. No formalismo de temperatura nula, ela pode ser escrita como

$$G_\ell(\mathbf{k}, k_0) = \frac{\theta(\mathbf{v}_\ell \cdot \mathbf{k})}{k_0 - \mathbf{v}_\ell \cdot \mathbf{k} + i\delta} + \frac{\theta(-\mathbf{v}_\ell \cdot \mathbf{k})}{k_0 - \mathbf{v}_\ell \cdot \mathbf{k} - i\delta}. \quad (2.8)$$

Limitando o domínio de integração para cada coordenada do momento ao intervalo $[-k_c, k_c]$, onde k_c é o *cut-off* de momento ultravioleta da teoria, as bolhas de polarização partícula-partícula e partícula-buraco entre os férmions nos *hot spots* $\ell = 1$ e $\ell = 3$ possuem, respectivamente, as seguintes expressões

$$\Pi_{31}(\mathbf{q}, q_0) = -i \frac{k_c}{4\pi^2 v_F} \left[\ln \left(\frac{\Lambda_0 + q_0 - \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} - i\delta}{q_0 + \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{-\Lambda_0 + q_0 + \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} + i\delta}{q_0 - \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} + i\delta} \right) \right], \quad (2.9)$$

$$\chi_{31}(\mathbf{q}, q_0) = i \frac{k_c}{4\pi^2 v_F} \left[\ln \left(\frac{\Lambda_0 + q_0 + \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} - i\delta}{q_0 - \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{-\Lambda_0 + q_0 - \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} + i\delta}{q_0 + \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} + i\delta} \right) \right]. \quad (2.10)$$

onde $v_F = \sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ e $\Lambda_0 = 2v_F k_c$ é o *cut-off* ultravioleta na energia. No limite de baixa energia, que corresponde à situação onde $\max\{q_0, \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q}\} \ll \Lambda_0$, as duas funções definidas nas Eqs. (2.9) e (2.10) apresentam divergência logarítmica simples dada por

$$\Pi_{31}(\mathbf{q}, q_0) = -\chi_{31}(\mathbf{q}, q_0) = -i \frac{N(0)}{2} \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.11)$$

onde $N(0) = k_c / (\pi^2 v_F)$ é a densidade de estados para a região em torno dos *hot spots*.

Da mesma forma que acontece no cálculo das bolhas de polarização em sistemas unidimensionais [47], inicialmente no modelo fermiônico de *hot spots*, apenas as bolhas formadas

por fêrmions com velocidade \mathbf{v}_ℓ na mesma direção e sentido oposto são divergentes no limite de baixa energia. Por meio da aplicação de teoria de perturbação para a Lagrangiana na Eq. (2.2), podemos mostrar, na aproximação de um *loop*, que as únicas funções vértices de quatro pontos $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_{0j}\})$ com divergência logarítmica do tipo exemplificado na Eq. (2.11) são as que envolvem as interações g_{1c} , g_{2c} , g_{1x} , g_{2x} , g_{3p} , g_{3x} , g_{1r} , g_{1s} e g_{1l} . De fato, para essa aproximação, as funções $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_{0j}\})$ para as referidas interações, representadas na Figura 2.4 por meio de diagramas de Feynman do tipo $1PI^1$, são dadas por

$$\Gamma_{1c}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{1c} + iN(0)[g_{1c}^2 + g_{1x}g_{2x} + g_{1s}g_{1l} + g_{1r}^2 + g_{3x}^2 - g_{3p}g_{3x}] \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.12)$$

$$\Gamma_{2c}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{2c} + i\frac{N(0)}{2}[g_{1c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + g_{1s}^2 + g_{1l}^2 + 2g_{1r}^2 - g_{3p}^2] \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.13)$$

$$\Gamma_{1x}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{1x} + iN(0)[g_{1c}g_{2x} + g_{2c}g_{1x} + (g_{1s} + g_{1l})g_{1r}] \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.14)$$

$$\Gamma_{2x}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{2x} + iN(0)[g_{1c}g_{1x} + (g_{2c} - g_2)g_{2x} + 2g_{1s}g_{1r} - g_{3x}g_3] \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.15)$$

$$\Gamma_{1r}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{1r} + iN(0)[(g_{1c} + g_{2c})g_{1r} + (g_{1x} + g_{2x})g_{1s}] \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.16)$$

$$\Gamma_{1s}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{1s} + iN(0)[g_{1c}g_{1l} + g_{2c}g_{1s} + (g_{1x} + g_{2x})g_{1r}] \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.17)$$

$$\Gamma_{1l}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{1l} + iN(0)[g_{1c}g_{1s} + g_{2c}g_{1l} + (g_{1x} + g_{2x})g_{1r}] \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.18)$$

$$\Gamma_{3p}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{3p} - iN(0)g_{2c}g_{3p} \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.19)$$

$$\Gamma_{3x}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{3x} + iN(0)[(2g_{1c} - g_{2c})g_{3x} - g_{1c}g_{3p}] \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}} \right), \quad (2.20)$$

onde podemos perceber claramente que as funções vértices $\Gamma_i^{(4)}(\mathbf{q}, q_0)$ acima não estão bem definidas no limite de baixas frequências e longos comprimentos de onda, ou seja, quando $\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\} \rightarrow 0$. Como um resultado, a nossa formulação da teoria de perturbação, nos moldes apresentados até aqui, impossibilita qualquer tipo de correspondência com a situação observada experimentalmente, onde sempre se mede valores finitos para as quantidades físicas

¹Em teoria quântica de campos, o termo $1PI$ (do inglês, “*1-particle irreducible*”) refere-se aos diagramas de Feynman que não podem ser divididos em dois diagramas distintos, cortando uma linha interna.

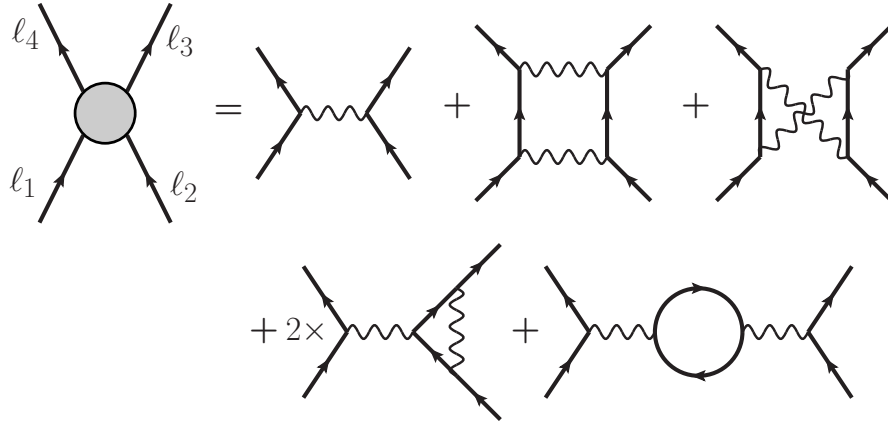


Figura 2.4: Função vértice irreduzível $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_i, k_{0i}\})$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) para os diversos tipos de interação do modelo fermiônico de *hot spots* calculada usando teoria de perturbação até a ordem de um *loop*.

nas quais estamos interessados. Para solucionar o problema das divergências logarítmicas que aparecem quando se tenta acessar perturbativamente as propriedades do sistema, devemos redefinir a nossa teoria por meio da aplicação do método de grupo de renormalização de teoria de campos [37, 38, 48].

Em virtude de o modelo fermiônico de *hot spots* na Eq. (2.2) representar uma teoria microscópica, todos os seus parâmetros, como os acoplamentos e os campos fermiônicos, são definidos para uma escala de energia da ordem do *cut-off* ultravioleta Λ_0 . Contudo, experimentalmente, o que se observa é a dinâmica de baixa energia do sistema. A metodologia do grupo de renormalização consiste basicamente na substituição dos parâmetros do modelo microscópico, conhecidos na literatura como parâmetros *nus*, por parâmetros efetivos ou renormalizados, definidos para uma escala de energia Λ que, por sua vez, corresponde à escala de energia observada experimentalmente. Para correções no modelo até a ordem de um *loop*, somente os acoplamentos g_i devem ser modificados. Dessa forma, fazemos a redefinição²

$$g_i = N^{-1}(0)[g_{iR}(\Lambda) + \Delta g_{iR}(\Lambda)], \quad (2.21)$$

onde $g_{iR}(\Lambda)$ é o acoplamento renormalizado do modelo e $\Delta g_{iR}(\Lambda)$ é o contra-termo correspon-

²A expressão na Eq. (2.21) constitui o que se chama de hipótese de renormalizabilidade [49]. Ela afirma que a reparametrização da teoria $\mathcal{L}[\bar{\psi}, \psi]$ em termos das quantidades físicas $g_{iR}(\Lambda)$ é suficiente para eliminar todas as singularidades logarítmicas que aparecem no cálculo perturbativo das funções de correlação de um modelo.

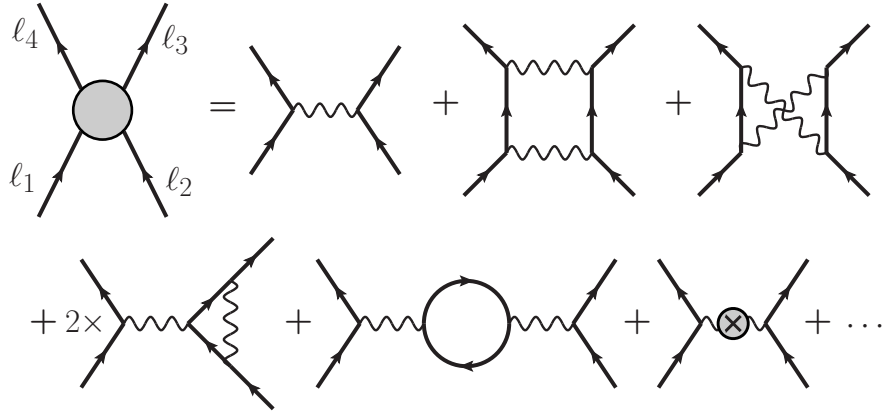


Figura 2.5: Função vértice renormalizada $\Gamma_i^{R(4)}(\{\mathbf{k}_i, k_{0i}\})$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) para os diversos canais de interação do modelo fermiônico de *hot spots* calculada usando teoria de perturbação renormalizada até a ordem de um *loop*. O último diagrama representa os contra-termos $-i\Delta g_{iR}$ da teoria.

dente, que deve ser calculado a cada ordem em teoria de perturbação. Inserindo a expressão acima para os acoplamentos g_i na Lagrangiana $\mathcal{L}[\bar{\psi}, \psi]$, definida na Eq. (2.2), obtemos então a teoria renormalizada $\mathcal{L}_R[\bar{\psi}, \psi]$ para o modelo fermiônico de *hot spots* na aproximação de um *loop*.

Como próximo passo, devemos em seguida calcular as funções vértices $\Gamma_i^{R(4)}(\{\mathbf{k}_i, k_{0i}\})$ para os acoplamentos renormalizados g_{iR} em $\mathcal{L}_R[\bar{\psi}, \psi]$. Esse cálculo é semelhante ao efetuado anteriormente para $\Gamma^{(4)}(\{\mathbf{k}_i, k_{0i}\})$, ou seja, os diagramas de Feynman que aparecem são os mesmos, com a exceção de um único diagrama que é devido ao contra-termo (veja a Figura 2.5). Dessa forma, chegamos ao resultado

$$\begin{aligned} \Gamma_{1c}^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) &= -ig_{1cR} + i[g_{1cR}^2 + g_{1xR}g_{2xR} + g_{1sR}g_{1lR} + g_{1rR}^2 + g_{3xR}^2 - g_{3pR}g_{3xR}] \\ &\quad \times \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}}\right) - i\Delta g_{1cR}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{2c}^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) &= -ig_{2cR} + \frac{i}{2}[g_{1cR}^2 + g_{1xR}^2 + g_{2xR}^2 + g_{1sR}^2 + g_{1lR}^2 + 2g_{1rR}^2 - g_{3pR}^2] \\ &\quad \times \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}}\right) - i\Delta g_{2cR}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{1x}^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) &= -ig_{1xR} + i[g_{1cR}g_{2xR} + g_{2cR}g_{1xR} + (g_{1sR} + g_{1lR})g_{1rR}] \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}}\right) \\ &\quad - i\Delta g_{1xR}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{2x}^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) &= -ig_{2xR} + i[g_{1cR}g_{1xR} + (g_{2cR} - g_{2R})g_{2xR} + 2g_{1sR}g_{1rR} - g_{3xR}g_{3R}] \\ &\quad \times \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}}\right) - i\Delta g_{2xR}, \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{1r}^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) &= -ig_{1rR} + i[(g_{1cR} + g_{2cR})g_{1rR} + (g_{1xR} + g_{2xR})g_{1sR}] \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}}\right) \\ &\quad - i\Delta g_{1rR}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{1s}^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) &= -ig_{1sR} + i[g_{1cR}g_{1lR} + g_{2cR}g_{1sR} + (g_{1xR} + g_{2xR})g_{1rR}] \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}}\right) \\ &\quad - i\Delta g_{1sR}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{1l}^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) &= -ig_{1lR} + i[g_{1cR}g_{1sR} + g_{2cR}g_{1lR} + (g_{1xR} + g_{2xR})g_{1rR}] \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}}\right) \\ &\quad - i\Delta g_{1lR}, \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\Gamma_{3p}^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) = -ig_{3pR} - ig_{2cR}g_{3pR} \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}}\right) - i\Delta g_{3p}, \quad (2.29)$$

$$\begin{aligned} \Gamma_{3x}^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) &= -ig_{3xR} + i[(2g_{1cR} - g_{2cR})g_{3xR} - g_{1cR}g_{3pR}] \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}}\right) \\ &\quad - i\Delta g_{3xR}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

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

$$\Gamma_{iR}^{(4)}(\mathbf{q}, q_0) \Big|_{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\}=\Lambda} = -ig_{iR}(\Lambda). \quad (2.31)$$

Dessa forma, todos os contra-termos da Lagrangiana renormalizada $\mathcal{L}_R[\bar{\psi}, \psi]$ ficam bem definidos na aproximação de um *loop*, sendo que a substituição dos mesmos nas Eqs. (2.22)–(2.30) mostra que as funções vértices reduzem-se aos respectivos termos de primeira ordem quando $\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\} \rightarrow \Lambda$. Como última etapa do estudo das interações do sistema, resta somente a derivação das equações de fluxo para os acoplamentos no limite de baixa energia. Para isso, notamos que a teoria original não contém qualquer informação sobre a escala de energia Λ . Então, observando a Eq. (2.21), concluímos que a seguinte condição deve ser satisfeita

$$\beta_i(\{g_{jR}\}) \equiv \Lambda \frac{d}{d\Lambda} g_{iR}(\Lambda) = -\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \Delta g_{iR}(\Lambda), \quad (2.32)$$

onde $\beta_i(\{g_{jR}\})$ são conhecidas como funções betas do modelo. Portanto, na aproximação de

um *loop*, as equações de fluxo de grupo de renormalização para os acoplamentos divergentes do sistema são dadas por³

$$\frac{dg_{1c}}{dl} = -g_{1c}^2 - g_{1x}g_{2x} - g_{1s}g_{1l} - g_{1r}^2 - g_{3x}^2 + g_{3p}g_{3x}, \quad (2.33)$$

$$\frac{dg_{2c}}{dl} = -\frac{1}{2}(g_{1c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + g_{1s}^2 + g_{1l}^2 + 2g_{1r}^2 - g_{3p}^2), \quad (2.34)$$

$$\frac{dg_{1x}}{dl} = -g_{1c}g_{2x} - g_{2c}g_{1x} - (g_{1s} + g_{1l})g_{1r}, \quad (2.35)$$

$$\frac{dg_{2x}}{dl} = -g_{1c}g_{1x} - (g_{2c} - g_2)g_{2x} - 2g_{1s}g_{1r} + g_{3x}g_3, \quad (2.36)$$

$$\frac{dg_{1r}}{dl} = -(g_{1c} + g_{2c})g_{1r} - (g_{1x} + g_{2x})g_{1s}, \quad (2.37)$$

$$\frac{dg_{1s}}{dl} = -g_{1c}g_{1l} - g_{2c}g_{1s} - (g_{1x} + g_{2x})g_{1r}, \quad (2.38)$$

$$\frac{dg_{1l}}{dl} = -g_{1c}g_{1s} - g_{2c}g_{1l} - (g_{1x} + g_{2x})g_{1r}, \quad (2.39)$$

$$\frac{dg_{3p}}{dl} = g_{2c}g_{3p}, \quad (2.40)$$

$$\frac{dg_{3x}}{dl} = (g_{2c} - 2g_{1c})g_{3x} + g_{1c}g_{3p}, \quad (2.41)$$

onde as derivadas acima são com respeito à variável l , também chamada de passo de grupo de renormalização, a qual é definida através da relação $\Lambda = \Lambda_0 \exp(-l)$.

Utilizando o modelo de Hubbard na Eq. (2.1), temos que os valores iniciais das interações renormalizadas são iguais a $g_{iR}(0) = [k_c/(\pi^2 v_F)]U$, com o termo U representando uma interação repulsiva. A solução numérica das Eqs. (2.33)–(2.41), com essas condições iniciais, mostra que, com a exceção de g_{1r} , g_{1s} e g_{1l} , todos os acoplamentos do modelo fluem para um ponto fixo de forte acoplamento na aproximação de um *loop* e divergem para uma escala de energia finita Λ_c , representada por $l_c = \ln(\Lambda_0/\Lambda_c)$. Próximo à escala crítica l_c , o comportamento do ponto fixo do sistema pode ser capturado pelo *Ansatz*

$$g_{iR}(l) = \frac{C_i}{l_c - l}, \quad (2.42)$$

onde aqui C_i são constantes universais, que não dependem das condições iniciais. Substituindo isso nas equações de grupo de renormalização acima, obtemos um conjunto de nove equações

³Para simplificar a notação, não usaremos aqui o subscrito indicativo de quantidades renormalizadas nas equações de fluxo de grupo de renormalização presentes neste capítulo.

polinomiais da forma $C_i + \beta_i(\{C_j\}) = 0$. A solução desse conjunto de equações polinomiais corresponde a

$$\begin{bmatrix} C_{1c} \\ C_{2c} \\ C_{1x} \\ C_{2x} \\ C_{1r} \\ C_{1s} \\ C_{1l} \\ C_{3p} \\ C_{3x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{10}-2}{3} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \frac{2\sqrt{8-\sqrt{10}}}{3} \\ \frac{\sqrt{8-\sqrt{10}}}{3} \end{bmatrix}. \quad (2.43)$$

A estrutura de ponto fixo representada acima foi determinada pela primeira vez em uma análise, por meio de grupo de renormalização na aproximação de um *loop*, das instabilidades em um líquido de Fermi bidimensional por Furukawa e Rice [46]. A reprodução da sua análise nesta seção serviu apenas para definir o nosso modelo e exemplificar a nossa metodologia. Nas seções seguintes, mostraremos como a inclusão de flutuações quânticas mais elevadas afeta a física do sistema no regime de baixas frequências e longos comprimentos de onda. Iniciaremos então pela análise dos efeitos das interações na topologia da superfície de Fermi nos *hot spots* e, em seguida, consideraremos o fluxo de grupo de renormalização das interações com respeito à inclusão de flutuações quânticas até a ordem de dois *loops*.

2.3 Renormalização da velocidade de Fermi, dimensão anômala e processos unidimensionais

Nesta seção, consideraremos o efeito das interações com funções vértices totalmente divergentes no limite de baixa energia sobre a superfície de Fermi do nosso modelo, localizada na região em torno dos oito *hot spots*. Como vimos anteriormente, essas interações são aquelas representadas, na notação de g-ologia apresentada na Figura 2.2, por g_{1c} , g_{2c} , g_{1x} , g_{2x} , g_{3p} , g_{3x} , g_{1r} , g_{1s} e g_{1l} . Para entender as propriedades da superfície de Fermi devido ao efeito das interações, calcularemos a velocidade de Fermi renormalizada \mathbf{v}_ℓ^R para cada *hot spot* ℓ . Em função disso, devemos então empreender uma total redefinição dos parâmetros microscópicos da Lagrangiana $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$, na Eq. (2.2), em termos de parâmetros adequados à escala de energia

pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 -i\Sigma_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, k_0) &= i\frac{k_c^2}{4\pi^4 v_R^2} [\gamma_\psi(\{g_{iR}\})k_0 - \gamma_{v_x}(\{g_{iR}\})v_x^R k_x + \gamma_{v_y}(\{g_{iR}\})v_y^R k_y] \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{k_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{k}\}}\right) \\
 &\quad + i(Z_\psi - 1)k_0 - i(Z_\psi Z_v^x - 1)v_x^R k_x - i(Z_\psi Z_v^y - 1)v_y^R k_y,
 \end{aligned} \tag{2.50}$$

onde as funções $\gamma_\psi(\{g_{iR}\})$, $\gamma_{v_x}(\{g_{iR}\})$ e $\gamma_{v_y}(\{g_{iR}\})$, que aparecem acima, são dadas por

$$\gamma_\psi(\{g_{iR}\}) = g_{1cR}^2 + g_{2cR}^2 + g_{1xR}^2 + g_{2xR}^2 + g_{3pR}^2 + g_{3xR}^2 - g_{1cR}g_{2cR} - g_{1xR}g_{2xR} - g_{3pR}g_{3xR}, \tag{2.51}$$

$$\gamma_{v_x}(\{g_{iR}\}) = g_{1cR}^2 + g_{2cR}^2 + g_{1xR}^2 + g_{2xR}^2 + g_{3pR}^2 + g_{3xR}^2 - g_{1cR}g_{2cR} - g_{1xR}g_{2xR} - g_{3pR}g_{3xR}, \tag{2.52}$$

$$\gamma_{v_y}(\{g_{iR}\}) = g_{1xR}^2 + g_{2xR}^2 + g_{3pR}^2 + g_{3xR}^2 - g_{1cR}^2 - g_{2cR}^2 + g_{1cR}g_{2cR} - g_{1xR}g_{2xR} - g_{3pR}g_{3xR}. \tag{2.53}$$

Neste momento, estamos aptos a calcular, na aproximação de dois *loops*, a função vértice irreduzível de dois pontos $\Gamma_\ell^{R(2)}(\mathbf{k}, k_0)$, que nada mais é que o inverso da função de Green total. Portanto, seguindo essa definição, temos que

$$\Gamma_\ell^{R(2)}(\mathbf{k}, k_0) = [G_\ell^R(\mathbf{k}, k_0)]^{-1} - \Sigma_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, k_0), \tag{2.54}$$

onde $[G_\ell^R(\mathbf{k}, k_0)]^{-1} = k_0 - \mathbf{v}_\ell \cdot \mathbf{k}$ é o inverso da função de Green livre. Substituindo o resultado na Eq. (2.50) na expressão logo acima, temos então que a função $\Gamma_\ell^{R(2)}(\mathbf{k}, k_0)$, na vizinhança do *hot spot* $\ell = 1$, pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{\ell=1}^{R(2)}(\mathbf{k}, k_0) &= k_0 \left[1 + \frac{k_c^2}{4\pi^4 v_R^2} \gamma_\psi(\{g_{iR}\}) \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{k_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{k}\}}\right) + (Z_\psi - 1) \right] \\
 &\quad - v_x^R k_x \left[1 + \frac{k_c^2}{4\pi^4 v_R^2} \gamma_{v_x}(\{g_{iR}\}) \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{k_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{k}\}}\right) + (Z_\psi Z_v^x - 1) \right] \\
 &\quad - v_y^R k_y \left[1 - \frac{k_c^2}{4\pi^4 v_R^2} \gamma_{v_y}(\{g_{iR}\}) \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\max\{k_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{k}\}}\right) + (Z_\psi Z_v^y - 1) \right]
 \end{aligned} \tag{2.55}$$

Por definição, as constantes de renormalização Z_ψ , Z_v^x e Z_v^y devem cancelar todas as divergências que acometem o modelo, à medida que a escala de energia $\Lambda = \max\{k_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{k}\}$ flui para zero.

Dessa forma, obtemos então o seguinte resultado

$$Z_\psi = 1 - \frac{k_c^2}{4\pi^4 v_R^2} \gamma_\psi(\{g_{iR}\}) \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\Lambda}\right), \tag{2.56}$$

$$Z_\psi Z_v^x = 1 - \frac{k_c^2}{4\pi^4 v_R^2} \gamma_{v_x}(\{g_{iR}\}) \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\Lambda}\right), \tag{2.57}$$

$$Z_\psi Z_v^y = 1 + \frac{k_c^2}{4\pi^4 v_R^2} \gamma_{v_y}(\{g_{iR}\}) \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\Lambda}\right). \tag{2.58}$$

$$\begin{aligned}
 -i\Sigma_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, k_0) = & \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} + \text{Diagram 3} \\
 & + \text{Diagram 4} + \text{Diagram 5} + \text{Diagram 6} \\
 & + \text{Diagram 7} + \text{Diagram 8} + \text{Diagram 9} \\
 & + \text{Diagram 10} + \text{Diagram 11} + \text{Diagram 12} \\
 & + \text{Diagram 13} + \dots
 \end{aligned}$$

Figura 2.6: Expansão da auto-energia $-i\Sigma_{\ell}^R(\mathbf{k}, k_0)$ para as excitações fermiônicas na vizinhança do *hot spot* $\ell = 1$ em função dos diagramas de Feynman de dois *loops* com divergências logarítmicas no limite de baixa energia do sistema. Aqui, as linhas contínuas representam o propagador não-interagente do modelo $iG_{\ell}(\mathbf{k}, k_0)$, as linhas onduladas correspondem, a menos de um fator $-i$, às interações renormalizadas g_{iR} do modelo e o último diagrama é o contra-termo da auto-energia, que descreve, por sua vez, o efeito das constantes de renormalização Z_{ψ} , Z_v^x e Z_v^y . Além disso, todos os diagramas de dois *loops* apresentados aqui contribuem também para a renormalização das componentes da velocidade de Fermi $\mathbf{v}_1 = (v_x, v_y)$ do *hot spot* $\ell = 1$.

As equações de grupo de renormalização para v_x^R e v_y^R são obtidas determinando as constantes de renormalização Z_v^x e Z_v^y através das Eqs. (2.56)–(2.58) e então substituindo os seus valores nas seguintes equações

$$\Lambda \frac{dv_{x,y}^R}{d\Lambda} = -v_{x,y}^R \Lambda \frac{d \ln Z_v^{x,y}}{d\Lambda}, \quad (2.59)$$

que foram derivadas supondo a invariância de v_x e v_y com a escala de energia Λ . De fato, seguindo tal procedimento, determinamos que, na aproximação de dois *loops*, as equações de grupo de renormalização para as componentes da velocidade de Fermi $\mathbf{v}_{\ell=1}^R = (v_x^R, v_y^R)$ do *hot*

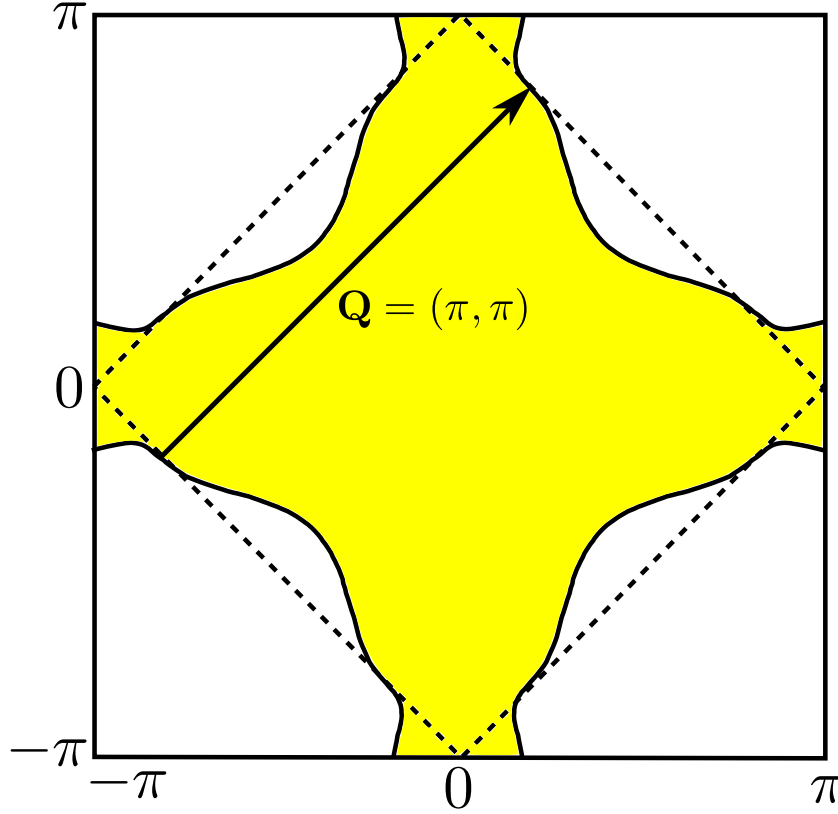


Figura 2.7: Representação da superfície de Fermi do modelo fermiônico de *hot spots* com o aspecto de “gargalo de garrafa”. Esse efeito ocorre devido à forte renormalização para zero da razão $\kappa_R = v_y^R/v_x^R$ entre as componentes da velocidade de Fermi nos *hot spots*, que leva ao aparecimento de *nesting* entre as regiões da superfície de Fermi separadas pelo vetor de onda do ordenamento antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$.

spot $\ell = 1$ são

$$\Lambda \frac{dv_x^R}{d\Lambda} = 0, \quad (2.60)$$

$$\Lambda \frac{dv_y^R}{d\Lambda} = \frac{k_c^2}{4\pi^4} [\gamma_{v_y}(\{g_{iR}\}) + \gamma_\psi(\{g_{iR}\})] \frac{v_y^R}{(v_x^R)^2 + (v_y^R)^2}. \quad (2.61)$$

Como consequência dos dois resultados acima, notamos que a componente v_x^R da velocidade de Fermi é um invariante do grupo de renormalização nessa ordem de aproximação e obtemos que a razão entre as velocidades $\kappa_R = v_y^R/v_x^R$ ($\equiv \tan \theta_R$) obedece à seguinte equação

$$\Lambda \frac{d\kappa_R}{d\Lambda} = \frac{1}{4} \gamma_v(\{g_{iR}\}) \frac{\kappa_R}{1 + \kappa_R^2}, \quad (2.62)$$

onde $\gamma_v(\{g_{iR}\}) \equiv \gamma_{v_x}(\{g_{iR}\}) + \gamma_{v_y}(\{g_{iR}\})$ e as interações g_{iR} foram reescaladas pela densidade de estados $N(0) = k_c/(\pi^2 v_F)$, no limite onde $v_F = v_x$. Pelo resultado na Eq. (2.62), observa-se

que $\kappa_R^* \rightarrow 0$ (ou $\theta_R^* \rightarrow 0$) é o único ponto fixo estável do sistema no limite do infra-vermelho. Ele corresponde a uma situação de *nesting* perfeito envolvendo as regiões da superfície de Fermi em torno dos *hot spots*, cuja separação é dada pelo vetor de ordenamento antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, o que leva ao aparecimento de estruturas similares a superfícies de Fermi unidimensionais nessas regiões do espaço recíproco [25] (veja a Figura 2.7). Embora isso ocorra somente no caso limite onde $\Lambda \rightarrow 0$, a solução numérica da equação de grupo de renormalização de dois *loops* acima para κ_R mostra que essa quantidade flui rapidamente para zero, mesmo para escalas de energia não tão distante do *cut-off* ultravioleta Λ_0 . Esse tipo de *nesting* dinâmico, produzido em maior grau pelas interações do tipo *Umklap* g_{3p} e g_{3x} , leva ao aparecimento de fortes flutuações antiferromagnéticas no sistema, como veremos mais adiante. De acordo com resultados de grupo de renormalização e expansões em $1/N$, onde $N \rightarrow \infty$ representa o número de tipos fermiônicos, um efeito bastante similar também ocorre no modelo bidimensional de spin-férmion [14, 15, 17, 18]. De fato, nesse caso, a superfície de Fermi do modelo assume a chamada forma de “gargalo de garrafa” (*bottleneck effect*), devido à forte renormalização da componente paralela da velocidade de Fermi nos *hot spots*, levando à emergência de processos de espalhamento unidimensionais, à medida que se aproxima do ponto crítico antiferromagnético do sistema [50].

No ponto fixo do modelo fermiônico de *hot spots*, onde a componente da velocidade \mathbf{v}_ℓ tangente à superfície de Fermi tende a zero, as interações unidimensionais do sistema passam a gerar contribuições não-analíticas para as suas funções de correlação. De fato, a auto-energia $-i\Sigma_\ell^R(\mathbf{k}, k_0)$, deve ser corrigida por diagramas de Feynman de dois *loops* envolvendo as interações g_1 , g_2 e g_3 , como representado na Figura 2.8. No caso do *hot spot* $\ell = 1$, essa correção da auto-energia é dada por

$$-i\delta\Sigma_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, k_0) = i\frac{k_c^2}{4\pi^4 v_R^2} \left(g_{1R}^2 + g_{2R}^2 + \frac{g_{3R}^2}{2} - g_{1R}g_{2R} \right) (k_0 - v_x^R k_x) \ln \left(\frac{\Lambda_0}{\max\{k_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{k}\}} \right). \quad (2.63)$$

O principal efeito da correção $-i\delta\Sigma_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, k_0)$ da auto-energia no sistema aparecerá nas funções

Figura 2.8: Correção para a auto-energia $-i\Sigma_{\ell}^R(\mathbf{k}, k_0)$ devido às excitações fermiônicas na vizinhança do *hot spot* $\ell = 1$ no limite onde a componente da velocidade de Fermi \mathbf{v}_1 tangente à superfície de Fermi tende a zero. Nesse caso, o termo de correção para a auto-energia, denominado aqui por $-i\delta\Sigma_{\ell}^R(\mathbf{k}, k_0)$, é dado em termos de diagramas de dois *loops* devido às interações unidimensionais g_1 , g_2 e g_3 . Na figura, as linhas contínuas representam o propagador não-interagente do modelo $iG_{\ell}(\mathbf{k}, k_0)$ e as linhas onduladas, a menos de um fator $-i$, correspondem às interações renormalizadas do modelo.

$\gamma_{\psi}(\{g_{iR}\})$ e $\gamma_{v_x}(\{g_{iR}\})$, que, evidentemente, devem ser corrigidas. Isso leva ao resultado

$$\begin{aligned} \gamma_{\psi}(\{g_{iR}\}) = & g_{1R}^2 + g_{2R}^2 + \frac{g_{3R}^2}{2} + g_{1cR}^2 + g_{2cR}^2 + g_{1xR}^2 + g_{2xR}^2 + g_{3pR}^2 + g_{3xR}^2 - g_{1R}g_{2R} - g_{1cR}g_{2cR} \\ & - g_{1xR}g_{2xR} - g_{3pR}g_{3xR}, \end{aligned} \quad (2.64)$$

$$\begin{aligned} \gamma_{v_x}(\{g_{iR}\}) = & g_{1R}^2 + g_{2R}^2 + \frac{g_{3R}^2}{2} + g_{1cR}^2 + g_{2cR}^2 + g_{1xR}^2 + g_{2xR}^2 + g_{3pR}^2 + g_{3xR}^2 - g_{1R}g_{2R} - g_{1cR}g_{2cR} \\ & - g_{1xR}g_{2xR} - g_{3pR}g_{3xR}. \end{aligned} \quad (2.65)$$

Combinando os resultados nas Eqs. (2.56) e (2.64), percebemos que os campos fermiônicos adquirem uma dimensão anômala η_{ψ} , cuja equação de grupo de renormalização pode ser escrita como

$$\eta_{\psi} \equiv \Lambda \frac{d \ln Z_{\psi}}{d\Lambda} = \frac{1}{4} \gamma_{\psi}(\{g_{iR}\}). \quad (2.66)$$

No limite onde a escala de energia Λ flui para zero, temos que a constante de renormalização dos campos fermiônicos Z_{ψ} corresponderá ao chamado peso da quasipartícula $Z = \left[1 - \frac{\partial \text{Re} [\Sigma_{\ell}(\mathbf{k}, k_0 + i0^+)]}{\partial k_0} \right]^{-1} \Big|_{\mathbf{k}=0, k_0=0}$ da teoria do líquido de Fermi de Landau [48, 34, 51]. Para o caso onde a dimensão anômala η_{ψ} é nula, que corresponde à situação $0 < Z < 1$, o sistema fermiônico interagente pode ser descrito em termos de um sistema de quasipartículas fracamente interagente, cujos números quânticos são os mesmos dos estados de elétron livre.

Nessa teoria, as interações do modelo inicial são basicamente responsáveis pela renormalização da massa e da carga dos estados eletrônicos livres. Por outro lado, na situação onde a dimensão anômala η_ψ é finita, a constante de renormalização Z_ψ flui para zero no limite de baixa energia que, dessa forma, implica em um valor nulo para o peso da quasipartícula Z . Como resultado, as propriedades termodinâmicas e de transporte do modelo, nesse limite, são completamente diferentes daquelas previstas pela teoria do líquido de Fermi de Landau. Com relação ao modelo fermiônico tratado aqui, deixaremos a discussão das suas propriedades, tomando como ponto de partida o valor de η_ψ no ponto fixo do sistema, para a próxima seção, quando derivaremos as equações de grupo de renormalização para os acoplamentos na aproximação de dois *loops*.

Antes de procedermos com análise do sistema por meio de flutuações quânticas mais elevadas, exploraremos ainda nesta seção um dos efeitos do resultado na Eq. (2.62) sobre os processos de interação do modelo fermiônico de *hot spots*. A renormalização da velocidade de Fermi nos *hot spots* com $v_y^R \rightarrow 0$ torna divergentes, no limite de baixa energia, as bolhas de polarização partícula-partícula e partícula-buraco formadas entre os férmions localizados nos *hot spots*, que são conectados pelo vetor de onda do ordenamento antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$. De fato, para os *hot spots* $\ell = 1$ e $m = 2$, o cálculo dessas quantidades leva, nessa ordem, aos seguintes resultados

$$\Pi_{21}(\mathbf{q}, q_0) = -i \frac{k_c}{4\pi^2 v_F} \left[\ln \left(\frac{\Lambda_0 + q_0 - \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} - i\delta}{q_0 + \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{-\Lambda_0 + q_0 + \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} + i\delta}{q_0 - \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} + i\delta} \right) \right], \quad (2.67)$$

$$\chi_{21}(\mathbf{q}, q_0) = i \frac{k_c}{4\pi^2 v_F} \left[\ln \left(\frac{\Lambda_0 + q_0 + \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} - i\delta}{q_0 - \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{-\Lambda_0 + q_0 - \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} + i\delta}{q_0 + \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{q} + i\delta} \right) \right], \quad (2.68)$$

onde, nesse caso, $v_F = v_x$. Como consequência desse resultado, as funções vértices $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_j\})$ para as interações unidimensionais g_1 , g_2 e g_3 , assim como para as interações bidimensionais do tipo *Umklap* g_{3t} , g_{3u} , g_{3v} e g_{3w} , apresentarão divergências logarítmicas no limite onde $\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\} \rightarrow 0$. Calculando todos os diagramas de Feynman que contribuem na aproximação de um *loop* para cada processo de interação do modelo e recorrendo então à metodologia do grupo de renormalização explicada na última seção, obtemos que as equações de fluxo para

as interações renormalizadas g_{iR} podem ser escritas como

$$\frac{dg_1}{dl} = -g_1^2 - (g_{1x} - g_{2x})g_{1x} - (g_{3p} - g_{3x})g_{3p} - 2(g_{3t} - g_{3v})g_{3t} - 2(g_{3u} - g_{3w})g_{3u}, \quad (2.69)$$

$$\frac{dg_2}{dl} = -\frac{1}{2}(g_1^2 - g_3^2 - g_{2x}^2 - g_{3x}^2) + g_{3v}^2 + g_{3w}^2, \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} \frac{dg_3}{dl} = & -(g_1 - 2g_2)g_3 - (2g_{3p} - g_{3x})g_{1x} + (g_{3p} + g_{3x})g_{2x} + 2(g_{3w} - 2g_{3u})g_{3t} + 2(g_{3u} \\ & + g_{3w})g_{3v}, \end{aligned} \quad (2.71)$$

$$\frac{dg_{1c}}{dl} = -g_{1c}^2 - g_{1x}g_{2x} - g_{1s}^2 - g_{1r}^2 + (g_{3p} - g_{3x})g_{3x}, \quad (2.72)$$

$$\frac{dg_{2c}}{dl} = -\frac{1}{2}(g_{1c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + 2g_{1s}^2 + 2g_{1r}^2 - g_{3p}^2), \quad (2.73)$$

$$\begin{aligned} \frac{dg_{1x}}{dl} = & -g_{1c}g_{2x} + (g_2 - g_{2c})g_{1x} - 2g_{1s}g_{1r} - (2g_{1x} - g_{2x})g_1 - (g_{3p} - g_{3x})g_3 + 2(g_{3u} \\ & - 2g_{3u})g_{3t} + 2g_{3u}g_{3v}, \end{aligned} \quad (2.74)$$

$$\frac{dg_{2x}}{dl} = -g_{1c}g_{1x} - (g_{2c} - g_2)g_{2x} + g_3g_{3x} - 2g_{1s}g_{1r} + g_{3v}g_{3w}, \quad (2.75)$$

$$\frac{dg_{1s}}{dl} = -g_{1c}g_{1l} - g_{2c}g_{1s} - (g_{1x} + g_{2x})g_{1r}, \quad (2.76)$$

$$\frac{dg_{1l}}{dl} = -g_{1c}g_{1s} - g_{2c}g_{1l} - (g_{1x} + g_{2x})g_{1r}, \quad (2.77)$$

$$\frac{dg_{1r}}{dl} = -(g_{1c} + g_{2c})g_{1r} - (g_{1x} + g_{2x})g_{1s}, \quad (2.78)$$

$$\begin{aligned} \frac{dg_{3p}}{dl} = & -(2g_1 - g_{2c} - g_2)g_{3p} - (g_{1x} - g_{2x})g_3 + g_1g_{3x} - 2(g_{3t} - g_{3v})g_{3t} - 2(g_{3u} \\ & - g_{3w})g_{3u}, \end{aligned} \quad (2.79)$$

$$\frac{dg_{3x}}{dl} = -(2g_{1c} - g_{2c} - g_2)g_{3x} + g_{1c}g_{3p} + g_3g_{2x} + g_{3v}^2, \quad (2.80)$$

$$\begin{aligned} \frac{dg_{3t}}{dl} = & -(2g_1 - g_2 + 2g_{3p} - g_{3x})g_{3t} - (g_3 + 2g_{1x} - g_{2x})g_{3u} + (g_1 + g_{3p})g_{3v} + (g_3 \\ & + g_{1x})g_{3w}, \end{aligned} \quad (2.81)$$

$$\begin{aligned} \frac{dg_{3u}}{dl} = & -(2g_1 - g_2 + 2g_{3p} - g_{3x})g_{3u} - (g_3 + 2g_{1x} - g_{2x})g_{3t} + (g_1 + g_{3p})g_{3w} + (g_3 \\ & + g_{1x})g_{3v}, \end{aligned} \quad (2.82)$$

$$\frac{dg_{3v}}{dl} = (g_2 + g_{3x})g_{3v} + (g_3 + g_{2x})g_{3w}, \quad (2.83)$$

$$\frac{dg_{3w}}{dl} = (g_2 + g_{3x})g_{3w} + (g_3 + g_{2x})g_{3v}, \quad (2.84)$$

onde, mais uma vez, omitimos o subscrito R das interações renormalizadas presentes nas equações acima.

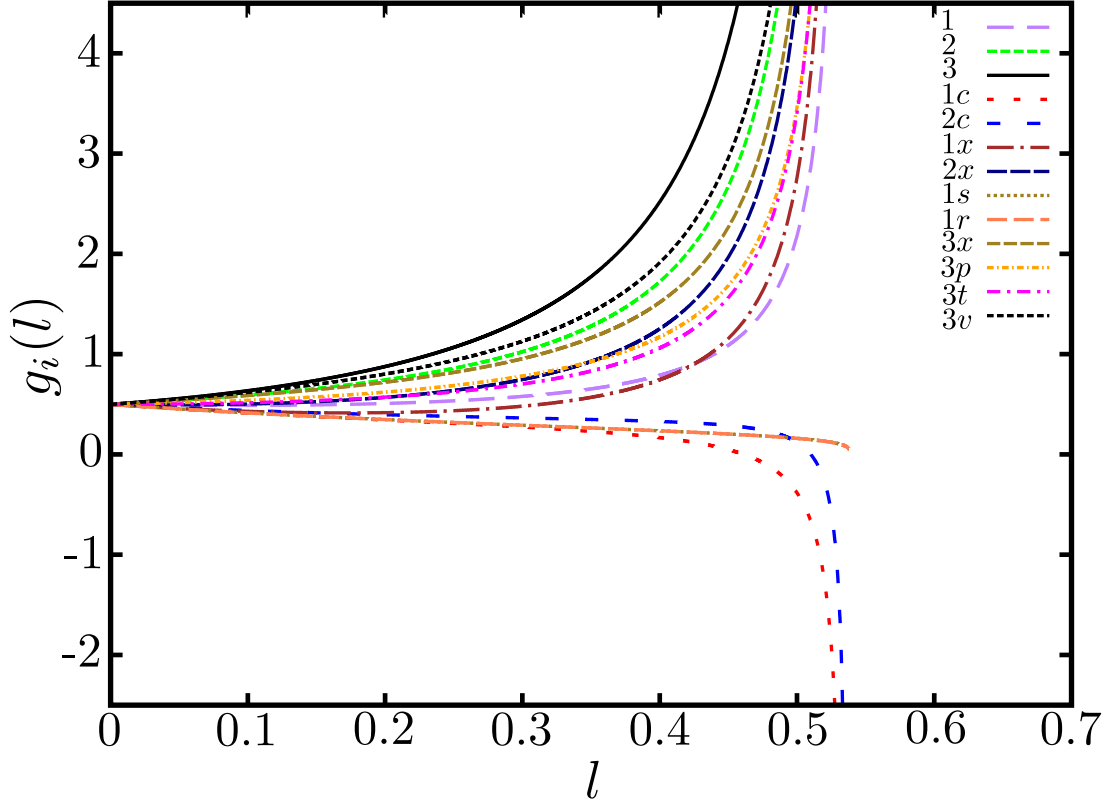


Figura 2.9: Fluxo de grupo de renormalização em função da variável $l = \ln(\Lambda_0/\Lambda)$ para os acoplamentos do modelo fermiônico de *hot spots* na aproximação de um *loop*, com condições iniciais repulsivas $g_i(0) = 1/2$.

Para condições iniciais do tipo de Hubbard, que corresponde a $g_{iR}(0) = [k_c/(\pi^2 v_F)]U$ para todos os acoplamentos, uma análise simples da estrutura das Eqs. (2.69)–(2.84) acima mostra que $g_{1s} = g_{1l}$, $g_{3t} = g_{3u}$ e $g_{3v} = g_{3w}$ para qualquer valor do passo de renormalização l , o que reduz número de equações a serem resolvidas. A solução numérica das equações remanescentes, exibida na Figura 2.9, mostra então que os acoplamentos do modelo flui para forte acoplamento, como já havia acontecido antes para as interações nas Eqs. (2.33)–(2.41). Novamente, o comportamento dessas equações próximo ao ponto fixo do modelo, considerando flutuações quânticas da ordem de um *loop*, pode ser obtido através do *Ansatz* definido pela Eq. (2.42). Dessa forma, substituindo esse resultado nas Eqs. (2.69)–(2.84), derivamos, como anteriormente, um sistema de equações polinomiais da forma $C_i + \beta_i(\{C_j\}) = 0$, onde agora $\beta_i(\{g_{jR}\})$ são as funções betas dos acoplamentos renormalizados nas Eqs. (2.69)–(2.84). A

solução numérica do mesmo leva ao seguinte resultado

$$\begin{bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_{1c} \\ C_{2c} \\ C_{1x} \\ C_{2x} \\ C_{1s} \\ C_{1r} \\ C_{3p} \\ C_{3x} \\ C_{3t} \\ C_{3v} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.073 \\ 0.234 \\ 0.393 \\ -0.039 \\ -0.020 \\ 0.127 \\ 0.186 \\ 0.000 \\ 0.000 \\ 0.108 \\ 0.185 \\ 0.124 \\ 0.249 \end{bmatrix}. \quad (2.85)$$

Comparando a estrutura do ponto fixo acima com aquela na Eq. (2.43), concluímos que devido à renormalização da velocidade de Fermi e à emergência de processos unidimensionais no modelo fermiônico tratados aqui, as interações g_{1c} e g_{2c} , entre férmions localizados em torno de *hot spots* com vetor de onda \mathbf{k}_F e $-\mathbf{k}_F$, tornam-se atrativas, à medida que a escala crítica de energia Λ_c do ponto fixo de um *loop* do sistema é aproximada, como discutido primeiramente nos trabalhos das referências [24, 23]. Um efeito similar também ocorre, como mencionado anteriormente, no modelo de spin-férmion bidimensional, quando flutuações quânticas da ordem de dois *loops* são incluídas na descrição do modelo [50]. Devido a isso, consideraremos, daqui em diante, o efeito na dinâmica de baixa energia do sistema quando flutuações dessa mesma ordem de aproximação são incorporadas na derivação das equações de fluxo de grupo de renormalização dos parâmetros do modelo fermiônico de *hot spots*.

2.4 Fluxo de grupo de renormalização na aproximação de dois *loops*

A metodologia do grupo de renormalização de teoria de campos para a derivação das equações de fluxo para os acoplamentos de um determinado modelo, tendo em vista correções na teoria da ordem de dois *loops*, consiste, primeiramente, na reparametrização de todos os acoplamentos *nus* (ou microscópicos) do sistema por acoplamentos renormalizados mais contra-termos e o cálculo perturbativo da auto-energia e das funções vértices do modelo até segunda

e terceira ordens nos acoplamentos, respectivamente. Em seguida, impomos a condição que os contra-termos da teoria renormalizada $\mathcal{L}_R[\psi_R^\dagger, \psi_R]$ devam, por definição, eliminar todas as divergências logarítmicas que apareçam no sistema para a escala de energia de interesse. No caso particular do modelo fermiônico de *hot spots*, tomaremos ainda o limite onde a componente da velocidade de Fermi tangente à superfície de Fermi tende a zero, que, fisicamente, corresponde à situação de *nesting* perfeito entre os *hot spots*. Além disso, redefiniremos os acoplamentos g_i do sistema na Eq. (2.48) por

$$g_i = N^{-1}(0)Z_\psi^{-2}[g_{iR}(\Lambda) + \Delta g_{iR}(\Lambda)], \quad (2.86)$$

onde $N(0) = k_c/(\pi^2 v_F)$ é a densidade de estados de estado do modelo e a velocidade de Fermi é dada por $v_F = v_x$. Uma vez que as interações microscópicas g_i não dependem de Λ , a diferenciação da equação logo acima leva ao resultado

$$\beta_i(\{g_{jR}\}) \equiv \Lambda \frac{d}{d\Lambda} g_{iR}(\Lambda) = -\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \Delta g_{iR}(\Lambda) + 2\eta_\psi g_{iR}(\Lambda), \quad (2.87)$$

com η_ψ sendo o termo de dimensão anômala da constante de renormalização Z_ψ do campo fermiônico, cuja definição é dada na Eq. (2.66). Os contra-termos Δg_{iR} de cada uma das interações precisam, de agora em diante, ser calculados até a ordem de dois *loops*.

Semelhantemente ao que foi feito para se determinar os contra-termos Δg_{iR} em um *loop*, precisamos nesse momento calcular perturbativamente, através da Lagrangiana renormalizada $\mathcal{L}_R[\psi_R^\dagger, \psi_R]$, as funções vértices $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_{0j}\})$ para cada canal do modelo até a ordem de dois *loops*. Essa expansão é feita, como antes, recorrendo-se ao método diagramático de Feynman. Contudo, agora, o número de diagramas com divergência logarítmica no limite de baixa energia é bem superior ao encontrado antes. Esses diagramas ainda se dividem entre aqueles que possuem divergência do tipo $\ln(\Lambda_0/\Lambda)$ (divergência logarítmica simples) e os que divergem segundo $\ln^2(\Lambda_0/\Lambda)$ (divergência logarítmica quadrática) que, à primeira vista, parecem ser mais relevantes para a série perturbativa. Contudo, os diagramas deste último tipo são todos cancelados na série perturbativa pelos diagramas formados com inserções dos contra-termos, restando assim apenas os diagramas com divergência logarítmica simples [52].

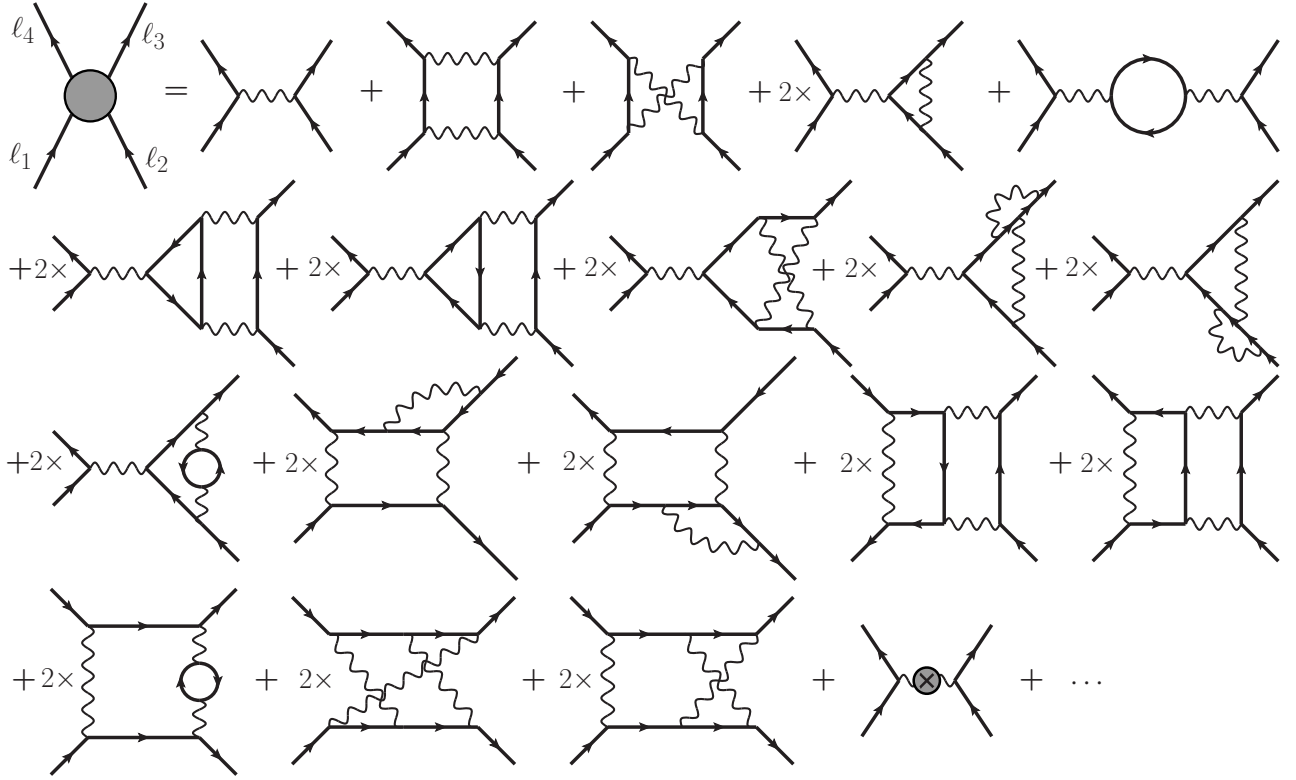


Figura 2.10: Expansão esquemática, dada em termos de diagramas de Feynman, da função vértice $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_{0j}\})$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) para os vários canais de interação g_i do modelo fermiônico de *hot spots* até a ordem de dois *loops*. Aqui, os índices ℓ_1, \dots, ℓ_4 referem-se a um dos oito *hot spots* do modelo, as linhas contínuas correspondem aos propagadores livres $iG_\ell(\mathbf{k}, k_0)$ e as linhas onduladas representam, por sua vez, os termos renormalizados $-ig_{iR}$.

Na Figura 2.10, mostramos todos os diagramas que contribuem efetivamente até a ordem de dois *loops* para a função vértice $\Gamma_i^{(4)}(\{\mathbf{k}_j, k_{0j}\})$ nos canais de espalhamento renormalizados g_{iR} . Os contra-termos da teoria, nessa ordem de aproximação, ficam definidos através das mesmas prescrições utilizadas para as funções vértices no caso do cálculo em um *loop*, ou seja, $\Gamma_i^{R(4)}(\mathbf{q}, q_0) \Big|_{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\} = \Lambda} = -ig_{iR}(\Lambda)$. Portanto, as equações de fluxo do grupo de renormalização na aproximação de dois *loops* para os acoplamentos, obtidas com a substituição dos contra-termos e do termo de dimensão anômala η_ψ na Eq. (2.87), são dadas por

$$\begin{aligned} \frac{dg_1}{dl} = & -g_1^2 - (g_{1x} - g_{2x})g_{1x} - (g_{3p} - g_{3x})g_{3p} - 4(g_{3t} - g_{3v})g_{3t} - \frac{1}{2}(g_{1x}g_{2x} - g_{2x}^2 \\ & - g_{3p}g_{3x})g_{1c} - \frac{1}{2}(g_{1c}^2 + g_1^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_{1x}g_{2x} - g_{3p}g_{3x})g_1, \end{aligned} \quad (2.88)$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_2}{dl} = & -\frac{1}{2}(g_1^2 - g_3^2 - g_{2x}^2 - g_{3x}^2) + 2g_{3v}^2 - \frac{1}{4}(g_1^3 + g_{1c}g_{1x}^2 + g_1g_{1c}^2) - \frac{1}{4}(2g_2 - g_1)g_3^2 \\
& - \frac{1}{4}[(2g_{2c} - g_{1c})(g_{3p}^2 + g_{3x}^2) - 2g_{2c}g_{3p}g_{3x} + 2g_2(g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_{3p}g_{3x})] \\
& - \frac{1}{2}(g_2 - g_{2c})(g_{1x}^2 - g_{1x}g_{2x}) - \frac{1}{2}(g_2 + g_{2c})g_{2x}^2,
\end{aligned} \tag{2.89}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_3}{dl} = & -(g_1 - 2g_2)g_3 - (2g_{3p} - g_{3x})g_{1x} + (g_{3p} + g_{3x})g_{2x} - 4(g_{3t} - g_{3v})g_{3t} + 2g_{3v}^2 \\
& - \frac{1}{4}[(g_1 - 2g_2)^2 + (g_{1c} - 2g_{2c})^2 + 2g_{1x}^2 + g_{2x}^2 - 2g_{1x}g_{2x} - 2g_{3p}g_{3x} + 2g_{3p}^2 \\
& + 2g_{3x}^2 + g_3^2]g_3,
\end{aligned} \tag{2.90}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{1c}}{dl} = & -g_{1c}^2 - g_{1x}g_{2x} - g_{1s}^2 - g_{1r}^2 + (g_{3p} - g_{3x})g_{3x} - \frac{1}{2}(g_{1x}g_{2x} - g_{2x}^2 - g_{3p}g_{3x})g_1 \\
& - \frac{1}{2}(g_1^2 + g_{1c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 - g_{1x}g_{2x} + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_{3p}g_{3x})g_{1c},
\end{aligned} \tag{2.91}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{2c}}{dl} = & -\frac{1}{2}(g_{1c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + 2g_{1s}^2 + 2g_{1r}^2 - g_{3p}^2) - \frac{1}{4}(g_1g_{1x}^2 + g_{1c}g_1^2 + g_{1c}^2) - \frac{1}{2}(g_{2c} \\
& - g_2)(g_{1x}^2 + g_{2x}^2 - g_{1x}g_{2x}) - \frac{1}{4}(2g_{2c} - g_{1c})g_3^2 - \frac{1}{4}[(2g_2 - g_1)(g_{3p}^2 + g_{3x}^2) \\
& - 2g_2g_{3p}g_{3x} + 2g_{2c}(g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_{3p}g_{3x})],
\end{aligned} \tag{2.92}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{1x}}{dl} = & -g_{1c}g_{2x} + (g_2 - g_{2c})g_{1x} - 2g_{1s}g_{1r} - (2g_{1x} - g_{2x})g_1 - (g_{3p} - g_{3x})g_3 + 2(g_{3v} \\
& - g_{3t})g_{3t} - \frac{1}{2}\left(g_1g_{2c} + g_{1c}g_2 - 2g_{2c}g_2 - \frac{g_{3p}^2}{2} - \frac{g_{3x}^2}{2}\right)g_{1x} - \frac{1}{2}\left(g_1^2 + g_2^2 + \frac{g_3^2}{2} \right. \\
& \left. + g_{1c}^2 + g_{2c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_1g_2 - g_{1c}g_{2c} - g_{1x}g_{2x} - g_{3p}g_{3x}\right)g_{1x},
\end{aligned} \tag{2.93}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{2x}}{dl} = & -g_{1c}g_{1x} - (g_{2c} - g_2)g_{2x} + g_3g_{3x} - 2g_{1s}g_{1r} + g_{3v}^2 - \frac{1}{2}\left(g_1g_{1c}g_{1x} - 2g_1g_{1c}g_{2x} \right. \\
& \left. + g_{1c}g_2g_{2x} - 2g_2g_{2c}g_{2x} - g_{1x}g_{3p}g_{3x} + g_{2x}g_{3p}g_{3x} - \frac{1}{2}(g_{3p}^2 + g_{3x}^2)g_{2x}\right) \\
& - \frac{1}{2}\left(g_1^2 + g_2^2 + \frac{g_3^2}{2} + g_{1c}^2 + g_{2c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_1g_2 - g_{1c}g_{2c} \right. \\
& \left. - g_{1x}g_{2x} - g_{3p}g_{3x}\right)g_{2x},
\end{aligned} \tag{2.94}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{1s}}{dl} = & -(g_{1c} + g_{2c})g_{1s} - (g_{1x} + g_{2x})g_{1r} - \frac{1}{2}\left(g_1^2 + g_2^2 + \frac{g_3^2}{2} + g_{1c}^2 + g_{2c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 \right. \\
& \left. + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_1g_2 - g_{1c}g_{2c} - g_{1x}g_{2x} - g_{3p}g_{3x}\right)g_{1s},
\end{aligned} \tag{2.95}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{1r}}{dl} = & -(g_{1c} + g_{2c})g_{1r} - (g_{1x} + g_{2x})g_{1s} - \frac{1}{2}\left(g_1^2 + g_2^2 + \frac{g_3^2}{2} + g_{1c}^2 + g_{2c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 \right. \\
& \left. + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_1g_2 - g_{1c}g_{2c} - g_{1x}g_{2x} - g_{3p}g_{3x}\right)g_{1r},
\end{aligned} \tag{2.96}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{3p}}{dl} = & - (2g_1 - g_{2c} - g_2)g_{3p} - (g_{1x} - g_{2x})g_3 + g_1g_{3x} - 4(g_{3t} - g_{3v})g_{3t} - \frac{1}{2} \left(2g_{2c}g_2g_{2p} \right. \\
& + g_{2x}^2g_{3x} - g_1g_{2c}g_{3p} - g_{1c}g_2g_{3p} - g_{1x}g_{2x}g_{3x} - g_1g_{1c}g_{3x} - \frac{g_{1x}^2g_{3p}}{2} \left. \right) - \frac{1}{2} \left(g_1^2 + g_2^2 \right. \\
& + \frac{g_3^2}{2} + g_{1c}^2 + g_{2c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_1g_2 - g_{1c}g_{2c} - g_{1x}g_{2x} - g_{3p}g_{3x} \left. \right) g_{3p}, \quad (2.97)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{3x}}{dl} = & - (2g_{1c} - g_{2c} - g_2)g_{3x} + g_{1c}g_{3p} + g_3g_{2x} + g_{3v}^2 - \frac{1}{2} \left(2g_2g_{2c}g_{3x} + g_{2x}^2g_{3p} \right. \\
& - g_1g_{2c}g_{3x} - g_{1c}g_2g_{3x} - g_{1x}g_{2x}g_{3p} - g_1g_{1c}g_{3p} - \frac{g_{1x}^2g_{3x}}{2} \left. \right) - \frac{1}{2} \left(g_1^2 + g_2^2 + \frac{g_3^2}{2} \right. \\
& + g_{1c}^2 + g_{2c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_1g_2 - g_{1c}g_{2c} - g_{1x}g_{2x} - g_{3p}g_{3x} \left. \right) g_{3x}, \quad (2.98)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{3t}}{dl} = & - (2g_1 - g_2 + g_3 + 2g_{1x} - g_{2x} + 2g_{3p} - g_{3x})g_{3t} + (g_1 + g_3 + g_{1x} + g_{3p})g_{3v} \\
& - \frac{1}{2} \left(g_1^2 + g_2^2 + \frac{g_3^2}{2} + g_{1c}^2 + g_{2c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 - g_1g_2 - g_{1c}g_{2c} \right. \\
& \left. - g_{1x}g_{2x} - g_{3p}g_{3x} \right) g_{3t}, \quad (2.99)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{dg_{3v}}{dl} = & (g_2 + g_3 + g_{2x} + g_{3x})g_{3v} - \frac{1}{2} \left(g_1^2 + g_2^2 + \frac{g_3^2}{2} + g_{1c}^2 + g_{2c}^2 + g_{1x}^2 + g_{2x}^2 + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 \right. \\
& \left. - g_1g_2 - g_{1c}g_{2c} - g_{1x}g_{2x} - g_{3p}g_{3x} \right) g_{3v}, \quad (2.100)
\end{aligned}$$

onde as derivadas acima são dadas com respeito ao passo de grupo de renormalização l , como havia sido feito no caso das equações de um *loop*. Um outro ponto importante a se observar nas equações acima é que consideramos, desde o início, $g_{1s} = g_{1l}$, $g_{3t} = g_{3u}$ e $g_{3v} = g_{3w}$ com a intenção de simplificar a nossa análise, uma vez que isso reduz a dimensão do espaço dos acoplamentos a ser considerado. Além disso, essa prescrição, como observado antes, está de acordo com condições iniciais para os acoplamentos do tipo do modelo de Hubbard.

Supondo, portanto, os valores iniciais $g_{iR}(0) = [k_c/(\pi^2v_F)]U$ para os acoplamentos, a solução numérica das Eqs. (2.88)–(2.100) mostra que a inclusão de efeitos de flutuações quânticas da ordem de dois *loops* no modelo fermiônico de *hot spots* elimina as divergências apresentadas pelos acoplamentos renormalizados no regime de um *loop*, fazendo com que eles fluam para um ponto fixo (PF) não-trivial, à medida que se considera o comportamento do sistema para longas escalas temporais e grandes distâncias (veja a Figura 2.11). De fato, nesse caso em questão, os acoplamentos não-nulos do modelo se aproximam, assintoticamente, dos

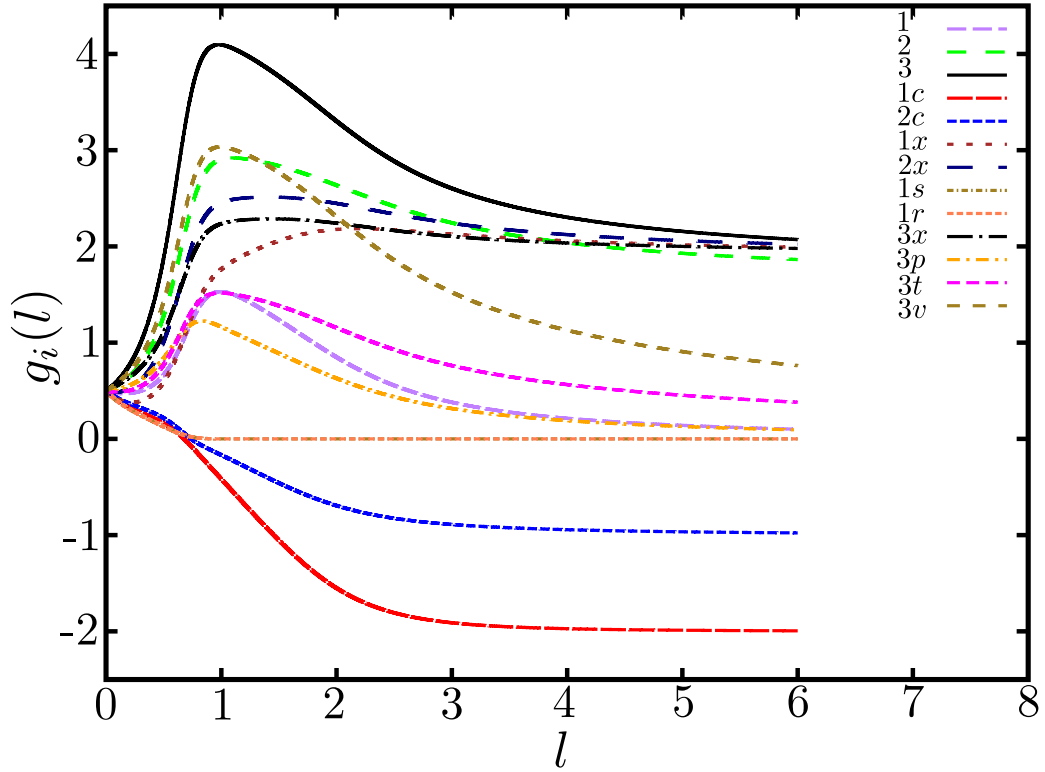


Figura 2.11: Fluxo de grupo de renormalização em função da variável $l = \ln(\Lambda_0/\Lambda)$ para os acoplamentos do modelo fermiônico de *hot spots* na aproximação de dois *loops*, com condições iniciais repulsivas $g_i(0) = 1/2$.

valores $g_2^* = 1.684$, $g_3^* = 1.841$, $g_{1c}^* = 2g_{2c}^* = -2.000$ e $g_{1x}^* = g_{2x}^* = g_{3x}^* = 1.918$. Nesse ponto fixo não trivial, o sistema interagente de oito *hot spots* com Lagrangiana $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$ pode ser completamente mapeado em dois sistemas fermiônicos interagentes bem distintos com Lagrangianas $\mathcal{L}_1[\psi^\dagger, \psi]$ e $\mathcal{L}_2[\psi^\dagger, \psi]$, que descrevem, respectivamente, as interações entre as excitações fermiônicas dos quartetos ortogonais de *hot spots* $\ell = 1, \dots, 4$ e $\ell = 5, \dots, 8$ e representam, portanto, o chamado modelo de Hubbard de duas cadeias [53, 54]. Além disso, o termo de dimensão anômala, nessa situação, converge para o valor $\eta_\psi^* = 3.722$ e a constante de renormalização dos campos fermiônicos $\psi_{\ell,\sigma}$ comporta-se como $Z_\psi \sim \Lambda^{\eta_\psi^*}$ no limite de baixa energia. Como discutido na seção anterior desta tese, esse comportamento da constante de renormalização Z_ψ implica em um valor nulo para o peso da quasipartícula Z nos *hot spots* e, conseqüentemente, na quebra do comportamento do tipo líquido de Fermi no modelo fermiônico bidimensional de *hot spots*.

Tabela 2.1: Pontos fixos (PF) das funções betas de dois *loops* $\beta_i(\{g_{jR}\})$ do modelo fermiônico de *hot spots*. O ponto fixo PF₁ corresponde à solução das equações de grupo de renormalização de dois *loops* com condições iniciais do tipo de Hubbard.

	PF ₁	PF ₂	PF ₃	PF ₄	PF ₅	PF ₆	PF ₇	PF ₈
g_1^*	0.000	0.000	0.000	0.000	0.073	0.000	0.000	0.000
g_2^*	1.684	1.000	1.000	1.000	2.397	0.082	0.419	1.618
g_3^*	1.841	1.990	2.000	0.000	0.567	0.000	0.000	0.000
g_{1c}^*	-2.000	0.000	0.000	0.000	0.350	0.000	0.000	0.000
g_{2c}^*	-1.000	0.000	0.000	0.000	-0.853	0.918	0.581	-0.618
g_{1x}^*	1.918	0.000	0.000	0.000	0.013	0.000	0.000	0.000
g_{2x}^*	1.918	1.177	0.000	1.000	0.026	0.000	0.000	0.000
g_{1r}^*	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
g_{1s}^*	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
g_{3p}^*	0.000	0.990	0.000	0.000	1.355	1.000	1.000	1.000
g_{3x}^*	1.918	0.990	0.000	0.000	0.983	1.000	1.000	1.000
g_{3t}^*	0.000	0.000	0.000	0.000	0.284	0.000	0.000	0.000
g_{3v}^*	0.000	0.000	0.000	0.000	0.568	0.000	0.000	0.000

Para determinar todos os pontos fixos das equações de grupo de renormalização nessa aproximação, precisamos achar os zeros das funções betas $\beta_i(\{g_{jR}\})$ de dois *loops*, que são definidas a partir das Eqs. (2.88)–(2.100). Evidentemente, o número de pontos fixos não-triviais que essas funções possuem é razoavelmente grande e, devido a isso, representamos apenas alguns deles na Tabela 2.1, sendo o ponto fixo obtido com condições iniciais do tipo do modelo de Hubbard designado, nessa tabela, por PF₁. Para estudar a estabilidade de cada um desses pontos fixos no espaço dos acoplamentos, precisamos analisar o fluxo de grupo de renormalização, dado pelas Eqs.(2.88)–(2.100), na vizinhança dos mesmos [55]. As equações de fluxo de grupo de renormalização na aproximação de dois *loops* tornam-se então

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} [g_{iR}(\Lambda) - g_i^*] = \sum_j \mathbf{M}_{ij} [g_{jR}(\Lambda) - g_j^*], \quad (2.101)$$

onde $\mathbf{M}_{ij} = \left. \frac{\partial \beta_i(\{g_{jR}\})}{\partial g_{jR}} \right|_{g_R=g^*}$ são elementos de uma matriz \mathbf{M} , que é definida no ponto fixo não-trivial $g^* = (g_1^*, g_2^*, \dots, g_{3v}^*)$, e $\beta_i(\{g_{jR}\})$ são as funções betas de dois *loops* do modelo fermiônico de *hot spots*. A solução para a equação acima pode ser escrita como [55]

$$g_{iR}(\Lambda) = g_i^* + \sum_j c_j V_j^i \Lambda^{m_j} \quad (2.102)$$

Tabela 2.2: Autovalores m_i da matriz \mathbf{M} para cada um dos oito pontos fixos (PF) das funções betas de dois *loops* $\beta_i(\{g_{jR}\})$ do modelo fermiônico de *hot spots*.

	PF ₁	PF ₂	PF ₃	PF ₄	PF ₅	PF ₆	PF ₇	PF ₈
m_1	8.28	3.85	2.50	2.00	4.76	2.87	2.00	2.00
m_2	7.60	3.54	2.50	2.00	4.01	2.00	1.86	1.95
m_3	7.30	3.34	2.50	1.50	3.98	1.84	1.33	1.38
m_4	6.76	3.47	2.00	-1.50	3.43	1.84	1.33	1.38
m_5	5.90	$3.16 + 0.49i$	2.00	-1.00	3.33	1.84	1.33	1.38
m_6	5.78	$3.16 - 0.49i$	2.00	1.00	3.18	1.86	-1.00	1.00
m_7	5.68	$3.10 + 0.37i$	-1.50	-1.00	2.32	1.00	1.00	1.00
m_8	5.68	$3.10 - 0.37i$	-1.50	-1.00	2.17	1.00	1.00	-1.00
m_9	5.67	2.97	1.50	$0.50 + 0.50i$	-1.30	-1.00	-1.00	-0.92
m_{10}	4.16	-2.48	1.50	$0.50 - 0.50i$	1.20	-0.16	-0.66	-0.61
m_{11}	3.59	-1.98	-1.50	-0.50	0.80	0.00	0.17	0.16
m_{12}	0.61	1.49	0.00	0.00	-0.75	0.00	0.00	0.00
m_{13}	0.08	1.07	0.00	0.00	0.72	0.00	0.00	0.00

onde \mathbf{V}^j são os autovetores da matriz \mathbf{M} com autovalores m_j associados e c_j são coeficientes da expansão em termos da variável Λ . Na Tabela 2.2, são mostrados todos os autovalores da matriz \mathbf{M} , que são determinados por meio da resolução da equação secular $\det(\mathbf{M} - m\mathbf{I}) = 0$ para cada um dos pontos fixos das funções betas $\beta_i(\{g_{jR}\})$ de dois *loops*. Para o ponto fixo PF₁, observamos que os autovalores m_j são todos positivos ou irrelevantes do ponto de vista do grupo de renormalização. Portanto, a dimensão da *bacia de atração* desse ponto fixo é a mesma do espaço dos acoplamentos do sistema, significando que, à medida que a escala de energia do modelo Λ é diminuída, todas trajetórias no espaço dos acoplamentos próxima ao ponto fixo PF₁ convergem para ele, ou seja, esse ponto fixo representa uma fase altamente estável do modelo fermiônico de *hot spots*. Como pode ser observado na Tabela 2.2, além de autovalores irrelevantes, a matriz \mathbf{M} dos outros pontos fixos possuem autovalores relevantes ($m_j > 0$), marginais ($m_j = 0$) e complexos. No caso de autovalores relevantes, os pontos fixos do modelo são obviamente instáveis em algumas direções do espaço dos acoplamentos, quando a escala de energia Λ do grupo de renormalização tende para o regime de baixa energia. Já os pontos fixos associados a autovalores complexos podem representar potencialmente fases caóticas ou cíclicas do modelo fermiônico de *hot spots*, como recentemente discutido na literatura para,

por exemplo, sistemas interagentes no vácuo formados por três bósons ou férmions com as respectivas simetrias U(1) e SU(2) [56, 57].

2.5 Equação de Callan-Symanzik

Os resultados derivados a partir da análise de grupo de renormalização na aproximação de dois *loops* podem agora ser usado para calcular a função de Green interagente do modelo próximo ao ponto fixo não-trivial PF₁. Uma vez que a relação entre as funções de Green *nua* e renormalizada é dada por $\mathcal{G}_\ell(\mathbf{k}, k_0; v_x, v_y, \{g_i\}) = Z_\psi \mathcal{G}_\ell^R(\mathbf{k}, k_0; v_x^R, v_y^R, \{g_{iR}\}, \Lambda)$, pode-se mostrar que a função de Green \mathcal{G}_ℓ^R para o *hot spot* $\ell = 1$ obedece a chamada equação de Callan-Symanzik [37, 58, 59]

$$\left(\Lambda \frac{\partial}{\partial \Lambda} + \beta_{v_x}(\{g_{jR}\}) \frac{\partial}{\partial v_x^R} + \beta_{v_y}(\{g_{jR}\}) \frac{\partial}{\partial v_y^R} + \sum_i \beta_i(\{g_{jR}\}) \frac{\partial}{\partial g_{iR}} + \eta_\psi \right) \times \mathcal{G}_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, k_0; v_x^R, v_y^R, \{g_{iR}\}, \Lambda) = 0, \quad (2.103)$$

onde $\beta_{v_x}(\{g_{jR}\}) = \Lambda \frac{dv_x^R}{d\Lambda}$ e $\beta_{v_y}(\{g_{jR}\}) = \Lambda \frac{dv_y^R}{d\Lambda}$ são as funções betas para as componentes da velocidade de Fermi renormalizada, que são definidas, respectivamente, nas Eqs. (2.60) e (2.61).

Devido a argumentos de análise dimensional [60, 61], a função de Green $\mathcal{G}_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, k_0; v_x^R, v_y^R, \{g_{iR}\}, \Lambda)$ também deve obedecer à seguinte equação

$$\left(\Lambda \frac{\partial}{\partial \Lambda} + \xi \frac{\partial}{\partial \xi} + k_0 \frac{\partial}{\partial k_0} \right) \mathcal{G}_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, k_0; v_x^R, v_y^R, \{g_{iR}\}, \Lambda) = -\mathcal{G}_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, k_0; v_x^R, v_y^R, \{g_{iR}\}, \Lambda), \quad (2.104)$$

onde $\xi = v_x^R k_x + v_y^R k_x$ representa a distância à superfície de Fermi do *hot spot* $\ell = 1$. Fazendo a continuação analítica $k_0 \rightarrow \omega + i0^+$, a solução de ambas as Eqs. (2.103) e (2.104) no ponto fixo PF₁ do sistema pode ser assim escrita

$$\mathcal{G}_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, \omega + i0^+) \sim \frac{1}{(\omega - v_x k_x + i0^+)^{1-\eta_\psi^*}}. \quad (2.105)$$

Observa-se que a estrutura analítica da função de Green renormalizada acima, calculada na aproximação de dois *loops* do grupo de renormalização, não apresenta polos do tipo quasipartícula, implicando, dessa maneira, na completa quebra do comportamento de líquido de Fermi do sistema na região próxima aos *hot spots* para regime de baixa energia tratado aqui.

A partir da Eq. (2.105), podemos calcular a função espectral do modelo $A_{\ell=1}(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[\mathcal{G}_{\ell=1}^R(\mathbf{k}, \omega + i0^+)]$ para as excitações em torno do *hot spot* $\ell = 1$, que leva ao resultado

$$A_{\ell=1}(\mathbf{k}, \omega) \sim \frac{\text{sen}(\pi\eta_\psi^*)}{\pi|\omega - v_x k_x|^{1-\eta_\psi^*}}. \quad (2.106)$$

Nesse caso, a densidade de estados $N(\omega) = \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} A_{\ell=1}(\mathbf{k}, \omega)$ torna-se $N(\omega) \propto |\omega - \omega_c|^{\eta_\psi^*}$, onde $\omega_c = v_F k_c$. Esse último resultado indica que próximo ao ponto fixo não-trivial PF_1 do modelo, há uma supressão, na forma de lei de potência, da densidade local de estados eletrônicos na situação onde a escala crítica de energia ω_c é aproximada. Esse tipo de comportamento pode estar associado à fase de pseudogap observada no diagrama de fases eletrônico dos cupratos supercondutores, que aparece no regime subdopado desses materiais. De fato, as nossas previsões teóricas referentes à função espectral e à densidade de estados na vizinhança dos *hot spots* podem ser verificadas experimentalmente através do uso de técnicas de espectroscopia de fotoemissão e microscopia de corrente de tunelamento.

2.6 Instabilidades do modelo fermiônico de *hot spots*

Nesta seção, daremos início ao estudo dos possíveis tipos de instabilidades que podem ocorrer no modelo fermiônico de *hot spots* no limite de baixa energia do sistema. Em vista dos recentes resultados experimentais para a região sub-dopada dos cupratos supercondutores, consideraremos então instabilidades partícula-partícula e partícula-buraco com vetores de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ e $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)/\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$.

2.6.1 Supercondutividade e onda de densidade de carga e spin com vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ e $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$

A análise dos possíveis tipos de correlações eletrônicas e magnéticas que dominam o estado fundamental do modelo fermiônico de *hot spots* envolve a adição da Lagrangiana externa

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{ext}}^{(1)}[\psi^\dagger, \psi] &= \Delta_{\sigma,\sigma'}^{1,3} \psi_{1,\sigma} \psi_{3,\sigma'} + \Delta_{\sigma,\sigma'}^{2,4} \psi_{2,\sigma} \psi_{4,\sigma'} + \Delta_{\sigma,\sigma'}^{5,7} \psi_{5,\sigma} \psi_{7,\sigma'} + \Delta_{\sigma,\sigma'}^{6,8} \psi_{6,\sigma} \psi_{8,\sigma'} \\ &+ \chi_{\sigma,\sigma'}^{1,2} \psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'} + \chi_{\sigma,\sigma'}^{3,4} \psi_{3,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'} + \chi_{\sigma,\sigma'}^{5,6} \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'} + \chi_{\sigma,\sigma'}^{7,8} \psi_{7,\sigma}^\dagger \psi_{8,\sigma'} \end{aligned}$$

$$+ \tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{1,3} \psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'} + \tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{2,4} \psi_{2,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'} + \tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{5,7} \psi_{5,\sigma}^\dagger \psi_{7,\sigma'} + \tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{6,8} \psi_{6,\sigma}^\dagger \psi_{8,\sigma'} + c.c. \quad (2.107)$$

à Lagrangiana total $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$ do sistema, que é definida na Eq. (2.2). Aqui $\Delta_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m} = \Delta_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}(\mathbf{r}, t)$ representa a função resposta supercondutora (SC) com vetor de onda nulo, ao passo que $\chi_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m} = \chi_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}(\mathbf{r}, t)$ e $\tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m} = \tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}(\mathbf{r}, t)$ correspondem, respectivamente, às funções respostas onda de densidade (OD) com vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ e $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ (veja a Figura 2.12). Ao se tentar calcular as funções de correlação supercondutora $\Gamma_{SC,\ell m}^{(2,1)} = \langle T[\psi_{\ell,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi_{m,\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t')] \rangle_{1PI}$ e onda de densidade $\Gamma_{OD,\ell m}^{(2,1)} = \langle T[\psi_{\ell,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi_{m,\sigma'}(\mathbf{r}', t')] \rangle_{1PI}$, usando teoria de perturbação para a Lagrangiana total $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi] + \mathcal{L}_{\text{ext}}^{(1)}[\psi^\dagger, \psi]$, verificaremos que alguns termos da série perturbativa dessas funções de correlações possuem divergências logarítmicas na situação onde a escala de energia Λ do modelo aproxima-se de zero⁴. De acordo com a metodologia do grupo de renormalização explicada nas seções anteriores, essas divergências podem ser eliminadas da teoria pela redefinição dos seus parâmetros *nus* ou microscópicos. No caso da Lagrangiana $\mathcal{L}_{\text{ext}}^{(1)}[\psi^\dagger, \psi]$, os seus campos fermiônicos transformam-se da maneira especificada nas Eqs. (2.44) e (2.45), o que leva as funções respostas do modelo a serem redefinidas de acordo com

$$\Delta_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m} = Z_\psi^{-1} [\Delta_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,m}(\Lambda) + \delta\Delta_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,m}(\Lambda)], \quad (2.108)$$

$$\chi_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m} = Z_\psi^{-1} [\chi_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,m}(\Lambda) + \delta\chi_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,m}(\Lambda)], \quad (2.109)$$

$$\tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m} = Z_\psi^{-1} [\tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,m}(\Lambda) + \delta\tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,m}(\Lambda)]. \quad (2.110)$$

Os parâmetros $\delta\Delta_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,m}$, $\delta\chi_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,m}$ e $\delta\tilde{\chi}_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,m}$, que aparecem nas definições acima, são os contra-termos das funções respostas, que têm o papel de eliminar as divergências do modelo no limite de baixas energias. Lembrando que os termos do lado esquerdo da igualdade nas Eqs. (2.108)–(2.110) não dependem da escala de energia Λ das variáveis renormalizadas, temos então que as equações de grupo de renormalização para as funções respostas supercondutora e onda de

⁴A grandeza T , que aparece na definição das funções de correlação $\Gamma_{SC,\ell m}^{(2,1)} = \langle T[\psi_{\ell,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi_{m,\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}', t')] \rangle_{1PI}$ e $\Gamma_{OD,\ell m}^{(2,1)} = \langle T[\psi_{\ell,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t) \psi_{m,\sigma'}(\mathbf{r}', t')] \rangle_{1PI}$, é o chamado operador de ordenamento temporal de teoria quântica de campos [37].

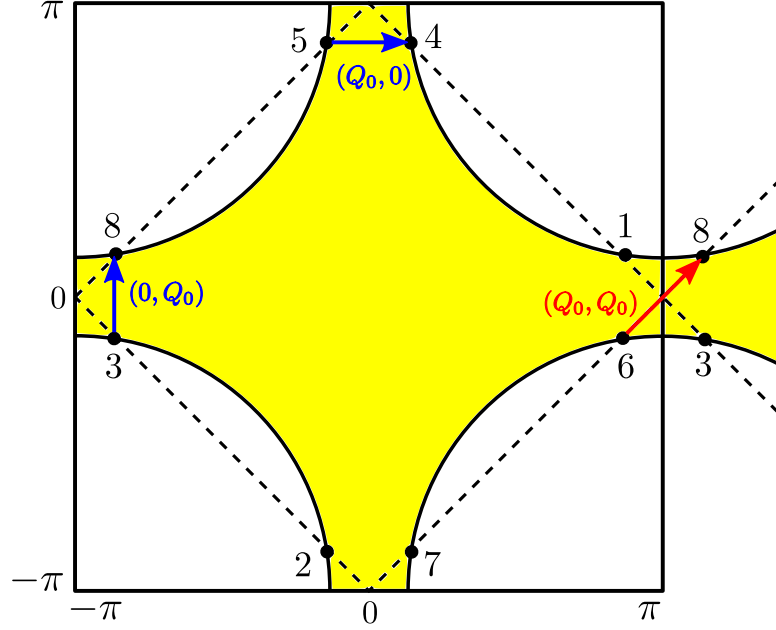


Figura 2.12: Superfície de Fermi do modelo fermiônico de *hot spots* com os vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$, $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ e $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ das possíveis instabilidades onda de densidade e supercondutora que podem afetar o estado normal do sistema.

densidade podem ser escritas como

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \Delta_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda) = -\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \delta \Delta_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda) + \eta_\psi \Delta_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda), \quad (2.111)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \chi_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda) = -\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \delta \chi_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda) + \eta_\psi \chi_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda), \quad (2.112)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda) = -\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \delta \tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda) + \eta_\psi \tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda), \quad (2.113)$$

onde, como anteriormente, η_ψ é o termo de dimensão anômala da constante de renormalização Z_ψ dos campos fermiônicos, que definimos na Eq. (2.66) desta tese.

A derivação da equação de fluxo de grupo de renormalização para $\Delta_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda)$ envolve o cálculo do contra-termo $\delta \Delta_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda)$ através da prescrição $\Gamma_{SC, \ell m}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0) \Big|_{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\} = \Lambda} = -i \Delta_{\sigma, \sigma'}^{Rl, m}(\Lambda)$ para a transformada de Fourier da função de correlação $\Gamma_{SC, \ell m}^{R(2,1)} = \langle T[\psi_{\ell, \sigma}^{R\dagger}(\mathbf{r}, t) \psi_{m, \sigma'}^{R\dagger}(\mathbf{r}', t')] \rangle_{1PI}$. Dessa forma, calculando $\Gamma_{SC, 13}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ para excitações fermiônicas em torno dos *hot spots* $\ell = 1$ e $m = 3$ na aproximação de dois *loops* (veja a Figura 2.13), obtemos que

$$\begin{aligned} \Lambda \frac{d}{d\Lambda} \Delta_{\sigma, \sigma'}^{1,3} = & \frac{1}{2} [(g_{2c} + g_{1r}) \Delta_{\sigma, \sigma'}^{1,3} - (g_{1c} + g_{1r}) \Delta_{\sigma', \sigma}^{1,3} + (g_{2x} + g_{1s}) \Delta_{\sigma, \sigma'}^{4,2} \\ & - (g_{1x} + g_{1s}) \Delta_{\sigma', \sigma}^{4,2}] + \eta_\psi \Delta_{\sigma, \sigma'}^{1,3}, \end{aligned} \quad (2.114)$$

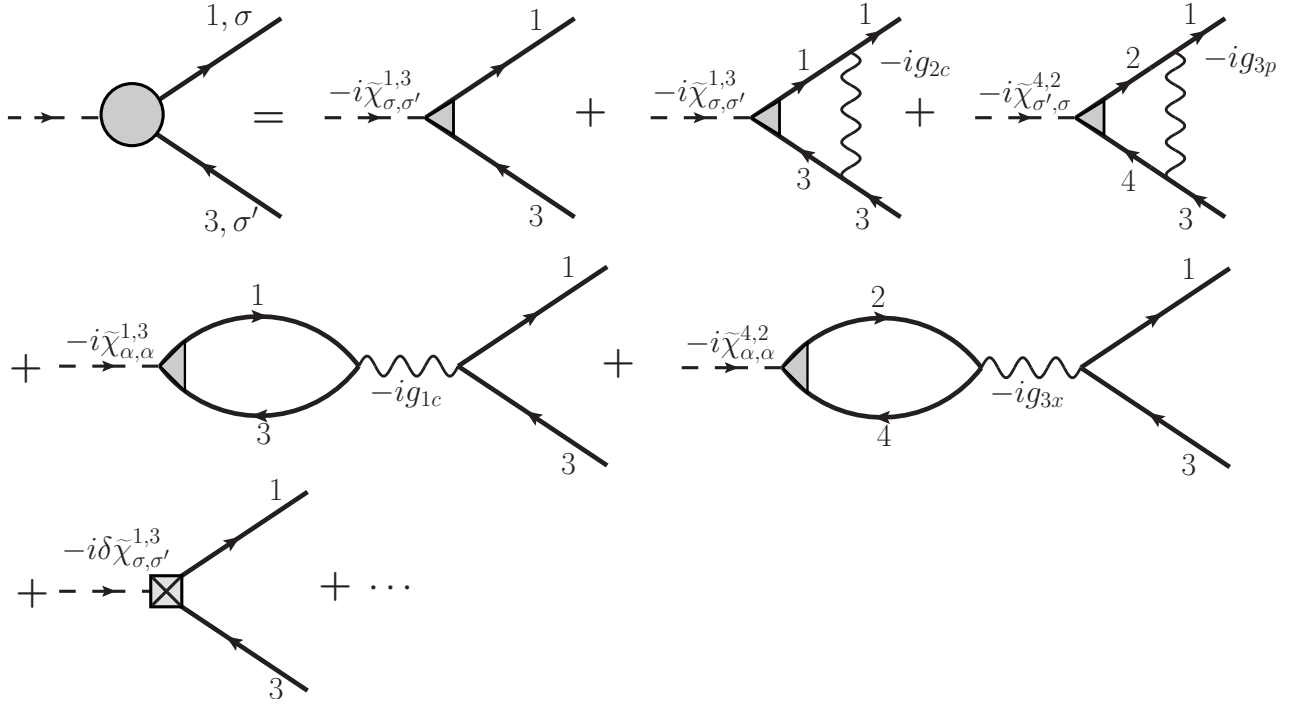


Figura 2.14: Função vértice onda de densidade $\tilde{\Gamma}_{OD}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) com vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ expandida em termos dos diagramas de Feynman que contribuem efetivamente para o modelo fermiônico de *hot spots* até a ordem de dois *loops*. Aqui, os triângulos e o quadrado com um “x” inscrito indicam, a menos do fator imaginário $-i$, as funções respostas $\tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{\ell, m}$ e o contra-termo $\delta\tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{\ell, m}$ do correspondente canal onda de densidade. Nesse caso, consideramos a interação entre férmions localizados nos *hot spots* $\ell = 1$ e $m = 3$, cujos spins são dados, respectivamente, pelas variáveis discretas σ e σ' .

A equação de fluxo de grupo de renormalização da função resposta $\chi_{\sigma, \sigma'}^{R\ell, m}(\Lambda)$, que descreve as instabilidades do tipo onda de densidade com vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, pode ser derivada de forma análoga. De fato, considerando a expansão até a ordem de dois *loops* da transformada de Fourier da função de correlação $\Gamma_{OD,12}^{R(2,1)} = \langle T[\psi_{1,\sigma}^{R\dagger}(\mathbf{r}, t)\psi_{2,\sigma'}^R(\mathbf{r}', t')] \rangle_{1PI}$ entre os férmions dos *hot spots* $\ell = 1$ e $m = 2$ (veja a Figura 2.15), obtemos o seguinte

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \chi_{\sigma, \sigma'}^{1,2} = \frac{1}{2} \left[(g_1 + g_3 + 2g_{3t}) \sum_{\alpha=\uparrow, \downarrow} \chi_{\alpha, \alpha}^{1,2} + (g_{1x} + g_{3p} + 2g_{3t}) \sum_{\alpha=\uparrow, \downarrow} \chi_{\alpha, \alpha}^{4,3} - (g_2 + g_{3v}) \chi_{\sigma, \sigma'}^{1,2} - (g_3 + g_{3v}) \chi_{\sigma', \sigma}^{1,2} - (g_{2x} + g_{3v}) \chi_{\sigma, \sigma'}^{4,3} - (g_{3x} + g_{3v}) \chi_{\sigma', \sigma}^{4,3} \right] + \eta_\psi \chi_{\sigma, \sigma'}^{1,2}. \quad (2.116)$$

Aqui, mais uma vez, utilizamos a simetria do sistema por rotações de $\pi/2$ e fizemos $\chi_{\sigma, \sigma'}^{1,2} = \chi_{\sigma, \sigma'}^{5,6}$ e $\chi_{\sigma, \sigma'}^{4,3} = \chi_{\sigma, \sigma'}^{8,7}$ na derivação da equação acima.

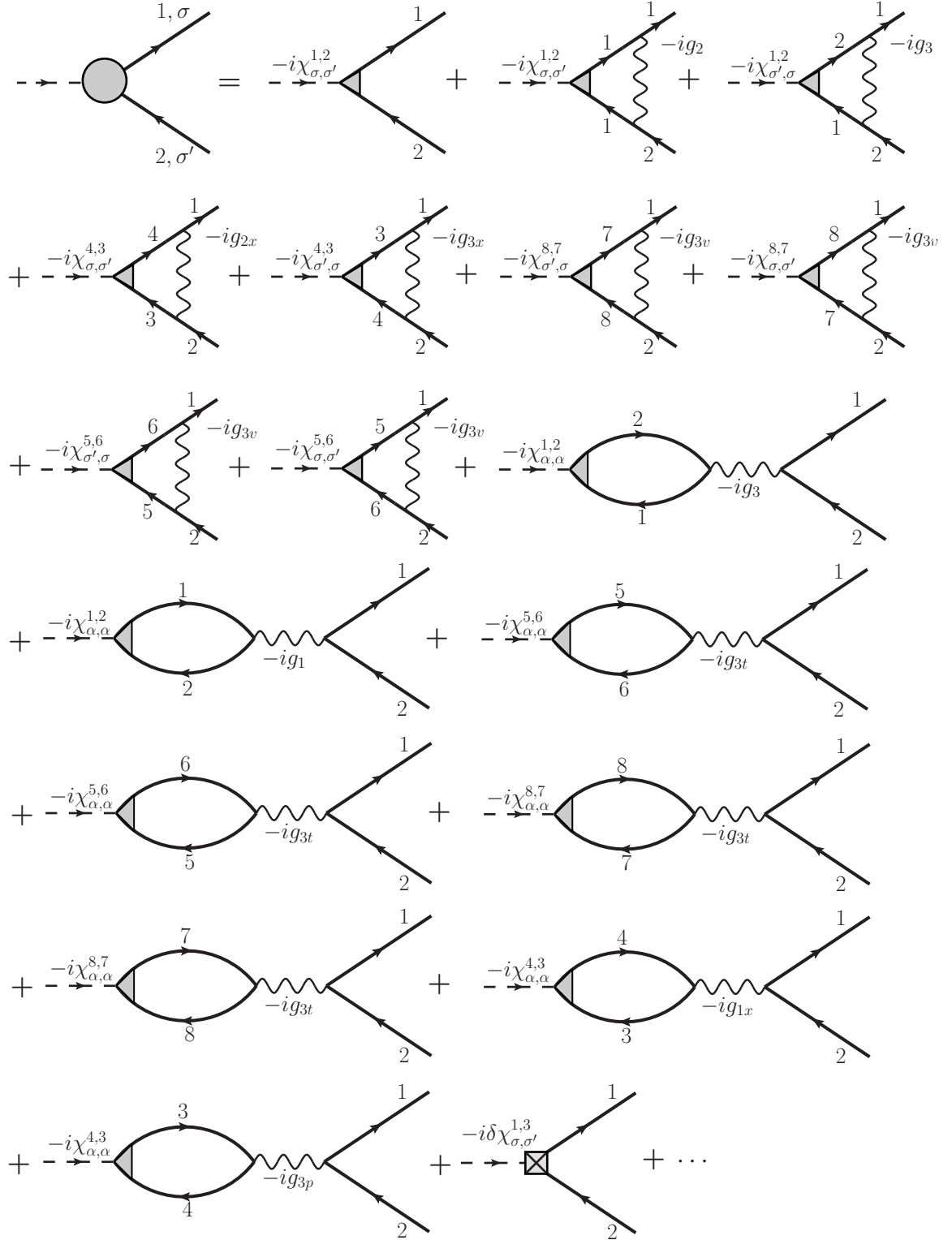


Figura 2.15: Função vértice onda de densidade $\Gamma_{OD}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) com vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ expandida em termos dos diagramas de Feynman que contribuem efetivamente para o modelo fermiônico de *hot spots* até a ordem de dois *loops*. Aqui, os triângulos e o quadrado com um “ \times ” inscrito indicam, a menos do fator imaginário $-i$, as funções respostas $\chi_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}$ e o contra-termo $\delta\chi_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}$ do correspondente canal onda de densidade. Nesse caso, consideramos a interação entre férmions localizados nos *hot spots* $\ell = 1$ e $m = 2$, cujos spins são dados, respectivamente, pelas variáveis discretas σ e σ' .

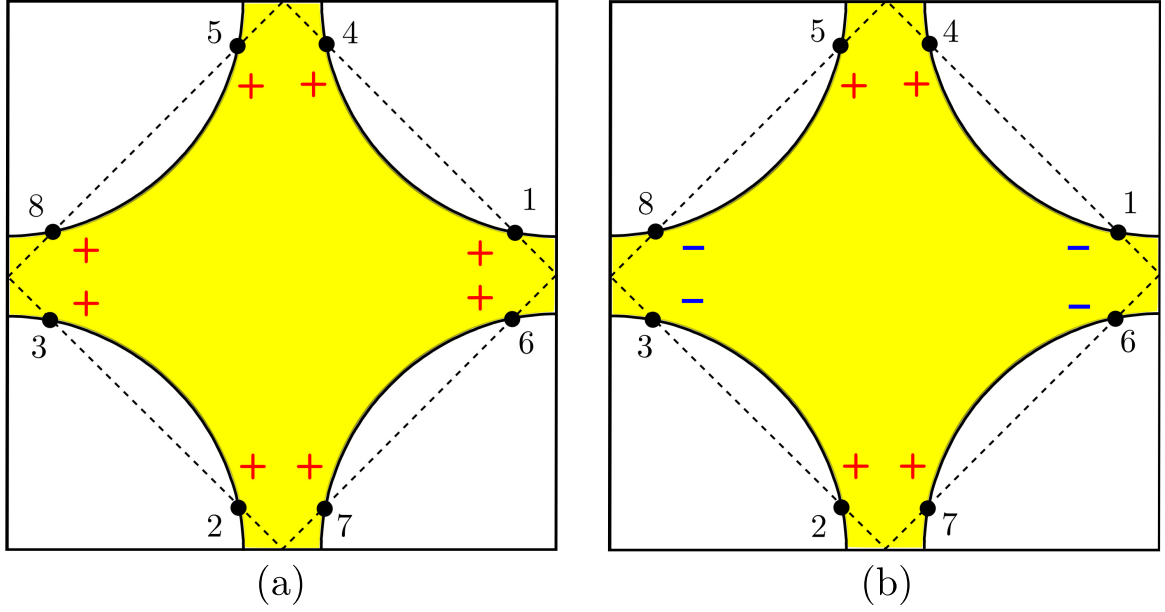


Figura 2.16: Sinais dos parâmetros de ordem supercondutor e onda de densidade com simetria s (a) e $d_{x^2-y^2}$ (b) na região em torno dos oito *hot spots*, que são definidos como a intersecção da superfície de Fermi com a zona antiferromagnética.

Por último, devemos simetrizar e anti-simetrizar as funções respostas nas Eqs. (2.114)–(2.115) com respeito aos índices de spin e às posições relativas dos *hot spots* para derivar as equações de grupo de renormalização dos parâmetros de ordem associados a uma potencial instabilidade do estado normal do sistema em direção a um dado estado ordenado ou com quebra espontânea de simetria. De fato, supondo que o sistema aqui tratado está sujeito a instabilidades supercondutora do tipo singleto (SCS), onda de densidade de carga (ODC) e spin (ODS), os seguintes parâmetros de ordem podem ser definidos para o modelo fermiônico de *hot spots*

$$\Delta_{SCS}^s = \varepsilon_{\sigma,\sigma'} (\Delta_{\sigma,\sigma'}^{1,3} + \Delta_{\sigma,\sigma'}^{4,2}), \quad (2.117)$$

$$\Delta_{SCS}^d = \varepsilon_{\sigma,\sigma'} (\Delta_{\sigma,\sigma'}^{1,3} - \Delta_{\sigma,\sigma'}^{4,2}), \quad (2.118)$$

$$\chi_{ODC}^s = \delta_{\sigma,\sigma'} (\chi_{\sigma,\sigma'}^{1,2} + \chi_{\sigma,\sigma'}^{4,3}), \quad (2.119)$$

$$\chi_{ODC}^d = \delta_{\sigma,\sigma'} (\chi_{\sigma,\sigma'}^{1,2} - \chi_{\sigma,\sigma'}^{4,3}), \quad (2.120)$$

$$\chi_{ODS}^s = \sigma_{\sigma,\sigma'}^z (\chi_{\sigma,\sigma'}^{1,2} + \chi_{\sigma,\sigma'}^{4,3}), \quad (2.121)$$

$$\chi_{ODS}^d = \sigma_{\sigma, \sigma'}^z (\chi_{\sigma, \sigma'}^{1,2} - \chi_{\sigma, \sigma'}^{4,3}), \quad (2.122)$$

$$\tilde{\chi}_{ODC}^s = \delta_{\sigma, \sigma'} (\tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{1,3} + \tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{4,2}), \quad (2.123)$$

$$\tilde{\chi}_{ODC}^d = \delta_{\sigma, \sigma'} (\tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{1,3} - \tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{4,2}), \quad (2.124)$$

$$\tilde{\chi}_{ODS}^s = \sigma_{\sigma, \sigma'}^z (\tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{1,3} + \tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{4,2}), \quad (2.125)$$

$$\tilde{\chi}_{ODS}^d = \sigma_{\sigma, \sigma'}^z (\tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{1,3} - \tilde{\chi}_{\sigma, \sigma'}^{4,2}), \quad (2.126)$$

onde os sobre-escritos dos termos no lado esquerdo da igualdade nas equações acima referem-se às simetrias s e $d_{x^2-y^2}$ do parâmetro de ordem na zona de Brillouin (veja a Figura 2.16), enquanto que $\varepsilon_{\sigma, \sigma'}$, $\delta_{\sigma, \sigma'}$ e $\sigma_{\sigma, \sigma'}^z$ correspondem, respectivamente, às componentes do tensor de Levi-Civita, da matriz identidade e da matriz de Pauli na direção z . Como consequência, as equações de grupo de renormalização para as quantidades nas Eqs. (2.117)–(2.126) são dadas por

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \Delta_{SCS}^s = \frac{1}{2} (g_{1c} + g_{2c} + g_{1x} + g_{2x} + 2g_{1s} + 2g_{1r}) \Delta_{SCS}^s + \eta_\psi \Delta_{SCS}^s, \quad (2.127)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \Delta_{SCS}^d = \frac{1}{2} (g_{1c} + g_{2c} - g_{1x} - g_{2x} - 2g_{1s} + 2g_{1r}) \Delta_{SCS}^d + \eta_\psi \Delta_{SCS}^d, \quad (2.128)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \chi_{ODC}^s = \frac{1}{2} (2g_1 - g_2 + g_3 + 2g_{1x} - g_{2x} - g_{3x} + 2g_{3p} - 4g_{3v} + 8g_{3t}) \chi_{ODC}^s + \eta_\psi \chi_{ODC}^s, \quad (2.129)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \chi_{ODC}^d = \frac{1}{2} (2g_1 - g_2 + g_3 - 2g_{1x} + g_{2x} + g_{3x} - 2g_{3p}) \chi_{ODC}^d + \eta_\psi \chi_{ODC}^d, \quad (2.130)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \chi_{ODS}^s = -\frac{1}{2} (g_2 + g_{2x} + g_3 + g_{3x} + 4g_{3v}) \chi_{ODS}^s + \eta_\psi \chi_{ODS}^s, \quad (2.131)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \chi_{ODS}^d = \frac{1}{2} (g_{2x} - g_2 + g_{3x} - g_3) \chi_{ODS}^d + \eta_\psi \chi_{ODS}^d, \quad (2.132)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\chi}_{ODC}^s = \frac{1}{2} (2g_{1c} - g_{2c} + 2g_{3x} - g_{3p}) \tilde{\chi}_{ODC}^s + \eta_\psi \tilde{\chi}_{ODC}^s, \quad (2.133)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\chi}_{ODC}^d = \frac{1}{2} (2g_{1c} - g_{2c} - 2g_{3x} + g_{3p}) \tilde{\chi}_{ODC}^d + \eta_\psi \tilde{\chi}_{ODC}^d, \quad (2.134)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\chi}_{ODS}^s = -\frac{1}{2} (g_{2c} + g_{3p}) \tilde{\chi}_{ODS}^s + \eta_\psi \tilde{\chi}_{ODS}^s, \quad (2.135)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\chi}_{ODS}^d = -\frac{1}{2} (g_{2c} - g_{3p}) \tilde{\chi}_{ODS}^d + \eta_\psi \tilde{\chi}_{ODS}^d. \quad (2.136)$$

A análise das equações de grupo de renormalização logo acima será feita, primeiramente, utilizando os resultados de um *loop* para o modelo fermiônico de *hot spots*, que, como

Tabela 2.3: Expoentes críticos dos vários parâmetros de ordem do modelo fermiônico de *hot spots* para o ponto fixo de um *loop* definido na Eq. (2.85).

Expoente	Expressão analítica	Valor numérico
α_{SCS}^s	$\frac{1}{2}(C_{1c} + C_{2c} + C_{1x} + C_{2x} + 2C_{1s} + 2C_{1r})$	0.127
α_{SCS}^d	$\frac{1}{2}(C_{1c} + C_{2c} - C_{1x} - C_{2x} - 2C_{1s} + 2C_{1r})$	-0.186
α_{ODC}^s	$\frac{1}{2}(2C_1 - C_2 + C_3 + 2C_{1x} - C_{2x} - C_{3x} + 2C_{3p} - 4C_{3v} + 8C_{3t})$	0.200
α_{ODC}^d	$\frac{1}{2}(2C_1 - C_2 + C_3 - 2C_{1x} + C_{2x} + C_{3x} - 2C_{3p})$	0.103
α_{ODS}^s	$-\frac{1}{2}(C_2 + C_{2x} + C_3 + C_{3x} + 4C_{3v})$	-0.997
α_{ODS}^d	$\frac{1}{2}(C_{2x} - C_2 + C_{3x} - C_3)$	0.128
$\tilde{\alpha}_{ODC}^s$	$\frac{1}{2}(2C_{1c} - C_{2c} + 2C_{3x} - C_{3p})$	0.102
$\tilde{\alpha}_{ODC}^d$	$\frac{1}{2}(2C_{1c} - C_{2c} - 2C_{3x} + C_{3p})$	-0.160
$\tilde{\alpha}_{ODS}^s$	$-\frac{1}{2}(C_{2c} + C_{3p})$	-0.044
$\tilde{\alpha}_{ODS}^d$	$-\frac{1}{2}(C_{2c} - C_{3p})$	0.064

vimos, mostram que a maioria dos acoplamentos do sistema diverge, segundo o *Ansatz* definido na Eq. (2.42), para uma escala crítica de energia Λ_c . Dessa forma, se substituirmos esse resultado nas Eqs. (2.127)–(2.136) e, ao mesmo tempo, desprezarmos a contribuição de dois *loops* decorrente do termo de dimensão anômala η_ψ , obteremos que os vários parâmetros de ordem do modelo comportam-se, próximo a Λ_c , segundo a lei de potência $\Delta_{SC} \sim \Lambda^{\alpha_{SC}}$ e $\chi_{OD} \sim \Lambda^{\alpha_{OD}}$, onde os expoentes críticos α_{SC} e α_{OD} são expressos na Tabela 2.3. Observando os valores desses expoentes, notamos que alguns dos parâmetros de ordem do modelo divergem próximo à escala crítica Λ_c , com a ordem onda de densidade de spin com simetria s e vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ tornando-se o principal tipo de ordenamento nessa escala de energia. Em seguida, vem as ordens supercondutora com simetria $d_{x^2-y^2}$ e do tipo singlete (SCS- d) e onda de densidade de carga para o vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ e com mesma simetria ($\widetilde{\text{ODC}}-d$), que na notação da referência [19] é também chamada de onda de densidade quadrupolar (ODQ). Aqui, chama-se atenção o fato de o valor numérico dos expoentes críticos α_{SCS}^d e $\tilde{\alpha}_{ODC}^d$ estarem muito próximo um do outro. Supondo que essa proximidade não é acidental, ela deve estar ligada, naturalmente, a algum tipo de simetria emergente envolvendo as excitações fermiônicas em torno dos *hot spots*. De fato, um tipo de simetria com essas características, conhecida como simetria de pseudospin SU(2), foi descoberta para o modelo de spin-férmion em duas dimensões espaciais por Metlitski e Sachdev em 2010 [17, 18]. As implicações físicas desse tipo de

Tabela 2.4: Expoentes críticos dos vários parâmetros de ordem do modelo fermiônico de *hot spots* para o ponto fixo PF_1 das funções betas de dois *loops* $\beta_i(\{g_{jR}\})$.

Expoente	Expressão analítica	Valor numérico
ν_{SCS}^s	$\frac{1}{2}(g_{1c}^* + g_{2c}^* + g_{1x}^* + g_{2x}^* + 2g_{1s}^* + 2g_{1r}^*) + \eta_\psi^*$	4.141
ν_{SCS}^d	$\frac{1}{2}(g_{1c}^* + g_{2c}^* - g_{1x}^* - g_{2x}^* - 2g_{1s}^* + 2g_{1r}^*) + \eta_\psi^*$	0.304
ν_{ODC}^s	$\frac{1}{2}(2g_1^* - g_2^* + g_3^* + 2g_{1x}^* - g_{2x}^* - g_{3x}^* + 2g_{3p}^* - 4g_{3v}^* + 8g_{3t}^*) + \eta_\psi^*$	3.801
ν_{ODC}^d	$\frac{1}{2}(2g_1^* - g_2^* + g_3^* - 2g_{1x}^* + g_{2x}^* + g_{3x}^* - 2g_{3p}^*) + \eta_\psi^*$	3.801
ν_{ODS}^s	$-\frac{1}{2}(g_2^* + g_{2x}^* + g_3^* + g_{3x}^* + 4g_{3v}^*) + \eta_\psi^*$	0.041
ν_{ODS}^d	$\frac{1}{2}(g_{2x}^* - g_2^* + g_{3x}^* - g_3^*) + \eta_\psi^*$	3.878
$\tilde{\nu}_{ODC}^s$	$\frac{1}{2}(2g_{1c}^* - g_{2c}^* + 2g_{3x}^* - g_{3p}^*) + \eta_\psi^*$	4.141
$\tilde{\nu}_{ODC}^d$	$\frac{1}{2}(2g_{1c}^* - g_{2c}^* - 2g_{3x}^* + g_{3p}^*) + \eta_\psi^*$	0.304
$\tilde{\nu}_{ODS}^s$	$-\frac{1}{2}(g_{2c}^* + g_{3p}^*) + \eta_\psi^*$	4.222
$\tilde{\nu}_{ODS}^d$	$-\frac{1}{2}(g_{2c}^* - g_{3p}^*) + \eta_\psi^*$	4.222

simetria, no contexto dos cupratos supercondutores, foram exploradas mais detalhadamente em trabalhos subsequentes de Efetov *et al.* [19, 20, 22], onde foi demonstrado que o parâmetro de ordem do modelo de spin-férmion, descrevendo o emaranhamento entre SCS-*d* e $\widetilde{\text{ODC-d}}$, possui fator de forma com simetria SU(2).

Considerando as correções de dois *loops* para o sistema, a solução das Eqs. (2.127)–(2.136), na vizinhança do ponto fixo não-trivial PF_1 discutido anteriormente, mostra que os parâmetros de ordem supercondutor e onda de densidade do modelo fermiônico de *hot spots* deixam de apresentar divergência, à medida que a escala de energia Λ flui para o regime de baixas energias. De fato, nessa situação, os parâmetros de ordem comportam-se segundo as leis de potência $\Delta_{SC} \sim \Lambda^{\nu_{SC}}$ e $\chi_{OD} \sim \Lambda^{\nu_{OD}}$, com todos os expoentes críticos ν_{SC} e ν_{OD} assumindo valores positivos (veja a Tabela 2.4). Como consequência, isso implica na ausência de quebra espontânea de simetria no modelo para temperaturas finitas, com as fases supercondutora e onda de densidade de carga e spin manifestando-se apenas como instabilidades cujo comprimento de correlação não envolve todo o sistema, ou seja, ordens de curto alcance. Esse tipo de comportamento, revelado pela inclusão de flutuações quânticas de dois *loops* no modelo fermiônico de *hot spots*, caracteriza também toda a classe de sistemas bidimensionais com simetria contínua e interações de curto alcance, de acordo com o chamado teorema de Mermin-Wagner⁵

⁵O teorema de Mermin-Wagner, também conhecido como teorema de Mermin-Wagner-Hohenberg [62, 63]

[65].

Pelos valores dos expoentes críticos na Tabela 2.4, notamos também que as flutuações antiferromagnéticas, relacionadas ao parâmetro de ordem χ_{ODS}^s , continuam sendo dominantes no sistema próximo ao ponto fixo de dois *loops* PF_1 , com um comprimento de correlação finito. Um outro resultado interessante está relacionado ao fato de os dois expoentes críticos ν_{SCS}^d e $\tilde{\nu}_{ODC}^d$, associados a fases subdominantes no sistema, serem iguais dentro da ordem de precisão numérica utilizada para a determinação dos acoplamentos g_i^* . Para explicar isso, definiremos, primeiramente, o seguinte spinor de quatro componentes [17, 18, 19] utilizando a notação de Balian-Werthamer [66]

$$\Psi_\ell = \begin{pmatrix} \psi_\ell \\ i\sigma^y(\psi_\ell^\dagger)^\top \end{pmatrix}_\tau, \quad (2.137)$$

onde, aqui, τ representa um espaço de partícula-buraco, $\psi_\ell = \begin{pmatrix} \psi_{\ell,\uparrow} \\ \psi_{\ell,\downarrow} \end{pmatrix}_\sigma$, $(\psi_\ell^\dagger)^\top = \begin{pmatrix} \psi_{\ell,\uparrow}^\dagger \\ \psi_{\ell,\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}_\sigma$, e σ^y é a matriz de Pauli na direção y . Em seguida, notamos que as interações responsáveis pelas ordens $SCS-d$ e $\widetilde{ODC}-d$ são, no limite de baixa energia, g_{1c} , g_{2c} , g_{1x} , g_{2x} e g_{3x} . Como resultado, temos que a Lagrangiana de baixa energia $\mathcal{L}_{SCS/\widetilde{ODC}}$, que descreve o emaranhamento entre essas duas fases nesse limite, pode ser escrita em termos dos spinores na Eq. (2.137) da seguinte maneira

$$\mathcal{L}_{SCS/\widetilde{ODC}} = \mathcal{L}_0 - \mathcal{H}_c - \mathcal{H}_x, \quad (2.138)$$

onde \mathcal{L}_0 , \mathcal{H}_c e \mathcal{H}_x correspondem, respectivamente, a

$$\mathcal{L}_0 = \frac{1}{2} \sum_{\ell=1}^8 \Psi_\ell^\dagger (i\partial_t + i\mathbf{v}_\ell \cdot \nabla) \Psi_\ell, \quad (2.139)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_c = \frac{g_c}{4} [& (\Psi_1^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_1) \cdot (\Psi_3^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_3) + (\Psi_2^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_2) \cdot (\Psi_4^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_4) \\ & + (\Psi_5^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_5) \cdot (\Psi_7^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_7) + (\Psi_6^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_6) \cdot (\Psi_8^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Psi_8)], \end{aligned} \quad (2.140)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_x = \frac{g_x}{4} [& (\Psi_1^\dagger i\boldsymbol{\sigma} \Psi_2) \cdot (\Psi_3^\dagger i\boldsymbol{\sigma} \Psi_4) + (\Psi_5^\dagger i\boldsymbol{\sigma} \Psi_6) \cdot (\Psi_7^\dagger i\boldsymbol{\sigma} \Psi_8) \\ & + \Psi_1^\dagger \Psi_2 \Psi_3^\dagger \Psi_4 + \Psi_5^\dagger \Psi_6 \Psi_7^\dagger \Psi_8 + c.c.]. \end{aligned} \quad (2.141)$$

em física da matéria condensada e por teorema de Coleman [64] em teoria quântica de campos, diz que não pode haver, para $T \neq 0$, o fenômeno de quebra espontânea de simetria em um sistema de dimensionalidade $d \leq 2$ com simetria contínua e interações de curto alcance.

As interações nas Hamiltonianas \mathcal{H}_c e \mathcal{H}_x são dadas por $g_c = |g_{2c}^*| = |g_{1c}^*|/2$ e $g_x = g_{1x}^* = g_{2x}^* = g_{3x}^*$, ao passo que $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ denota o vetor das matrizes de Pauli. A Lagrangiana na Eq. (2.138) é invariante através da transformação

$$\text{SU}(2)_i : \left\{ \begin{array}{c} \Psi_{2i-1} \\ \Psi_{2i} \end{array} \right\} \mapsto U_i \left\{ \begin{array}{c} \Psi_{2i-1} \\ \Psi_{2i} \end{array} \right\}, \quad (2.142)$$

com $i = 1, 2, 3, 4$. Aqui, os termos U_i representam matrizes unitárias do grupo de simetria $\text{SU}(2)$, que são definidas no espaço de partícula-buraco τ e obedecem a seguinte propriedade $U_i^\dagger \boldsymbol{\sigma} U_i = \boldsymbol{\sigma}$. A invariância do sistema por essa transformação, que relaciona os campos fermiônicos Ψ_ℓ dos *hot spots* conectados pelo vetor do ordenamento antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, é conhecida por simetria de pseudospin $\text{SU}(2) \times \text{SU}(2) \times \text{SU}(2) \times \text{SU}(2)$ [17, 18, 67].

Segundo Metlitski e Sachdev [17, 18], essa simetria emergente é a principal responsável pela degenerescência entre os parâmetros de ordem das fases $\text{SCS-}d$ e $\widetilde{\text{ODC-}}d$ no modelo de spin-férmion. Para verificar se isso é também verdade no caso do modelo fermiônico de *hot spots*, usamos os spinores Ψ_ℓ na Eq. (2.137) e definimos, para as excitações fermiônicas dos *hot spots* $\ell = 1, \dots, 4$, o seguinte operador matricial

$$\hat{\mathcal{O}}_{\text{SCS}/\widetilde{\text{ODC}}}^d \equiv \tau^z \left[\text{Tr}_\sigma(\Psi_2 \Psi_4^\dagger) - \text{Tr}_\sigma(\Psi_3 \Psi_1^\dagger) \right]. \quad (2.143)$$

Em seguida, efetuando a operação de traço parcial (Tr_σ) sobre o espaço de spin, que tem o efeito de selecionar apenas os operadores do estado singleto, e então a multiplicação pela matriz de Pauli τ^z do espaço de pseudospin partícula-buraco τ , obtemos o seguinte resultado

$$\hat{\mathcal{O}}_{\text{SCS}/\widetilde{\text{ODC}}}^d = \begin{pmatrix} \delta_{\sigma,\sigma'}(\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'} - \psi_{4,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'}) & \varepsilon_{\sigma,\sigma'}(\psi_{3,\sigma'} \psi_{1,\sigma} - \psi_{2,\sigma'} \psi_{4,\sigma}) \\ -\varepsilon_{\sigma,\sigma'}(\psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'}^\dagger - \psi_{4,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'}^\dagger) & \delta_{\sigma,\sigma'}(\psi_{3,\sigma}^\dagger \psi_{1,\sigma'} - \psi_{2,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'}) \end{pmatrix}_\tau. \quad (2.144)$$

Os termos da diagonal principal de $\hat{\mathcal{O}}_{\text{SCS}/\widetilde{\text{ODC}}}^d$ representam os operadores que caracterizam a fase $\widetilde{\text{ODC-}}d$, enquanto os termos da outra diagonal definem os operadores para $\text{SCS-}d$. De fato, aplicando a metodologia do grupo de renormalização de teoria quântica de campos à função de correlação $\langle T \hat{\mathcal{O}}_{\text{SCS}/\widetilde{\text{ODC}}}^d(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \rangle_{1PI}$, somos levado ao resultado

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{\text{SCS}/\widetilde{\text{ODC}}}^d = \Lambda \frac{d}{d\Lambda} \begin{pmatrix} \widetilde{\chi}_{\text{ODC}}^d & \Delta_{\text{SCS}}^{*d} \\ -\Delta_{\text{SCS}}^d & \widetilde{\chi}_{\text{ODC}}^{*d} \end{pmatrix}_\tau, \quad (2.145)$$

onde Δ_{SCS}^d e $\tilde{\chi}_{ODC}^d$ são, respectivamente, os parâmetros de ordem para as ordens SCS- d e \widetilde{ODC} - d , cujas funções betas, na aproximação de dois *loops*, aparecem nas Eqs. (2.128) e (2.134). Portanto, a solução da Eq. (2.145) na vizinhança do ponto fixo PF_1 é dada por

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{SCS/\widetilde{ODC}}^d(\Lambda) = \frac{1}{\sqrt{|\tilde{\chi}_{ODC}^d(0)|^2 + |\Delta_{SCS}^d(0)|^2}} \begin{pmatrix} \tilde{\chi}_{ODC}^d(0) & \Delta_{SCS}^{*d}(0) \\ -\Delta_{SCS}^d(0) & \tilde{\chi}_{ODC}^{*d}(0) \end{pmatrix}_\tau \mathcal{F}_{SCS/\widetilde{ODC}}^d(\Lambda) \quad (2.146)$$

onde o último termo que aparece na expressão acima possui, em relação à escala de energia Λ , a dependência $\mathcal{F}_{SCS/\widetilde{ODC}}^d(\Lambda) = [|\tilde{\chi}_{ODC}^d(0)|^2 + |\Delta_{SCS}^d(0)|^2]^{1/2} \Lambda^{\nu_d}$, com o expoente crítico $\nu_d = \nu_{SCS}^d = \tilde{\nu}_{ODC}^d = 0.304$. Por outro lado, o termo que multiplica $\mathcal{F}_{SCS/\widetilde{ODC}}^d(\Lambda)$ é o fator de forma do parâmetro de ordem $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{SCS/\widetilde{ODC}}^d(\Lambda)$ para as fases emaranhadas SCS- d e \widetilde{ODC} - d , que obviamente é uma matriz do grupo de simetria $SU(2)$. Dessa forma, a emergência da simetria de pseudospin, associadas com transformações do tipo partícula-buraco entre os quatro pares de *hot spots* conectados por $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, possibilita o mapeamento da fase supercondutora com simetria $d_{x^2-y^2}$ em uma fase onda de densidade de carga com mesma simetria $d_{x^2-y^2}$ e vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$, desde que o sistema esteja próximo ao ponto fixo não-trivial de dois *loops* PF_1 . Observando a Tabela 2.4 e a Eq. (2.143), podemos constatar que o parâmetro de ordem para ambas as fases supercondutora SCS- s e onda de densidade de carga \widetilde{ODC} - s também possui fator de forma com simetria $SU(2)$ próximo a esse ponto fixo. Como já havia sido mencionado, um resultado semelhante, no que diz respeito ao parâmetro de ordem $\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle_{SCS/\widetilde{ODC}}^d(\Lambda)$, foi também derivado para o modelo de spin-férmion em duas dimensões espaciais, no limite onde as flutuações antiferromagnéticas do sistema tornam-se críticas [17, 18, 19].

Para dar suporte aos resultados apresentados até aqui, calcularemos agora as susceptibilidades renormalizadas para as ordens supercondutora SCS- d , onda de densidade de carga \widetilde{ODC} - d e onda de densidade de spin dos tipos \widetilde{ODS} - s e ODS - s , que são definidas, respectivamente, por

$$X_{SCS-d}(l) = N(0) \int_0^l d\xi \Delta_{SCS}^d(\xi) \Delta_{SCS}^{*d}(\xi), \quad (2.147)$$

$$X_{\widetilde{ODC}-d}(l) = N(0) \int_0^l d\xi \tilde{\chi}_{ODC}^d(\xi) \tilde{\chi}_{ODC}^{*d}(\xi), \quad (2.148)$$

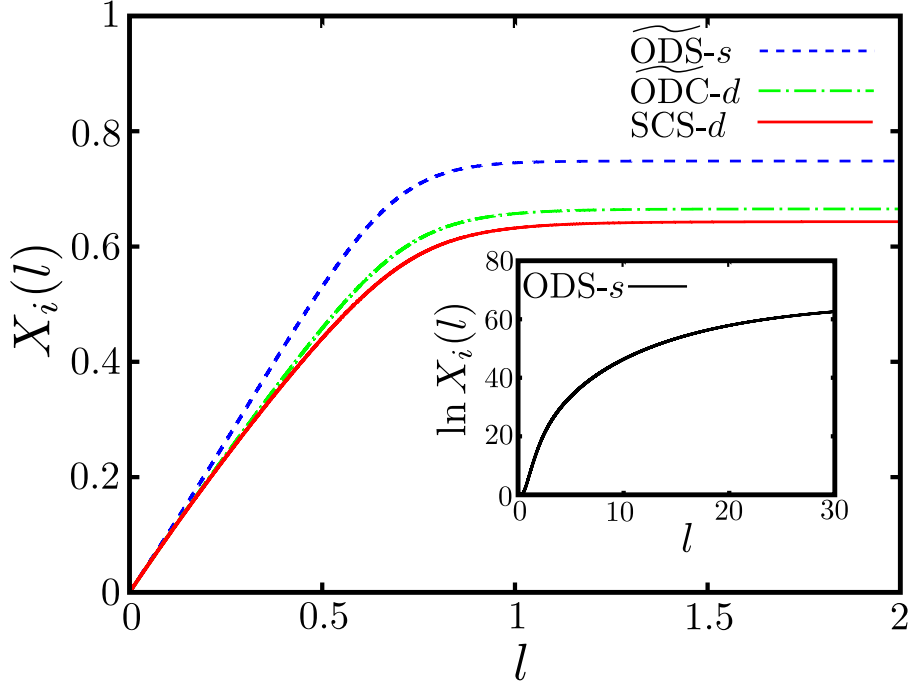


Figura 2.17: Fluxo de grupo de renormalização das susceptibilidades das fases SCS- d , $\widetilde{\text{ODC}}-d$, $\widetilde{\text{ODS}}-s$ e ODS- s do modelo fermiônico de *hot spots* na aproximação de dois *loops*, com as condições iniciais $g_{iR}(0) = 1/2$ para os acoplamentos renormalizados. Essas susceptibilidades são calculadas em unidades da densidade de estados $N(0)$ para a variável $l = \ln(\Lambda_0/\Lambda)$.

$$X_{\widetilde{\text{ODS}}-s}(l) = N(0) \int_0^l d\xi \tilde{\chi}_{\text{ODS}}^s(\xi) \tilde{\chi}_{\text{ODS}}^{*s}(\xi), \quad (2.149)$$

$$X_{\text{ODS}}-s}(l) = N(0) \int_0^l d\xi \chi_{\text{ODS}}^s(\xi) \chi_{\text{ODS}}^{*s}(\xi). \quad (2.150)$$

Os resultados numéricos para essas susceptibilidades são mostrados na Figura 2.17. A partir disso, podemos confirmar que, embora as susceptibilidades SCS- d , $\widetilde{\text{ODC}}-d$ e $\widetilde{\text{ODS}}-s$ sejam reforçadas para altas energias, elas eventualmente convergem para *plateaus* em baixas energias na aproximação de dois *loops*, indicando claramente a presença de ordens de curto alcance no sistema. Nesse regime, o comprimento de correlação das flutuações antiferromagnéticas ODS- s torna-se muito maior que o tamanho do espaçamento da rede do modelo, porém ele não diverge no ponto fixo de dois *loops*, como pode ser observado no *inset* da Figura 2.17. Com resultado, a simetria emergente de pseudospin, que relaciona, por exemplo, as fases supercondutora SCS- d e onda de densidade de carga $\widetilde{\text{ODC}}-d$, toma realmente lugar em baixas energias no modelo fermiônico de *hot spots* na presença de fortes flutuações antiferromagnéticas [23, 24].

2.6.2 Onda de densidade de pares e ordem de carga

Para analisar a instabilidade supercondutora no modelo fermiônico de *hot spots* com vetor de onda finito $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ ou $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$, que possui algumas similaridades com o estado de Fulde-Ferrel-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) [68, 69] e é conhecida na literatura como onda de densidade de pares (ODP) [70], e a ordem de carga (OC) com vetor de onda na mesma direção, vamos adicionar um termo perturbativo à Lagrangiana total do sistema $\mathcal{L}[\psi^\dagger, \psi]$, que é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\text{ext}}^{(2)}[\psi^\dagger, \psi] = & \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{4,5} \psi_{4,\sigma} \psi_{5,\sigma'} + \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{8,1} \psi_{8,\sigma} \psi_{1,\sigma'} + \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{3,6} \psi_{3,\sigma} \psi_{6,\sigma'} + \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{7,2} \psi_{4,\sigma} \psi_{2,\sigma'} \\ & + \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{1,6} \psi_{1,\sigma} \psi_{6,\sigma'} + \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{7,4} \psi_{7,\sigma} \psi_{4,\sigma'} + \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{2,5} \psi_{2,\sigma} \psi_{5,\sigma'} + \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{8,3} \psi_{8,\sigma} \psi_{3,\sigma'} \\ & + \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{4,5} \psi_{4,\sigma}^\dagger \psi_{5,\sigma'} + \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{8,1} \psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{1,\sigma'} + \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{3,6} \psi_{3,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'} + \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{7,2} \psi_{7,\sigma}^\dagger \psi_{2,\sigma'} \\ & + \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{1,6} \psi_{1,\sigma}^\dagger \psi_{6,\sigma'} + \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{7,4} \psi_{7,\sigma}^\dagger \psi_{4,\sigma'} + \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{2,5} \psi_{2,\sigma}^\dagger \psi_{5,\sigma'} + \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{8,3} \psi_{8,\sigma}^\dagger \psi_{3,\sigma'} + c.c., \end{aligned} \quad (2.151)$$

onde $\tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m} = \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}(\mathbf{r}, t)$ e $\tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m} = \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{\ell,m}(\mathbf{r}, t)$ são, respectivamente, as funções respostas para ODP e OC no sistema (veja a Figura 2.12). Redefinindo os parâmetros microscópicos da Lagrangiana $\mathcal{L}_{\text{ext}}^{(2)}[\psi^\dagger, \psi]$ em termos de parâmetros renormalizados ou físicos, semelhantemente ao que foi feito nas Eqs. (2.108)–(2.110), as equações de grupo de renormalização na aproximação de dois *loops* para as transformada de Fourier dessas funções respostas podem ser escritas como

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{4,5} = \lambda [g_{3t} \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{3,6} - g_{3v} \tilde{\Delta}_{\sigma',\sigma}^{3,6}] + \eta_\psi \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{4,5}, \quad (2.152)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{4,5} = \lambda \left[g_{3v} \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow} \tilde{\mathcal{X}}_{\alpha,\alpha}^{3,6} - g_{3t} \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{3,6} - g_{3v} \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma',\sigma}^{3,6} \right] + \eta_\psi \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{4,5}, \quad (2.153)$$

com $\lambda = 1/(\cos \theta_R + \sin \theta_R)$ e o ângulo θ_R sendo definido logo abaixo da Eq. (2.61). Nesse caso em particular, nós consideramos a taxa de espalhamento entre os férmions dos *hot spots* $\ell = 4$ e $m = 5$ para os canais partícula-partícula e partícula-buraco, que são dadas, respectivamente, pelas funções de correlação $\Gamma_{ODP,45}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ e $\Gamma_{OC,45}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$. Essas últimas funções são, por sua vez, representadas em termos dos diagramas de Feynman mais relevantes na Figura 2.18. Observando as Eqs. (2.152) e (2.153), vemos que elas descrevem, de fato, as ordens supercondutora e onda de densidade de carga com vetor de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$. Porém, devido

à invariância do modelo por rotações de $\pi/2$ (ou simetria C_4), equações semelhantes para as funções respostas devem ser obtidas, quando se considera o efeito de instabilidades como essas, cujo vetor de onda $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ aparece na direção perpendicular.

Os parâmetros de ordem para as instabilidades ODP e OC com as simetrias s e $d_{x^2-y^2}$ devem ser aqui definidos simetrizando e anti-simetrizando as funções respostas com relação aos índices de spin e às posições dos *hot spots* na zona de Brillouin, ou seja, da seguinte forma

$$\tilde{\Delta}_{ODP}^s = \varepsilon_{\sigma,\sigma'}(\tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{4,5} + \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{3,6}), \quad (2.154)$$

$$\tilde{\Delta}_{ODP}^d = \varepsilon_{\sigma,\sigma'}(\tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{4,5} - \tilde{\Delta}_{\sigma,\sigma'}^{3,6}), \quad (2.155)$$

$$\tilde{\mathcal{X}}_{OC}^s = \delta_{\sigma,\sigma'}(\tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{4,5} + \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{3,6}), \quad (2.156)$$

$$\tilde{\mathcal{X}}_{OC}^d = \delta_{\sigma,\sigma'}(\tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{4,5} - \tilde{\mathcal{X}}_{\sigma,\sigma'}^{3,6}). \quad (2.157)$$

Como resultado, as equações de grupo de renormalização na aproximação de dois *loop* podem ser escritas como

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\Delta}_{ODP}^s = \lambda(g_{3t} + g_{3v})\tilde{\Delta}_{ODP}^s + \eta_\psi \tilde{\Delta}_{ODP}^s, \quad (2.158)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\Delta}_{ODP}^d = -\lambda(g_{3t} + g_{3v})\tilde{\Delta}_{ODP}^d + \eta_\psi \tilde{\Delta}_{ODP}^d, \quad (2.159)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\mathcal{X}}_{OC}^s = \lambda(g_{3v} - g_{3t})\tilde{\mathcal{X}}_{OC}^s + \eta_\psi \tilde{\mathcal{X}}_{OC}^s, \quad (2.160)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \tilde{\mathcal{X}}_{OC}^d = \lambda(-g_{3v} + g_{3t})\tilde{\mathcal{X}}_{OC}^d + \eta_\psi \tilde{\mathcal{X}}_{OC}^d. \quad (2.161)$$

Para obter uma ideia qualitativa dos resultados de grupo de renormalização, discutiremos primeiramente as correções de um *loop* para o modelo fermiônico de *hot spots*. Nessa ordem de aproximação, podemos calcular os parâmetros de ordem para ODP e OC próximo Λ_c simplesmente substituindo o *Ansatz* (2.42) para os acoplamentos nas Eqs. (2.158)–(2.161) e, em seguida, desprezando a contribuição de dois *loops*, dada pelo termo de dimensão anômala η_ψ . Fazendo isso, nós encontramos imediatamente dois diferentes regimes, que dependem crucialmente dos valores iniciais dos acoplamentos para interações do tipo do modelo de Hubbard. Para compreender isso, devemos comparar diferentes escalas de energia, que emergem no presente problema: a primeira é a escala crítica Λ_c , dada pelos acoplamentos que divergem no

limite de baixa energia, e a segunda escala corresponde ao *cut-off* de baixa energia das bolhas de polarização partícula-partícula e partícula-buraco para os vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$, ou seja, $v_F^R k_c (1 - \tan \theta_R) / \lambda$. Por simplicidade, consideraremos aqui a superfície de Fermi renormalizada que emerge na aproximação de dois *loops*, para fazer uma estimativa sobre qual dessas escalas vence sobre a outra nos dois regimes físicos mencionados acima.

No primeiro regime, que ocorre para acoplamentos fracos no presente modelo (ou seja, $g_{iR}(0) < g_c$, onde g_c é um acoplamento crítico), é fácil verificar que $v_F^R k_c > \Lambda_c$. Isto significa que o *cut-off* de baixa energia nas bolhas de polarização partícula-partícula e partícula-buraco para os vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ impedirá a divergência dessas funções no ponto fixo de um *loop*. Dessa maneira, ambas as instabilidades ODP e OC permanecem com um comprimento de correlação muito inferior àqueles das ordens SCS-*d* e $\widetilde{\text{ODS}}\text{-s}$, uma vez que os diagramas de Feynman correspondentes a essas duas últimas ordens são independentes de qualquer tipo de *cut-off* (veja as Figuras 2.13 e 2.14). Essas conclusões estão em total concordância com alguns trabalhos referentes ao modelo de spin-férmion [26, 71], sendo também confirmadas por um trabalho independente de Whitsitt e Sachdev [72] para o modelo fermiônico de *hot spots*.

Por outro lado, no segundo regime, e para as nossas pretensões o mais interessante, o comportamento do sistema muda drasticamente. Isto ocorre para acoplamentos moderados no sistema [$g_{iR}(0) > g_c$], uma vez que nessa situação temos $\Lambda_c > v_F^R k_c$. A maior parte dos parâmetros de ordem calculados aqui exibem uma divergência para a escala de altas energias Λ_c , que é evidentemente uma consequência da divergência dos acoplamentos, quando a aproximação de um *loop* do grupo de renormalização é implementada para esse modelo em questão. Consequentemente, os parâmetros de ordem para as instabilidades ODP e OC tenderão a se comportar, próximo a Λ_c , como uma lei de potência da forma $\tilde{\Delta}_{ODP} \sim (\Lambda - \Lambda_c)^{\alpha_{ODP}}$ e $\tilde{\chi}_{OC} \sim (\Lambda - \Lambda_c)^{\alpha_{OC}}$, onde os expoentes críticos α_{ODP} e α_{OC} são dados, aproximadamente, por

$$\alpha_{ODP}^s = \lambda(g_{3t} + g_{3v}) = 0.373, \quad (2.162)$$

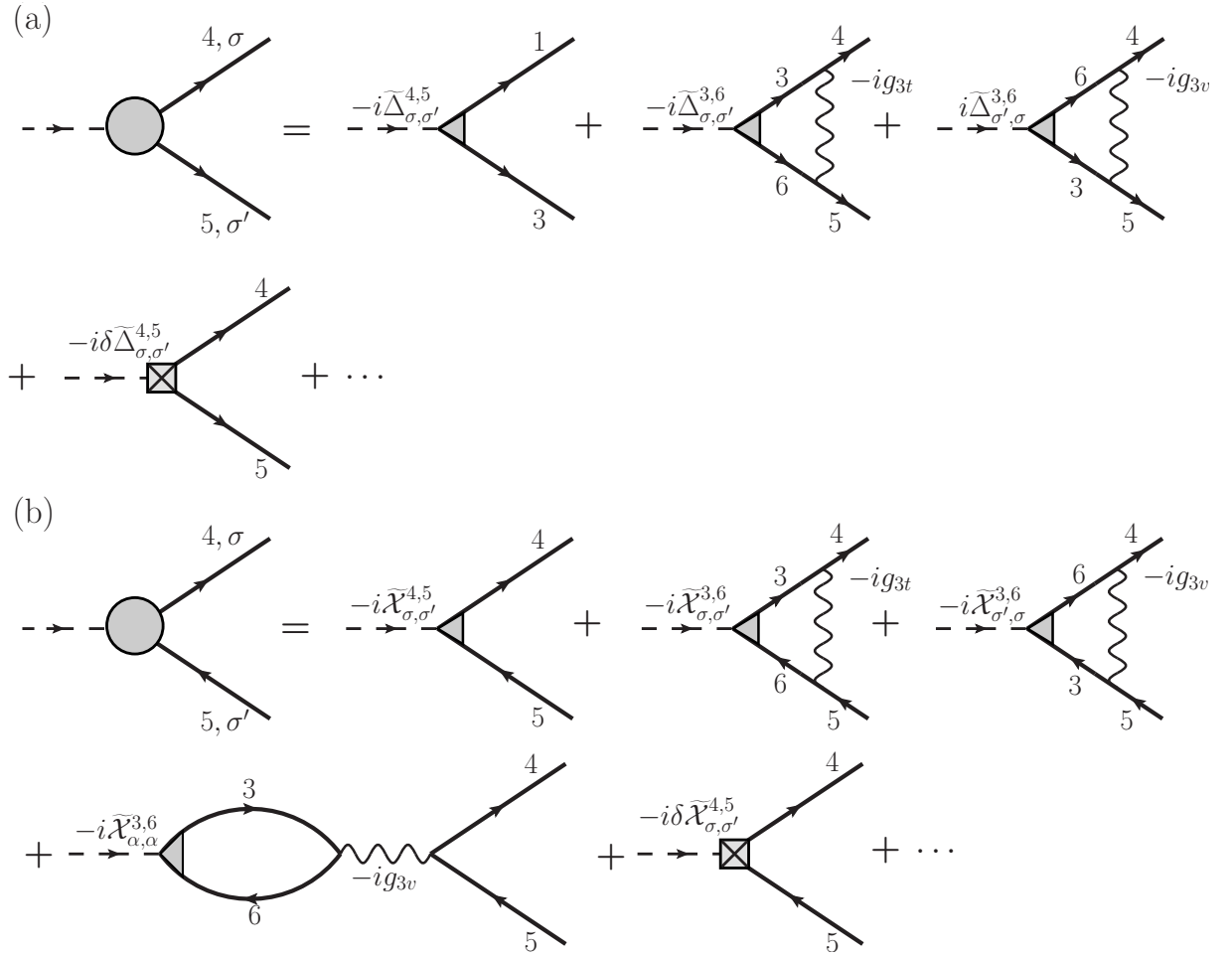


Figura 2.18: (a) Função vértice supercondutora $\Gamma_{SC,45}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) expandida em termos dos diagramas de Feynman que contribuem efetivamente para o modelo fermiônico de *hot spots* até a ordem de dois *loops*. (b) Função vértice ordem de carga $\Gamma_{OC,45}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza à esquerda da igualdade) com vetor de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ expandida em termos dos diagramas de Feynman que contribuem efetivamente para o modelo fermiônico de *hot spots* até a ordem de dois *loops*

$$\alpha_{ODP}^d = -\lambda(g_{3t} + g_{3v}) = -0.373, \quad (2.163)$$

$$\alpha_{OC}^s = \lambda(g_{3v} - g_{3t}) = 0.125, \quad (2.164)$$

$$\alpha_{OC}^d = \lambda(-g_{3v} + g_{3t}) = -0.125. \quad (2.165)$$

Podemos notar dos resultados de grupo de renormalização na aproximação de um *loop* acima que os expoentes associados com os parâmetros de ordem para as fases ODP e OC com simetria $d_{x^2-y^2}$ tornam-se negativos, o que leva essas duas quantidades a divergir próximo à escala crítica de energia Λ_c . Contrário a isso, os parâmetros de ordem para essas fases com

simetria s renormaliza-se para zero perto da mesma escala de energia Λ_c . Além do mais, os expoentes críticos associados com as fases ODP- d e OC- d tornam-se, na aproximação de um *loop* do grupo de renormalização, equivalentes aos expoentes para as fases SCS- d , $\widetilde{\text{ODC}}-d$, que mostramos na Tabela 2.3. Um outro efeito observado no modelo fermiônico de *hot spots*, no que diz respeito às fases ODP e OC, é a diminuição do módulo dos vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$, na situação onde ocorre o aumento da dopagem no sistema por portadores de carga do tipo buraco. Essa dependência do vetor de onda com a dopagem é observada experimentalmente para algumas famílias dos cupratos supercondutores [30]. De fato, ela revela o papel relevante que a superfície de Fermi desempenha para o aparecimento dessas ordens, no que se refere, pelo menos, à família dos cupratos supercondutores que não possui o elemento lantânio em sua estrutura.

Como discutido anteriormente, as divergências que aparecem nos parâmetros de ordem do modelo fermiônico de *hot spots* na aproximação de um *loop* são artificiais e podem ser eliminadas introduzindo correções no modelo de mais alta ordem. De fato, considerando correções de dois *loops* e resolvendo as Eqs. (2.158)–(2.161) na vizinhança do ponto fixo PF_1 , obtemos que os parâmetros de ordem para as fases ODP e OC devem obedecer as leis de potência $\tilde{\Delta}_{ODP} \sim \Lambda^{\nu_{ODP}}$ e $\tilde{\chi}_{OC} \sim \Lambda^{\nu_{OC}}$, onde os expoentes críticos ν_{ODP} e ν_{OC} correspondem a

$$\nu_{ODP}^s = \lambda(g_{3t} + g_{3v}) + \eta_\psi^* = 3.722, \quad (2.166)$$

$$\nu_{ODP}^d = -\lambda(g_{3t} + g_{3v}) + \eta_\psi^* = 3.722, \quad (2.167)$$

$$\nu_{OC}^s = \lambda(g_{3v} - g_{3t}) + \eta_\psi^* = 3.722, \quad (2.168)$$

$$\nu_{OC}^d = \lambda(-g_{3v} + g_{3t}) + \eta_\psi^* = 3.722. \quad (2.169)$$

Pelos resultados mostrados acima, concluímos que, na aproximação de dois *loops*, os expoentes críticos dos parâmetros de ordem definidos nesta seção tornam-se positivos e, como uma consequência, ao invés de serem divergentes, como na aproximação de um *loop*, eles fluem claramente para zero no limite onde a escala de energia Λ tende para baixas energias. Em termos físicos, isso ocorre porque a correção de dois *loops* da auto-energia (isto é, a instabilidade

de pseudogap) nas equações de grupo de renormalização impede a formação de correlações quânticas de longo alcance, ou seja, com comprimento de correlação que envolva todo o sistema [25].

Uma outra propriedade interessante que emerge dos resultados nas Eqs. (2.166)–(2.169) é a degenerescência entre os expoentes críticos das fases ODP e OC no modelo fermiônico de *hot spots*. Como era de se esperar, isso é puramente uma consequência da simetria emergente de pseudospin (2.142) que aparece no sistema próximo ao ponto fixo não trivial de dois *loops* PF_1 . De fato, o fator de forma para os parâmetros de ordem das fases emaranhadas ODP-*s*/OC-*s* e ODP-*d*/OC-*d* possui simetria $SU(2)$, em completa analogia com o resultado derivado na Eq. (2.146) para o parâmetro de ordem relacionando as ordens de curto alcance SCS-*d* e $\widetilde{ODC-d}$. No contexto do modelo de spin-férmion, um tipo de simetria com essas características – ou seja, envolvendo os parâmetros de ordem para as fases ODP e OC - foi notada em um trabalho de Pépin *et al.* [26], que trata da competição entre as ordens ODP-*d*/OC-*d* e SCS-*d*/ $\widetilde{ODC-d}$ na aproximação de campo médio em um sistema com ausência de simetria de rotação C_4 , e também em um trabalho de Wang *et al.* [73, 74], onde é mostrado, através de uma análise de Ginzburg-Landau, que os parâmetros de ordem para as fases ODP e OC tornam-se componentes de um “super-vetor” com simetria $SO(4)$ no regime de baixa energia.

Do ponto de vista experimental, uma fase supercondutora com vetor de onda ligando os *hot spots* na direção dos eixos principais da zona de Brillouin [$\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$], possuindo assim as mesmas características de uma fase ODP bidirecional, foi recentemente observada no cuprato supercondutor $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+x}$ [75], por meio da técnica de microscopia de corrente de tunelamento Josephson. Desse modo, podemos afirmar que as conclusões derivadas de modelos relativamente simples, como o modelo fermiônico de *hot spots* ou o modelo de spin-férmion, podem ter grande impacto na descrição dos possíveis tipos de quebra espontânea de simetria presentes, por exemplo, na fase de pseudogap dos cupratos supercondutores.

2.6.3 Ordens de carga e spin uniformes

Uma outra quantidade que pode ser analisada no modelo fermiônico de *hot spots*, por meio do método de grupo de renormalização, são as chamadas susceptibilidades uniformes de carga e spin, que indicam, respectivamente, a presença ou não de *gaps* de carga e spin na região da superfície de Fermi em torno dos *hot spots* [76]. Para isso, devemos adicionar a seguinte Lagrangiana ao sistema

$$\mathcal{L}_{\text{ext}}^{(3)}[\psi^\dagger, \psi] = \sum_{\ell=1}^8 \mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^\ell \psi_{\ell,\sigma}^\dagger \psi_{\ell,\sigma}, \quad (2.170)$$

que envolve o produto da função de resposta uniforme $\mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^\ell = \mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^\ell(\mathbf{r}, t)$ pelo operador densidade de carga em cada um dos oito *hot spots*. Como era de se esperar, a Lagrangiana acima produz diagramas de Feynman divergentes, quando tenta-se acessar a física de baixa energia da função de correlação $\Gamma_{OD,\ell}^{(2,1)} = \langle T[\psi_{\ell,\sigma}^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi_{\ell,\sigma}(\mathbf{r}', t')] \rangle_{1PI}$ perturbativamente. Dessa forma, redefinindo os parâmetros microscópicos de $\mathcal{L}_{\text{ext}}^{(3)}[\psi^\dagger, \psi]$ em termos de parâmetros físicos ou renormalizados e invocando a condição de independência dos parâmetros da teoria inicial com a escala de energia Λ , obtemos que as funções uniformes renormalizadas, no espaço de momento e frequência, obedecem a seguinte equação de grupo de renormalização

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^{R\ell}(\Lambda) = -\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \delta \mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^{R\ell}(\Lambda) + \eta_\psi \mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^{R\ell}(\Lambda). \quad (2.171)$$

Em seguida, calculamos a contribuição até a ordem dois *loops* para a transformada de Fourier da função de correlação $\Gamma_{OD,\ell}^{(2,1)}$ e impomos então a prescrição $\Gamma_{OD,\ell}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0) \Big|_{\max\{q_0, \mathbf{v}_F \cdot \mathbf{q}\} = \Lambda} = -i \mathcal{X}_{\sigma,\sigma'}^{R\ell,\ell}(\Lambda)$ para definir os contra-termos $\delta \mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^{R\ell}(\Lambda)$ da equação acima. Na Figura 2.19, representamos esquematicamente os diagramas de Feynman que contribuem, nessa ordem de aproximação, para $\Gamma_{OD,\ell}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$, evidenciando o fato de que somente diagramas de dois *loops*, conhecidos na literatura como diagramas de Aslamazov-Larkin [67, 77], aparecem na sua série perturbativa. Dessa forma, definindo as funções respostas uniformes de carga e spin, respectivamente, por

$$\mathcal{X}_C = \delta_{\sigma,\sigma'} (\mathcal{X}_{\sigma,\sigma'}^1 - \mathcal{X}_{\sigma,\sigma'}^2), \quad (2.172)$$

$$\mathcal{X}_S = \sigma_{\sigma,\sigma'}^z (\mathcal{X}_{\sigma,\sigma'}^1 - \mathcal{X}_{\sigma,\sigma'}^2), \quad (2.173)$$

e substituindo, em seguida, o termo de dimensão anômala η_ψ na Eq. (2.171), obtém-se, depois de algum trabalho algébrico, o resultado

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \mathcal{X}_C = \frac{1}{2} [g_3^2 + g_{3p}^2 + g_{3x}^2 + (g_{3p} - g_{3x})^2] \mathcal{X}_C, \quad (2.174)$$

$$\Lambda \frac{d}{d\Lambda} \mathcal{X}_S = \frac{1}{2} [g_1^2 + g_{1x}^2 + g_{1c}^2 + (g_{3p} - g_{3x})^2] \mathcal{X}_S. \quad (2.175)$$

Como um teste do que foi derivado aqui para as funções respostas uniformes de carga \mathcal{X}_C e spin \mathcal{X}_S , verificamos que o limite unidimensional das Eqs. (2.174) e (2.175) logo acima implica na reprodução dos resultados em uma dimensão espacial para sistemas fermiônicos com interações quárticas entre as suas excitações [46, 78].

Por meio da solução numérica das Eqs. (2.174) e (2.175), em termos da variável $l = \ln(\Lambda_0/\Lambda)$, estabelecemos o comportamento das quantidades $|\mathcal{X}_C(l)|^2$ e $|\mathcal{X}_S(l)|^2$, que são conhecidas, respectivamente, como as susceptibilidades uniformes de carga de spin. De acordo com a Figura 2.20, a susceptibilidade uniforme de carga $|\mathcal{X}_C(l)|^2$ torna-se fortemente suprimida e renormaliza-se para zero no limite de baixa energia. Isso implica na existência de um gap no espectro de excitação de carga do modelo próximo aos *hot spots*. Por sua vez, esse gap é produzido devido a ação conjunta dos dois acoplamentos do tipo *Umklapp* g_3 e g_{3x} , que como vimos, renormalizam-se para valores finitos diferentes de zero para condições iniciais do tipo do modelo de Hubbard. Podemos então concluir que a natureza do estado fundamental do modelo fermiônico de *hot spots* é claramente isolante, concordando então com o fato de o peso da quasipartícula Z ser nulo nas regiões em torno dos *hot spots*.

A susceptibilidade uniforme de spin $|\mathcal{X}_S(l)|^2$, por sua vez, renormaliza-se mais lentamente do que $|\mathcal{X}_C(l)|^2$, mas tende a anular-se quando o fluxo de grupo de renormalização estende-se para a região de baixa energia do sistema. Como era de se esperar, isso indica que deve haver um gap no espectro de excitação de spin, o qual é produzido pela ação conjunta das interações do tipo *Umklapp* g_{3x} e a do tipo Cooper g_{1c} . Tais interações contribuem, respectiva-

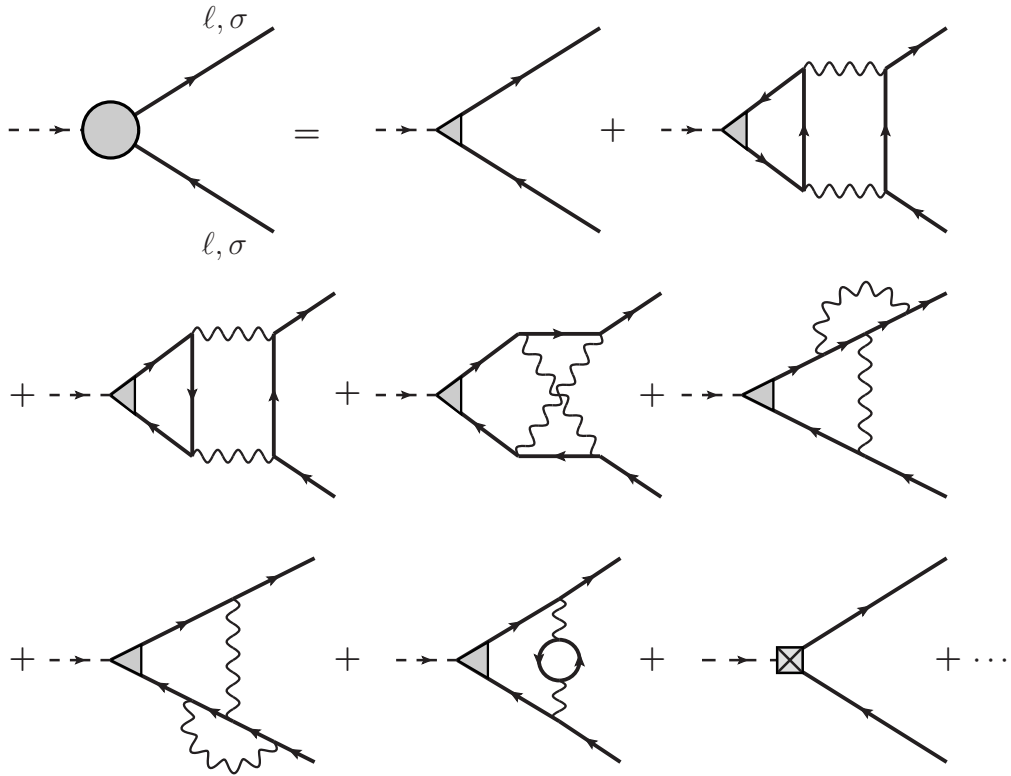


Figura 2.19: Expansão da função de correlação $\Gamma_{OD,\ell,\ell}^{R(2,1)}(\mathbf{q}, q_0)$ (círculo cinza do lado esquerdo da igualdade) em termos dos diagramas de Aslamazov-Larkin [67, 77] de dois *loops*. Essa função de correlação está relacionada às funções respostas uniformes renormalizadas $\mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^{R\ell}$, que são representadas aqui na forma de triângulos nos diagramas de Feynman, enquanto o contra-termo $\delta\mathcal{X}_{\sigma,\sigma}^{R\ell}$ dessas funções aparece indicado por um quadrado com um “×” inscrito no último diagrama da expansão.

mente, para a intensificação das correlações antiferromagnéticas com vetor de onda $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ e supercondutoras.

Os resultados de grupo de renormalização na aproximação de dois *loops* apresentados aqui sugerem então que o estado de baixa energia do modelo fermiônico de *hot spots* é um líquido isolante com gap de spin, ou seja, ele não possui quebra espontânea de simetria assim como quasipartículas fermiônicas bem definidas, em completa conexão com as conclusões de Furukawa e Rice [46]. Contudo, nesse caso, os resultados derivados da aproximação de um *loop* desse trabalho comportam-se de maneira contraditória, uma vez que o parâmetro de ordem para a fase onda de densidade de spin com simetria s diverge para uma certa escala de energia Λ_c , enquanto a susceptibilidade uniforme de spin $|\mathcal{X}_S(l)|^2$ anula-se na mesma região de energia.

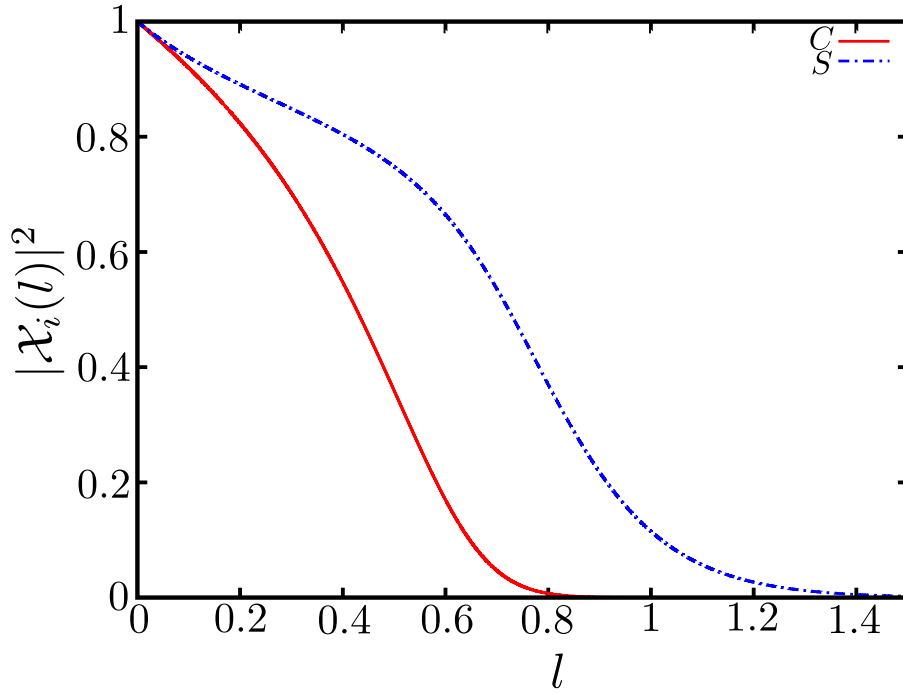


Figura 2.20: Fluxo do grupo de renormalização das susceptibilidades uniformes de carga (C) e spin (S) do modelo fermiônico de *hot spots* na aproximação de dois *loops*, com as condições iniciais $g_{iR}(0) = 1/2$ para os acoplamentos renormalizados.

A inclusão de flutuações quânticas até a ordem de dois *loops*, no modelo fermiônico de *hot spots*, resolve essa contradição, com a demonstração da finitude o parâmetro de ordem χ_{ODS}^s e a presença de um gap de spin no sistema, quando o mesmo aproxima-se do ponto fixo PF_1 no regime infravermelho.

O estado exibido pelo modelo fermiônico de *hot spots*, a segundo a análise do grupo de renormalização na aproximação de dois *loops*, compartilha as mesmas características do estado de líquido nodal observado para o cuprato $Bi_2Sr_2CaCu_2O_{8+\delta}$ levemente dopado com portadores de carga do tipo buraco [79]. Esse estado aparece na região de transição entre a fase isolante de Mott e a fase supercondutora, com o fator de estrutura do seu gap possuindo a mesma simetria do gap supercondutor nesse material, ou seja, a simetria $d_{x^2-y^2}$. Fazendo uma analogia entre as propriedades do modelo de *hot spots* e as do modelo de Hubbard de duas cadeias [53, 54], onde o gap de spin está também presente, podemos dizer que a física de baixa energia do modelo fermiônico de *hot spots* suporta a ideia de pares de Cooper pré-formados.

Além do mais, a supressão das susceptibilidades uniformes de carga e spin pode indicar um truncamento da superfície de Fermi nos *hot spots*, levando à formação de arcos fermiônicos, ou também indicar a sua reconstrução, acarretando na formação de *pockets*. Portanto, as propriedades de baixa energia do modelo fermiônico de *hot spots* podem, possivelmente, ter algumas similaridades com a fenomenologia dos cupratos supercondutores, que é observada para altas temperatura na região sub-dopada do seu diagrama eletrônico de fases.

Capítulo 3

Competição entre a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} e a fase de carga com simetria $d_{x^2-y^2}$ na direção da diagonal em um modelo bidimensional com *hot spots*

Une fourmi de dix-huit mètres

Avec un chapeau sur la tête

Ça n'existe pas! Ça n'existe pas!

Et pourquoi pas?

Robert Desnos

Neste capítulo, iniciamos a discussão do modelo de três bandas (ou modelo de Emery), que descreve as interações do tipo de Hubbard entre as excitações fermiônicas localizadas nos orbitais do cobre e do oxigênio em uma célula unitária semelhante à dos cupratos supercondutores no regime subdopado. A nossa abordagem aqui envolve a formulação de uma teoria efetiva de baixa energia para esse modelo que descreve a competição entre a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} – proposta há uma década atrás por Varma [10] e detectada em experimentos de difração de nêutrons [8] – com a ordem de carga do tipo onda de densidade quadrupolar com simetria $d_{x^2-y^2}$, que foi prevista por diversos modelos que tentam descrever a fase de pseudogap dos cupratos supercondutores [17, 19, 24, 26, 27]. Através da análise das soluções de campo médio para os parâmetros de ordem dessas fases, tentaremos resolver a aparente contradição

entre teoria e experimento no que se refere à ausência modulações de carga com vetor de onda na direção da diagonal da zona de Brillouin nesses materiais. Os resultados apresentados neste capítulo decorrem do nosso trabalho publicado na referência [28].

3.1 Modelo de três bandas

Nesta seção, definimos a parte quadrática e interagente da Hamiltoniana de um modelo de três bandas (o chamado modelo de Emery) \mathcal{H} [80, 81], relevante para a descrição da região sub-dopada do diagrama de fases dos cupratos supercondutores, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & -t_{pd} \sum_{i,\sigma} \sum_{\nu} (\hat{d}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{i+\hat{\nu}/2,\sigma} + c.c.) - t_{pp} \sum_{i,\sigma} \sum_{\langle \nu,\nu' \rangle} (\hat{p}_{i+\hat{\nu}/2,\sigma}^{\dagger} \hat{p}_{i+\hat{\nu}'/2,\sigma} + c.c.) \\ & + (\varepsilon_d - \mu) \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma}^d + \frac{1}{2} (\varepsilon_p - \mu) \sum_{i,\sigma} \sum_{\nu} \hat{n}_{i+\hat{\nu}/2,\sigma}^p, \end{aligned} \quad (3.1)$$

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = U_d \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow}^d \hat{n}_{i,\downarrow}^d + \frac{U_p}{2} \sum_{i,\nu} \hat{n}_{i+\hat{\nu}/2,\uparrow}^p \hat{n}_{i+\hat{\nu}/2,\downarrow}^p + V_{pd} \sum_{i,\nu} \sum_{\sigma,\sigma'} \hat{n}_{i,\sigma}^d \hat{n}_{i+\hat{\nu}/2,\sigma'}^p. \quad (3.2)$$

A Hamiltoniana $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{int}}$ descreve o movimento de férmions de spin 1/2 nos orbitais do cobre [$\text{Cu}(3d_{x^2-y^2})$] e do oxigênio [$\text{O}(2p_x)$ e $\text{O}(2p_y)$], que estão localizados na célula unitária de CuO_2 (veja Figura 3.1). As quantidades $\hat{d}_{i,\sigma}^{\dagger}$ e $\hat{d}_{i,\sigma}$ são, respectivamente, os operadores de criação e aniquilação dos férmions localizados no sítio i com spin σ do orbital do Cu e os operadores de criação e aniquilação de férmions no sítio $i+\hat{\nu}/2$ ($\nu = x, y$) com spin σ do orbitais do O. Além disso, $\hat{n}_{i,\sigma}^d$ e $\hat{n}_{i+\hat{\nu}/2,\sigma}^p$ correspondem, respectivamente, aos operadores números para partículas situadas nos orbitais do Cu e O. O modelo também leva em conta os parâmetros do tipo *hopping* de pares (t_{pd} e t_{pp}), interações no mesmo sítio (U_d e U_p) e entre primeiros vizinhos (V_{pd}) na rede bidimensional formada pelos átomos de Cu e O. Por sua vez, os parâmetros ε_d e ε_p são, nessa ordem, as energias dos orbitais do Cu e O, e μ é o potencial químico que regula a densidade eletrônica no sistema.

3.2 Derivação do modelo de spin-férmion na presença de correntes de loop a partir do modelo de três bandas

Nesta seção, mostraremos como construir uma teoria efetiva de baixa energia descre-

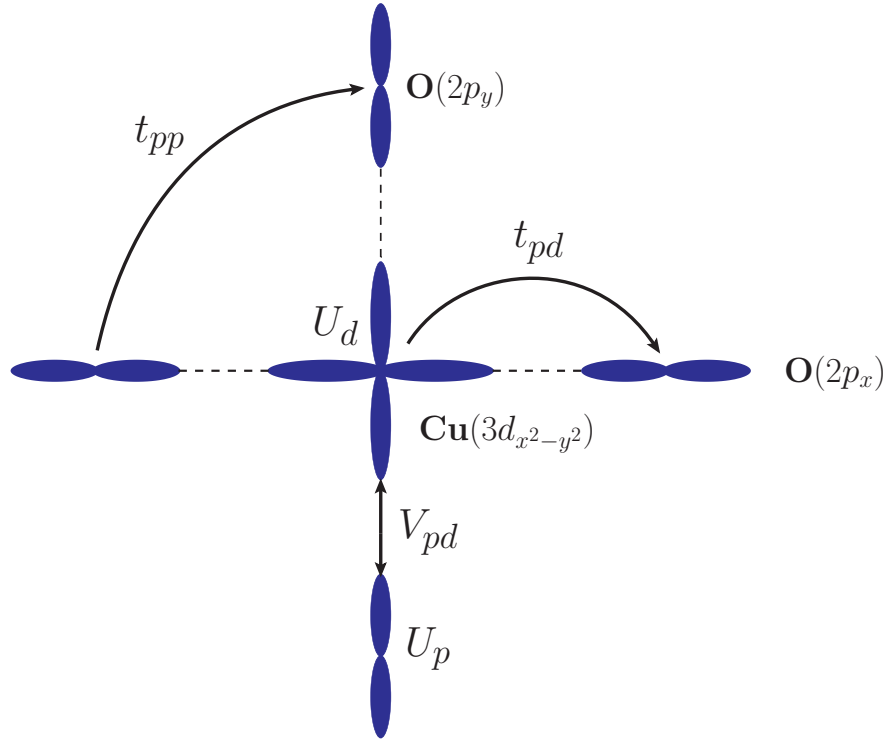


Figura 3.1: Estrutura orbital e os tipos de interação presentes no modelo de três bandas para a célula unitária de CuO₂.

vendo a interação de elétrons de condução por meio de flutuações antiferromagnéticas e também a formação de correntes eletrônicas estacionárias na célula unitária de CuO₂. Para isso, nós primeiramente desacoplamos a interação U_d da Hamiltoniana \mathcal{H}_{int} no canal de spin usando a chamada transformada de Hubbard-Stratonovich. Como resultado, a ação resultante torna-se

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)}[d, \phi] &= \lambda \int d\tau \sum_i d_{i,\sigma}^\dagger \phi_i \cdot \sigma_{\sigma,\sigma'} d_{i,\sigma'} e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_i} + \frac{1}{2} \int d\tau d^2\mathbf{r} \left[\frac{1}{v_s^2} (\partial_\tau \phi)^2 + (\nabla \phi)^2 + m_a \phi^2 + \frac{g}{2} ((\phi)^2)^2 \right], \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde o campo bosônico $\phi_i = (\phi_i^x, \phi_i^y, \phi_i^z)$ corresponde ao parâmetro de ordem para a fase onda de densidade de spin (ODS) com vetor de onda antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, v_s é a velocidade de propagação das ondas de spin, g representa a auto-interação do campo bosônico ϕ e m_a é a massa dos paramagnons (ou das flutuações de ODS), que tende a se anular no ponto crítico quântico da teoria. As matrizes σ_a ($a = 1, 2, 3$) são as usuais matrizes de Pauli, definidas no

espaço de spin σ como

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_\sigma, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}_\sigma, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_\sigma. \quad (3.4)$$

Observe que a Eq. (3.3) foi derivada integrando os férmions de altas energias no orbital do Cu, resultando em uma teoria efetiva $\mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)}[d, \phi]$ descrevendo o acoplamento λ , do tipo Yukawa, entre as excitações fermiônicas de baixa energia com as flutuações antiferromagnéticas ODS, que portanto corresponde à parte interagente do chamado modelo de spin-férmion em duas dimensões espaciais proposto por Abanov e Chubukov [14, 15, 16].

Neste ponto, voltamos a nossa atenção para o termo de interação V_{pd} na Eq. (3.2). Ele pode ser reescrito da seguinte forma [10, 82]

$$V_{pd} \sum_{i,\nu} \sum_{\sigma,\sigma'} \hat{n}_{i,\sigma}^d \hat{n}_{i+\hat{\nu}/2,\sigma'}^p = -V_{pd} \sum_i \sum_{j=1}^4 \sum_{\sigma,\sigma'} \mathcal{A}_{i,\sigma}^{\dagger(j)} \mathcal{A}_{i,\sigma'}^{(j)}, \quad (3.5)$$

onde os operadores $\mathcal{A}_{i,\sigma}^{\dagger(j)}$ no lado direito da igualdade acima são dados por

$$\mathcal{A}_{i,\sigma}^{\dagger(1,2)} = \frac{1}{2} [(\hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i+\hat{x}/2,\sigma} + \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i-\hat{x}/2,\sigma}) \pm (\hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i+\hat{y}/2,\sigma} + \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i-\hat{y}/2,\sigma})], \quad (3.6)$$

$$\mathcal{A}_{i,\sigma}^{\dagger(3,4)} = \frac{i}{2} [(\hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i+\hat{x}/2,\sigma} - \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i-\hat{x}/2,\sigma}) \pm (\hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i+\hat{y}/2,\sigma} - \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i-\hat{y}/2,\sigma})]. \quad (3.7)$$

Como primeiramente demonstrado por Varma [10], somente os parâmetros de ordem associados aos campos fermiônicos $\mathcal{A}_{i,\sigma}^{(2)}$, $\mathcal{A}_{i,\sigma}^{(3)}$ e $\mathcal{A}_{i,\sigma}^{(4)}$ levam à formação de estados de correntes de *loop* estacionárias nos planos de CuO_2 e, portanto, à quebra espontânea da simetria discreta de reversão temporal \mathbb{Z}_2 . A ordem de corrente de *loop* com parâmetro de ordem definido em termos do operador $\mathcal{A}_{i,\sigma}^{(2)}$ é comumente chamada de fase de corrente de *loop* do tipo Θ_I (CL- Θ_I), enquanto a ordem de corrente de *loop* com parâmetro de ordem definido para $\mathcal{A}_{i,\sigma}^{(3)}$ ou $\mathcal{A}_{i,\sigma}^{(4)}$ é conhecida na literatura como fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} (CL- Θ_{II}) (veja Figura 3.2). Em decorrência da interpretação de alguns experimentos realizados na fase de pseudogap de certas famílias de cupratos supercondutores como uma evidência em favor da fase de CL- Θ_{II} [8, 9, 83, 84], a análise apresentada nesta tese não abordará o efeito da fase de CL- Θ_I no sistema. Tendo isso em mente, o desacoplamento por meio da transformada de Hubbard-Stratonovich

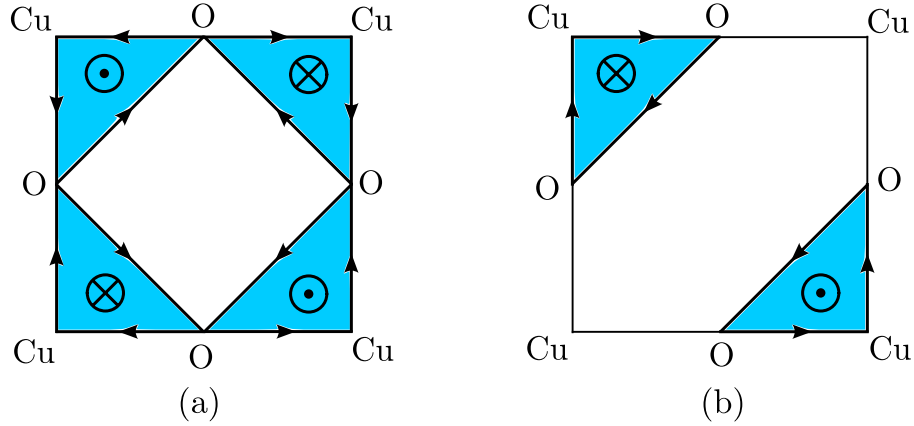


Figura 3.2: Configuração das correntes de *loop* na célula unitária de CuO_2 para as fases de $\text{CL-}\Theta_I$ (a) e $\text{CL-}\Theta_{II}$ (b) proposta por Varma para explicar algumas das propriedades físicas do estado de pseudogap nos cupratos supercondutores. Em ambas as figuras (a) e (b), os símbolos (\odot) e (\otimes) indicam a orientação dos momentos magnéticos locais gerados pelas correntes de *loop*.

da interação na Eq. (3.5) para o campo fermiônico $\mathcal{A}_{i,\sigma}^{(3)}$ é dada por

$$\exp\left\{V_{pd} \int d\tau \sum_i \sum_{\sigma,\sigma'} \mathcal{A}_{i,\sigma}^{\dagger(3)} \mathcal{A}_{i,\sigma'}^{(3)}\right\} = \int \mathcal{D}[R_{II}, \Theta_{II}] \exp\left\{\int d\tau \sum_{i,\sigma} \left[-\frac{R_{II}^2}{2V_{pd}} + R_{II} e^{i\Theta_{II}} \mathcal{A}_{i,\sigma}^{\dagger(3)} + R_{II} e^{-i\Theta_{II}} \mathcal{A}_{i,\sigma}^{(3)}\right]\right\}, \quad (3.8)$$

onde $R_{II} e^{i\Theta_{II}} = V_{pd} \sum_{\sigma} \langle \mathcal{A}_{i,\sigma}^{(3)} \rangle$ é um parâmetro de ordem complexo descrevendo a possibilidade de quebra da simetria de reversão temporal \mathbb{Z}_2 para a fase de $\text{CL-}\Theta_{II}$. Aqui o parâmetro Θ_{II} foi determinado na aproximação de campo médio como sendo $\Theta_{II} = \pm\pi/2$ [10]. No que se segue, usaremos o valor positivo desse parâmetro (ou seja, faremos $\Theta_{II} = \pi/2$), uma vez que esse valor de Θ_{II} , de acordo com a referência [10], minimiza a energia livre do sistema.

Uma vez que o nosso principal objetivo aqui é estudar as propriedades de baixa energia do modelo de três bandas, nós iremos analisar somente a banda de menor energia do sistema, que é definida através da diagonalização da Hamiltoniana não-interagente \mathcal{H}_0 na Eq. (3.1). Para escolhas fisicamente aceitáveis dos parâmetros do modelo, a banda de baixa energia dará origem à superfície de Fermi mostrada na Figura 3.3. A contribuição mais importante para esse modelo efetivo é devida aos graus de liberdade fermiônicos com vetores de onda perto dos chamados *hot spots*, ou seja, pontos do espaço recíproco definidos como a intersecção da zona de Brillouin com a zona antiferromagnética do modelo. Como consequência, nós restringiremos

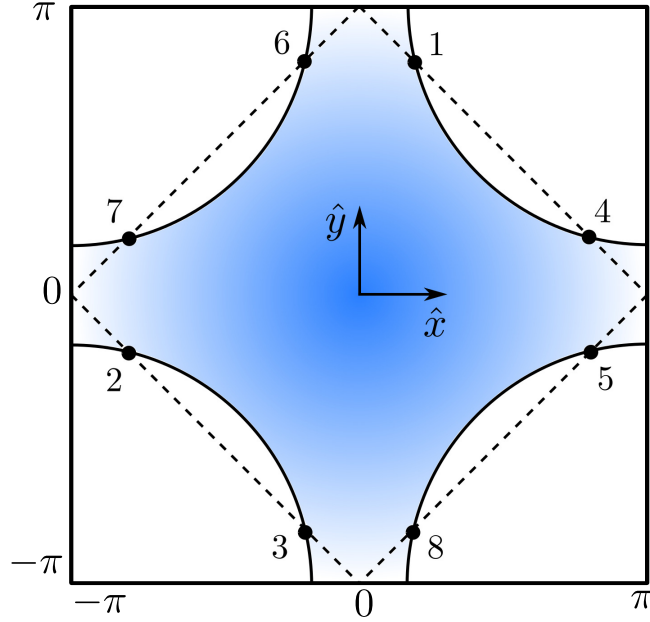


Figura 3.3: Representação da zona de Brillouin com a superfície de Fermi (contorno da região em azul) que caracteriza a fase de líquido de Fermi dos cupratos supercondutores. Os pequenos círculos pretos correspondem aos chamados *hot spots*, que são definidos como a intersecção da superfície de Fermi com a zona antiferromagnética (linhas tracejadas). Na notação usada nesta figura, o *hot spot* indexado como 1 possui coordenadas no espaço recíproco definidas pelo vetor de onda dado por $\mathbf{k}_1 = (K_-, K_+)$, onde as suas componentes estão relacionadas pela condição $K_- + K_+ = \pi$. As coordenadas dos outros *hot spots* na zona de Brillouin podem ser obtidas por meio de \mathbf{k}_1 , através do uso de operações de simetria de rotação e reflexão.

a partir de agora a análise do presente modelo aos graus de liberdade na vizinhança desses pontos. Com isso em mente e para facilitar a compreensão da teoria a ser apresentada, nós fazemos uso dos seguintes spinores fermiônicos

$$d = \left(\left(\begin{array}{c} (d_1) \\ (d_2)_{\Sigma} \\ (d_3) \\ (d_4)_{\Sigma} \end{array} \right)_{\Lambda} \right)_L, \quad p_x = \left(\left(\begin{array}{c} (p_{x1}) \\ (p_{x2})_{\Sigma} \\ (p_{x3}) \\ (p_{x4})_{\Sigma} \end{array} \right)_{\Lambda} \right)_L, \quad p_y = \left(\left(\begin{array}{c} (p_{y1}) \\ (p_{y2})_{\Sigma} \\ (p_{y3}) \\ (p_{y4})_{\Sigma} \end{array} \right)_{\Lambda} \right)_L, \quad (3.9)$$

onde $d_i = \begin{pmatrix} d_{i,\uparrow} \\ d_{i,\downarrow} \end{pmatrix}_{\sigma}$, $p_{xi} = \begin{pmatrix} p_{xi,\uparrow} \\ p_{xi,\downarrow} \end{pmatrix}_{\sigma}$ e $p_{yi} = \begin{pmatrix} p_{yi,\uparrow} \\ p_{yi,\downarrow} \end{pmatrix}_{\sigma}$ são, por sua vez, spinores de duas componentes no espaço de spin σ definidos em termos dos chamados campos de Grassmann $d_{i,\sigma}$ e $p_{x(y)i,\sigma}$, que descrevem, respectivamente, as excitações fermiônicas nos orbitais do Cu e do O. Os símbolos Σ , Λ e L na Eq. (3.9) designam espaços de pseudospin independentes com

simetria $SU(2)$, que são necessários para descrever os termos de espalhamento da Hamiltoniana do modelo de três bandas entre os oito *hot spots* [19], representados na Figura 3.3. Levando em consideração os resultados nas Eqs. (3.1), (3.3), (3.8) e (3.9) e, além disso, linearizando o espectro excitação do modelo de três bandas em torno dos *hot spots*, nós obtemos que a ação total do sistema, que descreve a interação entre os férmions localizados no orbital do Cu com as flutuações antiferromagnéticas (paramágnons) e a possibilidade de formação da fase de CL- Θ_{II} , pode ser escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{S}[p_x, p_y, d, \phi; n_p, R_{II}] \\
 &= \mathcal{S}_0[p_x, p_y, d] + \mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)}[d, \phi] + \mathcal{S}_{\text{int}}^{(2)}[p_x, p_y, d; n_p, R_{II}] \\
 &= \int (p_x^\dagger(X), p_y^\dagger(X), d^\dagger(X)) \begin{pmatrix} \partial_\tau + \xi_p & \hat{\Gamma}_1 + \hat{\Gamma}_2(-i\nabla) & \hat{\Gamma}_{1x} - \hat{\Gamma}_{2x}i\partial_x \\ \hat{\Gamma}_1 + \hat{\Gamma}_2(-i\nabla) & \partial_\tau + \xi_p & \hat{\Gamma}_{1y} - \hat{\Gamma}_{2y}i\partial_y \\ \hat{\Gamma}_{1x} - \hat{\Gamma}_{2x}i\partial_x & \hat{\Gamma}_{1y} - \hat{\Gamma}_{2y}i\partial_y & \partial_\tau + \xi_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x(X) \\ p_y(X) \\ d(X) \end{pmatrix} dX \\
 &+ \lambda \int [d^\dagger(X)\Sigma_1\phi(X) \cdot \sigma d(X)] dX + \frac{1}{2} \int \left[\frac{1}{v_s^2}(\partial_\tau\phi)^2 + (\nabla\phi)^2 + m_a\phi^2 + \frac{g}{2}(\phi^2)^2 \right] dX \\
 &+ \int \left(\frac{R_{II}^2}{V_{pd}} - \frac{n_p^2}{8}U_p \right) dX, \tag{3.10}
 \end{aligned}$$

onde $\xi_p \equiv \varepsilon_p + \frac{n_p}{4}U_p - \mu$, $\xi_d \equiv \varepsilon_d - \mu$, $n_p = \sum_\sigma \langle \hat{n}_{i+\nu/2,\sigma}^p \rangle$ corresponde ao valor de campo médio da densidade fermiônica nos orbitais dos átomos de O e ambas as coordenadas temporal e espacial do modelo foram condensadas em termos de uma única variável $X = (\tau, \mathbf{r})$. As matrizes $\hat{\Gamma}_1$, $\hat{\Gamma}_2$, $\hat{\Gamma}_{1x(y)}$ e $\hat{\Gamma}_{2x(y)}$ na Eq. (3.10) acima são todas diagonais no espaço de produto tensorial $\Sigma \otimes \Lambda \otimes L$, sendo dadas em termos dos parâmetros do modelo de três bandas e do parâmetro de ordem R_{II} da fase de CL- Θ_{II} , como pode ser visto no Apêndice A desta tese. Neste ponto, fazemos uso da notação de Balian-Werthamer [66] e introduzimos os seguintes spinores fermiônicos de trinta e duas componentes

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} d^* \\ i\sigma_2 d \end{pmatrix}_\tau, \Psi^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (-d^t, -d^\dagger i\sigma_2)_\tau, \tag{3.11}$$

$$P_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} p_x^* \\ i\sigma_2 p_x \end{pmatrix}_\tau, P_x^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (-p_x^t, -p_x^\dagger i\sigma_2)_\tau, \tag{3.12}$$

$$P_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} p_y^* \\ i\sigma_2 p_y \end{pmatrix}_\tau, P_y^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (-p_y^t, -p_y^\dagger i\sigma_2)_\tau, \tag{3.13}$$

que evidentemente pertencem ao espaço de partícula-buraco τ . Além desses spinores, utilizaremos aqui os spinores de conjugação de carga $\bar{\Psi}$, \bar{P}_x e \bar{P}_y , que podem ser construídos através do produto da matriz de Pauli τ_3 pelos termos nas Eqs. (3.11)–(3.13), ou seja,

$$\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \tau_3, \quad \bar{P}_x = P_x^\dagger \tau_3, \quad \bar{P}_y = P_y^\dagger \tau_3, \quad (3.14)$$

Portanto, fazendo uso das definições nas Eqs. (3.11)–(3.14), a ação total do sistema na Eq. (3.10) pode ser reescrita formalmente da seguinte maneira

$$\begin{aligned} & \mathcal{S}[P_x, P_y, \Psi, \phi; n_p, R_{II}] \\ &= \int (\bar{P}_x(X), \bar{P}_y(X), \bar{\Psi}(X)) \begin{pmatrix} -\partial_\tau + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_1 \tau_3 - \hat{\Gamma}_2 (-i\nabla) & \hat{\Gamma}_{1x} \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2x} i\partial_x \\ \hat{\Gamma}_1 \tau_3 - \hat{\Gamma}_2 (-i\nabla) & -\partial_\tau + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_{1y} \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2y} i\partial_y \\ \hat{\Gamma}_{1x} \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2x} i\partial_x & \hat{\Gamma}_{1y} \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2y} i\partial_y & -\partial_\tau + \xi_d \tau_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_x(X) \\ P_y(X) \\ \Psi(X) \end{pmatrix} dX \\ &+ \lambda \int [\bar{\Psi}(X) \Sigma_1 \phi(X) \cdot \boldsymbol{\sigma}^t \Psi(X)] dX + \frac{1}{2} \int \left[\frac{1}{v_s^2} (\partial_\tau \phi)^2 + (\nabla \phi)^2 + m_a \phi^2 + \frac{g}{2} (\phi^2)^2 \right] dX \\ &+ \int \left(\frac{R_{II}^2}{V_{pd}} - \frac{n_p^2}{8} U_p \right) dX. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Para a derivação das propriedades físicas do modelo efetivo de três bandas definido pela ação logo acima, integraremos primeiramente os graus de liberdade associados ao campo bosônico ODS na seguinte integral funcional para a função de partição

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= \int \exp\left\{-\mathcal{S}[P_x, P_y, \Psi, \phi; n_p, R_{II}]\right\} \mathcal{D}[P_x, P_y, \Psi, \phi] \\ &= \int \exp\left\{-\mathcal{S}[P_x, P_y, \Psi; n_p, R_{II}]\right\} \mathcal{D}[P_x, P_y, \Psi]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Contudo, antes de proceder com isso, desprezaremos, daqui em diante, a auto-interação g do campo bosônico ϕ no presente modelo. Isso pode ser justificado recorrendo à análise de grupo de renormalização do operador $(g/2)(\phi^2)^2$. De fato, ela mostra que acoplamento g flui assintoticamente para zero no limite de baixa energia do sistema [19]. Como resultado, a função de partição do modelo de três bandas pode ser calculada analiticamente quando o

campo bosônico ϕ é integrado na Eq. (3.16), dando origem à seguinte ação

$$\begin{aligned} & \mathcal{S}[P_x, P_y, \Psi, \phi; n_p, R_{II}] \\ &= \int (\bar{P}_x(X), \bar{P}_y(X), \bar{\Psi}(X)) \begin{pmatrix} -\partial_\tau + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_1 \tau_3 - \hat{\Gamma}_2 (-i\nabla) & \hat{\Gamma}_{1x} \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2x} i\partial_x \\ \hat{\Gamma}_1 \tau_3 - \hat{\Gamma}_2 (-i\nabla) & -\partial_\tau + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_{1y} \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2y} i\partial_y \\ \hat{\Gamma}_{1x}^\dagger \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2x}^\dagger i\partial_x & \hat{\Gamma}_{1y}^\dagger \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2y}^\dagger i\partial_y & -\partial_\tau + \xi_d \tau_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_x(X) \\ P_y(X) \\ \Psi(X) \end{pmatrix} dX \\ & - \frac{\lambda^2}{2} \int [\bar{\Psi}(X) \Sigma_1 \boldsymbol{\sigma}^t \Psi(X)] D(X - X') [\bar{\Psi}(X') \Sigma_1 \boldsymbol{\sigma}^t \Psi(X')] dX dX' + \int \left(\frac{R_{II}^2}{V_{pd}} - \frac{n_p^2}{8} U_p \right) dX. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Aqui, a função $D(X - X')$, que aparece como um potencial no termo de interação fermiônico quártico, corresponde ao propagador bosônico livre da teoria na Eq. (3.15). Calculando a sua transformada de Fourier, obtemos a expressão $D(\omega, \mathbf{k}) = (\omega^2/v_s^2 + |\mathbf{k}|^2 + m_a)^{-1}$, onde o parâmetro m_a representa aqui a massa dos paramagnons, que tende a se anular no ponto crítico quântico antiferromagnético do modelo, e ω corresponde à frequência dos modos bosônicos no formalismo de temperatura finita de Matsubara.

Seguindo uma estratégia semelhante a que foi feita para o modelo de spin-férmion bidimensional no trabalho de Efetov *et al.* [19], a nossa análise do modelo de três bandas prossegue, novamente, com o desacoplamento da interação fermiônica quártica na Eq. (3.17) por meio de uma transformada de Hubbard-Stratonovich e com a introdução de um parâmetro de ordem $\hat{\mathcal{M}}(X, X')$ para a ordem emaranhada com simetria $d_{x^2-y^2}$ envolvendo a fase supercondutora (SC) do tipo singlete e a ordem de carga do tipo onda de densidade quadrupolar (ODQ), cujo vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ aponta na direção da diagonal da zona de Brillouin. Antes de se fazer isso, é necessário, contudo, considerar a contribuição para propagador bosônico $D(\omega, \mathbf{k})$ produzida pelas excitações fermiônicas localizadas nos *hot spots*. Levando em conta essa contribuição, obtemos que o propagador bosônico efetivo do modelo de três bandas é dado por $D_{ef}(\omega, \mathbf{k}) = (\gamma|\omega| + |\mathbf{k}|^2 + m_a)^{-1}$, onde o parâmetro γ representa o termo de amortecimento de Landau, que controla a integridade das excitações fermiônicas do tipo quasipartícula no sistema. Em decorrência disso, a ação efetiva no limite de baixa energia do modelo pode ser

escrita da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{S}_{\text{ef}}[P_x, P_y, \Psi; n_p, R_{II}, \hat{\mathcal{M}}] \\
 &= \int (\bar{P}_x(X), \bar{P}_y(X), \bar{\Psi}(X)) \begin{pmatrix} -\partial_\tau + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_1 \tau_3 - \hat{\Gamma}_2(-i\nabla) & \hat{\Gamma}_{1x} \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2x} i \partial_x \\ \hat{\Gamma}_1 \tau_3 - \hat{\Gamma}_2(-i\nabla) & -\partial_\tau + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_{1y} \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2y} i \partial_y \\ \hat{\Gamma}_{1x}^\dagger \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2x}^\dagger i \partial_x & \hat{\Gamma}_{1y}^\dagger \tau_3 + \hat{\Gamma}_{2y}^\dagger i \partial_y & -\partial_\tau + \xi_d \tau_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_x(X) \\ P_y(X) \\ \Psi(X) \end{pmatrix} dX \\
 & - i \int \bar{\Psi}(X) \hat{\mathcal{M}}(X, X') \Psi(X') dX dX' + \frac{1}{2} \int J^{-1}(X - X') \text{Tr}[\hat{\mathcal{M}}(X, X') \Sigma_1 \hat{\mathcal{M}}(X', X) \Sigma_1] dX dX' \\
 & + \int \left(\frac{R_{II}^2}{V_{pd}} - \frac{n_p^2}{8} U_p \right) dX, \tag{3.18}
 \end{aligned}$$

onde definimos a função $J(X - X') = 3\lambda^2 D_{\text{ef}}(X - X')$ em termos do propagador bosônico efetivo para simplificar a expressão da ação do modelo de três bandas acima. De acordo com a nossa teoria, o parâmetro de ordem $\hat{\mathcal{M}}(X, X')$, representando aqui a fase emaranhada SC/ODQ com simetria $d_{x^2-y^2}$, possui no espaço de pseudospin $\Sigma \otimes \Lambda \otimes L$ seguinte estrutura

$$\hat{\mathcal{M}}(X, X') = b(X, X') \Sigma_3 \begin{pmatrix} 0 & \hat{u}_\tau \\ -\hat{u}_\tau^\dagger & 0 \end{pmatrix}_\Lambda, \text{ onde } \hat{u}_\tau = \begin{pmatrix} \Delta_{\text{ODQ}} & \Delta_{\text{SC}} \\ -\Delta_{\text{SC}}^* & \Delta_{\text{ODQ}}^* \end{pmatrix}_\tau, \tag{3.19}$$

$b(X, X')$ é uma função real que indica a extensão do gap produzido por essa ordem emaranhada e os fatores Δ_{SC} e Δ_{ODQ} determinam a relação de ordem de grandeza entre os parâmetros de ordem das fases supercondutora e onda de densidade quadrupolar de simetria $d_{x^2-y^2}$. Além disso, as matrizes \hat{u}_τ , que são definidas no espaço de partícula-buraco τ , pertencem ao grupo de simetria $\text{SU}(2)$ e, portanto, a condição $|\Delta_{\text{SC}}|^2 + |\Delta_{\text{ODQ}}|^2 = 1$, relacionando os fatores SC e ODQ do modelo, é sempre satisfeita. Observamos que embora o modelo de spin-férmion apresentado aqui envolva apenas os átomos de Cu da célula unitária de CuO_2 , o parâmetro de ordem $\hat{\mathcal{M}}(X, X')$ para a ordem emaranhada SC/ODQ na Eq. (3.19) não produz modulações de carga localizadas nos próprios átomos de Cu. De fato, esse parâmetro de ordem leva justamente à ocorrência de modulações de carga bidirecionais nas regiões da célula unitária de CuO_2 onde se localizam os átomos de O [19, 20, 22].

Em virtude da ação efetiva \mathcal{S}_{ef} do modelo de três bandas na Eq. (3.18) possuir forma quadrática, a energia livre do sistema pode ser facilmente derivada integrando os graus de liberdade fermiônicos na integral funcional para a função de partição e então aplicando a identidade

matricial $\text{Tr} \ln G^{-1} = \ln \det(G^{-1})$. De fato, seguindo esse procedimento, determinamos que a energia livre do sistema, em função das coordenadas espaço-temporais $X = (\tau, \mathbf{r})$, pode ser escrita como

$$\begin{aligned} & \frac{\mathcal{F}[T, n_p, R_{II}, \hat{\mathcal{M}}]}{T} \\ &= - \int \text{Tr} \ln[G^{-1}(X, X')] dX dX' + \frac{1}{2} \int J^{-1}(X - X') \text{Tr}[\hat{\mathcal{M}}(X, X') \Sigma_1 \hat{\mathcal{M}}(X', X) \Sigma_1] dX dX' \\ &+ \int \left(\frac{R_{II}^2}{V_{pd}} - \frac{n_p^2}{8} U_p \right) dX, \end{aligned} \quad (3.20)$$

onde $G^{-1}(X, X')$ é a transformada de Fourier da função matricial $G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$, que é aqui definida como

$$G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_1 \tau_3 - \hat{\Gamma}_2(\mathbf{k}) & \hat{\Gamma}_{1x} \tau_3 - \hat{\Gamma}_{2x} k_x \\ \hat{\Gamma}_1^\dagger \tau_3 - \hat{\Gamma}_2^\dagger(\mathbf{k}) & -i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_{1y} \tau_3 - \hat{\Gamma}_{2y} k_y \\ \hat{\Gamma}_{1x}^\dagger \tau_3 - \hat{\Gamma}_{2x}^\dagger k_x & \hat{\Gamma}_{1y}^\dagger \tau_3 - \hat{\Gamma}_{2y}^\dagger k_y & -i\varepsilon_n + \xi_d \tau_3 - i\hat{\mathcal{M}}(\varepsilon_n, \mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (3.21)$$

A equação auto-consistente para $b(X, X')$ é obtida através da minimização da energia livre $\mathcal{F}[T, n_p, R_{II}, \hat{\mathcal{M}}]$ com respeito a esse parâmetro de ordem, ou seja, por meio da equação funcional $\delta\mathcal{F}/\delta b = 0$. Em decorrência disso, obtemos que a equação para o parâmetro de ordem $b(X, X')$ é dada por

$$\begin{aligned} & \text{Tr} \left\{ \Sigma_3 \begin{pmatrix} 0 & \hat{u}_\tau \\ -\hat{u}_\tau^\dagger & 0 \end{pmatrix}_\Lambda \Sigma_1 \Sigma_3 \begin{pmatrix} 0 & \hat{u}_\tau \\ -\hat{u}_\tau^\dagger & 0 \end{pmatrix}_\Lambda \Sigma_1 \right\} b(X, X') = J(X - X') \\ & \times \text{Tr} \left\{ \frac{1}{G^{-1}(X, X')} \frac{\partial G^{-1}(X, X')}{\partial b(X, X')} \right\}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Calculando a operação de traço (Tr) no lado esquerdo da igualdade na equação acima sobre o produto de matrizes definidas no espaço tensorial $\Sigma \otimes \Lambda \otimes L \otimes \tau$, a equação para $b(X, X')$ pode ser reescrita da seguinte forma

$$\begin{aligned} b(X, X') &= \frac{1}{16} J(X - X') \text{Tr} \left\{ G(X, X') \frac{\partial G^{-1}(X, X')}{\partial b(X, X')} \right\} \\ &= \frac{1}{16} J(X - X') \text{Tr} \left\{ G(X, X') i\Pi_3 \otimes \Sigma_3 \begin{pmatrix} 0 & \hat{u}_\tau \\ -\hat{u}_\tau^\dagger & 0 \end{pmatrix}_\Lambda \right\}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

onde Π_3 é um projetor para o espaço do modelo de três bandas, cuja definição é a seguinte

$$\Pi_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3.24)$$

Neste ponto, consideraremos que a solução para o parâmetro de ordem da fase emaranhada SC/ODQ e a função de Green $G(X, X')$ sejam, respectivamente, do tipo $b(X, X') = b(X - X')$ e $G(X, X') = G(X - X')$. Isso é justificado aqui pelo fato de estarmos lidando com um sistema isotrópico nas coordenadas espaciais e temporal. Em seguida, aplicamos uma transformada de Fourier para o parâmetro de ordem $b(X - X')$ e obtemos, em termos das coordenadas de frequência (ε_n) e momento (\mathbf{k}), a seguinte equação

$$b(\varepsilon_n, \mathbf{k}) = \frac{T}{16} \sum_{\varepsilon'_n} \int J(\varepsilon_n - \varepsilon'_n, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \text{Tr} \left\{ [G^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')]^{-1} \frac{\partial G^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')}{\partial b(\varepsilon'_n, \mathbf{k}')} \right\} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (3.25)$$

onde aqui T corresponde à temperatura do sistema. Com o intuito de escrever a equação para $b(\varepsilon_n, \mathbf{k})$ de uma forma mais conveniente, devemos calcular o traço (Tr) no lado direito da igualdade na Eq. (3.25). Esse problema pode ser resolvido fazendo-se uso da seguinte identidade

$$\text{Tr} \left\{ [G^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')]^{-1} \frac{\partial G^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')}{\partial b(\varepsilon'_n, \mathbf{k}')} \right\} = \frac{1}{\det[G^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')] } \frac{\partial \det[G^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')] }{\partial b(\varepsilon'_n, \mathbf{k}')} . \quad (3.26)$$

De fato, substituindo a Eq. (3.26) na Eq. (3.25), nós finalmente determinamos a equação auto-consistente desejada para o parâmetro de ordem $b(\varepsilon_n, \mathbf{k})$, que é dada por

$$b(\varepsilon_n, \mathbf{k}) = \frac{3\lambda^2 T}{16} \sum_{\varepsilon'_n} \int \frac{D_{ef}(\varepsilon_n - \varepsilon'_n, \mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\det[G^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')] } \frac{\partial \det[G^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')] }{\partial b(\varepsilon'_n, \mathbf{k}')} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (3.27)$$

onde fizemos a substituição $J(\varepsilon_n - \varepsilon'_n, \mathbf{k} - \mathbf{k}') = 3\lambda^2 D_{ef}(\varepsilon_n - \varepsilon'_n, \mathbf{k} - \mathbf{k}')$ na equação acima.

Agora voltamos nossa atenção para o cálculo do determinante $\det[G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]$ na Eq. (3.27). Uma vez que a função matricial de Green $G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$, definida acima, é formada por blocos matriciais distintos (ver Eq. (3.21)), o cálculo do determinante $\det[G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]$, em termos dos parâmetros do modelo de três bandas, será facilitado pelo emprego das fórmulas

$$\det \begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{B} \\ \hat{C} & \hat{D} \end{pmatrix} = \det(\hat{A}) \det(\hat{D} - \hat{C}\hat{A}^{-1}\hat{B}), \quad (3.28)$$

$$\det(\hat{A} \otimes \hat{D}) = [\det(\hat{A})]^m [\det(\hat{D})]^n, \quad (3.29)$$

onde \hat{A} e \hat{D} representam, respectivamente, matrizes quadradas de dimensões $n \times n$ e $m \times m$, e com a matriz \hat{A} na Eq. (3.28) possuindo determinante $\det(\hat{A})$ não nulo. De fato, desconsiderando o setor supercondutor do parâmetro de ordem para a fase emaranhada SC/ODQ

($\Delta_{\text{SC}} = \Delta_{\text{SC}}^* = 0$) e aplicando as fórmulas acima para a função matricial de Green $G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$, obtemos, depois de algumas manipulações algébricas, que o determinante $\det[G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]$ é igual a

$$\det[G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})] = \prod_{\ell=1}^2 \prod_{m=1}^2 \mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}), \quad (3.30)$$

onde $\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ são funções reais bem comportadas dos parâmetros do modelo de três bandas, que são explicitamente calculadas no Apêndice B desta tese. Portanto, substituindo o resultado da Eq. (3.30) na Eq. (3.27), a equação auto-consistente para o parâmetro de ordem $b(\varepsilon_n, \mathbf{k})$, em termos das funções $\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$, pode ser reescrita como

$$b(\varepsilon_n, \mathbf{k}) = \frac{3\lambda^2 T}{16} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{\varepsilon'_n} \int \frac{D_{ef}(\varepsilon_n - \varepsilon'_n, \mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')} \frac{\partial \mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')}{\partial b(\varepsilon'_n, \mathbf{k}')} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^2}. \quad (3.31)$$

Em função do fato de termos desprezado o setor supercondutor do parâmetro de ordem $\hat{\mathcal{M}}(\varepsilon_n, \mathbf{k})$ para a derivação do resultado na Eq. (3.30), a equação logo acima para $b(\varepsilon_n, \mathbf{k})$ descreve apenas o comportamento das modulações de carga do tipo ODQ com vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ no presente sistema bidimensional.

Como uma consequência do resultado na Eq. (3.30), determinamos, depois de uma transformada de Fourier do lado direito da igualdade na Eq. (3.20), que a energia livre funcional do modelo efetivo de três bandas possui a seguinte forma analítica

$$\begin{aligned} \mathcal{F}[T, n_p, R_{II}, b] = & -T \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{\varepsilon_n} \int \ln[\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})] \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} + \frac{8T}{3\lambda^2} \sum_{\varepsilon_n} \int b(\varepsilon_n, \mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \\ & \times \left[T \sum_{\varepsilon'_n} \int b(\varepsilon'_n, \mathbf{k}') D_{ef}^{-1}(\varepsilon_n - \varepsilon'_n, \mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \right] + \frac{R_{II}^2}{V_{pd}} - \frac{n_p^2}{8} U_p, \end{aligned} \quad (3.32)$$

onde a energia livre $\mathcal{F}[T, n_p, R_{II}, b]$ é dada agora em unidades do volume do sistema. Por meio da expressão acima, a equação para parâmetro de ordem R_{II} da fase de CL- Θ_{II} pode ser derivada auto-consistentemente minimizando $\mathcal{F}[T, n_p, R_{II}, b]$ com relação a R_{II} , ou seja, determinando a solução da equação funcional $\delta\mathcal{F}/\delta R_{II} = 0$. De fato, fazendo isso, a equação auto-consistente de campo médio para o parâmetro de ordem R_{II} pode ser facilmente escrita como

$$R_{II} = \frac{V_{pd} T}{2} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{\varepsilon_n} \int \frac{1}{\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})} \frac{\partial \mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})}{\partial R_{II}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (3.33)$$

Nas seções seguintes, explicaremos o nosso *Ansatz* para as soluções das equações auto-consistentes de campo médio para as fases de CL- Θ_{II} e ODQ, que são definidas através das Eqs. (3.31) e (3.33). Além disso, discutiremos o significado físico dessas soluções em face dos resultados experimentais para a fase de pseudogap do diagrama de fase dos cupratos supercondutores, que emerge no regime sub-dopado desses materiais para temperaturas menores que $T^* = T^*(p)$. Nos Apêndices A e B desta tese, incluímos informações adicionais sobre os resultados que serão apresentados logo a seguir.

3.3 Determinação das somas sobre as frequências de Matsubara nas equações auto-consistentes de campo médio

3.3.1 Equação auto-consistente de campo médio para o parâmetro de ordem onda de densidade quadrupolar (ODQ)

Para calcular de forma exata a soma de Matsubara que aparece na Eq. (3.31), não consideraremos, no restante desta tese, a dependência parâmetro de ordem $b(\varepsilon_n, \mathbf{k})$ com relação às variáveis de frequência e momento. Desta forma, a Eq. (3.31) pode ser simplesmente reescrita como

$$b(T) = \frac{3\lambda^2 T}{16} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{\varepsilon_n} \int \frac{D_{ef}(\varepsilon_n, \mathbf{k})}{\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})} \frac{\partial \mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})}{\partial b} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (3.34)$$

onde, por simplicidade, escrevemos apenas a dependência do parâmetro de ordem $b(T)$ com a temperatura. Usando o teorema dos resíduos, a soma de Matsubara na Eq. (3.34) pode ser transformada da seguinte forma

$$T \sum_{\varepsilon_n} \frac{D_{ef}(\varepsilon_n, \mathbf{k})}{\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})} \frac{\partial \mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})}{\partial b} = -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} dz n_F(z) \frac{D_{ef}(-iz, \mathbf{k})}{\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})} \frac{\partial \mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b}, \quad (3.35)$$

onde $n_F(z) = (e^{\beta z} + 1)^{-1}$ é a função distribuição de Fermi-Dirac e as outras funções no integrando do lado direito da igualdade da equação acima são as continuações analíticas daquelas no lado esquerdo da igualdade correspondente. Obviamente, o contorno \mathcal{C} sob o símbolo da integral na Eq. (3.35) deve tangenciar os polos de $n_F(z)$, que se estendem por todo o eixo imaginário no plano complexo.

Há aqui uma sutileza para a definição da continuação analítica do propagador bosônico efetivo $D_{ef}(\varepsilon_n, \mathbf{k})$, uma vez que ele depende da função modular $|\omega|$ que, por sua vez, não é bem definida para números complexos. Para resolver esse problema, recorreremos ao uso das seguintes fórmulas integrais

$$|\omega| = -\frac{i\omega}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x - i\omega}, \quad (3.36)$$

$$\text{sgn}(\omega) = -\frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x - i\omega}, \quad (3.37)$$

onde $\text{sgn}(\omega)$ é a função sinal do argumento ω . Como resultado, a continuação analítica de $D_{ef}(\varepsilon_n, \mathbf{k})$ torna-se

$$D_{ef}(-iz, \mathbf{k}) = \frac{1}{-i\gamma z \text{sgn}[\text{Im}(z)] + |\mathbf{k}|^2 + m_a}. \quad (3.38)$$

Da expressão acima, concluímos que $D_{ef}(-iz, \mathbf{k})$ não é analítica em todo o plano complexo. De fato, essa função possui uma linha de corte (ou linha de singularidade) que deve ser evitada ao se efetuar a sua integração complexa. Tendo em vista esses resultados, obtemos que a Eq. (3.34) pode ser reescrita como

$$b(T) = \frac{3\lambda^2}{16} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \left\{ -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_1} dz n_F(z) D_{ef}(-iz, \mathbf{k}) \left[\frac{1}{h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})} \frac{\partial h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b} + \frac{1}{\bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})} \frac{\partial \bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b} \right] \right\}, \quad (3.39)$$

onde \mathcal{C}_1 é o contorno definido na Figura 3.4 e o resultado $\mathcal{D}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k}) = h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k}) \bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ foi usado (veja o Apêndice B para mais detalhes). Aqui as funções $h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ e $\frac{\partial h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b}$ são ambas polinômios com respeito à variável z , e a relação entre os seus graus é a seguinte

$$\deg \left[\frac{\partial h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b} \right] < \deg[h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})]. \quad (3.40)$$

Como esperado, uma desigualdade similar é também verificada para as funções $\bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ e $\frac{\partial \bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b}$. A principal consequência do resultado na Eq. (3.40) é que podemos construir uma expansão em frações parciais da forma

$$\frac{1}{h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})} \frac{\partial h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b} + \frac{1}{\bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})} \frac{\partial \bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b} = \sum_{n=1}^N \frac{\Delta_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}{z - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}, \quad (3.41)$$

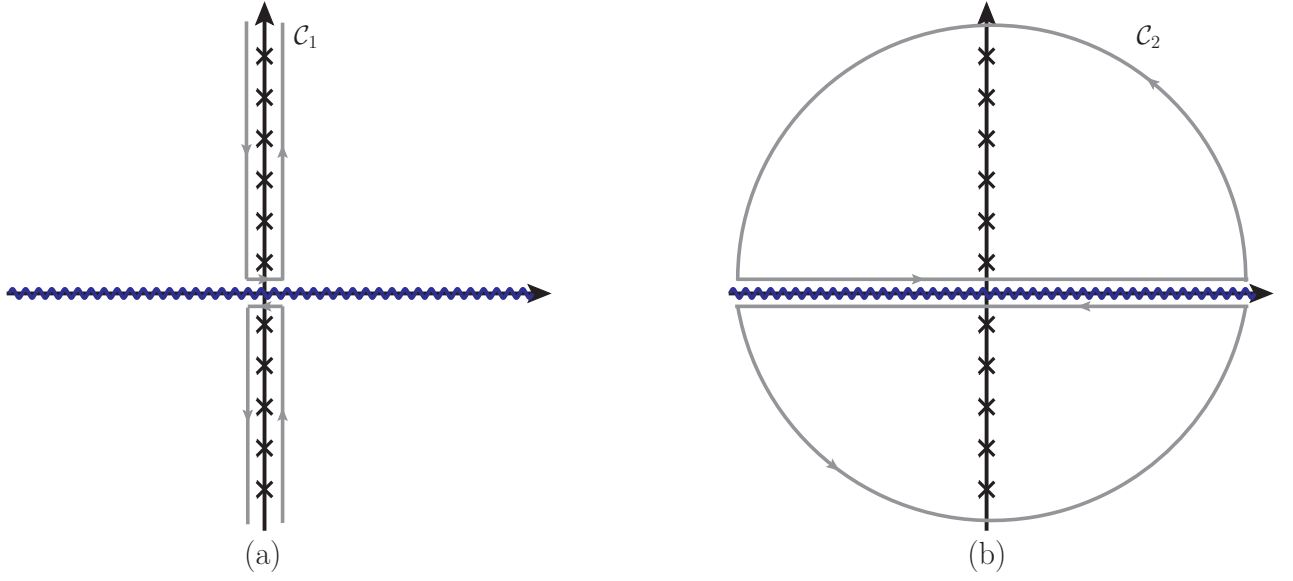


Figura 3.4: (a) Contorno de integração \mathcal{C}_1 para o cálculo da soma de Matsubara que aparece na equação auto-consistente de campo médio para o parâmetro de ordem da fase ODQ. Os símbolos (\times) representam os polos da função distribuição de Fermi-Dirac $n_F(z) = (e^{\beta z} + 1)^{-1}$ e a linha azul ondulada no eixo horizontal $\text{Im}(z) = 0$ denota a região de singularidade (ou linha de corte) do propagador $D_{ef}(-iz, \mathbf{k})$. (b) Para resolver a soma de Matsubara nesse caso, o contorno de integração \mathcal{C}_1 deve ser distorcido de tal forma a se transformar no contorno \mathcal{C}_2 , que não tangencia nenhum dos polos de $n_F(z)$ assim como não cruza o eixo horizontal $\text{Im}(z) = 0$.

onde $N \equiv \frac{3}{4} \dim(\Sigma \otimes \Lambda \otimes L \otimes \tau)$ é igual a doze e $\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})$ representam as raízes de ambos polinômios $h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ ($1 \leq n \leq N/2$) e $\bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ ($N/2 + 1 \leq n \leq N$). Por sua vez, os coeficientes $\Delta_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})$ são calculados através das seguintes expressões

$$\Delta_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) = \frac{\left. \frac{\partial h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b} \right|_{z=\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}}{\left. \frac{\partial h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial z} \right|_{z=\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}}, \quad 1 \leq n \leq \frac{N}{2}; \quad (3.42)$$

$$\Delta_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) = \frac{\left. \frac{\partial \bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial b} \right|_{z=\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}}{\left. \frac{\partial \bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial z} \right|_{z=\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}}, \quad \frac{N}{2} + 1 \leq n \leq N. \quad (3.43)$$

Agora, pela substituição da Eq. (3.41) na Eq. (3.39), concluímos que a equação auto-consistente de campo médio para $b(T)$ assume a forma

$$b(T) = \frac{3\lambda^2}{16} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^N \int \Delta_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) \left[-\frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_1} dz n_F(z) \frac{D_{ef}(-iz, \mathbf{k})}{z - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})} \right] \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (3.44)$$

A integral complexa entre colchetes na equação acima pode ser calculada deformando o contorno \mathcal{C}_1 para o contorno \mathcal{C}_2 mostrado na Figura 3.4. De fato, isso leva ao resultado

$$-\frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_1 \rightarrow \mathcal{C}_2} dz n_F(z) \frac{D_{ef}(-iz, \mathbf{k})}{z - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})} = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} dx n_F(x) \left[\frac{1}{-i\gamma x + |\mathbf{k}|^2 + m_a} \frac{1}{x^+ - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})} - \frac{1}{i\gamma x + |\mathbf{k}|^2 + m_a} \frac{1}{x^- - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})} \right], \quad (3.45)$$

onde $x^\pm = x \pm i\eta$ com $\eta \rightarrow 0^+$. Neste ponto, fazemos uso da identidade de Dirac

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = \mp i\pi\delta(x) + \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right), \quad (3.46)$$

com \mathcal{P} representando o chamado valor principal de Cauchy, de forma a obter o seguinte expressão

$$-\frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_1 \rightarrow \mathcal{C}_2} dz n_F(z) \frac{D_{ef}(-iz, \mathbf{k})}{z - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})} = \frac{|\mathbf{k}|^2 + m_a}{[|\mathbf{k}|^2 + m_a]^2 + \gamma^2[\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})]^2} n_F[\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})] - \frac{\gamma}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x n_F(x)}{[|\mathbf{k}|^2 + m_a]^2 + \gamma^2 x^2} \frac{1}{x - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}. \quad (3.47)$$

Finalmente, após inserir o resultado da Eq. (3.47) na Eq. (3.44), a equação auto-consistente de campo médio para o parâmetro de ordem ODQ em temperatura finita pode ser simplesmente expressa como

$$b(T) = \frac{3\lambda^2}{16} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^N \int \left\{ \frac{|\mathbf{k}|^2 + m_a}{[|\mathbf{k}|^2 + m_a]^2 + \gamma^2[\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})]^2} n_F[\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})] - \frac{\gamma}{\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x n_F(x)}{[|\mathbf{k}|^2 + m_a]^2 + \gamma^2 x^2} \frac{1}{x - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})} \right\} \Delta_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (3.48)$$

No limite de temperatura nula ($T \rightarrow 0$), a função distribuição de Fermi-Dirac $n_F(x)$ torna-se a função passo $\theta(-x)$. Como resultado, a integral na Eq. (3.48), envolvendo o valor principal de Cauchy, possui uma forma puramente analítica, dada por

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{x n_F(x)}{[|\mathbf{k}|^2 + m_a]^2 + \gamma^2 x^2} \frac{1}{x - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})} = \frac{\pi}{2\gamma} \frac{|\mathbf{k}|^2 + m_a}{(|\mathbf{k}|^2 + m_a)^2 + \gamma^2[\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})]^2} + \frac{\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}{(|\mathbf{k}|^2 + m_a)^2 + \gamma^2[\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})]^2} \ln \left[\frac{\gamma |\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})|}{|\mathbf{k}|^2 + m_a} \right], \quad (3.49)$$

com $m_a = m_a(T \rightarrow 0)$ representando agora a massa dos modos bosônicos para temperatura nula. Portanto, neste limite, a equação de campo médio do parâmetro de ordem para a fase de ODQ, na presença da fase de CL- Θ_{II} , tem a seguinte expressão

$$b(T \rightarrow 0) = -\frac{3\lambda^2}{32} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^N \int \left\{ \frac{|\mathbf{k}|^2 + m_a}{(|\mathbf{k}|^2 + m_a)^2 + \gamma^2 [\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})]^2} \operatorname{sgn}[\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})] + \frac{2}{\pi} \frac{\gamma \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}{(|\mathbf{k}|^2 + m_a)^2 + \gamma^2 [\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})]^2} \ln \left[\frac{\gamma |\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})|}{|\mathbf{k}|^2 + m_a} \right] \right\} \Delta_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (3.50)$$

onde foi usada a identidade $\theta(-x) = \frac{1}{2}[1 - \operatorname{sgn}(x)]$ de maneira a simplificar o resultado apresentado acima.

3.3.2 Equação auto-consistente de campo médio para o parâmetro de ordem de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} (CL- Θ_{II})

A equação de campo médio para o parâmetro de ordem da fase de corrente de *loop* (CL- Θ_{II}), derivada no final da Seção 3.2, pode ser simplificada seguindo o mesmo procedimento descrito acima. Primeiramente, transformamos a soma de Matsubara na Eq. (3.33) em uma integral complexa, cujo contorno \mathcal{C}_1 tangencia os polos da função distribuição de Fermi-Dirac $n_F(z) = (e^{\beta z} + 1)^{-1}$. De fato, isso leva à seguinte expressão

$$R_{II}(T) = \frac{V_{pd}}{2} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \int \left\{ -\frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}_1} dz n_F(z) \left[\frac{1}{h_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})} \frac{\partial h_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial R_{II}} + \frac{1}{\bar{h}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})} \frac{\partial \bar{h}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial R_{II}} \right] \right\} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (3.51)$$

Novamente, expandimos os termos entre colchetes na equação acima em uma série de frações parciais, ou seja,

$$\frac{1}{h_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})} \frac{\partial h_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial R_{II}} + \frac{1}{\bar{h}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})} \frac{\partial \bar{h}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial R_{II}} = \sum_{n=1}^N \frac{\Xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}{z - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}, \quad (3.52)$$

onde os coeficientes da expansão $\Xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})$ são dados por

$$\Xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) = \frac{\left. \frac{\partial h_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial R_{II}} \right|_{z=\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}}{\left. \frac{\partial h_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial z} \right|_{z=\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}}, \quad 1 \leq n \leq \frac{N}{2}; \quad (3.53)$$

$$\Xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) = \frac{\left. \frac{\partial \bar{h}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial R_{II}} \right|_{z=\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}}{\left. \frac{\partial \bar{h}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k})}{\partial z} \right|_{z=\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})}}, \quad \frac{N}{2} + 1 \leq n \leq N. \quad (3.54)$$

Tendo em vista o resultado na Eq. (3.52), a integral complexa na Eq.(3.51) é calculada por meio do teorema dos resíduos, deformando o contorno \mathcal{C}_1 para um contorno \mathcal{C}_3 que, por sua vez, envolve o polo $\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})$ no eixo real. De fato, isso leva ao seguinte resultado

$$-\frac{1}{2\pi i} \sum_{n=1}^N \Xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) \oint_{\mathcal{C}_1 \rightarrow \mathcal{C}_3} dz \frac{n_F(z)}{z - \xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})} = \sum_{n=1}^N \Xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) n_F[\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})]. \quad (3.55)$$

A equação auto-consistente de campo médio para o parâmetro de ordem R_{II} , à temperatura finita, é obtida inserindo o resultado acima na Eq. (3.51). Portanto, essa equação é dada por

$$R_{II}(T) = \frac{V_{pd}}{2} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^N \int \Xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) n_F[\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})] \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (3.56)$$

No limite de temperatura nula, temos que a equação de campo médio para R_{II} torna-se

$$R_{II}(T \rightarrow 0) = \frac{V_{pd}}{2} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{n=1}^N \int \Xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k}) \theta[-\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})] \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (3.57)$$

com $\theta(-x)$ representando, nesse caso em particular, a função distribuição de Fermi-Dirac $n_F(x)$.

3.4 Solução das equações auto-consistentes de campo médio

Para investigar a relação entre as fases de corrente de *loop* Θ_{II} (CL- Θ_{II}) e onda de densidade quadrupolar (ODQ) no presente modelo efetivo de três bandas, resolveremos numericamente as equações de campo médio (3.50) e (3.57) para os parâmetros de ordem b e R_{II}

em função do acoplamento spin-férmion λ e da interação V_{pd} entre primeiros vizinhos na célula unitária de CuO_2 . O nosso procedimento numérico consistirá na discretização da zona de Brillouin em uma rede com 320×320 pontos. Além do mais, esse cálculo será realizado aqui variando o acoplamento λ ou a interação V_{pd} e fixando todos os outros parâmetros do modelo.

Os nossos resultados são apresentados nas Figuras 3.5(a) e 3.5(b). Para valores fisicamente aceitáveis dos parâmetros do modelo (por exemplo, utilizamos nos cálculos apresentados aqui $m_a = 10^{-2}$, $\gamma = 10^{-5}$, $t_{pd} = 1$, $t_{pp} = 0.5$, $U_p = 3$ e $\varepsilon_d - \varepsilon_p = 3$), observamos na Figura 3.5(a) que o parâmetro de ordem R_{II} cresce continuamente desde o valor zero até valores positivos finitos, à medida que a interação V_{pd} é aumentada, com o acoplamento λ fixo. Em particular, nessa situação pode ser bastante interessante fazer uma estimativa do momento magnético associado às correntes de *loop* descritas por R_{II} e obtidas neste trabalho à nível de campo médio. Da análise da Figura 3.5(a), podemos inferir numericamente que a razão desse parâmetro de ordem para a interação V_{pd} na região com presença da fase de CL- Θ_{II} é dada por $R_{II}^c/V_{pd}^c \sim 0.2$. Dessa forma, seguindo o mesmo procedimento descrito em detalhes na referência [85], podemos chegar à conclusão que a fase de CL- Θ_{II} fornece um momento magnético, por célula unitária de CuO_2 , de aproximadamente $M_{CL} \sim 0.19\mu_B$. Surpreendentemente, esse resultado concorda qualitativamente com a estimativa experimental de $M_{\text{exp}} \sim 0.05 - 0.1\mu_B$, que foi obtida por Fauqué *et al.* [8] por meio de experimentos de espalhamento de nêutrons. Na Figura 3.5(a), pode também ser observado que o parâmetro de ordem b para a fase ODQ, em contraste, tende a zero no regime onde a interação V_{pd} flui para forte acoplamento. Além disso, pode-se notar na mesma figura uma pequena região onde ambos parâmetros de ordem b e R_{II} permanecem finitos para valores moderados de V_{pd} , indicando portanto que o presente modelo de três bandas pode, em princípio, acomodar uma fase com ausência da simetria de reversão temporal e translação espacial. Contudo, como pode ser inferido da Figura 3.5(a), isso aparentemente ocorre para interações com valores muito precisos.

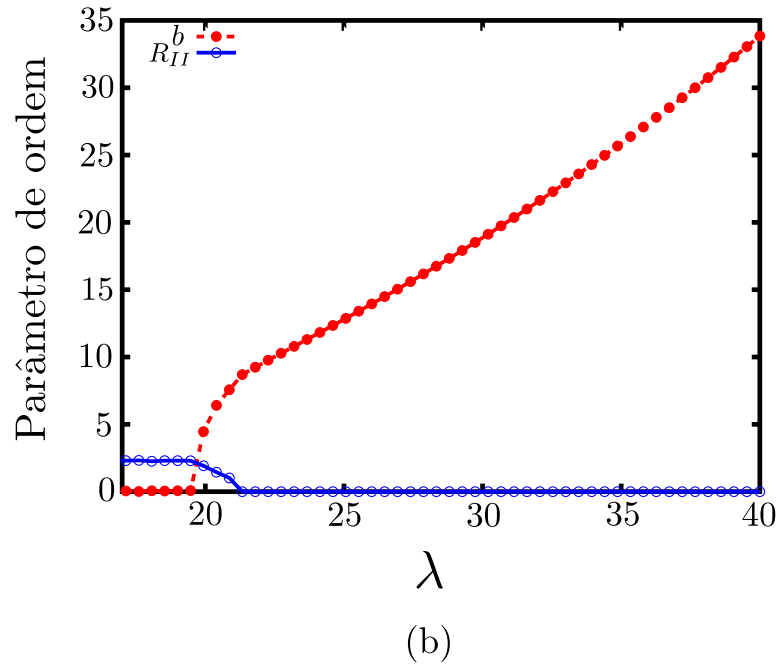
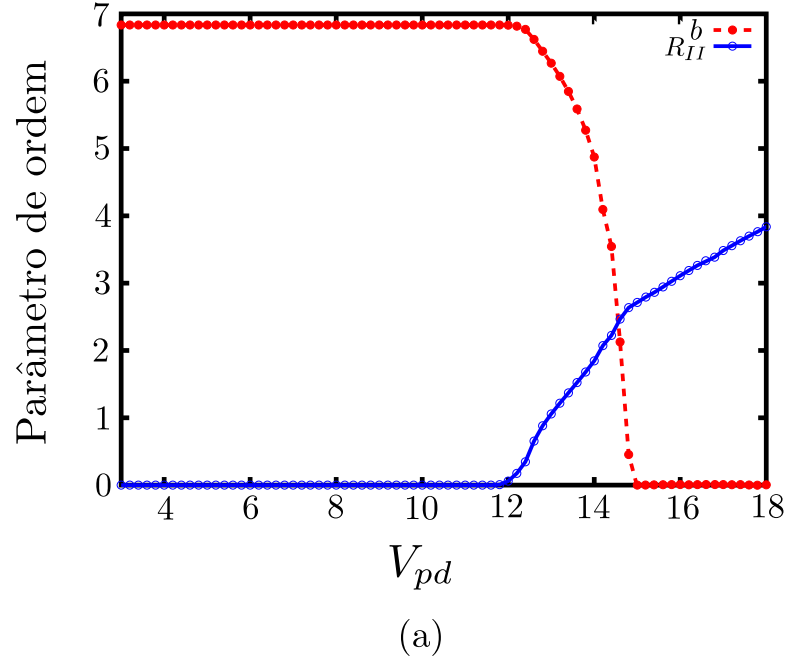


Figura 3.5: (a) Resultados de campo médio dos parâmetros de ordem R_{II} e b em função da interação entre primeiros vizinhos V_{pd} no limite de temperatura nula para o valor $\lambda = 20$ da interação spin-férmion. (b) Resultados de campo médio dos parâmetros de ordem R_{II} e b em função da interação spin-férmion λ no limite de temperatura absoluta nula para $V_{pd} = 14$. Ambos os resultados em (a) e (b) foram derivados através de integração numérica no espaço de momento das equações auto-consistentes para b e R_{II} dadas nas Eqs. (3.50) e (3.57) com uma rede de 320×320 pontos na zona de Brillouin. Aqui, $m_a = 10^{-2}$, $\gamma = 10^{-5}$ e os outros parâmetros do modelo são definidos por $t_{pd} = 1$, $t_{pp} = 0.5$, $U_p = 3$ e $\varepsilon_d - \varepsilon_p = 3$. A densidade fermiônica no orbital do oxigênio corresponde a $n_p = 0.6$ e a posição relativa dos *hot spots* é tal que $\delta = 0.93$.

Podemos também analisar o comportamento desses parâmetros de ordem variando o acoplamento spin-férmion λ e, ao mesmo tempo, fixando a interação V_{pd} . As soluções correspondentes das equações de campo médio são mostradas na Figura 3.5(b). Da sua análise, observamos que o parâmetro de ordem R_{II} para a fase de CL- Θ_{II} é finito até um certo valor de λ e então, à medida que esse acoplamento torna-se cada vez maior, ele é claramente suprimido até se anular por completo. Mais uma vez, o comportamento do parâmetro de ordem b para a fase ODQ é essencialmente o oposto. De fato, ele cresce desde zero até valores finitos, quando a interação λ , que regula o efeito atrativo dos paramagnons nos graus de liberdade fermiônicos do sistema, tende para o regime de forte acoplamento. De uma maneira análoga ao caso discutido anteriormente, há aqui também um pequeno intervalo de parâmetros onde as fases de CL- Θ_{II} e ODQ coexistem para valores moderados de λ e V_{pd} . Apesar disso, o comportamento genérico do sistema que pode ser inferido dos resultados nas Figuras 3.5(a) e 3.5(b) é que ambas as ordens estudadas aqui parecem suprimir uma a outra. Em outros termos, podemos concluir que, para uma grande maioria de escolhas iniciais das interações λ e V_{pd} no presente modelo de três bandas, há uma forte tendência para essas duas fases não coexistirem, ao menos no regime de campo médio apresentado aqui.

Para analisar a sensibilidade dos resultados de campo médio descritos acima com relação a mudanças dos parâmetros físicos do modelo de três bandas, nós também fizemos uma investigação das suas propriedades com relação a pequenas variações da massa m_a dos modos bosônicos de onda de spin e da energia de transferência orbital $\varepsilon_d - \varepsilon_p$. À medida que o valor de m_a cresce (que, fisicamente, corresponde a uma diminuição do comprimento de correlação das flutuações antiferromagnéticas), obtemos que os valores das interações críticas λ_c e V_{pd}^c tendem claramente a crescer. Além disso, examinamos também a dependência dos nossos resultados com relação a mudanças na energia de transferência orbital do modelo. Como um resultado, observamos da nossa análise numérica do modelo de três bandas que, à medida que a diferença $\varepsilon_d - \varepsilon_p$ é reduzida a zero, as interações críticas λ_c e V_{pd}^c , da mesma maneira, mostram uma tendência de crescimento dentro da presente análise de campo médio.

Capítulo 4

Coexistência entre a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} com onda de densidade de pares e ordem de carga com simetria $d_{x^2-y^2}$ em um modelo bidimensional com *hot spots*

Neste capítulo, descrevemos o efeito da fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} , que viola a simetria de reversão temporal \mathbb{Z}_2 [10], na fase emaranhada com simetria $d_{x^2-y^2}$ envolvendo as instabilidades onda de densidade de pares e ordem de carga unidirecionais e bidirecionais, tomando como ponto de partida a teoria efetiva de baixa energia derivada no capítulo anterior desta tese. Supondo que as flutuações quânticas do modelo sobre a solução de campo médio sejam pequenas, mostramos então que os resultados decorrentes dessa análise descrevem, ao menos qualitativamente, a fenomenologia de quebra espontânea de simetria dos cupratos supercondutores observada na região interna da fase de pseudogap [9, 30, 75, 83, 86, 87]. Os resultados apresentados aqui neste capítulo encontram-se publicados no artigo da referência [29].

4.1 Modelo e método

Como no capítulo anterior desta tese, estudaremos aqui o modelo efetivo de três bandas

[28, 29, 80, 81], cuja ação total é dada por

$$\begin{aligned}
& \mathcal{S}[p_x, p_y, d, \phi; n_p, R_{II}] \\
&= \mathcal{S}_0[p_x, p_y, d] + \mathcal{S}_{\text{int}}^{(1)}[d, \phi] + \mathcal{S}_{\text{int}}^{(2)}[p_x, p_y, d; n_p, R_{II}] \\
&= \int (p_x^\dagger(X), p_y^\dagger(X), d^\dagger(X)) \begin{pmatrix} \partial_\tau + \xi_p & \hat{\Gamma}_1 + \hat{\Gamma}_2(-i\nabla) & \hat{\Gamma}_{1x} - \hat{\Gamma}_{2x}i\partial_x \\ \hat{\Gamma}_1 + \hat{\Gamma}_2(-i\nabla) & \partial_\tau + \xi_p & \hat{\Gamma}_{1y} - \hat{\Gamma}_{2y}i\partial_y \\ \hat{\Gamma}_{1x} - \hat{\Gamma}_{2x}i\partial_x & \hat{\Gamma}_{1y} - \hat{\Gamma}_{2y}i\partial_y & \partial_\tau + \xi_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x(X) \\ p_y(X) \\ d(X) \end{pmatrix} dX \\
&+ \lambda \int [d^\dagger(X)\Sigma_1\phi(X) \cdot \sigma d(X)] dX + \frac{1}{2} \int \left[\frac{1}{v_s^2}(\partial_\tau\phi)^2 + (\nabla\phi)^2 + m_a\phi^2 + \frac{g}{2}(\phi^2)^2 \right] dX \\
&+ \int \left(\frac{R_{II}^2}{V_{pd}} - \frac{n_p^2}{8}U_p \right) dX, \tag{4.1}
\end{aligned}$$

onde o campo bosônico $\phi_i = (\phi_i^x, \phi_i^y, \phi_i^z)$ é o parâmetro de ordem para a fase onda de densidade de spin (ODS) para o vetor de onda antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$, v_s é a velocidade das ondas de spin, m_a é a massa bosônica das ondas de spin que desaparece no ponto crítico quântico do modelo e λ é o termo de acoplamento spin-férmion [14, 15]. O parâmetro de ordem $R_{II} = -iV_{pd} \sum_\sigma \langle \mathcal{A}_{i,\sigma} \rangle$ descreve a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} (CL- Θ_{II}), onde o operador de corrente estacionária $\mathcal{A}_{i,\sigma}$ é dado por

$$\mathcal{A}_{i,\sigma} = \frac{i}{2} [(\hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i+\hat{x}/2,\sigma} - \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i-\hat{x}/2,\sigma}) + (\hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i+\hat{y}/2,\sigma} - \hat{d}_{i,\sigma}^\dagger \hat{p}_{i-\hat{y}/2,\sigma})]. \tag{4.2}$$

Os termos σ_a ($a = 1, 2, 3$) são as usuais matrizes de Pauli no espaço de spin σ . Além disso $\xi_p \equiv \varepsilon_p + \frac{n_p}{4}U_p - \mu$, $\xi_d \equiv \varepsilon_d - \mu$ e a variável $X = (\tau, \mathbf{r})$ inclui ambas as coordenadas temporais e espaciais. A matriz Σ_1 refere-se à matriz de Pauli na direção x definida no espaço de pseudospin Σ (veja o Apêndice A para conferir a definição desse e outros espaços de pseudospin). As outras matrizes que aparecem na Eq. (4.1) são diagonais no espaço de pseudospin $\Sigma \otimes \Lambda \otimes L$ e, de acordo com os resultados do Apêndice A, possuem as seguintes estruturas

$$\hat{\Gamma}_1 = -2t_{pp} \cos \delta \mathbf{1}_\Sigma \otimes \mathbf{1}_\Lambda \otimes \mathbf{1}_L, \tag{4.3}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\Gamma}_2 &= t_{pp}(\text{sen } \delta \Lambda_3 \otimes L_3 - \Sigma_3 \otimes \Lambda_3) i\partial_x \\
&- t_{pp}(\text{sen } \delta \Lambda_3 + \Sigma_3 \otimes \Lambda_3 \otimes L_3) i\partial_y, \tag{4.4}
\end{aligned}$$

$$\hat{\Gamma}_{1x} = \gamma_1 e^{-i\varphi \Lambda_3 \otimes L_3} + \gamma_2 e^{i\theta \Lambda_3 \otimes L_3} \Sigma_3 \otimes L_3, \tag{4.5}$$

$$\hat{\Gamma}_{2x} = -\frac{1}{2}\gamma_1 e^{-i\varphi\Lambda_3 \otimes L_3} \Sigma_3 \otimes \Lambda_3 + \frac{1}{2}\gamma_2 e^{i\theta\Lambda_3 \otimes L_3} \Lambda_3 \otimes L_3, \quad (4.6)$$

$$\hat{\Gamma}_{1y} = \gamma_1 e^{i\varphi\Lambda_3} - \gamma_2 e^{-i\theta\Lambda_3} \Sigma_3 \otimes L_3, \quad (4.7)$$

$$\hat{\Gamma}_{2y} = -\frac{1}{2}\gamma_1 e^{i\varphi\Lambda_3} \Sigma_3 \otimes \Lambda_3 \otimes L_3 + \frac{1}{2}\gamma_2 e^{-i\theta\Lambda_3} \Lambda_3, \quad (4.8)$$

onde $\delta = (K_+ - K_-)/2$ é o parâmetro que define a posição relativa do *hot spot*, cuja definição precisa é apresentada na Figura 4.1, ao passo que $\mathbb{1}_\Sigma$, $\mathbb{1}_\Lambda$ e $\mathbb{1}_L$ são, respectivamente, as matrizes identidades nos espaços de pseudospin Σ , Λ e L . Os parâmetros φ , θ , γ_1 e γ_2 são definidos através de $\tan \varphi = \frac{R_{II}}{2t_{pd}} \tan\left(\frac{\delta}{2}\right)$, $\tan \theta = \frac{R_{II}}{2t_{pd}} \cot\left(\frac{\delta}{2}\right)$, $\gamma_1 = \left[2t_{pd}^2 \cos^2\left(\frac{\delta}{2}\right) + \frac{R_{II}^2}{2} \sin^2\left(\frac{\delta}{2}\right)\right]^{1/2}$ e $\gamma_2 = \left[2t_{pd}^2 \sin^2\left(\frac{\delta}{2}\right) + \frac{R_{II}^2}{2} \cos^2\left(\frac{\delta}{2}\right)\right]^{1/2}$.

Com o intuito de derivar as propriedades termodinâmicas do presente modelo, integramos primeiramente os modos bosônicos da teoria considerando $g = 0$ e, subsequentemente, os campos fermiônicos das excitações em torno dos *hot spots*. Como resultado, obtemos que a energia livre funcional do modelo é dada por

$$\begin{aligned} & \frac{\mathcal{F}_\alpha[T, n_p, R_{II}, \hat{\mathcal{M}}_\alpha]}{T} \\ &= - \int \text{Tr} \ln[G_\alpha^{-1}(X, X')] dX dX' + \frac{1}{6\lambda^2} \int D_{ef}^{-1}(X - X') \text{Tr}[\hat{\mathcal{M}}_\alpha(X, X') \Sigma_1 \hat{\mathcal{M}}_\alpha(X', X) \Sigma_1] dX dX' \\ &+ \int \left(\frac{R_{II}^2}{V_{pd}} - \frac{n_p^2}{8} U_p \right) dX, \end{aligned} \quad (4.9)$$

onde $D_{ef}(X - X')$ é o propagador efetivo para os paramagnons, cuja transformada de Fourier foi definida no capítulo anterior, e $\hat{\mathcal{M}}_\alpha(X, X')$ é o parâmetro de ordem para a fase emaranhada unidirecional ($\alpha = \text{ODP-1/OC-1}$) ou bidirecional ($\alpha = \text{ODP-2/OC-2}$) com simetria $d_{x^2-y^2}$ envolvendo a fase onda de densidade de pares (ODP) e a ordem de carga (OC) com vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ na direção dos eixos principais da zona de Brillouin. A matriz $G_\alpha^{-1}(X, X')$ é a transformada de Fourier de

$$G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) = \begin{pmatrix} -i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_1 \tau_3 - \hat{\Gamma}_2(\mathbf{k}) & \hat{\Gamma}_{1x} \tau_3 - \hat{\Gamma}_{2x} k_x \\ \hat{\Gamma}_1^\dagger \tau_3 - \hat{\Gamma}_2^\dagger(\mathbf{k}) & -i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3 & \hat{\Gamma}_{1y} \tau_3 - \hat{\Gamma}_{2y} k_y \\ \hat{\Gamma}_{1x}^\dagger \tau_3 - \hat{\Gamma}_{2x}^\dagger k_x & \hat{\Gamma}_{1y}^\dagger \tau_3 - \hat{\Gamma}_{2y}^\dagger k_y & -i\varepsilon_n + \xi_d \tau_3 - i\hat{\mathcal{M}}_\alpha(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Uma vez que o espectro das excitações do modelo em torno dos *hot spots* foi linearizado para a derivação da ação efetiva do modelo na Eq. (4.1), o fator de forma do parâmetro

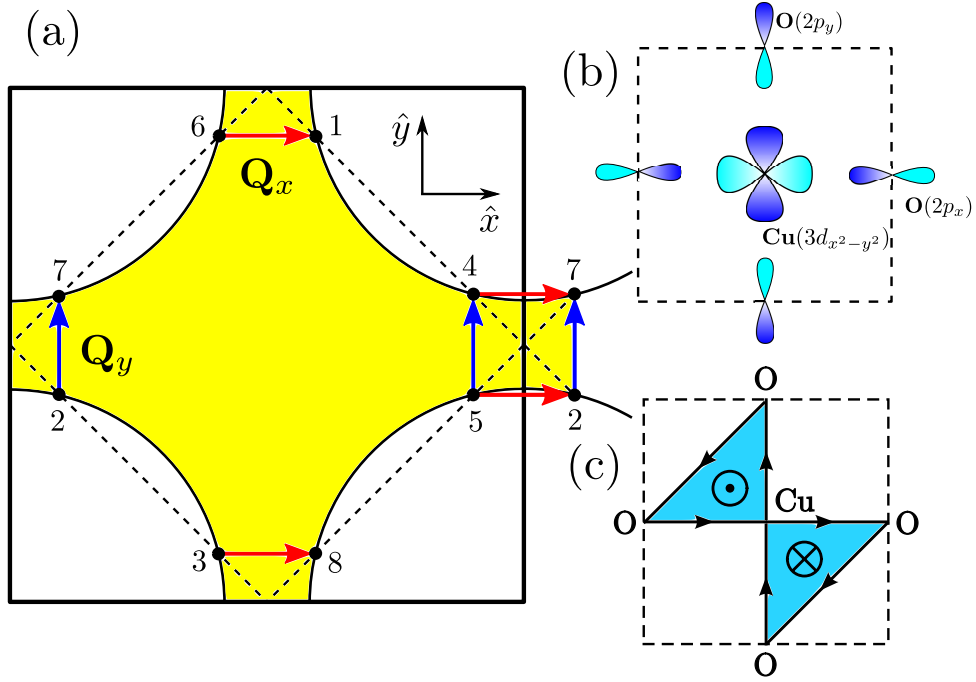


Figura 4.1: (a) Representação esquemática da superfície de Fermi (curvas que contornam a área amarela) que caracteriza os cupratos supercondutores para parâmetros experimentalmente relevantes. Os vetores $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$, na direção dos eixos principais da zona de Brillouin, representam aqueles da ordem de carga observada experimentalmente em algumas famílias de cupratos supercondutores. Os pontos sobre a superfície de Fermi numerados de 1 a 8 nessa figura referem-se aos *hot spots*, que são definidos como a intersecção dessa superfície com a zona antiferromagnética do modelo. O *hot spot* com índice 1 possui vetor de onda $\mathbf{k}_1 = (K_-, K_+)$ no espaço recíproco e as suas componentes obedecem a relação $K_- + K_+ = \pi$. Os vetores de onda dos outros *hot spots* podem ser então obtidos através de operações de reflexão e rotação através de \mathbf{k}_1 . (b) Estrutura dos orbitais do cobre [$\text{Cu}(3d_{x^2-y^2})$] e oxigênio [$\text{O}(2p_x)$ e $\text{O}(2p_y)$] na célula unitária de CuO_2 para o modelo de três bandas (ou modelo de Emery). (c) Padrão das correntes de *loop* do tipo Θ_{II} na célula unitária. Os símbolos \odot e \otimes indicam a orientação dos momentos magnéticos locais gerados pelas correntes de *loop*.

de ordem para a fase ODP/OC unidirecional é dado em termos de uma matriz do grupo de simetria $\text{SU}(2)$. Aqui, consideramos que o vetor de onda dessa fase unidirecional corresponde a $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$, onde Q_0 representa a distância entre dois *hot spots* vizinhos na direção dos eixos principais da zona de Brillouin. Dessa forma, seguindo a metodologia explicada no capítulo anterior desta tese e as referências [19, 26, 28], obtemos que o parâmetro de ordem para a fase

ODP/OC unidirecional pode ser escrito da seguinte maneira

$$\hat{\mathcal{M}}_{\text{ODP-1/OC-1}}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) = b_{\text{ODP-1/OC-1}}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \Sigma_3 \otimes \Lambda_3 \otimes \begin{pmatrix} 0 & -\hat{u}_\tau \\ \hat{u}_\tau^\dagger & 0 \end{pmatrix}_L, \quad (4.11)$$

$$\text{com } \hat{u}_\tau = \begin{pmatrix} \Delta_{\text{OC}} & \Delta_{\text{ODP}} \\ -\Delta_{\text{ODP}}^* & \Delta_{\text{OC}}^* \end{pmatrix}_\tau. \quad (4.12)$$

Por definição, \hat{u}_τ é uma matriz do grupo de simetria $\text{SU}(2)$ e, portanto, temos que a equação $|\Delta_{\text{OC}}|^2 + |\Delta_{\text{ODP}}|^2 = 1$ envolvendo as amplitudes para as fases OC e ODP é sempre verdadeira. Por outro lado, no caso da fase emaranhada ODP/OC bidirecional, as suas modulações no espaço recíproco são definidas em termos dos dois vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ que, de acordo com o esquema apresentado na Figura 4.1, conectam os *hot spots* nas direções dos dois eixos principais da zona de Brillouin. De acordo com a nossa metodologia, o parâmetro de ordem para essa fase assume a seguinte forma

$$\hat{\mathcal{M}}_{\text{ODP-2/OC-2}}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) = b_{\text{ODP-2/OC-2}}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \left[\Sigma_3 \otimes \Lambda_3 \otimes \begin{pmatrix} 0 & -\hat{u}_\tau \\ \hat{u}_\tau^\dagger & 0 \end{pmatrix}_L + \Sigma_3 \otimes L_1 \otimes \begin{pmatrix} 0 & -\hat{u}_\tau \\ \hat{u}_\tau^\dagger & 0 \end{pmatrix}_\Lambda \right]. \quad (4.13)$$

Finalmente, as equações auto-consistentes de campo médio para os parâmetros de ordem da fase emaranhada ODP/OC com simetria $d_{x^2-y^2}$ e a fase de CL- Θ_{II} , que possivelmente aparecem no modelo efetivo de três bandas, são obtidas minimizando a energia livre funcional $\mathcal{F}_\alpha[T, n_p, R_{II}, \hat{\mathcal{M}}_\alpha]$ na Eq. (4.9) com respeito a esses parâmetros de ordem, ou seja, impondo as condições $\delta\mathcal{F}_\alpha/\delta b_\alpha = 0$ e $\delta\mathcal{F}_\alpha/\delta R_{II} = 0$. Fazendo a transformada de Fourier dessas equações para o espaço de momento e frequência, somos levados aos seguintes resultados

$$b_\alpha(\varepsilon_n, \mathbf{k}) = \frac{3\lambda^2 T}{16\zeta} \sum_{\varepsilon'_n} \int \frac{D_{ef}(\varepsilon_n - \varepsilon'_n, \mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\det[G_\alpha^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')] } \frac{\partial \det[G_\alpha^{-1}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')] }{\partial b_\alpha(\varepsilon'_n, \mathbf{k}')} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^2}, \quad (4.14)$$

$$R_{II} = \frac{V_{pd} T}{2} \sum_{\varepsilon_n} \int \frac{1}{\det[G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]} \frac{\partial \det[G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]}{\partial R_{II}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}, \quad (4.15)$$

onde $D_{ef}(\omega, \mathbf{k}) = (\gamma|\omega| + |\mathbf{k}|^2 + m_a)^{-1}$ e γ define o termo de amortecimento de Landau, que aparece como um efeito da contribuição das excitações fermiônicas nos *hot spots* para o propagador das flutuações antiferromagnéticas no sistema [19]. De acordo com os nossos resultados, o termo $\zeta = 1$ aparece na equação de campo médio para fase ODP/OC unidirecional, ao passo

que $\zeta = 2$ define a mesma equação para a fase ODP/OC bidirecional. Segundo os resultados do Apêndice B, o determinante da matriz $G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ que aparecem nas duas equações logo acima pode ser simplesmente escrito em termos do seguinte produto

$$\det[G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})] = \prod_{\ell=1}^2 \prod_{m=1}^2 \mathcal{D}_\alpha^{\ell m}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}), \quad (4.16)$$

com $\mathcal{D}_\alpha^{\ell m}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ representando funções positivas definidas para todo intervalo de valores das variáveis de momento e frequência. Substituindo esse resultado nas Eqs. (4.14) e (4.15), obtemos que as equações de campo médio se reduzem a

$$b_\alpha(\varepsilon_n, \mathbf{k}) = \frac{3\lambda^2 T}{16\zeta} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{\varepsilon'_n} \int \frac{D_{ef}(\varepsilon_n - \varepsilon'_n, \mathbf{k} - \mathbf{k}')}{\mathcal{D}_\alpha^{\ell m}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')} \frac{\partial \mathcal{D}_\alpha^{\ell m}(i\varepsilon'_n, \mathbf{k}')}{\partial b_\alpha(\varepsilon'_n, \mathbf{k}')} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^2}, \quad (4.17)$$

$$R_{II} = \frac{V_{pd} T}{2} \sum_{\ell=1}^2 \sum_{m=1}^2 \sum_{\varepsilon_n} \int \frac{1}{\mathcal{D}_\alpha^{\ell m}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})} \frac{\partial \mathcal{D}_\alpha^{\ell m}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})}{\partial R_{II}} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (4.18)$$

Essas duas equações apresentam a mesma forma das equações de campo médio descrevendo a competição entre a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} (CL- Θ_{II}) e a fase onda de densidade quadrupolar (ODQ) derivadas no Capítulo 3 desta tese. Portanto, o método para a sua solução envolve basicamente o mesmo tipo de *Ansatz* discutido nesse capítulo. Dessa forma, descreveremos, na próxima seção, apenas os resultados decorrentes da solução numérica das Eqs. (4.17) e (4.18).

4.2 Solução das equações auto-consistentes de campo médio

Nesta seção, discutiremos as implicações da solução numérica das equações de campo médio para os parâmetros de ordem R_{II} e b_α . Como vimos, essas quantidades descrevem a possibilidade de quebra espontânea da simetria de reversão temporal (parâmetro R_{II}), através do aparecimento de correntes estacionárias com o padrão de CL- Θ_{II} na célula unitária de CuO_2 e a existência de modulações partícula-partícula e partícula-buraco (parâmetro b_α) com vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ nas regiões em torno dos *hot spots*, levando, por sua vez, à quebra da simetria de translação espacial. Para fazer isso, discretizamos a zona de Brillouin

por meio de uma rede de 320×320 pontos em torno dos *hot spots*. Verificamos que o aumento do número de pontos além desse valor não altera qualitativamente o comportamento da solução das equações de campo médio para parâmetros de ordem do modelo. Além disso, desprezamos a distribuição espaço-temporal do parâmetro de ordem para a fase emaranhada ODP/OC, o que nos leva a desconsiderar a dependência com relação às coordenadas de frequência e momento de $b_\alpha(\varepsilon_n, \mathbf{k})$. Como no caso estudado no Capítulo 3, isso permitirá a determinação analítica das somas de Matsubara sobre o espectro de frequência, que aparecem nas equações de campo médio em (4.17) e (4.18). Consideraremos, nos cálculos apresentados aqui, apenas o regime físico onde o sistema encontra-se próximo à temperatura nula e faremos a interação V_{pd} entre primeiros vizinhos na célula unitária igual ao acoplamento spin-férmion λ . Esse regime de interações pode ser considerado fisicamente aceitável para a descrição, por exemplo, de algumas famílias de cupratos supercondutores no regime de média até alta dopagem. Os outros parâmetros do modelo de três bandas serão dados aqui através dos seguintes valores físicos: $t_{pd} = 1$, $t_{pp} = 0.5$, $U_p = 3$, $\varepsilon_d - \varepsilon_p = 3$, $\gamma = 10^{-5}$ e $m_a = 10^{-3}$. Nesse caso, o valor médio do operador número de ocupação nos orbitais do oxigênio é igual a $n_p \approx 0.3$ e o valor médio dos mesmo operador no orbital do cobre é dado por meio da relação $n_d + 2n_p = 1 + x$, onde x denota o valor da dopagem por buraco, e $m_a \propto (x - x_c)$, com x_c sendo o valor da dopagem crítica associada a um suposto ponto crítico quântico localizado na região ótima, ou seja, com temperatura crítica supercondutora máxima.

Para estudar a competição entre as fases de CL- Θ_{II} e OC unidirecional com simetria $d_{x^2-y^2}$ e vetor de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ no modelo de três bandas, que é observada experimentalmente em algumas famílias de cupratos supercondutores no regime de baixa dopagem [86, 87], desprezamos o fator Δ_{ODP} para a fase ODP no parâmetro de ordem definido nas Eqs. (4.11) e (4.12) e, em seguida, resolvemos numericamente as equações de campo médio em (4.17) e (4.18) em função do acoplamento spin-férmion λ , como pode ser observado no gráfico da Figura 4.2(a). Observamos, através da análise desta figura, que à medida que o acoplamento spin-férmion λ é aumentado, o parâmetro de ordem $b_{\text{OC-1}}$ para a fase OC unidirecional cresce, a partir de um

valor crítico de λ , desde o valor zero até valores finitos no regime de forte acoplamento. Em contraste, o parâmetro de ordem R_{II} possui o comportamento oposto nessa situação, ou seja, ele torna-se visivelmente nulo, quando o acoplamento spin-férmion λ cresce acima do mesmo valor crítico. Portanto, esses resultados sugerem que ambas as ordens atuam no sentido de anular uma a outra e, conseqüentemente, a tendência geral é que as fases de CL- Θ_{II} e OC unidirecional não coexistam no presente modelo de três bandas, ao menos no nível da aproximação de campo médio.

A análise da relação entre as fases de CL- Θ_{II} e OC bidirecional com simetria $d_{x^2-y^2}$ e vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ evolve, como no caso anterior, a solução numérica das respectivas equações de campo médio (4.17) e (4.18) para o parâmetro de ordem na Eq. (4.13) com fator Δ_{ODP} para a fase ODP igual a zero. Os nossos resultados são mostrados na Figura 4.2(b). Similarmente ao que tinha sido obtido para a fase OC unidirecional, o parâmetro de ordem b_{OC-2} para a fase OC bidirecional descreve aqui o efeito de uma transição de fase de segunda ordem, ou seja, ele cresce continuamente a partir do zero, à medida que o acoplamento spin-férmion λ é aumentado além de um certo valor crítico. Observando a mesma figura, vemos que o parâmetro de ordem R_{II} para a fase de CL- Θ_{II} também flui desde o zero até valores finitos, quando o acoplamento λ torna-se maior que um certo valor limite. De acordo com esses resultados, essas duas ordens tendem a não competir pela mesma região do espaço de fase do sistema, coexistindo assim para a maioria das escolhas das constantes de acoplamento do modelo efetivo de três bandas. Essas conclusões são consistentes com a existência de pequenos momentos magnéticos na célula unitária de CuO_2 , observados em experimentos de difração de nêutrons [9, 83], e também com os resultados de experimentos de raio-X no cuprato supercondutor YBCO [30], que estabelecem a emergência de uma ordem de carga bidirecional de curto alcance e com simetria $d_{x^2-y^2}$, para o regime de baixas temperaturas e altas dopagens nesse material. Com relação a essas observações experimentais, um outro trabalho teórico [88], que faz uma análise de Ginzburg-Landau de um modelo de spin-férmion com *hot spots*, sugere que a ordem de carga nos cupratos supercondutores é inicialmente bidirecional, mas sofre uma

transição nemática no regime de baixas dopagens, tornando-se portanto unidirecional. Em contrapartida, quando a dopagem no sistema se aproxima daquela do ponto crítico quântico, a ordem de carga se torna bidirecional. Dessa forma, esses resultados para o modelo de spin-férmion concordam, ao menos qualitativamente, com o que foi discutido aqui para o modelo de três bandas.

Uma comparação mais direta entre a física exibida pelo modelo efetivo de três bandas e os resultados experimentais para os cupratos supercondutores pode ser obtida através da análise do comportamento dos parâmetros de ordem das fases de CL- Θ_{II} e OC bidirecional com simetria $d_{x^2-y^2}$ em função do acoplamento spin-férmion λ para diferentes valores da massa m_a dos modos bosônicos de onda de densidade de spin, que mede a distância, em termos do valor de dopagem, para o ponto crítico quântico do sistema. Os resultados numéricos, nesse caso, são mostrados nas Figuras 4.3(a) e 4.3(b) abaixo. Na Figura 4.3(a), observamos que o principal efeito de se afastar do ponto crítico quântico do modelo consiste basicamente no aumento do valor crítico do acoplamento spin-férmion λ associado à emergência da fase OC bidirecional no sistema. Este tipo de comportamento poderia, em princípio, explicar qualitativamente a razão do decaimento da amplitude das modulações de carga da fase OC bidirecional em cupratos supercondutores para dopagens no sistema além do valor de dopagem ótima [30]. Por outro lado, o comportamento crítico do parâmetro de ordem R_{II} para a fase de CL- Θ_{II} parece não ser tão sensível à variação da dopagem no sistema, como mostra os resultados na Figura 4.3(b). Isso indica que a fase de CL- Θ_{II} é mais robusta no modelo efetivo de três bandas estudado aqui, não dependendo portanto de nenhum ajuste fino de parâmetros para a sua emergência. Tal comportamento está em perfeito acordo com os resultados experimentais relativos a essa fase nos cupratos supercondutores [9, 83].

Por último, mencionamos que, devido às simetrias dos parâmetros de ordem das fases ODP e OC nas Eqs. (4.11) e (4.13), o diagrama de fase do modelo de três bandas, no que diz respeito apenas à competição entre as fases de CL- Θ_{II} e ODP unidirecional e bidirecional, corresponderá basicamente ao que foi aqui apresentado para a fase OC. Devido a isso, podemos

concluir que parâmetro de ordem R_{II} tenderá, evidentemente, a suprimir o correspondente parâmetro de ordem da fase ODP com vetor de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ [ou $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$] e coexistir com o da fase ODP com vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$. A recente descoberta experimental de uma fase supercondutora com modulações dada pelos vetores de onda ligando os *hot spots* nas direções x e y da zona de Brillouin no cuprato supercondutor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ [75], e portanto com as características da fase ODP bidirecional, dá suporte às conclusões derivadas aqui a partir da análise das possíveis instabilidades do modelo efetivo de três bandas.

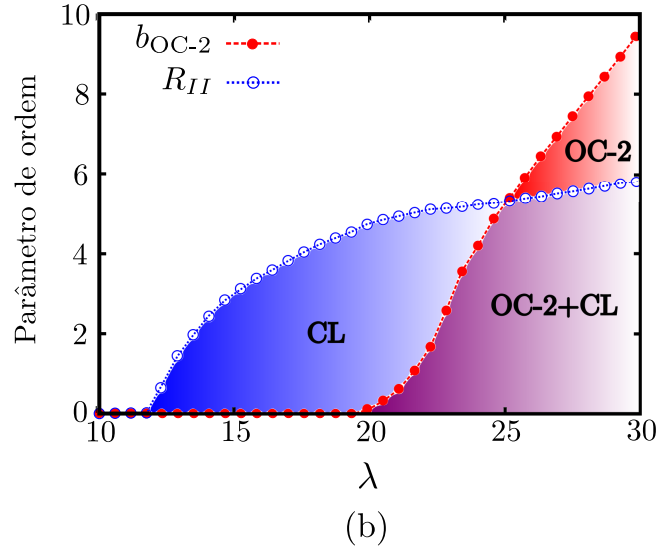
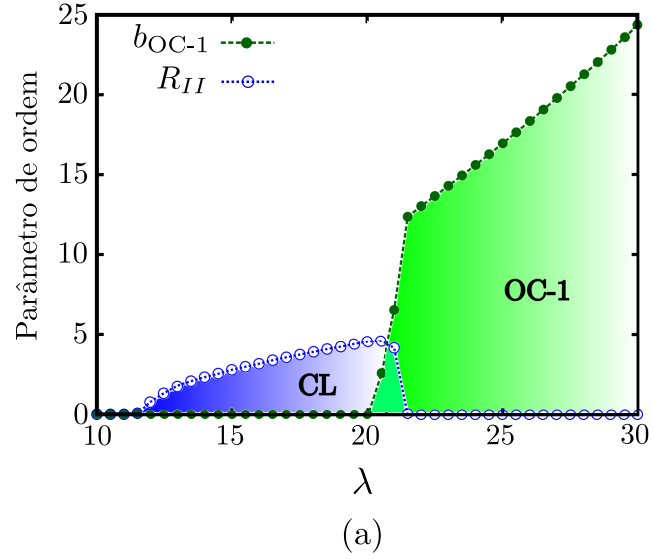


Figura 4.2: (a) Valores de campo médio do parâmetro de ordem R_{II} para a fase de corrente de *loop* Θ_{II} (CL- Θ_{II}) e do parâmetro de ordem b_{OC-1} para a ordem de carga unidirecional (OC-1) com simetria $d_{x^2-y^2}$ em função do acoplamento spin-férmion λ no limite de temperatura nula, com a interação V_{pd} entre os orbitais do cobre e oxigênio dada por $V_{pd} = \lambda$. (b) Valores de campo médio do parâmetro de ordem R_{II} para a fase de CL- Θ_{II} e do parâmetro de ordem b_{OC-2} para a ordem de carga bidirecional (OC-2) com simetria $d_{x^2-y^2}$ em função do acoplamento spin-férmion λ no limite de temperatura nula, com a interação V_{pd} dada por $V_{pd} = \lambda$. Ambos os resultados em (a) e (b) foram obtidos através da integração numérica no espaço de recíproco das equações auto-consistentes de campo médio definidas em (4.17) e (4.18) para uma rede de 320×320 pontos na zona de Brillouin. Aqui, em particular, fizemos $m_a = 10^{-3}$, $\gamma = 10^{-5}$ e os outros parâmetros são definidos por $t_{pd} = 1$, $t_{pp} = 0.5$, $U_p = 3$ e $\varepsilon_d - \varepsilon_p = 3$. O número de ocupação no orbitais do oxigênio corresponde a $n_p \approx 0.3$ e o número de ocupação no orbital do cobre é dado por $n_d + 2n_p = 1 + x$, onde x é o parâmetro que controla a dopagem por buracos e $m_a \propto (x - x_c)$ com x_c sendo a dopagem crítica associada com o ponto crítico quântico do modelo.

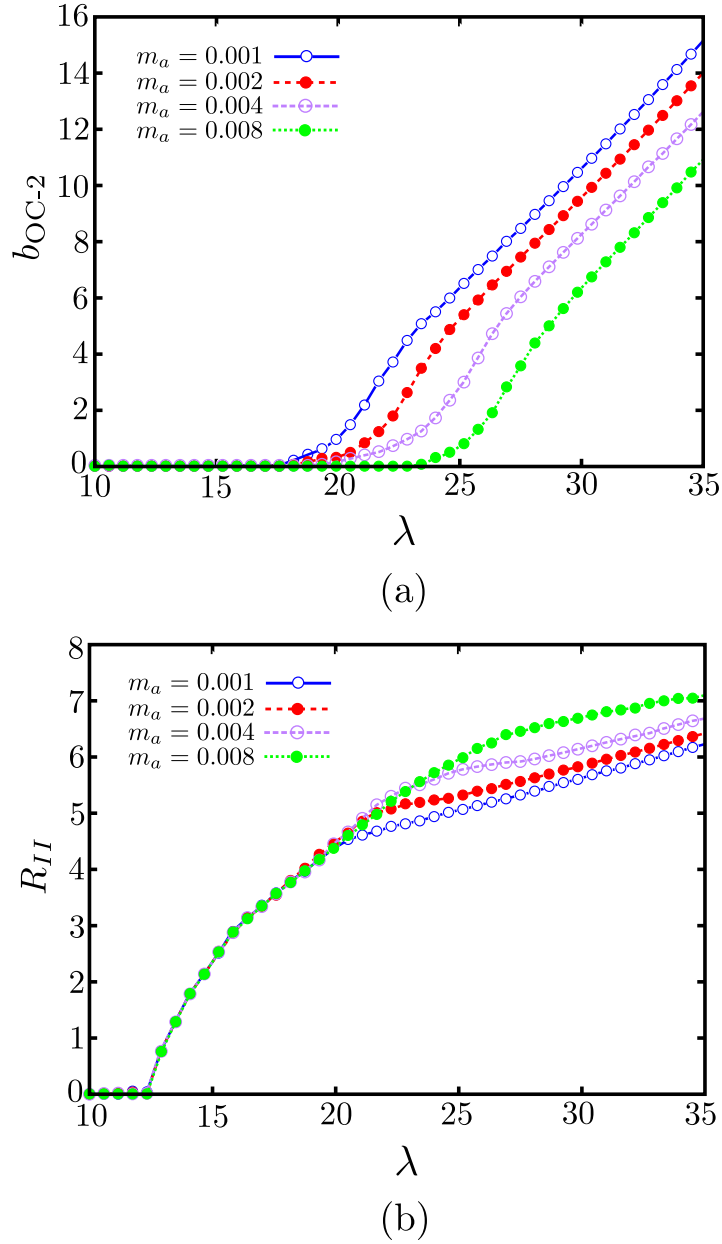


Figura 4.3: (a) Resultados de campo médio do parâmetro de ordem b_{OC-2} para a ordem de carga bidirecional (OC-2) com simetria $d_{x^2-y^2}$ em função do acoplamento spin-férmion λ no limite de temperatura nula, com a interação V_{pd} entre os orbitais do cobre e oxigênio dada por $V_{pd} = \lambda$, para diversas escolhas da massa m_a dos modos bosônicos de onda de spin, que controla a dopagem por buracos no modelo. (b) Resultados de campo médio do parâmetro de ordem R_{II} para a fase de corrente de *loop* Θ_{II} (CL- Θ_{II}) em função do acoplamento spin-férmion λ no limite de temperatura nula, com a interação V_{pd} dada por $V_{pd} = \lambda$, para diversas escolhas de m_a . Ambas os gráficos em (a) e (b) foram obtidos por meio da integração numérica da equações auto-consistentes de campo médio em (4.17) e (4.18) para uma rede de 320×320 pontos na zona de Brillouin. Além disso, utilizamos $\gamma = 10^{-5}$, $t_{pd} = 1$, $t_{pp} = 0.5$, $U_p = 3$ e $\varepsilon_d - \varepsilon_p = 3$. O número de ocupação no orbitais do oxigênio corresponde a $n_p \approx 0.3$ e o número de ocupação no orbital do cobre é dado por $n_d + 2n_p = 1 + x$, onde x é o parâmetro que controla a dopagem por buracos e $m_a \propto (x - x_c)$ com x_c sendo a dopagem crítica associada com o ponto crítico quântico do modelo.

Capítulo 5

Conclusões e perspectivas

Nesta tese, estudamos as propriedades de baixa energia de alguns modelos fermiônicos bidimensionais, que podem ser relevantes para a descrição das propriedades físicas dos supercondutores de altas temperaturas conhecidos como cupratos, no regime de dopagem média. O primeiro modelo abordado aqui foi uma versão do modelo de Hubbard bidimensional em que são considerados apenas os graus de liberdade do sistema na vizinhança de oito *hot spots* na zona de Brillouin [23, 24, 25], que são definidos através da intersecção da superfície de Fermi com a zona antiferromagnética do sistema. Uma vez que pretendíamos estudar somente as propriedades de baixa energia desse modelo, linearizamos, desde o início, o seu espectro de excitação em torno dos *hot spots* do modelo e, então, definimos todas as interações relevantes entre as excitações fermiônicas nessas regiões. Em seguida, mostramos que o modelo possui divergências logarítmicas em um *loop* nas chamadas funções vértices irredutíveis no regime infra-vermelho do sistema. Para corrigir essa anomalia da teoria de baixa energia, aplicamos a metodologia do grupo de renormalização de teoria de campos na aproximação de um *loop* para os acoplamentos do modelo. A solução das equações de grupo de renormalização mostrou, como era de se esperar, que as interações do modelo flui para o regime de forte acoplamento para a maioria das condições iniciais. Devido a isso, tivemos que incluir correções quânticas no sistema para a auto-energia assim como para as funções vértices de quatro pontos até a ordem de dois *loops*. Como consequência disso, obtemos que a componente da velocidade de Fermi nos *hot spots* tangente à superfície de Fermi flui assintoticamente para zero quando os modos de

alta energia do modelo são progressivamente integrados. Nós verificamos também que, nessa situação, os acoplamentos renormalizam-se para valores finitos não triviais, no caso de condições iniciais definidas pelo modelo de Hubbard. Em termos físicos, esses resultados implicam que esse modelo fermiônico de *hot spots* não possui excitações do tipo quasipartículas fermiônicas bem definidas na região próxima aos *hot spots*, demonstrando assim o comportamento do tipo líquido de não-Fermi para o sistema. Para corroborar esses resultados, estudamos o comportamento da equação de Callan-Symanzik do modelo para a função de Green renormalizada de uma partícula na aproximação de dois *loops*. Mostramos então que a sua solução não possui polos, como acontece em um líquido de Fermi, mas sim linhas de não analiticidade, que são decorrentes do valor finito do termo de dimensão anômala dos campos fermiônicos. Além disso, mostramos que a densidade de estados fermiônica decai, segundo uma lei de potência, à medida que escala de energia se aproxima da energia do *hot spot*. Esse último resultado pode ser verificado experimentalmente, em materiais como os cupratos supercondutores, por meio de experimentos de fotoemissão e microscopia de corrente de tunelamento.

Através da análise de grupo de renormalização das possíveis instabilidades de baixa energia do modelo fermiônico de *hot spots*, foi identificado um tipo simetria emergente no sistema, conhecida como simetria de pseudospin, que leva ao aparecimento de ordens emaranhadas de curto alcance na região próxima ao ponto fixo não trivial do modelo, com o fator de forma do seu parâmetro de ordem possuindo simetria SU(2). Obtivemos que uma dessas ordens envolve as fases supercondutora do tipo singlete com simetria $d_{x^2-y^2}$ e onda de densidade de carga com mesma simetria e vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ na diagonal da zona de Brillouin. Uma outra ordem emaranhada, que aparece nesse modelo no limite de baixa energia, é formada por uma fase supercondutora, chamada de onda de densidade de pares, e uma fase ordem de carga, que possuem parâmetros de ordem com simetria $d_{x^2-y^2}$ e vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ ligando os *hot spots* na direção dos eixos principais da zona de Brillouin. A emergência dessas ordens emaranhadas, no modelo fermiônico de *hot spots*, está de acordo com a física exibida por outros modelos bidimensionais [17, 19, 26, 27, 74, 89, 90] que tentam descre-

ver as propriedades físicas da região sub-dopada do diagrama de fases eletrônico dos cupratos supercondutores através do mecanismo de pareamento por flutuações antiferromagnéticas. Os resultados apresentados nesta tese para as fases onda de densidade de pares e ordem de carga também concordam, ao menos qualitativamente, com os dados experimentais para algumas famílias de cupratos supercondutores [75, 91, 92]. De fato, eles confirmam a existência de fases eletrônicas de curto alcance, como as descritas aqui, na região sub-dopada do diagrama de fases, bem abaixo da curva $T^* = T^*(p)$ que define a fase de pseudogap nesses materiais.

Por fim, a análise das chamadas susceptibilidades de carga e spin uniformes do modelo fermiônico de *hot spots*, através da inclusão de termos de flutuação quântica de dois *loops*, mostrou que as excitações fermiônicas nas regiões adjacentes aos *hot spots* adquirem um gap em ambos espectros de carga e spin. Tal comportamento indica que a superfície de Fermi do modelo aparentemente sofre uma mudança estrutural (ou topológica), à medida que o ponto fixo não trivial do sistema é aproximado. Fisicamente, isso pode ser interpretado em termos da formação de arcos ou *pockets* eletrônicos, como os que ocorrem na fase de pseudogap dos cupratos supercondutores [7].

O segundo modelo estudado nesta tese foi o modelo bidimensional de três bandas (ou modelo de Emery) para os cupratos supercondutores, que leva em contas as possíveis interações entre excitações fermiônicas localizadas nos orbitais do cobre [$\text{Cu}(3d_{x^2-y^2})$] e do oxigênio [$\text{O}(2p_x)$ e $\text{O}(2p_y)$] na célula unitária de CuO_2 [80, 81]. Por meio do emprego da transformada de Hubbard-Stratonovich, construímos uma teoria efetiva de baixa energia para a fase de corrente de *loop* Θ_{II} , que foi originalmente proposta por Varma [10] para explicar o fenômeno de quebra espontânea de simetria de reversão temporal observada na fase de pseudogap [8], e a fase emaranhada $\text{SU}(2)$ envolvendo as instabilidades supercondutora do tipo singlete do tipo $d_{x^2-y^2}$ e onda de densidade quadrupolar [17, 19]. A nossa análise das equações de campo médio do modelo de três bandas revelou que o parâmetro de ordem da fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} tende sempre a suprimir o parâmetro de ordem da fase onda de densidade quadrupolar e que, portanto, não é possível haver coexistência entre essas duas ordens nesse sistema, pelo

menos no nível de campo médio. Embora esse resultado possa possivelmente representar uma justificativa para o fato de nenhum tipo de modulação de carga com vetor de onda $\tilde{\mathbf{Q}} = (Q_0, Q_0)$ na direção da diagonal da zona de Brillouin ter sido observado experimentalmente nos cupratos supercondutores até a presente data, as soluções das equações de campo médio estudadas nesta tese aparecem somente no regime de forte acoplamento e, portanto, uma resposta definitiva sobre o assunto apenas seria possível com a inclusão de flutuações quânticas mais elevadas no modelo. Consequentemente, teríamos que recorrer a outros métodos, como o grupo de renormalização, para fazer isso.

Por último, analisamos a competição entre a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} com as fases onda de densidade de pares e ordem de carga. Através da análise numérica das equações de campo médio do modelo efetivo de três bandas, mostramos que o parâmetro de ordem da fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} suprime o correspondente parâmetro de ordem da fase ordem de carga unidirecional e, conseqüentemente, essas duas ordens tendem a não coexistir. Em total contraste a isso, mostramos que os parâmetros de ordem de ambas as fases de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} e ordem de carga bidirecional não levam à supressão um do outro para a situação física considerada no modelo. Como consequência da simetria de pseudospin $SU(2)$ do modelo efetivo de três bandas, observamos que resultados similares, no que diz respeito à competição entre as fases de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} e onda de densidade de pares, devam ocorrer, ou seja, o modelo muito provavelmente suportará a coexistência entre as fases de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} e onda de densidade de pares bidirecional. Tais resultados concordam, ao menos qualitativamente, com a verificação experimental da existência de uma fase supercondutora com modulações na direção de ambos os vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ no cuprato supercondutor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$ [75].

Com relação às nossas perspectivas futuras, pretendemos generalizar a teoria desenvolvida nesta tese com o objetivo de descrever outras fases eletrônicas do diagrama de fases dos cupratos supercondutores, como, por exemplo, a fase de metal anômalo. Nesse sentido, uma formulação que nos parece bastante adequada para esse problema consiste a derivação

de uma teoria efetiva baseada no mecanismo de flutuações antiferromagnéticas envolvendo o acoplamento dos graus de liberdade fermiônicos de toda a superfície de Fermi com um campo bosônico de excitações coletivas do tipo paramágnons. Uma outra linha de pesquisa que pretendemos seguir consistirá na investigação do efeito produzido pela fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} no estado de excitação ressonante do tipo Peierls, proposto recentemente por Kloss *et al.* [90, 93] para a descrição da fase de metal anômalo nos cupratos supercondutores, em particular o comportamento linear da resistividade com a temperatura.

Em decorrência do resultados apresentados nesta desta tese, podemos afirmar que os modelos eletrônicos fortemente correlacionados estudados aqui têm potencialmente uma grande relevância na elucidação do mecanismo responsável pelo aparecimento das diversas quebras espontâneas de simetria da região sub-dopada do diagrama de fases dos cupratos supercondutores, onde invariavelmente emerge a fase de pseudogap.

Apêndice A

Determinação das matrizes $\hat{\Gamma}_i$

Neste apêndice, mostraremos como as matrizes $\hat{\Gamma}_i$ ($i = 1, 2, 1x, 2x, 1y, 2y$), que aparecem na ação efetiva do modelo de três bandas, são obtidas. Para isso, precisaremos usar a seguinte transformada de Fourier

$$\hat{d}_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (\text{A.1})$$

$$\hat{p}_{i+\hat{\nu}/2,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i+\hat{\nu}/2)} \hat{p}_{\nu\mathbf{k},\sigma}, \quad (\text{A.2})$$

onde V denota o volume do sistema. Observamos que relaciona os operadores fermiônicos $\hat{d}_{i,\sigma}$ e $\hat{p}_{i+\hat{\nu}/2,\sigma}$ ($\nu = x, y$) dos orbitais do cobre [$\text{Cu}(3d_{x^2-y^2})$] e do oxigênio [$\text{O}(2p_x)$ e $\text{O}(2p_y)$] no espaço real com as suas respectivas versões $\hat{d}_{\mathbf{k},\sigma}$ e $\hat{p}_{\nu\mathbf{k},\sigma}$ no espaço recíproco. Desconsiderando o termo com interação U_d no sistema de CuO_2 , a substituição das definições acima na Hamiltoniana do modelo de três bandas com o parâmetro de ordem R_{II} para a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} permite-nos escrever a teoria de campo médio (CM) desse modelo como

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{CM}} = & \sum_{\mathbf{k},\sigma} \left(\hat{p}_{x\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{p}_{y\mathbf{k},\sigma}^\dagger, \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \right) \begin{pmatrix} \xi_p & \gamma(\mathbf{k}) & \gamma_x(\mathbf{k}) \\ \gamma^*(\mathbf{k}) & \xi_p & \gamma_y(\mathbf{k}) \\ \gamma_x^*(\mathbf{k}) & \gamma_y^*(\mathbf{k}) & \xi_d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{p}_{x\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{p}_{y\mathbf{k},\sigma} \\ \hat{d}_{\mathbf{k},\sigma} \end{pmatrix} \\ & + \sum_i \left(\frac{R_{II}^2}{V_{pd}} - \frac{n_p^2}{8} U_p \right), \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde as funções $\gamma_x(\mathbf{k})$, $\gamma_y(\mathbf{k})$ e $\gamma(\mathbf{k})$, que aparecem nessa Hamiltoniana, são definidas por meio das expressões

$$\gamma(\mathbf{k}) = -4t_{pp} \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y}{2}\right), \quad (\text{A.4})$$

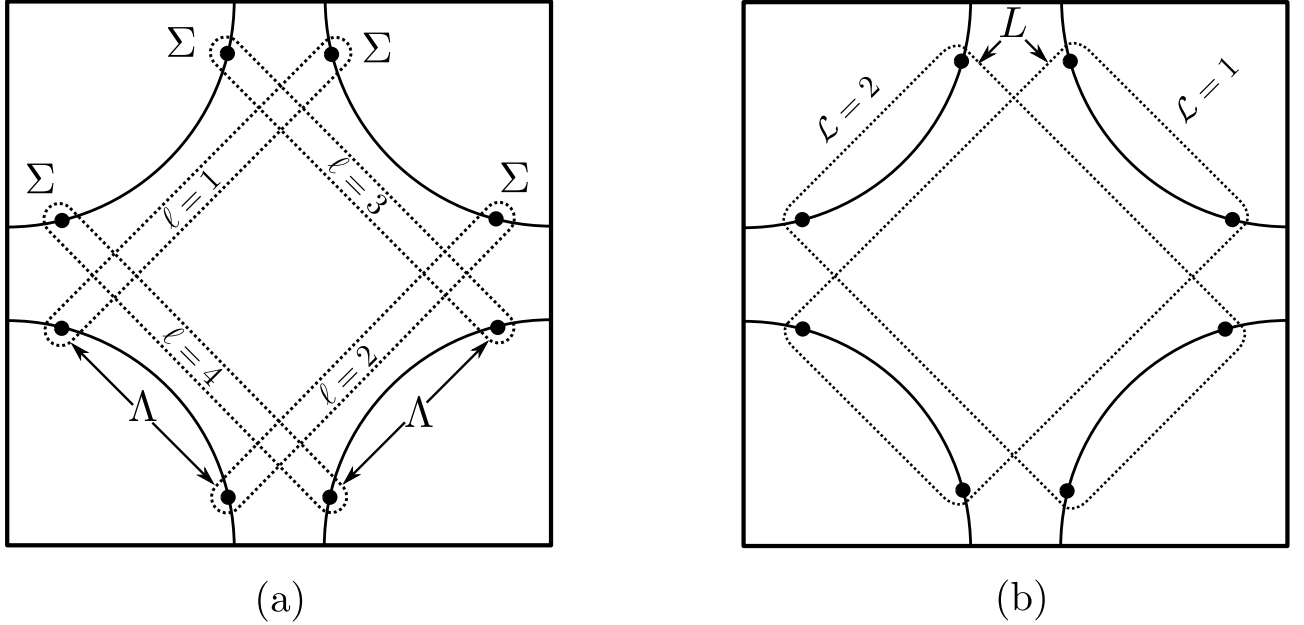


Figura A.1: (a) Esquema da superfície de Fermi para os cupratos com os quatro pares de *hot spots* ($\ell = 1, \dots, 4$) conectados pelo vetor de onda antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ [ou $\mathbf{Q}' = (-\pi, \pi)$]. (b) Os quatro pares de *hot spots* podem ser divididos em dois quartetos ortogonais, denotados na figura pelos índices $\mathcal{L} = 1$ e $\mathcal{L} = 2$. Para estabelecer todas as conexões possíveis entre os oito *hot spots*, são necessários empregar três espaços de pseudospin $SU(2)$, que nós representamos pelas letras Σ , Λ e L . O espaço de pseudospin Σ conecta diferentes *hot spots* em um mesmo par, enquanto o espaço Λ conecta os *hot spots* em diferentes pares, mas que possuem o mesmo vetor de onda antiferromagnético \mathbf{Q} . Já o espaço de pseudospin L estabelece a conexão entre os *hot spots* de quartetos ortogonais.

$$\gamma_x(\mathbf{k}) = -2t_{pd} \cos\left(\frac{k_x}{2}\right) - iR_{II} \sin\left(\frac{k_x}{2}\right), \quad (\text{A.5})$$

$$\gamma_y(\mathbf{k}) = -2t_{pd} \cos\left(\frac{k_y}{2}\right) - iR_{II} \sin\left(\frac{k_y}{2}\right). \quad (\text{A.6})$$

Como enfatizado nos Capítulos 3 e 4 desta tese, a nossa análise do modelo de três bandas se restringe apenas aos graus de liberdade do sistema na vizinhança dos chamados *hot spots*, que são definidos como a intersecção da superfície de Fermi, gerada a partir da banda de menor energia da Hamiltoniana não interagente \mathcal{H}_0 na Eq. (3.1), com zona antiferromagnética do modelo. Como consequência, isso nos levou a definir, na Eq. (3.9), os spinores de dezesseis componentes d , p_x e p_y para os férmions localizados nos orbitais do cobre e do oxigênio, segundo uma representação envolvendo três espaços de pseudospin $SU(2)$, que denotamos através dos símbolos Σ , Λ e L . De acordo com o esquema apresentado na Figura A.1, o espaço de pseudospin

Σ conecta *hot spots* que podem ser mapeados um no outro pelo vetor de onda antiferromagnético $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ [ou $\mathbf{Q}' = (-\pi, \pi)$]. Diferentes pares de *hot spots*, definidos através do mesmo vetor de onda \mathbf{Q} , são conectados, nessa representação, pelo espaço de pseudospin Λ . Por outro lado, o espaço de pseudospin L estabelece a conexão entre quartetos ortogonais de *hot spots*.

Para utilizar esses spinors, precisamos primeiramente expandir em série de Taylor todas as funções que aparecem na Hamiltoniana \mathcal{H}_{CM} na vizinhança dos *hot spots* e então expressá-las na forma de matrizes. Dessa forma, para cada função $\gamma(\mathbf{k})$, $\gamma_x(\mathbf{k})$ e $\gamma_y(\mathbf{k})$, temos respectivamente as matrizes $\hat{\Gamma}(\mathbf{k})$, $\hat{\Gamma}_x(\mathbf{k})$ e $\hat{\Gamma}_y(\mathbf{k})$, que pertencem ao espaço de pseudospin $\Sigma \otimes \Lambda \otimes L$ e são definidas da seguinte forma

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_i(\mathbf{k}) = & \left(\begin{array}{cc} ([\gamma_i(\mathbf{k})]_1 & 0 \\ 0 & [\gamma_i(\mathbf{k})]_2 \end{array} \right)_{\Sigma} & \left(\begin{array}{cc} 0 & 0 \\ [\gamma_i(\mathbf{k})]_3 & 0 \\ 0 & [\gamma_i(\mathbf{k})]_4 \end{array} \right)_{\Sigma} & \otimes & \left(\begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{array} \right)_{L} \\ & + \left(\begin{array}{cc} ([\gamma_i(\mathbf{k})]_5 & 0 \\ 0 & [\gamma_i(\mathbf{k})]_6 \end{array} \right)_{\Sigma} & \left(\begin{array}{cc} 0 & 0 \\ [\gamma_i(\mathbf{k})]_7 & 0 \\ 0 & [\gamma_i(\mathbf{k})]_8 \end{array} \right)_{\Sigma} & \otimes & \left(\begin{array}{cc} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{array} \right)_{L}, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

onde $[\gamma_i(\mathbf{k})]_{\ell}$ representa a função $\gamma(\mathbf{k})$, $\gamma_x(\mathbf{k})$ ou $\gamma_y(\mathbf{k})$ linearizada em torno do *hot spot* com vetor de onda \mathbf{k}_{ℓ} (veja a Figura 3.3). Seguindo essas definições e utilizando a representação das matrizes de Pauli nos espaços de pseudospin Σ , Λ e L , obtemos que as matrizes $\hat{\Gamma}(\mathbf{k})$, $\hat{\Gamma}_x(\mathbf{k})$ e $\hat{\Gamma}_y(\mathbf{k})$ podem ser escritas como

$$\hat{\Gamma}(\mathbf{k}) = \hat{\Gamma}_1 + \hat{\Gamma}_2(\mathbf{k}), \quad (\text{A.8})$$

$$\hat{\Gamma}_x(\mathbf{k}) = \hat{\Gamma}_{1x} + \hat{\Gamma}_{2x}k_x, \quad (\text{A.9})$$

$$\hat{\Gamma}_y(\mathbf{k}) = \hat{\Gamma}_{1y} + \hat{\Gamma}_{2y}k_y, \quad (\text{A.10})$$

onde as matrizes $\hat{\Gamma}_1$, $\hat{\Gamma}_2$, $\hat{\Gamma}_{1x}$, $\hat{\Gamma}_{2x}$, $\hat{\Gamma}_{1y}$ e $\hat{\Gamma}_{2y}$, que aparecem nos Capítulos 3 e 4 desta tese, são dadas por

$$\hat{\Gamma}_1 = -2t_{pp} \cos \delta \mathbf{1}_{\Sigma} \otimes \mathbf{1}_{\Lambda} \otimes \mathbf{1}_L, \quad (\text{A.11})$$

$$\begin{aligned} \hat{\Gamma}_2 = & t_{pp}(\text{sen } \delta \Lambda_3 \otimes L_3 + \Sigma_3 \otimes \Lambda_3)k_x \\ & + t_{pp}(\text{sen } \delta \Lambda_3 + \Sigma_3 \otimes \Lambda_3 \otimes L_3)k_y, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

$$\hat{\Gamma}_{1x} = \gamma_1 e^{-i\varphi\Lambda_3 \otimes L_3} + \gamma_2 e^{i\theta\Lambda_3 \otimes L_3} \Sigma_3 \otimes L_3, \quad (\text{A.13})$$

$$\hat{\Gamma}_{2x} = -\frac{1}{2}\gamma_1 e^{-i\varphi\Lambda_3 \otimes L_3} \Sigma_3 \otimes \Lambda_3 + \frac{1}{2}\gamma_2 e^{i\theta\Lambda_3 \otimes L_3} \Lambda_3 \otimes L_3, \quad (\text{A.14})$$

$$\hat{\Gamma}_{1y} = \gamma_1 e^{i\varphi\Lambda_3} - \gamma_2 e^{-i\theta\Lambda_3} \Sigma_3 \otimes L_3, \quad (\text{A.15})$$

$$\hat{\Gamma}_{2y} = -\frac{1}{2}\gamma_1 e^{i\varphi\Lambda_3} \Sigma_3 \otimes \Lambda_3 \otimes L_3 + \frac{1}{2}\gamma_2 e^{-i\theta\Lambda_3} \Lambda_3, \quad (\text{A.16})$$

com $\delta = (K_+ - K_-)/2$ representando o parâmetro que define a posição relativa do *hot spot* na zona de Brillouin e $\mathbb{1}_\Sigma$, $\mathbb{1}_\Lambda$ e $\mathbb{1}_L$ correspondendo, nessa ordem, às matrizes identidades nos espaços de pseudospin Σ , Λ e L . Os parâmetros φ , θ , γ_1 e γ_2 são definidos, respectivamente, da seguinte maneira

$$\tan \varphi = \frac{R_{II}}{2t_{pd}} \tan\left(\frac{\delta}{2}\right), \quad (\text{A.17})$$

$$\tan \theta = \frac{R_{II}}{2t_{pd}} \cot\left(\frac{\delta}{2}\right), \quad (\text{A.18})$$

$$\gamma_1 = \left[2t_{pd}^2 \cos^2\left(\frac{\delta}{2}\right) + \frac{R_{II}^2}{2} \sin^2\left(\frac{\delta}{2}\right) \right]^{1/2}, \quad (\text{A.19})$$

$$\gamma_2 = \left[2t_{pd}^2 \sin^2\left(\frac{\delta}{2}\right) + \frac{R_{II}^2}{2} \cos^2\left(\frac{\delta}{2}\right) \right]^{1/2}. \quad (\text{A.20})$$

Apêndice B

Cálculo do determinante das funções matriciais de Green $G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ e $G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$

B.1 Determinante da função matricial de Green $G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$

Nesta seção, explicaremos detalhadamente como se processa o cálculo do determinante $\det[G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]$ para as fases de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} (CL- Θ_{II}) e onda de densidade quadrupolar (ODQ) com simetria $d_{x^2-y^2}$. Como mencionado no Capítulo 3, isso envolverá o uso das fórmulas

$$\det \begin{pmatrix} \hat{A} & \hat{B} \\ \hat{C} & \hat{D} \end{pmatrix} = \det(\hat{A}) \det(\hat{D} - \hat{C}\hat{A}^{-1}\hat{B}), \quad (\text{B.1})$$

$$\det(\hat{A} \otimes \hat{D}) = [\det(\hat{A})]^m [\det(\hat{D})]^n, \quad (\text{B.2})$$

onde \hat{A} e \hat{D} são, respectivamente, matrizes quadradas de dimensões $n \times n$ e $m \times m$, e a matriz \hat{A} na Eq. (B.1) é invertível. De fato, aplicando duas vezes a fórmula de redução na Eq. (B.2) ao determinante $\det[G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]$, obtemos a seguinte expressão

$$\begin{aligned} & \det[G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})] \\ &= \det(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3) \det \left[-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3 - \hat{\Gamma}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \hat{\Gamma}(\mathbf{k}) \right] \det \left\{ -i\varepsilon_n + \xi_d \tau_3 - i\hat{\mathcal{M}}(\varepsilon_n, \mathbf{k}) \right. \\ & \quad \left. - \hat{\Gamma}_x^\dagger(k_x)(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \hat{\Gamma}_x(k_x) - \left[\hat{\Gamma}_y^\dagger(k_y) - \hat{\Gamma}_x^\dagger(k_x)(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \hat{\Gamma}(\mathbf{k}) \right] \left[-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3 - \hat{\Gamma}(\mathbf{k}) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. \times (-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \hat{\Gamma}(\mathbf{k}) \right]^{-1} \left[\hat{\Gamma}_y(k_y) - \hat{\Gamma}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \hat{\Gamma}_x(k_x) \right] \right\}, \quad (\text{B.3}) \end{aligned}$$

onde $\hat{\Gamma}_x(k_x) \equiv \hat{\Gamma}_{1x}\tau_3 - \hat{\Gamma}_{2x}k_x$, $\hat{\Gamma}_y(k_y) \equiv \hat{\Gamma}_{1y}\tau_3 - \hat{\Gamma}_{2y}k_y$ e $\hat{\Gamma}(\mathbf{k}) \equiv \hat{\Gamma}_1\tau_3 - \hat{\Gamma}_2(\mathbf{k})$. Empregando agora a Eq. (B.2), o primeiro determinante no lado direito da igualdade acima pode ser calculado como

$$\begin{aligned} \det(-i\varepsilon_n + \xi_p\tau_3) &= \det \left[\begin{pmatrix} (-i\varepsilon_n + \xi_p)\mathbf{1}_L \otimes \mathbf{1}_\Lambda \otimes \mathbf{1}_\Sigma & 0 \\ 0 & (-i\varepsilon_n - \xi_p)\mathbf{1}_L \otimes \mathbf{1}_\Lambda \otimes \mathbf{1}_\Sigma \end{pmatrix}_\tau \right] \\ &= \det[(-i\varepsilon_n + \xi_p)\mathbf{1}_L \otimes \mathbf{1}_\Lambda \otimes \mathbf{1}_\Sigma] \det[(-i\varepsilon_n - \xi_p)\mathbf{1}_L \otimes \mathbf{1}_\Lambda \otimes \mathbf{1}_\Sigma] \\ &= [\det(-i\varepsilon_n + \xi_p)\mathbf{1}_L]^4 [\det(\mathbf{1}_\Lambda \otimes \mathbf{1}_\Sigma)]^2 \det[(-i\varepsilon_n - \xi_p)\mathbf{1}_L]^4 [\det(\mathbf{1}_\Lambda \otimes \mathbf{1}_\Sigma)]^2 \\ &= (\varepsilon_n^2 + \xi_p^2)^8. \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Antes de calcular o segundo determinante no lado direito da igualdade na Eq. (B.3), nós primeiramente escrevemos

$$\begin{aligned} & -i\varepsilon_n + \xi_p\tau_3 - \hat{\Gamma}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p\tau_3)^{-1}\hat{\Gamma}(\mathbf{k}) \\ &= \begin{pmatrix} \left(\begin{pmatrix} \mathcal{G}_{L_x}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \mathcal{G}_{L_y}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \end{pmatrix}_L & 0 \\ 0 & \Lambda_1 \left(\begin{pmatrix} [\mathcal{G}_{L_x}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]^\dagger & 0 \\ 0 & [\mathcal{G}_{L_y}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]^\dagger \end{pmatrix}_L \Lambda_1 \right)_\tau \end{pmatrix} \\ & \times (\tau_3 \otimes \mathbf{1}_L \otimes \mathbf{1}_\Lambda \otimes \mathbf{1}_\Sigma). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Na definição acima, Λ_1 é uma matriz de Pauli no espaço de pseudospin Λ , e $\mathcal{G}_{L_x}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ e $\mathcal{G}_{L_y}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ são matrizes quadradas pertencentes a esse mesmo espaço, cuja estrutura é dada, respectivamente, por

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}_{L_x}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\ &= \begin{pmatrix} -i\varepsilon_n + \xi_p & 0 \\ 0 & -i\varepsilon_n + \xi_p \end{pmatrix}_\Lambda - t_{pp}^2 \left(\frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2} \right) \begin{pmatrix} a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k})\Sigma_3 & 0 \\ 0 & a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k})\Sigma_3 \end{pmatrix}_\Lambda, \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{G}_{L_y}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\ &= \begin{pmatrix} -i\varepsilon_n + \xi_p & 0 \\ 0 & -i\varepsilon_n + \xi_p \end{pmatrix}_\Lambda - t_{pp}^2 \left(\frac{i\varepsilon_n + \xi_p}{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2} \right) \begin{pmatrix} a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k})\Sigma_3 & 0 \\ 0 & a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k})\Sigma_3 \end{pmatrix}_\Lambda, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

com $a_\ell(\mathbf{k})$ e $b_\ell(\mathbf{k})$ ($\ell = 1, \dots, 4$) sendo funções reais do parâmetro $\delta = (K_+ - K_-)/2$ e do momento recíproco com relação aos *hot spots*, que definimos na Tabela B.1. Com isso, o

Tabela B.1: Primeiro conjunto de funções bases necessário para calcular a energia livre funcional do modelo efetivo de três bandas, definido no Capítulo 3 desta tese. Na nossa notação, os índices ℓ e $\tilde{\ell}$ designam, respectivamente, os pares de funções $\{a_\ell(\mathbf{k}), b_\ell(\mathbf{k})\}$ e $\{\tilde{a}_\ell(\mathbf{k}), \tilde{b}_\ell(\mathbf{k})\}$.

ℓ	$a_\ell(\mathbf{k})$	$b_\ell(\mathbf{k})$
1	$(k_x + k_y)^2 + \text{sen}^2 \delta (k_y - k_x + 2 \cot \delta)^2$	$2 \text{sen} \delta [(k_y + \cot \delta)^2 - (k_x - \cot \delta)^2]$
2	$(k_x + k_y)^2 + \text{sen}^2 \delta (k_y - k_x - 2 \cot \delta)^2$	$2 \text{sen} \delta [(k_y - \cot \delta)^2 - (k_x + \cot \delta)^2]$
3	$(k_x - k_y)^2 + \text{sen}^2 \delta (k_x + k_y + 2 \cot \delta)^2$	$2 \text{sen} \delta [(k_x + \cot \delta)^2 - (k_y + \cot \delta)^2]$
4	$(k_x - k_y)^2 + \text{sen}^2 \delta (k_x + k_y - 2 \cot \delta)^2$	$2 \text{sen} \delta [(k_x - \cot \delta)^2 - (k_y - \cot \delta)^2]$
$\tilde{1}$	$-\text{sen} \delta (k_x - k_y - 2 \cot \delta)$	$k_x + k_y$
$\tilde{2}$	$\text{sen} \delta (k_x - k_y + 2 \cot \delta)$	$-(k_x + k_y)$
$\tilde{3}$	$\text{sen} \delta (k_x + k_y + 2 \cot \delta)$	$k_x - k_y$
$\tilde{4}$	$-\text{sen} \delta (k_x + k_y - 2 \cot \delta)$	$-(k_x - k_y)$

determinante da matriz na Eq. (B.5) é calculado como sendo igual a

$$\det[-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3 - \hat{\Gamma}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \hat{\Gamma}(\mathbf{k})] = \prod_{\ell=1}^4 \prod_{\sigma=\pm} \left\{ \varepsilon_n^2 + \xi_p^2 + 2t_{pp}^2 \left(\frac{\varepsilon_n^2 - \xi_p^2}{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2} \right) [a_\ell(\mathbf{k}) + \sigma b_\ell(\mathbf{k})] + \frac{t_{pp}^4}{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2} [a_\ell(\mathbf{k}) + \sigma b_\ell(\mathbf{k})]^2 \right\}. \quad (\text{B.8})$$

Antes de calcular o terceiro determinante que aparece no lado direito da Eq. (B.3), vamos definir os seguintes coeficientes

$$c_1(k_x) = \sqrt{2} \left(-t_{pd} + i \frac{R_{II}}{4} k_x \right), \quad (\text{B.9})$$

$$c_1(k_y) = \sqrt{2} \left(-t_{pd} + i \frac{R_{II}}{4} k_y \right), \quad (\text{B.10})$$

$$c_2(k_x) = \frac{\sqrt{2}}{2} (-t_{pd} k_x - i R_{II}), \quad (\text{B.11})$$

$$c_2(k_y) = \frac{\sqrt{2}}{2} (-t_{pd} k_y - i R_{II}), \quad (\text{B.12})$$

em função do termo de *hopping* t_{pd} entre os orbitais do cobre $[\text{Cu}(3d_{x^2-y^2})]$ e do oxigênio $[\text{O}(2p_x)$ e $\text{O}(2p_y)]$, do parâmetro de ordem R_{II} para a fase de CL- Θ_{II} e da distância \mathbf{k} no espaço de momento para os *hot spots*. Definimos esses quatro parâmetros aqui com a finalidade de escrever o determinante $\det[G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]$ de forma compacta. Para isso, devemos ainda construir o conjunto de funções bases representado na Tabela B.2, que depende do parâmetro de *hot spot* $\delta = (K_+ - K_-)/2$ e dos coeficientes $c_i(k_x)$ e $c_i(k_y)$ ($i = 1, 2$).

Supondo que o sistema possua apenas modulações do tipo ODQ com a simetria $d_{x^2-y^2}$, o que equivale a fazer $\Delta_{\text{SC}} = 0$ na Eq. (3.19) para o parâmetro de ordem $\hat{\mathcal{M}}(\varepsilon_n, \mathbf{k})$, obtemos

Tabela B.2: Segundo conjunto de funções bases necessário para calcular a energia livre funcional do modelo efetivo de três bandas, definido no Capítulo 3 desta tese. Aqui, essas funções são definidas em termos do parâmetro $\delta = (K_+ - K_-)/2$, que indica a posição relativa do *hot spot* na zona de Brillouin, e também em termos dos coeficientes $c_i(k_x)$ e $c_i(k_y)$ ($i = 1, 2$).

Função base	Definição
$a_{1x}(k_x)$	$ c_1(k_x) ^2 + c_2(k_x) ^2$
$a_{2x}(k_x)$	$ c_1(k_x) ^2 + c_2(k_x) ^2$
$a_{3x}(k_x)$	$ c_1(k_x) ^2 + c_2(k_x) ^2$
$a_{4x}(k_x)$	$ c_1(k_x) ^2 + c_2(k_x) ^2$
$b_{1x}(k_x)$	$\text{sen } \delta [c_1(k_x) ^2 - c_2(k_x) ^2] + 2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_2(k_x)]$
$b_{2x}(k_x)$	$\text{sen } \delta [c_1(k_x) ^2 - c_2(k_x) ^2] - 2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_2(k_x)]$
$b_{3x}(k_x)$	$\text{sen } \delta [c_2(k_x) ^2 - c_1(k_x) ^2] + 2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_2(k_x)]$
$b_{4x}(k_x)$	$\text{sen } \delta [c_2(k_x) ^2 - c_1(k_x) ^2] - 2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_2(k_x)]$
$a_{1y}(k_y)$	$ c_1(k_y) ^2 + c_2(k_y) ^2$
$a_{2y}(k_y)$	$ c_1(k_y) ^2 + c_2(k_y) ^2$
$a_{3y}(k_y)$	$ c_1(k_y) ^2 + c_2(k_y) ^2$
$a_{4y}(k_y)$	$ c_1(k_y) ^2 + c_2(k_y) ^2$
$b_{1y}(k_y)$	$\text{sen } \delta [c_2(k_y) ^2 - c_1(k_y) ^2] + 2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_y)c_2(k_y)]$
$b_{2y}(k_y)$	$\text{sen } \delta [c_2(k_y) ^2 - c_1(k_y) ^2] - 2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_y)c_2(k_y)]$
$b_{3y}(k_y)$	$\text{sen } \delta [c_1(k_y) ^2 - c_2(k_y) ^2] - 2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_y)c_2(k_y)]$
$b_{4y}(k_y)$	$\text{sen } \delta [c_1(k_y) ^2 - c_2(k_y) ^2] + 2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_y)c_2(k_y)]$
$a_{1xy}(\mathbf{k})$	$2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_1(k_y) + c_2^*(k_x)c_2(k_y)] + 2 \text{sen } \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_2(k_y) - c_2^*(k_x)c_1(k_y)]$
$a_{2xy}(\mathbf{k})$	$2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_1(k_y) + c_2^*(k_x)c_2(k_y)] - 2 \text{sen } \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_2(k_y) - c_2^*(k_x)c_1(k_y)]$
$a_{3xy}(\mathbf{k})$	$2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_1(k_y) - c_2^*(k_x)c_2(k_y)] + 2 \text{sen } \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_2(k_y) + c_2^*(k_x)c_1(k_y)]$
$a_{4xy}(\mathbf{k})$	$2 \cos \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_1(k_y) - c_2^*(k_x)c_2(k_y)] - 2 \text{sen } \delta \text{Re}[c_1^*(k_x)c_2(k_y) + c_2^*(k_x)c_1(k_y)]$
$b_{1xy}(\mathbf{k})$	$2 \text{Re}[c_2^*(k_x)c_1(k_y) + c_1^*(k_x)c_2(k_y)]$
$b_{2xy}(\mathbf{k})$	$-2 \text{Re}[c_2^*(k_x)c_1(k_y) + c_1^*(k_x)c_2(k_y)]$
$b_{3xy}(\mathbf{k})$	$2 \text{Re}[c_2^*(k_x)c_1(k_y) - c_1^*(k_x)c_2(k_y)]$
$b_{4xy}(\mathbf{k})$	$-2 \text{Re}[c_2^*(k_x)c_1(k_y) - c_1^*(k_x)c_2(k_y)]$

que o terceiro determinante do lado direito da igualdade na Eq. (B.3) é dado por

$$\begin{aligned}
 & \det \left\{ -i\varepsilon_n + \xi_d \tau_3 - i\hat{\mathcal{M}} - \hat{\Gamma}_x^\dagger(k_x)(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \hat{\Gamma}_x(k_x) - \left[\hat{\Gamma}_y^\dagger(k_y) - \hat{\Gamma}_x^\dagger(k_x)(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \right. \right. \\
 & \left. \left. \times \hat{\Gamma}(\mathbf{k}) \right] \left[-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3 - \hat{\Gamma}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \hat{\Gamma}(\mathbf{k}) \right]^{-1} \left[\hat{\Gamma}_y(k_y) - \hat{\Gamma}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p \tau_3)^{-1} \hat{\Gamma}_x(k_x) \right] \right\} \\
 & = \frac{\prod_{\ell=1}^2 \prod_{m=1}^2 \mathcal{D}_\ell^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})}{(\varepsilon_n^2 + \xi_p^2)^8 \prod_{\ell=1}^4 \prod_{\sigma=\pm} \left\{ \varepsilon_n^2 + \xi_p^2 + 2t_{pp}^2 \left(\frac{\varepsilon_n^2 - \xi_p^2}{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2} \right) [a_\ell(\mathbf{k}) + \sigma b_\ell(\mathbf{k})] + \frac{t_{pp}^4}{\varepsilon_n^2 + \xi_p^2} [a_\ell(\mathbf{k}) + \sigma b_\ell(\mathbf{k})]^2 \right\}}.
 \end{aligned} \tag{B.13}$$

As funções $\mathcal{D}_\ell^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ que aparecem acima são definidas da seguinte maneira

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{D}_1^{(1)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\
 &= \{ \{ (-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))] - P_1^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_1^{(1)}(\mathbf{k}) \} \\
 & \times \{ (-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))] - P_2^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_2^{(1)}(\mathbf{k}) \} \\
 & - b^2[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))]^2, \quad (\text{B.14})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{D}_1^{(2)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\
 &= \{ \{ (-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))] - M_1^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_1^{(1)}(\mathbf{k}) \} \\
 & \times \{ (-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))] - M_2^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_2^{(1)}(\mathbf{k}) \} \\
 & - b^2[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))]^2, \quad (\text{B.15})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{D}_2^{(1)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\
 &= \{ \{ (-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))] - P_3^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_3^{(1)}(\mathbf{k}) \} \\
 & \times \{ (-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))] - P_4^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_4^{(1)}(\mathbf{k}) \} \\
 & - b^2[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))]^2, \quad (\text{B.16})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{D}_2^{(2)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\
 &= \{ \{ (-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))] - M_3^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_3^{(1)}(\mathbf{k}) \} \\
 & \times \{ (-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))] - M_4^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_4^{(1)}(\mathbf{k}) \} \\
 & - b^2[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))]^2, \quad (\text{B.17})
 \end{aligned}$$

Aqui, usamos o conjunto de funções bases definido na Tabela B.2, assim como as funções

$$P_\ell^{(0)}(\mathbf{k}) = a_{\ell x}(k_x) + a_{\ell y}(k_y) + b_{\ell x}(k_x) + b_{\ell y}(k_y), \quad (\text{B.18})$$

$$P_\ell^{(1)}(\mathbf{k}) = [\tilde{a}_\ell(\mathbf{k}) + \tilde{b}_\ell(\mathbf{k})][a_{\ell xy}(\mathbf{k}) + b_{\ell xy}(\mathbf{k})], \quad (\text{B.19})$$

$$M_\ell^{(0)}(\mathbf{k}) = a_{\ell x}(k_x) + a_{\ell y}(k_y) - b_{\ell x}(k_x) - b_{\ell y}(k_y), \quad (\text{B.20})$$

$$M_\ell^{(1)}(\mathbf{k}) = [\tilde{a}_\ell(\mathbf{k}) - \tilde{b}_\ell(\mathbf{k})][a_{\ell xy}(\mathbf{k}) - b_{\ell xy}(\mathbf{k})], \quad (\text{B.21})$$

que são escritas em termos das funções elementares das Tabelas B.1 e B.2.

Substituindo as Eqs. (B.4), (B.8) e (B.13) na Eq. (B.3), somos levados ao seguinte resultado para o determinante da matriz $G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$

$$\det[G^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})] = \prod_{\ell=1}^2 \prod_{m=1}^2 \mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}). \quad (\text{B.22})$$

Como vimos, essa é a Eq. (3.30) que antecipamos no Capítulo 3 desta tese.

Também, no Capítulo 3, empregamos a continuação analítica $\varepsilon_n \rightarrow -iz$ para as funções positivas definidas $\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$. Observando os resultados nas Eqs. (B.14)–(B.17), concluímos facilmente que cada função $\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ pode ser escrita como um produto de uma outra função com o seu complexo conjugado. Como um resultado, a continuação analítica proposta aqui pode ser feita como

$$\mathcal{D}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k}) = h_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k}) \bar{h}_{\ell}^{(m)}(z, \mathbf{k}), \quad (\text{B.23})$$

onde as funções no lado direito da equação logo acima são dadas por

$$\begin{aligned} h_1^{(1)}(z, \mathbf{k}) &= \{(z - \xi_d)[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))] - P_1^{(0)}(\mathbf{k})(z - \xi_p) + t_{pp}P_1^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ &\times \{(z - \xi_d)[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))] - P_2^{(0)}(\mathbf{k})(z - \xi_p) + t_{pp}P_2^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ &- b^2[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))][(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))], \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

$$\begin{aligned} \bar{h}_1^{(1)}(z, \mathbf{k}) &= \{(z + \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))] - P_1^{(0)}(\mathbf{k})(z + \xi_p) - t_{pp}P_1^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ &\times \{(z + \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))] - P_2^{(0)}(\mathbf{k})(z + \xi_p) - t_{pp}P_2^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ &- b^2[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))][(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))], \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

$$\begin{aligned} h_1^{(2)}(z, \mathbf{k}) &= \{(z - \xi_d)[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))] - M_1^{(0)}(\mathbf{k})(z - \xi_p) + t_{pp}M_1^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ &\times \{(z - \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))] - M_2^{(0)}(\mathbf{k})(z - \xi_p) + t_{pp}M_2^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ &- b^2[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))][(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))], \end{aligned} \quad (\text{B.26})$$

$$\begin{aligned} \bar{h}_1^{(2)}(z, \mathbf{k}) &= \{(z + \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))] - M_1^{(0)}(\mathbf{k})(z + \xi_p) - t_{pp}M_1^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ &\times \{(z + \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))] - M_2^{(0)}(\mathbf{k})(z + \xi_p) - t_{pp}M_2^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ &- b^2[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))][(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))], \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

$$\begin{aligned}
 h_2^{(1)}(z, \mathbf{k}) &= \{(z - \xi_d)[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))] - P_3^{(0)}(\mathbf{k})(z - \xi_p) + t_{pp}P_3^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(z - \xi_d)[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))] - P_4^{(0)}(\mathbf{k})(z - \xi_p) + t_{pp}P_4^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &- b^2[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))][(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))], \quad (\text{B.28})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bar{h}_2^{(1)}(z, \mathbf{k}) &= \{(z + \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))] - P_3^{(0)}(\mathbf{k})(z + \xi_p) - t_{pp}P_3^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(z + \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))] - P_4^{(0)}(\mathbf{k})(z + \xi_p) - t_{pp}P_4^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &- b^2[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))][(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))], \quad (\text{B.29})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 h_2^{(2)}(z, \mathbf{k}) &= \{(z - \xi_d)[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))] - M_3^{(0)}(\mathbf{k})(z - \xi_p) + t_{pp}M_3^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(z - \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))] - M_4^{(0)}(\mathbf{k})(z - \xi_p) + t_{pp}M_4^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &- b^2[(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))][(z - \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))], \quad (\text{B.30})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \bar{h}_2^{(2)}(z, \mathbf{k}) &= \{(z + \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))] - M_3^{(0)}(\mathbf{k})(z + \xi_p) - t_{pp}M_3^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(z + \xi_d)[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))] - M_4^{(0)}(\mathbf{k})(z + \xi_p) - t_{pp}M_4^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &- b^2[(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))][(z + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))]. \quad (\text{B.31})
 \end{aligned}$$

De acordo com metodologia explicada no Capítulo 3 para a solução das equações de campo médio para as fases de CL- Θ_{II} e ODQ, devemos primeiramente determinar as raízes na variável z das funções $h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ e $\bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$, que são denotadas por $\xi_{\ell,n}^{(m)}(\mathbf{k})$ ($n = 1, \dots, N$). Uma vez que $h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ e $\bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ são ambos polinômios de sexta ordem em z , suas raízes somente podem ser determinadas através de métodos numéricos. Dessa forma, empregamos a rotina numérica desenvolvida por Jenkins [94], e conhecida como *Algorithm 493*, para a determinação dos zeros dessas equações polinomiais. Por último, observamos que os zeros de $h_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ e $\bar{h}_\ell^{(m)}(z, \mathbf{k})$ são números reais. Na verdade, isso é uma simples consequência do fato de a Hamiltoniana do modelo de três bandas ser hermitiana.

B.2 Determinante da função matricial de Green $G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$

O procedimento para o cálculo do determinante $\det[G_\alpha^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})]$, que aparece nas equa-

ções de campo médio tratando da competição entre a fase de corrente de *loop* do tipo Θ_{II} (CL- Θ_{II}) com a fase emaranhada envolvendo onda de densidade de pares (ODP) e a ordem de carga (OC) com simetria $d_{x^2-y^2}$ e vetores de onda na direção dos eixos principais da zona de Brillouin, é basicamente o mesmo que foi utilizado na seção anterior. Dessa forma, utilizando os parâmetros de ordem nas Eqs. (4.11) e (4.13) com o fator Δ_{ODP} nulo, obtemos o seguinte resultado

$$\det[G_{\text{OC-1}}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})] = \prod_{\ell=1}^2 \prod_{m=1}^2 \mathcal{D}_{\text{OC-1}}^{\ell m}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}), \quad (\text{B.32})$$

$$\det[G_{\text{OC-2}}^{-1}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})] = \prod_{\ell=1}^1 \prod_{m=1}^2 \mathcal{D}_{\text{OC-2}}^{\ell m}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}). \quad (\text{B.33})$$

Aqui, as funções $\mathcal{D}_{\text{OC-1}}^{\ell m}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ referem-se à fase OC unidirecional com modulações na direção do vetor de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e simetria $d_{x^2-y^2}$. Recorrendo às definições dadas nas Tabelas B.1 e B.2, essas funções podem ser simplesmente escritas como

$$\begin{aligned} & \mathcal{D}_{\text{OC-1}}^{11}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\ &= \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))] - P_1^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_1^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ & \times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))] - P_3^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_3^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ & - b_{\text{OC-1}}^2(\varepsilon_n, \mathbf{k})[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))]^2, \quad (\text{B.34}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{D}_{\text{OC-1}}^{12}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\ &= \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))] - M_1^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_1^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ & \times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))] - M_3^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_3^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ & - b_{\text{OC-1}}^2(\varepsilon_n, \mathbf{k})[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))]^2, \quad (\text{B.35}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathcal{D}_{\text{OC-1}}^{21}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\ &= \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))] - P_2^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_2^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ & \times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))] - P_4^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_4^{(1)}(\mathbf{k})\} \\ & - b_{\text{OC-1}}^2(\varepsilon_n, \mathbf{k})[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))]^2, \quad (\text{B.36}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{D}_{\text{OC-1}}^{22}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\
 &= |\{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))] - M_2^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_2^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))] - M_4^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_4^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &- b_{\text{OC-1}}^2(\varepsilon_n, \mathbf{k})[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))]|^2. \quad (\text{B.37})
 \end{aligned}$$

Por outro lado, as funções $\mathcal{D}_{\text{OC-2}}^{\ell m}(i\varepsilon_n, \mathbf{k})$ descrevem a fase OC bidirecional com modulações na direção dos vetores de onda $\mathbf{Q}_x = (Q_0, 0)$ e $\mathbf{Q}_y = (0, Q_0)$ e simetria $d_{x^2-y^2}$. Utilizando definições dadas nas Tabelas B.1 e B.2, essas funções podem ser escritas da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{D}_{\text{OC-2}}^{11}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\
 &= |\{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))] - P_1^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_1^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))] - P_2^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_2^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))] - P_3^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_3^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))] - P_4^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}P_4^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &- b_{\text{OC-2}}^2(\varepsilon_n, \mathbf{k})\{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) \\
 &+ b_2(\mathbf{k}))] - [P_1^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) + t_{pp}P_1^{(1)}(\mathbf{k})][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) + b_2(\mathbf{k}))] - [P_2^{(0)}(\mathbf{k}) \\
 &\times (-i\varepsilon_n + \xi_p) + t_{pp}P_2^{(1)}(\mathbf{k})][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) + b_1(\mathbf{k}))]\}\{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 \\
 &- t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))] - [P_3^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) + t_{pp}P_3^{(1)}(\mathbf{k})] \\
 &\times [(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) + b_4(\mathbf{k}))] - [P_4^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) + t_{pp}P_4^{(1)}(\mathbf{k})][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 \\
 &- t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) + b_3(\mathbf{k}))]\}|^2, \quad (\text{B.38})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \mathcal{D}_{\text{OC-2}}^{12}(i\varepsilon_n, \mathbf{k}) \\
 &= |\{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))] - M_1^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_1^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))] - M_2^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_2^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))] - M_3^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_3^{(1)}(\mathbf{k})\} \\
 &\times \{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))] - M_4^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) - t_{pp}M_4^{(1)}(\mathbf{k})\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & -b_{\text{OC-2}}^2(\varepsilon_n, \mathbf{k})\{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) \\
 & - b_2(\mathbf{k}))] - [M_1^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) + t_{pp}M_1^{(1)}(\mathbf{k})][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_2(\mathbf{k}) - b_2(\mathbf{k}))] - [M_2^{(0)}(\mathbf{k}) \\
 & \times (-i\varepsilon_n + \xi_p) + t_{pp}M_2^{(1)}(\mathbf{k})][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_1(\mathbf{k}) - b_1(\mathbf{k}))]\}\{(-i\varepsilon_n + \xi_d)[(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 \\
 & - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))] - [M_3^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) + t_{pp}M_3^{(1)}(\mathbf{k})] \\
 & \times [(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 - t_{pp}^2(a_4(\mathbf{k}) - b_4(\mathbf{k}))] - [M_4^{(0)}(\mathbf{k})(-i\varepsilon_n + \xi_p) + t_{pp}M_4^{(1)}(\mathbf{k})][(-i\varepsilon_n + \xi_p)^2 \\
 & - t_{pp}^2(a_3(\mathbf{k}) - b_3(\mathbf{k}))]\}^2. \tag{B.39}
 \end{aligned}$$

Para resolver as equações de campo médio descrevendo a competição entre as fases de CL- Θ_{II} e OC unidirecional e bidirecional, tomando como ponto de partida os resultados nas Eqs. (B.32) e (B.33), seguimos basicamente o procedimento numérico que foi explicado na última seção para o caso da solução das equações de campo médio para os parâmetros de ordem das fases de CL- Θ_{II} e ODQ.

Bibliografia

- [1] J. G. Bednorz and K. A. Müller, *Possible high- T_C superconductivity in the Ba–La–Cu–O system*, *Zeitschrift für Physik B: Condensed Matter* **64**, 189 (1986).
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, *Physical Review* **108**, 1175 (1957).
- [3] P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen, *Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity*, *Reviews of Modern Physics* **78**, 17 (2006).
- [4] M. R. Norman and C. Pépin, *The electronic nature of high temperature cuprate superconductors*, *Reports on Progress in Physics* **66**, 1547 (2003).
- [5] B. Keimer, S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida, and J. Zaanen, *From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides*, *Nature* **518**, 179 (2015).
- [6] A. Damascelli, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors*, *Reviews of Modern Physics* **75**, 473 (2003).
- [7] D. Chowdhury and S. Sachdev, *Quantum Criticality in Condensed Matter* (WORLD SCIENTIFIC, 2015) Chap. 1, pp. 1–43.
- [8] B. Fauqué, Y. Sidis, V. Hinkov, S. Pailhès, C. T. Lin, X. Chaud, and P. Bourges, *Magnetic Order in the Pseudogap Phase of High- T_C Superconductors*, *Physical Review Letters* **96**, 197001 (2006).
- [9] L. Mangin-Thro, Y. Sidis, A. Wildes, and P. Bourges, *Intra-unit-cell magnetic correlations near optimal doping in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.85}$* , *Nature Communications* **6**, 7705 (2015).

- [10] C. M. Varma, *Theory of the pseudogap state of the cuprates*, [Physical Review B](#) **73**, 155113 (2006).
- [11] J. Xia, E. Schemm, G. Deutscher, S. A. Kivelson, D. A. Bonn, W. N. Hardy, R. Liang, W. Siemons, G. Koster, M. M. Fejer, and A. Kapitulnik, *Polar Kerr-Effect Measurements of the High-Temperature $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ Superconductor: Evidence for Broken Symmetry near the Pseudogap Temperature*, [Physical Review Letters](#) **100**, 127002 (2008).
- [12] C. M. Varma, P. B. Littlewood, S. Schmitt-Rink, E. Abrahams, and A. E. Ruckenstein, *Phenomenology of the normal state of Cu – O high-temperature superconductors*, [Physical Review Letters](#) **63**, 1996 (1989).
- [13] B. J. Ramshaw, S. E. Sebastian, R. D. McDonald, J. Day, B. S. Tan, Z. Zhu, J. B. Betts, R. Liang, D. A. Bonn, W. N. Hardy, and N. Harrison, *Quasiparticle mass enhancement approaching optimal doping in a high- T_C superconductor*, [Science](#) **348**, 317 (2015).
- [14] A. Abanov and A. V. Chubukov, *Spin-Fermion Model near the Quantum Critical Point: One-Loop Renormalization Group Results*, [Physical Review Letters](#) **84**, 5608 (2000).
- [15] A. Abanov, A. V. Chubukov, and J. Schmalian, *Quantum-critical theory of the spin-fermion model and its application to cuprates: Normal state analysis*, [Advances in Physics](#) **52**, 119 (2003).
- [16] A. Abanov and A. Chubukov, *Anomalous Scaling at the Quantum Critical Point in Itinerant Antiferromagnets*, [Physical Review Letters](#) **93**, 255702 (2004).
- [17] M. A. Metlitski and S. Sachdev, *Quantum phase transitions of metals in two spatial dimensions. II. Spin density wave order*, [Physical Review B](#) **82**, 075128 (2010).
- [18] M. A. Metlitski and S. Sachdev, *Instabilities near the onset of spin density wave order in metals*, [New Journal of Physics](#) **12**, 105007 (2010).

- [19] K. B. Efetov, H. Meier, and C. Pépin, *Pseudogap state near a quantum critical point*, [Nature Physics](#) **9**, 442 (2013).
- [20] H. Meier, M. Eimenkel, C. Pépin, and K. B. Efetov, *Effect of magnetic field on the competition between superconductivity and charge order below the pseudogap state*, [Physical Review B](#) **88**, 020506 (2013).
- [21] D. LeBoeuf, S. Kramer, W. N. Hardy, R. Liang, D. A. Bonn, and C. Proust, *Thermodynamic phase diagram of static charge order in underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$* , [Nature Physics](#) **9**, 79 (2013).
- [22] H. Meier, C. Pépin, M. Eimenkel, and K. B. Efetov, *Cascade of phase transitions in the vicinity of a quantum critical point*, [Physical Review B](#) **89**, 195115 (2014).
- [23] V. S. de Carvalho and H. Freire, *Breakdown of Fermi liquid behavior near the hot spots in a two-dimensional model: A two-loop renormalization group analysis*, [Nuclear Physics B](#) **875**, 738 (2013).
- [24] V. S. de Carvalho and H. Freire, *Evidence of a short-range incommensurate d -wave charge order from a fermionic two-loop renormalization group calculation of a 2D model with hot spots*, [Annals of Physics](#) **348**, 32 (2014).
- [25] H. Freire, V. S. de Carvalho, and C. Pépin, *Renormalization group analysis of the pair-density-wave and charge order within the fermionic hot-spot model for cuprate superconductors*, [Physical Review B](#) **92**, 045132 (2015).
- [26] C. Pépin, V. S. de Carvalho, T. Kloss, and X. Montiel, *Pseudogap, charge order, and pairing density wave at the hot spots in cuprate superconductors*, [Physical Review B](#) **90**, 195207 (2014).
- [27] Y. Wang and A. Chubukov, *Charge-density-wave order with momentum $(2Q, 0)$ and $(0, 2Q)$ within the spin-fermion model: Continuous and discrete symmetry breaking, preemptive*

- composite order, and relation to pseudogap in hole-doped cuprates*, [Physical Review B **90**, 035149 \(2014\)](#).
- [28] V. S. de Carvalho, T. Kloss, X. Montiel, H. Freire, and C. Pépin, *Strong competition between Θ_{II} -loop-current order and d-wave charge order along the diagonal direction in a two-dimensional hot spot model*, [Physical Review B **92**, 075123 \(2015\)](#).
- [29] V. S. de Carvalho, C. Pépin, and H. Freire, *Coexistence of Θ_{II} -loop-current order with checkerboard d-wave CDW/PDW order in a hot-spot model for cuprate superconductors*, [Physical Review B **93**, 115144 \(2016\)](#).
- [30] S. Blanco-Canosa, A. Frano, E. Schierle, J. Porras, T. Loew, M. Minola, M. Bluschke, E. Weschke, B. Keimer, and M. Le Tacon, *Resonant x-ray scattering study of charge-density wave correlations in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$* , [Physical Review B **90**, 054513 \(2014\)](#).
- [31] N. W. Ashcroft and D. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College Publishing, Fort Worth, 1976).
- [32] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons, New York, 1996).
- [33] G. D. Mahan, *Condensed Matter in a Nutshell* (Princeton University Press, Princeton, 2011).
- [34] A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinski, *Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics*, Dover Books on Physics (Dover Publications, New York, 1975).
- [35] G. Mahan, *Many-Particle Physics* (Plenum Press, New York, 1990).
- [36] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
- [37] L. H. Ryder, *Quantum Field Theory* (Cambridge University Press, New York, 1996).

-
- [38] M. E. Peskin and D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory* (Addison-Wesley Publishing Company, Reading, 1995).
- [39] A. Zee, *Quantum Field Theory in a Nutshell* (Princeton University Press, Princeton, 2010).
- [40] A. Altland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
- [41] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2013).
- [42] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, Cambridge, 2011).
- [43] S. Sachdev and B. Keimer, *Quantum criticality*, [Physics Today](#) **64**, 29 (2011).
- [44] J. A. Hertz, *Quantum critical phenomena*, [Physical Review B](#) **14**, 1165 (1976).
- [45] A. J. Millis, *Effect of a nonzero temperature on quantum critical points in itinerant fermion systems*, [Physical Review B](#) **48**, 7183 (1993).
- [46] N. Furukawa and T. M. Rice, *Instability of a Landau - Fermi liquid as the Mott insulator is approached*, [Journal of Physics: Condensed Matter](#) **10**, L381 (1998).
- [47] J. Sólyom, *The Fermi gas model of one-dimensional conductors*, [Advances in Physics](#) **28**, 201 (1979).
- [48] R. Shankar, *Renormalization-group approach to interacting fermions*, [Reviews of Modern Physics](#) **66**, 129 (1994).
- [49] B. Delamotte, *A hint of renormalization*, [American Journal of Physics](#) **72**, 170 (2004).
- [50] A. Chubukov, *Hidden one-dimensional physics in 2D critical metals*, [Physics](#) **3**, 70 (2010).
- [51] H. v. Löhneysen, A. Rosch, M. Vojta, and P. Wölfle, *Fermi-liquid instabilities at magnetic quantum phase transitions*, [Reviews of Modern Physics](#) **79**, 1015 (2007).

- [52] H. Freire, E. Corrêa, and A. Ferraz, *Field-theoretical renormalization group for a flat two-dimensional Fermi surface*, [Physical Review B](#) **71**, 165113 (2005).
- [53] L. Balents and M. P. A. Fisher, *Weak-coupling phase diagram of the two-chain Hubbard model*, [Physical Review B](#) **53**, 12133 (1996).
- [54] H.-H. Lin, L. Balents, and M. P. A. Fisher, *N-chain Hubbard model in weak coupling*, [Physical Review B](#) **56**, 6569 (1997).
- [55] S. Weinberg, *The Quantum Theory of Fields*, Vol. II (Cambridge University Press, New York, 2005).
- [56] S. Moroz, S. Floerchinger, R. Schmidt, and C. Wetterich, *Efimov effect from functional renormalization*, [Physical Review A](#) **79**, 042705 (2009).
- [57] P. Kopietz, L. Bartosch, and F. Schütz, *Introduction to the Functional Renormalization Group*, Lecture Notes in Physics 798 (Springer, Berlin Heidelberg, 2010).
- [58] C. G. Callan, *Broken Scale Invariance in Scalar Field Theory*, [Physical Review D](#) **2**, 1541 (1970).
- [59] K. Symanzik, *Small distance behaviour in field theory and power counting*, [Communications in Mathematical Physics](#) **18**, 227 (1970).
- [60] S. Weinberg, *New Approach to the Renormalization Group*, [Physical Review D](#) **8**, 3497 (1973).
- [61] A. Ferraz, *Non-Fermi liquid in a truncated two-dimensional Fermi surface*, [Physical Review B](#) **68**, 075115 (2003).
- [62] P. C. Hohenberg, *Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions*, [Physical Review](#) **158**, 383 (1967).

-
- [63] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 1996).
- [64] S. Coleman, *There are no Goldstone bosons in two dimensions*, [Communications in Mathematical Physics](#) **31**, 259 (1973).
- [65] N. D. Mermin and H. Wagner, *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models*, [Physical Review Letters](#) **17**, 1133 (1966).
- [66] P. Coleman, *Introduction to Many-Body Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2015).
- [67] S. A. Hartnoll, D. M. Hofman, M. A. Metlitski, and S. Sachdev, *Quantum critical response at the onset of spin-density-wave order in two-dimensional metals*, [Physical Review B](#) **84**, 125115 (2011).
- [68] P. Fulde and R. A. Ferrell, *Superconductivity in a Strong Spin-Exchange Field*, [Physical Review](#) **135**, A550 (1964).
- [69] A. I. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, *Inhomogeneous State of Superconductors*, *Soviet Physics: Journal of Experimental and Theoretical Physics* **20**, 762 (1965).
- [70] E. Fradkin, S. A. Kivelson, and J. M. Tranquada, *Colloquium: Theory of intertwined orders in high temperature superconductors*, [Reviews of Modern Physics](#) **87**, 457 (2015).
- [71] D. Chowdhury and S. Sachdev, *Density-wave instabilities of fractionalized Fermi liquids*, [Physical Review B](#) **90**, 245136 (2014).
- [72] S. Whitsitt and S. Sachdev, *Renormalization group analysis of a fermionic hot-spot model*, [Physical Review B](#) **90**, 104505 (2014).
- [73] Y. Wang, D. F. Agterberg, and A. Chubukov, *Interplay between pair- and charge-density-wave orders in underdoped cuprates*, [Physical Review B](#) **91**, 115103 (2015).

- [74] Y. Wang, D. F. Agterberg, and A. Chubukov, *Coexistence of Charge-Density-Wave and Pair-Density-Wave Orders in Underdoped Cuprates*, [Physical Review Letters](#) **114**, 197001 (2015).
- [75] M. H. Hamidian, S. D. Edkins, S. H. Joo, A. Kostin, H. Eisaki, S. Uchida, M. J. Lawler, E. A. Kim, A. P. MacKenzie, K. Fujita, J. Lee, and J. C. S. Davis, *Detection of a Cooper-pair density wave in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+x}$* , [Nature](#) **532**, 343 (2016).
- [76] H. Freire, E. Corrêa, and A. Ferraz, *Insulating spin liquid in the lightly doped two-dimensional Hubbard model*, [Physical Review B](#) **73**, 073103 (2006).
- [77] A. I. Larkin and A. A. Varlamov, *Superconductivity: Conventional and Unconventional Superconductors*, edited by K. H. Bennemann and J. B. Ketterson (Springer Berlin Heidelberg, Berlin Heidelberg, 2008) Chap. Fluctuation Phenomena in Superconductors, pp. 369–458.
- [78] H. Fukuyama, T. M. Rice, C. M. Varma, and B. I. Halperin, *Some properties of the one-dimensional Fermi model*, [Physical Review B](#) **10**, 3775 (1974).
- [79] U. Chatterjee, M. Shi, D. Ai, J. Zhao, A. Kanigel, S. Rosenkranz, H. Raffy, Z. Z. Li, K. Kadowaki, D. G. Hinks, Z. J. Xu, J. S. Wen, G. Gu, C. T. Lin, H. Claus, M. R. Norman, M. Randeria, and J. C. Campuzano, *Observation of a d-wave nodal liquid in highly underdoped $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaO}_{8+\delta}$* , [Nature Physics](#) **6**, 99 (2010).
- [80] V. J. Emery, *Theory of high- T_C superconductivity in oxides*, [Physical Review Letters](#) **58**, 2794 (1987).
- [81] C. Varma, S. Schmitt-Rink, and E. Abrahams, *Charge transfer excitations and superconductivity in ionic metals*, [Solid State Communications](#) **62**, 681 (1987).
- [82] M. H. Fischer and E.-A. Kim, *Mean-field analysis of intra-unit-cell order in the Emery model of the CuO_2 plane*, [Physical Review B](#) **84**, 144502 (2011).

- [83] Y. Li, V. Baledent, N. Barisic, Y. Cho, B. Fauqué, Y. Sidis, G. Yu, X. Zhao, P. Bourges, and M. Greven, *Unusual magnetic order in the pseudogap region of the superconductor HgBa₂CuO_{4+δ}*, *Nature* **455**, 372 (2008).
- [84] Y. Sidis and P. Bourges, *Evidence for Intra-Unit-Cell magnetic order in the pseudo-gap state of high- T_C cuprates*, *Journal of Physics: Conference Series* **449**, 012012 (2013).
- [85] R. Thomale and M. Greiter, *Numerical analysis of three-band models for CuO planes as candidates for a spontaneous T -violating orbital current phase*, *Physical Review B* **77**, 094511 (2008).
- [86] R. Comin, R. Sutarto, E. H. da Silva Neto, L. Chauviere, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, F. He, G. A. Sawatzky, and A. Damascelli, *Broken translational and rotational symmetry via charge stripe order in underdoped YBa₂Cu₃O_{6+y}*, *Science* **347**, 1335 (2015).
- [87] M. Hamidian, S. Edkins, K. Fujita, A. Kostin, A. Mackenzie, H. Eisaki, S. Uchida, M. Lawler, E.-A. Kim, S. Sachdev, and J. Séamus Davis, *Magnetic-field Induced Interconversion of Cooper Pairs and Density Wave States within Cuprate Composite Order*, (2015), [arXiv:1508.00620](https://arxiv.org/abs/1508.00620) .
- [88] Y. Wang and A. V. Chubukov, *Interplay between unidirectional and bidirectional charge-density-wave orders in underdoped cuprates*, *Physical Review B* **92**, 245140 (2015).
- [89] T. Kloss, X. Montiel, and C. Pépin, *$SU(2)$ symmetry in a realistic spin-fermion model for cuprate superconductors*, *Physical Review B* **91**, 205124 (2015).
- [90] T. Kloss, X. Montiel, and C. Pépin, *Local particle-hole pair excitations by $SU(2)$ symmetry fluctuations*, *Scientific Reports* **7**, 3477 (2017).
- [91] K. Fujita, M. H. Hamidian, S. D. Edkins, C. K. Kim, Y. Kohsaka, M. Azuma, M. Takano, H. Takagi, H. Eisaki, S.-i. Uchida, A. Allais, M. J. Lawler, E.-A. Kim, S. Sachdev, and

- J. C. S. Davis, *Direct phase-sensitive identification of a d-form factor density wave in underdoped cuprates*, [Proceedings of the National Academy of Sciences](#) **111**, E3026 (2014).
- [92] R. Comin, R. Sutarto, F. He, E. H. da Silva Neto, L. Chauviere, A. Frano, R. Liang, W. N. Hardy, D. A. Bonn, Y. Yoshida, H. Eisaki, A. J. Achkar, B. Hawthorn, D. G. Keimer, G. A. Sawatzky, and A. Damascelli, *Symmetry of charge order in cuprates*, [Nature Materials](#) **14**, 796 (2015).
- [93] T. Kloss, X. Montiel, V. S. de Carvalho, H. Freire, and C. Pépin, *Charge orders, magnetism and pairings in the cuprate superconductors*, [Reports on Progress in Physics](#) **79**, 084507 (2016).
- [94] M. A. Jenkins, *Algorithm 493: Zeros of a Real Polynomial [C2]*, [ACM Transactions on Mathematical Software](#) **1**, 178 (1975).