

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA

INSTITUTO DE FÍSICA

TESE DE DOUTORADO

**O Líquido de Spin Isolante no Modelo de Hubbard
Bidimensional Levemente Dopado**

Por

Hermann Freire Ferreira Lima e Silva

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

Brasília - DF

Maio, 2006

TESE DE DOUTORADO

**O Líquido de Spin Isolante no Modelo de Hubbard
Bidimensional Levemente Dopado**

Por

Hermann Freire Ferreira Lima e Silva

Orientador

Prof. Dr. Álvaro Ferraz Filho

Resumo

O nosso objetivo principal nesta tese consiste em estudar as propriedades de baixa energia do modelo de Hubbard bidimensional (2d) levemente fora de uma situação de banda semi-cheia sob o ponto de vista do método do grupo de renormalização (GR), utilizando a aproximação até 2 loops. Vamos desenvolver essa técnica, adaptando-a convenientemente ao nosso problema de interesse. Como um teste inicial para a nossa abordagem, vamos aplicar essa metodologia para o modelo de Hubbard unidimensional (1d) que, também, se encontra fora de uma situação de banda semi-cheia. Como resultado disso, vamos mostrar que essa técnica reproduz corretamente a física de baixa energia associada ao sistema e que esse modelo, de fato, é descrito pelo chamado líquido de Luttinger nesse limite. Em seguida, vamos voltar para o nosso problema 2d. Nesse caso, em um regime de fraco acoplamento, vamos observar que esse modelo parece ser bem descrito pela teoria do líquido de Fermi no qual as excitações do tipo quasipartícula estão adiabaticamente conectadas aos elétrons do modelo não-interagente. Por outro lado, em um regime de acoplamento intermediário, vamos argumentar que os nossos resultados são consistentes com uma interpretação de formação de um estado de líquido de spin isolante (LSI) no sistema com “gaps” tanto de carga quanto de spin no espectro de excitação correspondente. Esse estado seria, portanto, um exemplo interessante de líquido de Não-Fermi em 2d, uma vez que ele não pode ser associado a nenhuma quebra espontânea de simetria contínua obtida a partir das interações presentes no modelo. Por conseguinte, ele deve apresentar apenas um ordenamento de curto alcance. Finalmente, vamos sugerir que esse último resultado pode ser relevante para o problema da supercondutividade de alta temperatura nos cupratos e que o regime de pseudogap observado nesses sistemas poderia ser interpretado em termos de um LSI.

Abstract

Our main goal here is to analyze the low-energy properties of the two-dimensional (2d) Hubbard model slightly away from half-filling from a renormalization group point of view within the two-loop approximation. We will develop this technique adapting it conveniently to our problem at hand. As a warm-up test for our approach, we will apply the same methodology to the one-dimensional (1d) Hubbard model away from half-filling. As a result, we will show that this technique reproduces correctly the low-energy physics of the system, and the model is indeed described by the so-called Luttinger liquid. Next, we move on to the 2d problem. In this latter case, in a weak-coupling regime, we will observe that this model seems to be well described by Fermi liquid theory with quasiparticles adiabatically connected to the electrons in the noninteracting case. On the other hand, in an intermediate interacting regime, we will argue that our results are consistent with the interpretation of an insulating spin liquid (ISL) formation in the system with gaps in both charge and spin excitation spectra. This state would be an interesting example of a Non-Fermi liquid in 2d, since it cannot be associated to any spontaneously broken continuous symmetry due to the interactions present in the model. Consequently, it should have only short-range order. Finally, we will suggest that this latter result could be potentially relevant for describing the physics of the underdoped regime of the high- T_c cuprate superconductors, and the pseudogap phase observed in these systems could be interpreted in terms of an ISL.

Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço à minha família (meu pai Hélio, minha mãe Verônica e meus irmãos Igor e Vinícius) por me apoiar e encorajar, especialmente, nos momentos mais difíceis.

Agradeço, também, à minha namorada Carolina por sua paciência enquanto eu escrevia esta tese de doutorado e, além disso, pelo seu carinho.

Também quero expressar aqui o meu agradecimento ao meu colega de sala e de trabalho Eberth Corrêa com quem discuti vários tópicos relacionados a esta tese.

Agradeço, também, ao meu grande amigo Chrystian de A. Siqueira por me encorajar nos momentos mais difíceis e, também, pelas ótimas discussões sobre física que tivemos desde a época de graduação.

Agradeço, também, ao Prof. Álvaro Ferraz por me orientar durante o mestrado e o doutorado em física e, principalmente, por me incentivar em todos os estágios deste trabalho.

Por fim, agradeço ao apoio financeiro fornecido pelo CNPq ao longo deste meu doutorado em física.

Sumário

1	Introdução	9
1.1	As duas teorias de Landau e suas falhas em sistemas de baixa dimensionalidade	10
1.2	A fenomenologia dos supercondutores de alta-temperatura	14
1.3	Os estados de líquido de spin isolante	17
1.4	Renormalização: Uma perspectiva histórica	19
1.5	Estrutura desta tese	23
2	O Modelo de Hubbard	26
2.1	Elétrons confinados em uma linha	27
2.1.1	O modelo “tight-binding”	27
2.1.2	Incluindo a interação elétron-elétron no modelo	29
2.2	Elétrons confinados em um plano	32
2.2.1	O modelo “tight-binding” com interações	32
2.2.2	Simetrias do modelo	34
2.2.3	Limite de fraco acoplamento: $W \gg U$	35
2.2.4	Limite de forte acoplamento: $U \gg W$	37
2.2.5	O estado de Nagaoka	39
2.2.6	Sistemas com acoplamentos intermediários ($U \sim W$)	40
2.3	Teoria de transição de fase “clássica” ou de Landau-Ginzburg-Wilson	41

2.4	Teorema de Mermin-Wagner	44
2.5	Considerações gerais	45
3	O Grupo de Renormalização	47
3.1	A filosofia do método	48
3.2	O problema central desta tese	52
3.3	A abordagem de Wilson	57
3.3.1	Representação de integral funcional do sistema	57
3.3.2	Estágios da transformação do GR de Wilson	59
3.3.3	O caso da teoria livre	62
3.3.4	Relevante, irrelevante ou marginal	64
3.4	A abordagem de teoria de campos: Uma discussão qualitativa	67
4	O Líquido de Luttinger em 1d	70
4.1	O modelo de g-ologia	71
4.2	Teoria de perturbação convencional até 1 loop	75
4.3	O grupo de renormalização até 1 loop	79
4.4	Cálculo da auto-energia do modelo - O peso da quasipartícula	85
4.5	O grupo de renormalização até 2 loops	91
4.6	Cálculo das susceptibilidades de carga e spin uniformes	95
5	Renormalização em Direção à Superfície de Fermi 2d	100
5.1	O modelo de g-ologia para o caso 2d	101
5.2	Teoria de perturbação convencional até 1 loop	106
5.3	O grupo de renormalização até 1 loop	109
5.4	Cálculo da auto-energia do modelo 2d - O peso da quasipartícula nesse sistema	114
5.5	O grupo de renormalização até 2 loops	120
5.6	Cálculo das susceptibilidades de carga e spin uniformes	124

6	Resultados Numéricos	129
6.1	A estratégia numérica	129
6.2	O modelo de Hubbard 2d no regime de fraco acoplamento	132
6.2.1	O fluxo de renormalização até 1 loop	132
6.2.2	O fluxo de renormalização até 2 loops	134
6.2.3	O fluxo do peso da quasipartícula no sistema	135
6.3	O modelo de Hubbard 2d no regime de acoplamento intermediário	137
6.3.1	O fluxo de renormalização até 1 loop	137
6.3.2	O fluxo de renormalização até 2 loops	139
6.3.3	O fluxo do peso da quasipartícula no sistema	142
6.4	O fluxo das susceptibilidades de carga e spin uniformes - O cenário do líquido de spin isolante	143
7	Conclusão	149
A	Sobre a Renormalizabilidade das Teorias 1d e 2d	158
B	Os Domínios de Integração \mathcal{D}_i	163
	Referências Bibliográficas	166

Capítulo 1

Introdução

Sistemas eletrônicos fortemente correlacionados em baixa dimensionalidade representam um tema importante atualmente na física da matéria condensada tanto teórica quanto experimental. Isso porque o entendimento desses sistemas desafiam importantes teorias que, por sua vez, são responsáveis por muitos dos avanços tecnológicos vistos ao longo do século XX. Uma dessas teorias consiste na chamada teoria do líquido de Fermi [1] e a outra consiste na teoria da quebra espontânea de simetria [2], ambas desenvolvidas, originalmente, por Landau na década de 50. Durante muito tempo, elas representaram os dois pilares que forneciam a sustentação para o entendimento de todos os mecanismos envolvendo a matéria em seu estado sólido ou líquido. Esse status mudou, principalmente no final do século XX, com a descoberta de novas classes de materiais que exibem propriedades eletrônicas e magnéticas bastante incomuns se comparadas com essas teorias tradicionais.

Neste capítulo introdutório, vamos descrever alguns desses avanços recentes, principalmente do ponto de vista teórico, para nos prepararmos para a nossa discussão posterior que será de natureza mais técnica. Vamos, inicialmente, discutir onde e por que as duas teorias de Landau falham em alguns sistemas de matéria condensada. Em seguida, vamos detalhar um pouco mais a fenomenologia de uma importante classe de materiais e os

desafios impostos por ela para a correta descrição de suas propriedades. Depois, vamos descrever, qualitativamente, o instrumento teórico que iremos utilizar ao longo desta tese que consistirá no método do grupo de renormalização a fim de atacar alguns aspectos desse problema. Nesse sentido, vamos também contextualizar apropriadamente essa discussão dentro de um ponto de vista histórico em que essa técnica foi desenvolvida. Por fim, definiremos como está estruturada esta tese de doutorado.

1.1 As duas teorias de Landau e suas falhas em sistemas de baixa dimensionalidade

A física da matéria condensada tradicional está, convencionalmente, estruturada em duas teorias principais cuja origem nos remete a Landau: uma é a teoria do líquido de Fermi [1] e a outra é a teoria da quebra espontânea de simetria [2]. Essas teorias combinadas possibilitaram durante muito tempo a descrição de vários sistemas eletrônicos como, por exemplo, os metais, os semicondutores, os supercondutores, os isolantes, entre vários outros.

A primeira teoria, ou seja, o líquido de Fermi¹, está intimamente ligada com a compreensão das propriedades macroscópicas que se manifestam em sistemas interagentes que vão desde o hélio líquido (He^3) até os chamados metais simples tridimensionais (3d) como, por exemplo, o cobre (Cu) e o ouro (Au). As previsões dessa teoria já foram verificadas em experimentos de altíssima precisão no caso do He^3 que é um exemplo fortuito de substância com alta pureza e perfeita isotropia [4]. No caso dos metais 3d, a dinâmica da estrutura cristalina e a presença inevitável de impurezas nesses sistemas mascaram algumas das propriedades eletrônicas mais sensíveis comparativamente com o caso dos sistemas completamente puros e isotrópicos. No entanto, muitas dessas propriedades são,

¹Uma exposição bastante profunda sobre a teoria do líquido de Fermi está dada em [3].

felizmente, bastante robustas e não são afetadas por essas complicações. Entre essas propriedades estão, por exemplo, a existência de uma superfície de Fermi bem definida no espaço dos momentos, um calor específico proporcional a temperatura, uma densidade finita de estados de partícula única em baixas energias, susceptibilidades uniformes de carga e spin finitas no sistema, entre várias outras.

Como podemos facilmente observar, essas propriedades descritas acima são, qualitativamente, as mesmas comparadas com o modelo de um gás de elétrons livres, apesar desses sistemas mencionados incluírem fortes interações entre as partículas. Dessa maneira, a teoria do líquido de Fermi estabelece que tais sistemas com interações podem ser, efetivamente, descritos em termos de um gás de partículas livres no limite de baixa energia. A essas partículas, dá-se o nome de quasipartículas. Elas estão adiabaticamente conectadas ao modelo sem interações e, por essa razão, têm uma correspondência de um para um com os elétrons livres do sistema. Fisicamente, podemos entender esse cenário devido ao princípio de exclusão de Pauli que reduz drasticamente o espaço de fase disponível para os processos de interação nesses sistemas. Mesmo assim, essas interações alteram (ou, equivalentemente, renormalizam) quantitativamente algumas das propriedades dinâmicas dessas partículas como, por exemplo, a massa delas, podendo, em algumas situações extremas, aumentar essa quantidade por um fator de mil como ocorre nos sistemas de férmions pesados [5].

A segunda teoria, ou seja, a teoria da quebra espontânea de simetria está relacionada com possíveis instabilidades no estado do líquido de Fermi que podem induzir uma transição de fase para um estado eletrônico com um ordenamento de longo alcance e, portanto, completamente diferente do estado inicial. Essa teoria permite a compreensão da formação da maioria dos estados ordenados possíveis em matéria condensada como, por exemplo, a fase supercondutora nos metais simples, a fase superfluida no caso do He^3 e uma variedade de fases ordenadas magneticamente. Como podemos ver, essas duas teorias estão fundamentalmente ligadas de tal maneira que se alguma delas falhar em alguma

situação física, a outra teoria também pode, potencialmente, falhar.

De fato, com a descoberta experimental de várias classes de materiais extremamente anisotrópicas, ficou claro que uma enormidade de fenômenos exibidos em matéria condensada simplesmente não podem ser descritos por esses dois paradigmas fundamentais. Isso ocorre, de uma maneira geral, em sistemas que apresentam a propriedade de estarem definidos efetivamente em um espaço com dimensionalidade reduzida (ou seja, $d < 3$). Esses sistemas são, convencionalmente, classificados como sendo de baixa dimensionalidade. O exemplo mais famoso deles consiste nos cupratos supercondutores [6] de alta temperatura que são materiais que, naturalmente, apresentam uma estrutura cristalina disposta em várias camadas e, por causa disso, são sistemas efetivamente bidimensionais (2d). Outro exemplo importante desses sistemas consiste nos nanotubos de carbono [7] que são materiais normalmente dispostos em uma linha e, por isso, são sistemas efetivamente unidimensionais (1d).

A razão física da falha dessas duas teorias de Landau está relacionada com o papel central que as flutuações quânticas desempenham nesses sistemas. Do ponto de vista teórico, isso fica particularmente evidente em um teorema² demonstrado, rigorosamente, por Hohenberg [8], Mermin e Wagner [9] dentro de um contexto não-relativístico e, também, por Coleman [10] para o caso relativístico. Esse teorema assegura que, para algumas condições relativas à interação presente no modelo, não é possível existir um estado eletrônico com ordenamento de longo alcance a temperaturas finitas em sistemas tipicamente de baixa dimensionalidade. Em outras palavras, as fortes flutuações quânticas naturalmente presentes nesse caso destroem esse tipo de ordenamento nesses sistemas. Por conseguinte, é razoável esperar, pela mesma razão, que a teoria do líquido de Fermi também deixe de ser válida em algumas situações nesses sistemas.

Essa expectativa é confirmada, por exemplo, em sistemas metálicos 1d. Nesse caso, é bem estabelecido o fato de que a teoria do líquido de Fermi falha completamente na

²Esse teorema é conhecido como o teorema de Mermin-Wagner na literatura.

descrição da física de baixa energia desses sistemas. De fato, a teoria apropriada se torna a do líquido de Luttinger [11, 12, 13]. Diferentemente da teoria de Landau que é construída a partir de um gás de elétrons, o líquido de Luttinger é construído a partir de um importante modelo 1d conhecido como o modelo de Tomonaga-Luttinger [14, 15]. Conseqüentemente, essa teoria 1d não apresenta quasipartículas eletrônicas bem definidas e o espectro de excitação de baixa energia se torna, fundamentalmente, dominado por excitações coletivas bosônicas denominadas de holons (associados à carga do sistema) e spinons (associados ao spin). Essas partículas implicam em uma separação exata dos graus de liberdade de carga e spin no sistema que, de fato, se propagam com velocidades diferentes no sistema. Essas propriedades, portanto, ilustram de maneira clara o papel drástico que as flutuações quânticas desempenham nesses sistemas.

Em sistemas 2d, a situação é bem mais controversa nesse aspecto. Do ponto de vista teórico, a teoria do líquido de Fermi de Landau não deixa de ser válida necessariamente nesse caso. Na verdade, existem sistemas metálicos 2d como, por exemplo, o composto $1 - T - TiTe_2$, cujo comportamento é corretamente descrito por quasipartículas e, portanto, pela teoria do líquido de Fermi [16]. Por outro lado, a evidência da falha da teoria do líquido de Fermi de Landau em 2d vem de outra observação experimental que diz respeito às propriedades eletrônicas da fase metálica da classe de materiais representada naturalmente pelos cupratos supercondutores [6]. De fato, atualmente, é bem estabelecido do ponto de vista experimental que muitas das propriedades dessa fase eletrônica não podem ser facilmente reconciliadas com as previsões que decorrem da aplicação da teoria do líquido de Fermi para esses sistemas. Por essa razão, esse estado metálico é, convencionalmente, denominado de um estado de líquido de Não-Fermi na literatura. Além disso, como esse estado quântico não possui nenhuma quebra de simetria associada, isso levou vários físicos a uma busca incessante por uma teoria consistente que pudesse explicar as propriedades dessa fase eletrônica tão exótica em 2d. Obviamente, o interesse também em entender essas questões está ligado com o fato de que essa teoria pode, potencialmente,

conter a chave para a explicação da supercondutividade de alta temperatura que se manifesta nesses sistemas. Para entendermos melhor esse ponto, vamos começar a discutir na próxima seção a fenomenologia associada tipicamente a esses sistemas.

1.2 A fenomenologia dos supercondutores de alta-temperatura

Desde a sua descoberta em 1986 por Bednorz e Müller [17], o diagrama de fases da classe de materiais dos cupratos se tornou um dos temas mais controversos no cenário atual da física da matéria condensada. Uma das razões para isso está relacionada com a enorme riqueza de fenômenos físicos que se manifestam nesses compostos. Nesta tese, vamos discutir apenas as propriedades que são universais desses sistemas, ou seja, que não dependem do material supercondutor utilizado. Como vimos anteriormente, esses materiais são dispostos em camadas ou, mais precisamente, planos de CuO_2 e, por essa razão, são sistemas efetivamente 2d. Uma questão importante aqui consiste no fato de que os elétrons de valência desses compostos derivam de um orbital do tipo d dos átomos de cobre. Dessa maneira, esses materiais são, naturalmente, classificados como sendo de banda estreita. Nesse caso, é de se esperar que a interação eletrônica desempenhe um papel importante na dinâmica do sistema. Esse regime eletrônico é usualmente modelado a partir do modelo de Hubbard³ 2d, o qual acredita-se conter os ingredientes mínimos necessários para a descrição da física associada a esses sistemas.

Existem dois parâmetros importantes que permitem caracterizar os cupratos supercondutores: um consiste na dopagem que determina o número de portadores de carga presentes nos planos de Cu e O desses compostos e o outro na temperatura. O diagrama de fases típico desses sistemas se encontra mostrado na Fig. 1.1. Na situação de dopa-

³Vamos explicar com detalhes esse modelo no próximo capítulo.

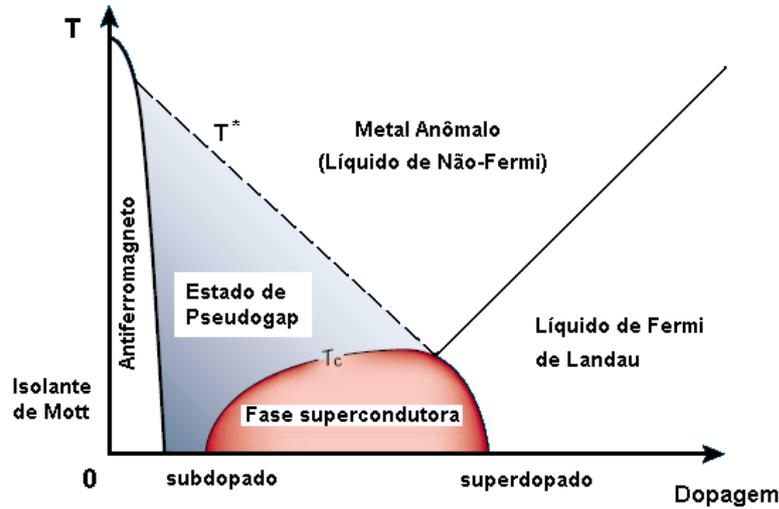


Figura 1.1: Diagrama de fases dos cupratos supercondutores.

gem estritamente zero, esses materiais possuem exatamente um elétron por cada sítio da rede cristalina. Em teoria de bandas, eles seriam classificados como sistemas de banda semi-cheia e, portanto, seria de se esperar que eles apresentassem um comportamento metálico. No entanto, esse não é o caso, uma vez que esses sistemas, na verdade, são isolantes de carga com um “gap” de excitação correspondente razoavelmente grande da ordem de $2eV$. Por essa razão, esses materiais são classificados como isolantes de Mott [18, 19]. A origem física desse comportamento isolante está diretamente relacionada com a intensidade relativa das interações eletrônicas desse sistema que é bastante forte e, portanto, não pode, de maneira alguma, ser desprezada na sua descrição. Além disso, esse estado isolante apresenta um ordenamento de quase-longo alcance antiferromagnético e excitações coletivas de spin sem “gap” (*i.e.*, os mágnons) presentes.

Quando dopamos esses compostos com buracos (ou seja, quando removemos alguns elétrons dos planos de CuO_2), vários estados quânticos bastante diferentes entre si emergem desse sistema. Desenvolver uma teoria que descreva, consistentemente, todos essas fases presentes de uma maneira unificada representa um desafio intelectual do mais alto nível.

Como podemos ver na Fig. 1.1, podemos distinguir duas regiões de dopagem no sistema: uma região classificada como subdopada e a outra região chamada de superdopada. Na região superdopada, a fase metálica que se manifesta em altas temperaturas é consistente com a teoria do líquido de Fermi tradicional, ou seja, observa-se experimentalmente a existência de quasipartículas bem definidas além de outras propriedades diretamente relacionadas. Nessa região, portanto, podemos constatar que a física associada ao sistema é de natureza relativamente convencional. Por outro lado, na região subdopada, a fase metálica correspondente que se manifesta em altas temperaturas é altamente anômala e, por essa razão, definitivamente não se encaixa dentro do esquema tradicional de Landau [20, 21, 22]. Essa fase é chamada, por essa razão, de um estado de líquido de Não-Fermi. De fato, nessa fase, apesar dos experimentos de espectroscopia de fotoemissão (ARPES) darem evidências convincentes da existência de uma superfície de Fermi 2d bem definida, eles mostram igualmente que o sistema, na realidade, não apresenta quasipartículas bem definidas presentes.

Ao reduzirmos a temperatura nessa fase metálica não-convencional, o sistema se torna um estado supercondutor numa temperatura razoavelmente alta ($T_c \sim 100K$). Essa temperatura crítica claramente não pode ser obtida aplicando-se a teoria de campo médio de Bardeen-Cooper-Schrieffer [23] apropriada, por sua vez, para os supercondutores ditos de baixa temperatura como o chumbo e o nióbio. Além disso, nessa fase supercondutora, a simetria associada ao par de Cooper não é do tipo s como ocorre, geralmente, no caso em que os processos de interação entre os elétrons no sistema são mediados por fônons, mas sim, do tipo d [24, 25]. Esse cenário é visto, na verdade, como uma forte evidência de que as flutuações magnéticas desempenham um papel fundamental na dinâmica desses sistemas.

Se considerarmos, novamente, a fase de isolante de Mott e doparmos esse sistema levemente com buracos (ou seja, se removermos poucos elétrons do sistema), uma outra fase eletrônica emerge desse cenário que é conhecida como o estado de pseudogap [26].

Nessa fase, o ordenamento de quase longo alcance antiferromagnético do estado isolante de Mott desaparece completamente e, além disso, existem fortes evidências experimentais de uma abertura de “gap” de spin sem a ocorrência de nenhuma quebra espontânea de simetria no sistema. Recentemente, experimentos ARPES também observaram que esse sistemas levemente dopados também podem apresentar um “gap” de carga e, portanto, seriam isolantes [27]. Isso parece indicar que a fase de pseudogap é, de fato, influenciada pela proximidade com a fase isolante de Mott no sistema.

Apesar do fato da fase de pseudogap não ser completamente entendida em todos os seus aspectos até o presente momento, ela é amplamente reconhecida como sendo central para o entendimento apropriado do mecanismo da supercondutividade de alta temperatura que se manifesta nesses sistemas. Por essa razão, essa fase será basicamente a região do diagrama de fases em que estaremos interessados nesta tese. De fato, como veremos a seguir, essa discussão está naturalmente relacionada com o entendimento de estados quânticos isolantes que, por sua vez, não apresentam quebra espontânea de simetria: os chamados líquidos de spin isolantes. Na próxima seção, vamos definir mais precisamente a idéia subjacente desse estado quântico tão exótico.

1.3 Os estados de líquido de spin isolante

Os líquidos de spin isolantes são estados quânticos nos quais nenhuma simetria contínua associada ao sistema é quebrada. Esses estados apresentam “gaps” tanto de carga quanto de spin e, por essa razão, só podem apresentar correlações de curto alcance presentes no sistema. De acordo com a nossa discussão anterior, é razoável esperar que esses estados sejam mais naturais de serem encontrados em sistemas de baixa dimensionalidade, uma vez, nesse caso, as flutuações quânticas são bastante fortes e impedem o sistema de apresentar qualquer tipo de ordenamento magnético de longo alcance.

Um exemplo bem estabelecido de líquido de spin isolante ocorre no modelo de Hub-

bard em duas cadeias unidimensionais (ou seja, um modelo quase 1d) numa situação de banda exatamente semi-cheia [28, 29, 30, 31, 32, 33]. Nesse sistema, pode-se demonstrar, utilizando tanto o método do grupo de renormalização quanto o método de bosonização, que o estado fundamental é, de fato, um estado com “gaps” finitos tanto de carga quanto de spin. Conseqüentemente, esse estado descreve um sistema invariante por rotação de spin com funções de correlação associadas à carga e ao spin que decaem exponencialmente.

Infelizmente, em 2d, a situação é, mais uma vez, bem mais controversa. De fato, existe um enorme esforço da comunidade científica em encontrar modelos 2d interagentes que apresentem um comportamento similar ao do modelo de Hubbard em duas cadeias 1d. Parte dessa motivação vem da sugestão original de Anderson [34] para o problema da supercondutividade de alta temperatura nos cupratos que estados de líquido de spin isolantes exibem, naturalmente, pares de Cooper “pré-formados” e poderiam representar o regime de pseudogap encontrado nesses sistemas. Além disso, dopando esse estado isolante, isso daria “espaço” para esses pares se condensarem no sistema e formarem uma fase supercondutora do tipo d .

Recentemente, trabalhos teóricos mostram que isso, de fato, ocorre no modelo de Hubbard em duas cadeias [30]. Em outras palavras, esse resultado é bem estabelecido para esse caso bastante particular. Em 2d, existem trabalhos na literatura que sugerem que essa física do líquido de spin quase 1d também poderia ser encontrada no chamado modelo de Hubbard 2d estendido na vizinhança das chamadas singularidades de van Hove, utilizando argumentos do grupo de renormalização até 1 loop [35, 36]. No entanto, esses trabalhos têm a desvantagem de não considerarem as contribuições de ordens superiores (como, por exemplo, as correções de auto-energia) na teoria que são, também, bastante importantes na descrição da física de baixa energia desses sistemas.

Dentro desse quadro, o nosso objetivo primordial desta tese consistirá em analisar a física de baixa energia do modelo de Hubbard 2d tradicional (ou seja, o modelo não estendido) numa situação de leve dopagem com buracos em relação ao caso de banda

exatamente semi-cheia. Para isso, vamos implementar, pela primeira vez, o grupo de renormalização para esse sistema até 2 loops, ou seja, levando em conta, explicitamente, correções de ordem superior e da auto-energia na teoria.

No entanto, antes de começarmos a nossa discussão sobre esse sistema do ponto de vista do grupo de renormalização, será instrutivo traçar um breve histórico sobre essa metodologia dentro do contexto da física teórica moderna.

1.4 Renormalização: Uma perspectiva histórica

O grupo de renormalização (GR) consiste em uma ferramenta extremamente poderosa e bem sucedida que é utilizada em quase todas as áreas da física teórica atualmente. A sua origem nos remete à década de 50 quando Gell-Mann e Low [37] e, independentemente, Stückelberg e Petermann [38] analisavam a estrutura analítica de teoria de campos relativísticos que exibiam inúmeras divergências induzidas por flutuações quânticas em teoria de perturbação. Essas idéias foram, subseqüentemente, generalizadas por Callan e Symanzik [39, 40] e formam hoje o chamado GR de teoria de campos. Essa formulação do GR é extremamente importante na física teórica moderna e fornece o esquema conceitual que permitiu, por exemplo, a compreensão do status e validade do chamado modelo padrão [41] que descreve todas as forças fundamentais da natureza com exceção da gravidade.

A idéia central dessa abordagem consiste em uma redefinição de parâmetros que definem a teoria como, por exemplo, os acoplamentos e os campos, em termos dos respectivos parâmetros físicos observáveis experimentalmente. Quando esse procedimento é implementado consistentemente em cada ordem de teoria de perturbação, essa expansão se torna bem definida e livre das desconfortáveis divergências que apareciam inicialmente na teoria. Dessa maneira, todas as previsões que dela emergem passam a ser finitas e podem, portanto, ser comparadas diretamente com o experimento. No entanto, uma vez que esse método se baseia em um esquema perturbativo, esse programa só funciona em alguns tipos

de teorias de campos denominadas renormalizáveis. Em teorias ditas não-renormalizáveis como, por exemplo, a gravitação quântica, esse procedimento se revela insuficiente na remoção de todas as divergências que aparecem e novos métodos analíticos (ainda para serem inventados) devem ser utilizados.

Por outro lado, uma formulação alternativa possível do GR foi proposta por Wilson [42] para lidar com um problema aparentemente diferente (no caso, não-relativístico) que são as chamadas transições de fase clássicas de segunda ordem que se manifestam, tipicamente, em matéria condensada. Essa abordagem, chamada de GR de Wilson, permitiu, em um nível mais profundo, a compreensão teórica do papel das flutuações térmicas do sistema no comportamento macroscópico de várias grandezas na vizinhança da temperatura crítica de transição. Essa construção é fisicamente mais intuitiva, porém tecnicamente mais complexa que a abordagem de teoria de campos. Vale a pena chamar a atenção aqui que o fenômeno de transição de fase de segunda ordem pode, também, ser formulado completamente dentro do contexto do método do GR de teoria de campos [43].

Uma vantagem do método de Wilson consiste no fato de que ele, em princípio, não faz qualquer referência a teoria de perturbação e, por essa razão, pode ser implementado de uma maneira não-perturbativa. Porém, do ponto de vista analítico, recorre-se na prática à única ferramenta conhecida que permite a sua implementação que é o esquema perturbativo. Essa aproximação restringe o método uma vez que a implementação da abordagem de teoria de campos se revela bem mais eficiente que o método de Wilson dentro desse contexto. Vale a pena mencionar que, numericamente, é possível implementar o esquema de Wilson além da abordagem perturbativa. Essas técnicas incluem o método de GR na rede, NRG (*“Numerical Renormalization Group”*), métodos baseados em rotinas de Monte-Carlo quântico, DMRG (*“Density-Matrix Renormalization Group”*), entre várias outras. Essas abordagens se revelaram bem sucedidas na descrição de vários tipos de sistemas. Mesmo assim, esses métodos também possuem limitações igualmente sérias em alguns casos como, por exemplo, problemas de convergência no limite termodinâmico, o

problema do sinal fermiônico em rotinas de Monte-Carlo quântico, etc. Dessa maneira, é importante que técnicas completamente independentes sejam usadas para confrontar resultados e, nesse sentido, a abordagem perturbativa pode fornecer um guia importante para muitos desses métodos.

Historicamente, o uso de técnicas do GR analíticas ou numéricas para o estudo de problemas associados a elétrons fortemente correlacionados em física de muitos corpos começou na década de 70 com Anderson e Yuval [44], Nozières [45] e Wilson [46] no tratamento do problema Kondo em três dimensões espaciais. Em seguida, essas idéias foram utilizadas na determinação dos possíveis estados fundamentais que emergem no problema de elétrons interagentes em 1d [11]. As soluções providas pelos métodos do GR para esses dois problemas se revelaram extremamente bem sucedidas. De fato, esses sistemas são considerados paradigmas de como o GR deve ser corretamente empregado em sistemas quânticos com muitos graus de liberdade ($\sim 10^{23}$) interagindo entre si.

Um marco histórico importante veio com a descoberta dos supercondutores de alta temperatura na década de 80 [17]. Como vimos, esses materiais exibem uma fase metálica do tipo líquido de Não-Fermi em duas dimensões espaciais. Essa descoberta estimulou uma profunda reinvestigação dos conceitos básicos das teorias dos metais. Dentro desse quadro, o método do grupo de renormalização fornece o esquema mais promissor e menos enviesado na análise de sistemas de baixa dimensionalidade com várias instabilidades induzidas por correlações eletrônicas no sistema competindo entre si.

Os primeiros trabalhos nessa direção surgiram na comunidade de física matemática com Benfatto e Gallovotti [47] e Feldman e Trubowitz [48] com estudos rigorosos da estabilidade do modelo de gás de elétrons 2d com relação a perturbações adicionadas no sistema. Nesse mesmo período, Shankar [49, 50] desenvolveu para o mesmo modelo um método mais intuitivo inspirado na formulação original de Wilson do GR, porém adaptado ao problema bidimensional. Em todos esses estudos, foi possível estabelecer, rigorosamente, a existência de um estado metálico do tipo líquido de Fermi em 2d para

esses sistemas. Por outro lado, esses trabalhos falham em obter qualquer estado metálico que seja do tipo líquido de Não-Fermi que, como vimos, parece ser um ingrediente essencial na descrição da física dos cupratos supercondutores.

Os primeiros estudos do GR adequado para modelos interagentes 2d definidos em uma rede cristalina (mais precisamente, para o modelo de Hubbard 2d) foram realizados por Zanchi e Schulz [51, 52], Zheleznyak *et al.* [53], Gonzalez *et. al* [54, 55], Vistulo de Abreu e Douçot [56], Halboth e Metzner [57], Kopietz e Busche [58], Honerkamp *et al.* [36], Binz *et al.* [59], Dusuel *et. al.* [60] e Baier *et. al.* [61], utilizando diferentes formulações possíveis desse método. Em todos esses trabalhos, o GR foi implementado até a ordem de 1 loop em teoria de perturbação o que, na verdade, é válido somente na situação de fraco acoplamento. Ao fazer isso, eles puderam caracterizar as instabilidades mais importantes presentes nesse sistema que consistem na instabilidade antiferromagnética e a instabilidade supercondutora do tipo d . Esse resultado está de acordo, qualitativamente, com o cenário que nos é imposto pela evidência experimental dos cupratos. Por outro lado, esses estudos não levam em conta as correções de auto-energia do sistema que, por sua vez, se manifestam de maneira importante em ordens superiores [62, 63]. Essas contribuições, como veremos, serão fundamentais na descrição da física de baixa energia desses sistemas.

Nesta tese, o nosso interesse principal será o de implementar um cálculo completo do GR até 2 loops a fim de investigar as propriedades eletrônicas de baixa energia do modelo de Hubbard 2d para densidades próximas (mas não iguais) a uma situação de banda semi-cheia. Esse esquema nos permitirá incluir, de maneira consistente e direta, as contribuições relacionadas aos efeitos da auto-energia desse modelo que, como veremos, serão essenciais para podermos estabelecer a existência de um estado do tipo líquido de Não-Fermi nesse sistema. Para caracterizarmos esse estado eletrônico, vamos analisar, ainda, o fluxo de renormalização de duas grandezas físicas que provêm informação direta sobre a natureza das excitações elementares presentes nessa descrição que serão as

susceptibilidades uniformes de carga e spin associadas ao sistema.

Como um teste inicial para essa abordagem, vamos implementar, em primeiro lugar, o nosso método para o caso do modelo de Hubbard 1d para densidades diferentes de uma situação de banda semi-cheia. Dessa maneira, vamos mostrar que os nossos resultados reproduzem corretamente a física de baixa energia desse modelo, ou seja, de que o estado eletrônico resultante é, de fato, um metal descrito pelo líquido de Luttinger. Essa conclusão, como veremos, concorda com vários resultados exatos obtidos por outros métodos analíticos disponíveis na literatura para esses sistemas.

Subseqüentemente, vamos aplicar essas mesmas considerações para o caso mais complicado que é o modelo de Hubbard definido em duas dimensões espaciais no qual estamos, principalmente, interessados em analisar nesta tese. Como resultado dessa abordagem, vamos mostrar a possibilidade de que a teoria efetiva de baixa energia apropriada para esse modelo seja, de fato, um líquido de spin isolante de acordo com a nossa expectativa inicial com relação a esses sistemas levemente dopados. Esse resultado estaria, portanto, de acordo com a sugestão original de Anderson para os cupratos supercondutores de que a fase de pseudogap exibida nesses sistemas poderia ser, na realidade, vista em termos de um estado de líquido de spin isolante com “gaps” de carga e spin presentes e sem nenhuma quebra espontânea de simetria associada.

1.5 Estrutura desta tese

Nesta seção, vamos apresentar, de maneira esquemática, o roteiro de como esta tese se encontra estruturada nos próximos capítulos.

No Capítulo 2, vamos começar definindo, de maneira precisa, os modelos de Hubbard em uma (1d) e em duas dimensões espaciais (2d). Esses serão os modelos que serão utilizados ao longo de toda esta tese. Dessa forma, vamos descrever importantes métodos de aproximação e alguns teoremas rigorosos que permitem analisar a física subjacente

desses modelos para alguns regimes de interação e dopagens. O objetivo dessa exposição será o de motivar a nossa discussão posterior sobre o método do grupo de renormalização aplicado a esses sistemas de baixa dimensionalidade.

No Capítulo 3, vamos descrever a filosofia associada ao método do grupo de renormalização (GR) aplicada a um sistema de elétrons interagentes na vizinhança de uma superfície de Fermi bem definida. Para isso, vamos explicar primeiramente a abordagem de Wilson para esse método que, como veremos, é fisicamente mais intuitiva. Em seguida, vamos apresentar também uma discussão qualitativa da abordagem de teoria de campos que, apesar de ser um pouco mais abstrata, tem a vantagem de ser tecnicamente mais simples na sua implementação. Por essa razão, essa última abordagem será escolhida nesta tese para lidarmos com os problemas descritos acima.

No Capítulo 4, vamos implementar o método do GR até 2 loops para uma situação cuja solução exata é bem conhecida, ou seja, o modelo de Hubbard 1d com densidades eletrônicas diferentes do caso de banda semi-cheia. Dessa maneira, vamos mostrar que essa abordagem, de fato, reproduz corretamente vários aspectos da física de baixa energia desse modelo. O conteúdo desse capítulo pode ser encontrado no nosso artigo [64].

No Capítulo 5, vamos partir para o modelo que estamos, principalmente, interessados em analisar nesta tese que é o modelo de Hubbard 2d com densidades eletrônicas próximas (mas não iguais) a uma situação de banda semi-cheia. Como veremos, as equações de fluxo do GR que descrevem a dinâmica de baixa energia desse sistema resultarão em complicadas equações íntegro-diferenciais acopladas entre si e que precisam ser atacadas do ponto de vista numérico. O conteúdo desse capítulo está devidamente publicado nos nossos artigos [65, 66].

No Capítulo 6, vamos discutir a implementação da nossa abordagem numérica para a resolução das equações íntegro-diferenciais mencionadas acima. Como resultado disso, vamos mostrar os resultados que emergem dessa abordagem. Em seguida, vamos partir para a interpretação desses dados, utilizando como guia de referência a nossa discussão

apresentada no Capítulo 2 para esse sistema. Dessa maneira, vamos mostrar que o fluxo de renormalização resultante é consistente com um cenário de formação de um estado de líquido de spin isolante no sistema para o modelo definido com interações intermediárias. Além disso, vamos sugerir, ainda, que esses resultados obtidos podem ser, potencialmente, relevantes para a descrição da fase de pseudogap exibida tipicamente nos cupratos supercondutores de alta temperatura. Os resultados numéricos obtidos bem como a discussão apresentada a respeito desses dados está também publicada nos nossos artigos [65, 66].

Por fim, no Capítulo 7, vamos apresentar as nossas conclusões a respeito da discussão apresentada ao longo desta tese.

Capítulo 2

O Modelo de Hubbard

Neste capítulo, vamos definir o modelo que analisaremos ao longo desta tese: o modelo de Hubbard. Esse modelo, que foi originalmente introduzido na década de 60, independentemente, por Gutzwiller [67], Hubbard [68, 69] e Kanamori [70] no estudo de metais de transição com bandas estreitas, é considerado hoje o paradigma para o estudo de sistemas eletrônicos fortemente correlacionados em geral. Apesar de ser bastante simples conceitualmente, esse modelo tem resistido a tentativas de solução exata em sistemas com dimensão espacial $d > 1$ e, mesmo hoje, depois de mais de 40 anos sob forte investigação, o seu diagrama de fases completo é ainda pobremente conhecido. Mesmo assim, em algumas situações especiais, esse modelo pode ser resolvido exatamente e essas soluções, de uma maneira geral, têm servido como fonte de inspiração e “insight” sobre a questão de como fortes correlações eletrônicas podem originar uma enormidade de possíveis fases eletrônicas em matéria condensada incluindo, por exemplo, uma fase isolante de Mott e uma fase supercondutora do tipo d . De fato, grande parte da renovação do interesse em se entender esse modelo nas últimas duas décadas se deve, principalmente, ao fato de que ele, potencialmente, pode conter a chave para o entendimento do tão esperado mecanismo físico responsável pelo fenômeno da supercondutividade de alta temperatura que se manifesta nos cupratos.

2.1 Elétrons confinados em uma linha

2.1.1 O modelo “tight-binding”

Para iniciarmos a nossa discussão, considere a seguinte Hamiltoniana escrita na chamada base de Wannier¹ que descreve um conjunto de elétrons em $d = 1$ que não interagem entre si no sistema

$$H_0 = \sum_{i,j,\sigma} \langle i | H_0 | j \rangle \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{j\sigma} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{j\sigma}, \quad (2.1)$$

onde $\psi_{i\sigma}^\dagger$ e $\psi_{i\sigma}$ são, respectivamente, os operadores de criação e destruição de elétrons com projeção de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ em um sítio i da rede cristalina. Além disso, t_{ij} representa a amplitude de probabilidade de um elétron tunelar de um sítio i para um sítio j no sistema. No que se segue, vamos considerar o caso de uma rede cristalina com um espaçamento a entre os sítios e um comprimento total $L = N_{\text{sítios}}a$, onde $N_{\text{sítios}}$ é o número total de sítios no sistema. Vamos admitir, ainda, a hipótese de que a amplitude de tunelamento t_{ij} é máxima quando os sítios i e j são vizinhos entre si e decai, substancialmente, à medida que essa distância aumenta. Assim, podemos modelar essa situação da seguinte maneira

$$t_{ij} = \begin{cases} -t, & \text{se } i \text{ e } j \text{ forem vizinhos entre si,} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.2)$$

Essa é, por definição, a situação de “tight-binding”. Ela ocorre, tipicamente, em materiais formados por metais de transição, cujos elétrons de valência derivam de um orbital tipo d ou f que, em geral, são funções localizadas no espaço real. Vamos, agora, fazer a seguinte mudança de variáveis para a representação de vetor de onda de Bloch no sistema

$$\psi_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N_{\text{sítios}}}} \sum_i e^{ikx_i} \psi_{i\sigma}, \quad (2.3)$$

¹Essa base, de uma maneira geral, descreve orbitais que estão, essencialmente, localizados em torno dos sítios na rede cristalina.

onde k pertence a primeira zona de Brillouin definida como $-\pi/a < k \leq \pi/a$. Nessa representação, a Hamiltoniana fica diagonalizada da seguinte maneira

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k \psi_{k\sigma}^\dagger \psi_{k\sigma} = \sum_{k,\sigma} [-2t \cos(ka)] \psi_{k\sigma}^\dagger \psi_{k\sigma}, \quad (2.4)$$

onde ϵ_k é a relação de dispersão que define a estrutura da banda única do sistema. Além disso, no ensemble grande-canônico, convencionou-se definir a seguinte quantidade

$$H_0 - \mu N = \sum_{k,\sigma} \xi_k \psi_{k\sigma}^\dagger \psi_{k\sigma} = \sum_{k,\sigma} [-2t \cos(ka) - \mu] \psi_{k\sigma}^\dagger \psi_{k\sigma}, \quad (2.5)$$

onde μ é o potencial químico que ajusta o número de elétrons N no sistema. Obviamente, no limite termodinâmico ($N, L \rightarrow \infty$), devemos substituir $\sum_k = L/(2\pi) \int dk$. O estado fundamental desse modelo é obtido preenchendo-se cada estado quântico disponível na banda com apenas um elétron até o nível máximo de energia ϵ_F denominado energia de Fermi² do sistema.

Nesse modelo não-interagente, podemos ver, também, que a natureza do estado fundamental pode ser, facilmente, descoberta realizando-se uma simples contagem do número de elétrons no sistema. Dito de outra forma, teoria de bandas funciona apenas nesse caso muito especial. Se o sistema possuir uma densidade eletrônica $n = 2$, onde $n = N/N_{\text{sitios}}$, a sua banda estará completamente cheia. Como não há estados acessíveis acima do nível de Fermi para serem populados (presença de um “gap”), o sistema será um isolante nessa situação.

Por outro lado, se o sistema possuir uma densidade eletrônica $n = 1$ ou $n \approx 1$, a sua banda estará apenas parcialmente cheia, existindo, portanto, estados disponíveis acima do nível de Fermi para serem excitados (ausência de um “gap”). Isso implica, por sua vez, que o sistema é um metal dentro dessa descrição. Além disso, como podemos ver claramente na Fig. 2.1, existem dois vetores de onda (designados por $+k_F$ e $-k_F$) que estão associados à energia de Fermi nesse estado. Esses dois pontos definem a chamada

²A energia de Fermi também é definida como sendo $\epsilon_F = \mu(T = 0)$.

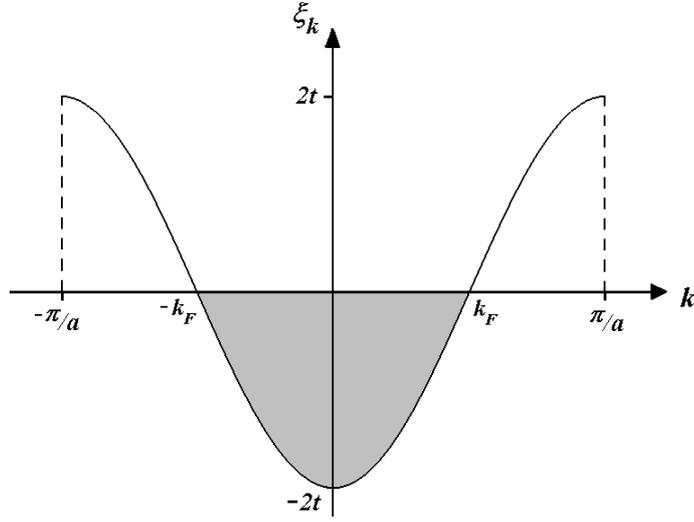


Figura 2.1: Relação de dispersão do modelo “tight-binding” em 1d.

“superfície” de Fermi unidimensional do modelo sem interações.

Vamos fazer, agora, o seguinte questionamento: Essa física que acabamos de descrever, ou seja, derivada de uma simples teoria de bandas, é robusta ou não a perturbações geradas, inevitavelmente, pelas interações coulombianas entre os elétrons sempre presentes em um dado sistema? Vamos começar a responder essa importante questão na próxima seção.

2.1.2 Incluindo a interação elétron-elétron no modelo

Inicialmente, vamos considerar o termo de interação coulombiana elétron-elétron escrito da forma mais geral possível na representação de Wannier. Assim,

$$H_{int} = \sum_{\substack{i,j,i',j' \\ \sigma,\sigma'}} \langle i,j | V | i',j' \rangle \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{j\sigma'}^\dagger \psi_{j'\sigma'} \psi_{i'\sigma} = \sum_{\substack{i,j,i',j' \\ \sigma,\sigma'}} V_{ij,i'j'} \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{j\sigma'}^\dagger \psi_{j'\sigma'} \psi_{i'\sigma}, \quad (2.6)$$

onde $\psi_{i\sigma}^\dagger$ e $\psi_{i\sigma}$ são os já conhecidos operadores de criação e destruição de elétrons com projeção de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ em um sítio i da rede cristalina.

Olhando para o termo de interação nessa forma, a sua contribuição para o sistema

não parece de nenhuma maneira transparente. Para entender melhor o significado físico dos elementos de matriz $V_{ij,i'j'}$, a estrutura espacial das funções de Wannier tem que ser invocada. Seguindo a filosofia geral da seção anterior, vamos considerar que essas funções são extremamente localizadas em torno dos seus respectivos sítios na rede. Dessa forma, é razoável admitir que a contribuição mais importante será dada pelo elemento de matriz $V_{ii,ii}$, ou seja, a interação dentro de um mesmo sítio, enquanto que as outras contribuições diminuem, substancialmente, à medida que essa distância inicial aumenta. Portanto, podemos modelar essa situação da seguinte maneira

$$V_{ij,i'j'} = \begin{cases} U > 0, & \text{se } i = j = i' = j', \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.7)$$

Como os elétrons obedecem o princípio de exclusão de Pauli, para eles ocuparem o mesmo sítio e, portanto, experimentarem essa repulsão coulombiana, eles têm de ter visivelmente spins opostos. Dessa maneira, adicionando-se o termo de interação à Hamiltoniana de “tight-binding” descrita na seção anterior, obtemos finalmente

$$H - \mu N = \sum_{k,\sigma} [-2t \cos(ka) - \mu] \psi_{k\sigma}^\dagger \psi_{k\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.8)$$

onde $n_{i\sigma} = \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{i\sigma}$ é o número de ocupação de um elétron no sítio i e com projeção de spin σ . Esse é o chamado modelo de Hubbard unidimensional. Ele foi resolvido exatamente, pela primeira vez, por Lieb e Wu [71] para o caso de uma banda exatamente semi-cheia, ou seja, $n = 1$. Nesse caso especial, pode-se demonstrar que o estado fundamental do sistema, para qualquer parâmetro de interação $U > 0$, é isolante e com fortes correlações antiferromagnéticas presentes. Isso significa que basta uma interação infinitesimalmente pequena para o sistema deixar de ser metálico e transformar em um estado isolante também conhecido como um isolante de Mott. Em outras palavras, como essa transição entre os dois estados (metálico e isolante) se dá em $U = 0$, dizemos que o sistema não efetua uma transição de Mott em um parâmetro de interação crítico U_c

finito. Além disso, essa discussão ilustra, de maneira evidente, o quão drástico pode ser o papel das interações eletrônicas no comportamento de sistemas tipicamente de baixa dimensionalidade.

Além disso, quando dopamos levemente esse sistema isolante, ou seja, na situação em que $n \approx 1$, pode-se também demonstrar que o sistema se torna metálico para qualquer $U > 0$. A natureza precisa desse estado é, no entanto, bem diferente se comparada com o caso não-interagente descrito na seção anterior. As excitações elementares de baixa energia, ao invés de serem excitações eletrônicas (e portanto férmions), se tornam modos coletivos bosônicos também conhecidos como holons e spinons [72, 73]. Essas partículas, por sua vez, implicam em uma separação exata dos graus de liberdade de carga e spin no sistema, o que invalida completamente o conceito de quasipartícula eletrônica que discutimos anteriormente. Dessa maneira, a teoria efetiva de baixa energia do líquido de Fermi (ou, equivalentemente, a teoria de bandas) se torna completamente inapropriada para a descrição desses sistemas. Na verdade, nesse caso, essa teoria deve ser substituída por uma outra teoria efetiva chamada de líquido de Luttinger que leva em consideração todas essas peculiaridades descritas desses metais unidimensionais.

Para entendermos o porquê dessas peculiaridades dos sistemas 1d, precisamos traçar a origem desses efeitos de uma maneira mais precisa. A primeira questão consiste no fato da superfície de Fermi do sistema sempre possuir uma característica fundamental e que influencia toda a sua dinâmica eletrônica: a chamada condição de “nesting”. Ela, por sua vez, significa que uma parte da superfície de Fermi pode ser mapeada exatamente em outra parte, apenas fazendo-se uma translação finita de $2k_F$. Essa propriedade especial induz vários tipos de instabilidades no sistema que, essencialmente, competem entre si. É justamente essa competição entre possíveis ordenamentos no sistema que torna o caso 1d altamente não-trivial em vários aspectos. Vale mencionar que as flutuações quânticas nesses sistemas são essenciais do ponto de vista físico e não podem ser levadas em conta por meio de simples médias efetivas como ocorre, tipicamente, em abordagens do tipo

campo médio.

Intuitivamente, podemos entender também os sistemas 1d sob um outro ponto de vista. Para isso, vamos recorrer à seguinte experiência mental: Imagine os elétrons confinados unidimensionalmente. Tudo o que eles podem fazer no sistema é otimizar sua configuração criando distorções de carga e spin nele. Essas excitações são os modos coletivos bosônicos que, por sua vez, dominam a dinâmica do sistema. Assim, como os elétrons não podem, estritamente falando, passar um pelo outro em um linha, isso faz com que o caráter fermiônico dessas partículas seja efetivamente desativado nesses sistemas. Visto por esse ângulo, esse problema certamente não aparece em duas ou em três dimensões espaciais, uma vez que esses sistemas dispõem de um espaço de fase bem mais amplo para que as excitações elementares associadas possam interagir entre si.

Na próxima seção, vamos começar a discutir, em particular, o problema de elétrons fortemente correlacionados em duas dimensões espaciais. Mais precisamente, o nosso objetivo central será o de entender o quanto da física de uma dimensão espacial sobrevive no caso de duas dimensões. Esse problema é de extremo interesse dentro do contexto atual da física teórica, em função do fato de que sua solução pode conter o ingrediente chave que permitirá, finalmente, a compreensão da supercondutividade de alta temperatura exibida nos cupratos³.

2.2 Elétrons confinados em um plano

2.2.1 O modelo “tight-binding” com interações

Em $d = 2$, vamos considerar, em particular, o caso de uma rede quadrada (ver Fig. 2.2) com um espaçamento a entre os sítios e área ou “volume” bidimensional total $V = L^2 = N_{\text{sítios}}a^2$. Vale notar que $N_{\text{sítios}}$ agora é o número total de sítios no sistema bidimensional.

³Que, como vimos no capítulo anterior, são sistemas efetivamente bidimensionais.

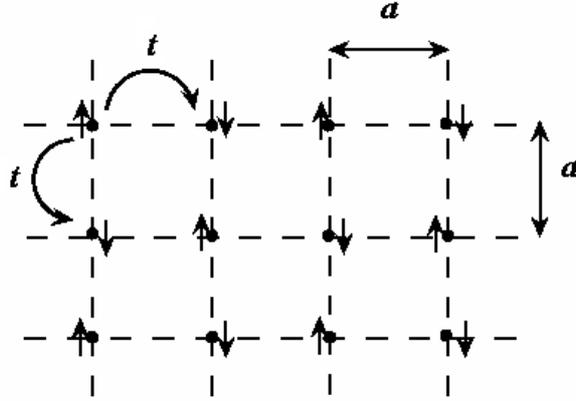


Figura 2.2: Rede cristalina em duas dimensões espaciais.

Vamos supor, também, que a amplitude de probabilidade t_{ij} é bem maior se os sítios i e j forem vizinhos entre si. Assim, repetindo os mesmos passos feitos para o caso unidimensional, obtemos

$$H_0 - \mu N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (2.9)$$

onde $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ e a relação de dispersão $\xi_{\mathbf{k}}$ agora fica

$$\xi_{\mathbf{k}} = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] - \mu. \quad (2.10)$$

onde todas as outras quantidades seguem definições semelhantes comparadas com o caso anterior, ou seja, μ é o potencial químico que permite ajustar o número de elétrons N no sistema e, no limite termodinâmico ($N, V \rightarrow \infty$), devemos substituir $\sum_{\mathbf{k}} = V/(2\pi)^2 \int d^2\mathbf{k}$. Além disso, como podemos facilmente constatar, a largura da banda não-interagente desse modelo é dada por $W = 8t$. De fato, como veremos, esse parâmetro desempenhará um papel importante na dinâmica resultante do sistema.

Vamos agora incluir as interações eletrônicas no sistema. Repetindo os mesmos passos descritos anteriormente temos que o modelo final fica

$$H - \mu N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [-2t (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - \mu] \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.11)$$

que é o modelo de Hubbard bidimensional. Diferentemente do caso 1d, esse modelo não pode ser resolvido exatamente para todas as situações. Por essa razão, em geral, temos que recorrer a métodos aproximados para inferir o comportamento desses sistemas em casos de interesse físico.

Além disso, nesse modelo, podemos ver que existem duas escalas características de energia. Uma escala é definida pelo parâmetro t (ou, equivalentemente, por W) relativo à parte cinética e a outra escala é definida pelo parâmetro U proveniente do termo de interação. Essas escalas induzem diferentes tipos de tendências no sistema, de tal maneira que se torna importante examinar as situações em que uma escala domina sobre a outra.

2.2.2 Simetrias do modelo

Uma questão importante para se entender qualquer sistema consiste na análise de suas simetrias. Assim, pode-se facilmente ver que a Hamiltoniana de Hubbard é invariante, por exemplo, pela seguinte transformação

$$\psi_{i\sigma} \rightarrow e^{i\alpha} \psi_{i\sigma}, \quad (2.12)$$

onde α é um parâmetro contínuo arbitrário. Essa é conhecida como simetria $U(1)$ global do sistema ou de conservação de carga. Outra simetria bastante importante na Hamiltoniana de Hubbard é a simetria de rotação de spin ou simetria $SU(2)$ global no sistema. Essa, por sua vez, consiste na seguinte transformação

$$\psi_{i\sigma} \rightarrow e^{i\boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\sigma}} \psi_{i\sigma}, \quad (2.13)$$

onde $\boldsymbol{\theta}$ é um vetor constante arbitrário e $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as bem conhecidas matrizes de Pauli. Essa simetria fica, particularmente, evidente escrevendo-se o termo de interação do modelo em termos dos operadores de spin do sistema que são definidos como

$$\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \psi_{i\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\alpha\beta} \psi_{i\beta}. \quad (2.14)$$

Assim,

$$H_{int} = U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = -\frac{2U}{3} \sum_i (\mathbf{S}_i)^2 + \frac{U}{2} \sum_i n_i, \quad (2.15)$$

o que mostra, claramente, que termo de interação induz uma tendência para os elétrons se localizarem no sistema e formarem momentos magnéticos locais. Isso terá implicações bastante importantes no modelo como veremos adiante.

A Hamiltoniana de Hubbard também é invariante por simetrias discretas. Por exemplo, ela é real ($H = H^*$) o que implica que o sistema é invariante por inversão temporal e é invariante por reflexão espacial $\psi_{i\sigma} \rightarrow \psi_{-i,\sigma}$ que, também, se evidencia através da propriedade $\xi_{\mathbf{k}} = \xi_{-\mathbf{k}}$.

2.2.3 Limite de fraco acoplamento: $W \gg U$

Vamos começar a nossa discussão do modelo considerando a situação em que a parte cinética do sistema domina o termo de interação, ou seja, $W \gg U$. Dessa maneira, esperamos que tendência do elétron se deslocalizar supere a sua tendência de localização. O nosso ponto de partida será, obviamente, o caso não-interagente (ou seja, em que $U = 0$). Da nossa discussão anterior sobre sistemas 1d, nós sabemos, de antemão, que nesse caso, teoria de bandas ou, equivalentemente, a teoria do líquido de Fermi de Landau funciona trivialmente. Isso significa que se $n = 1$ ou $n \approx 1$, essa teoria prevê que o sistema será metálico e se $n = 2$ o sistema será um isolante.

O estado fundamental é obtido preenchendo-se cada estado quântico disponível com apenas um elétron até o nível máximo de energia ϵ_F que é a energia de Fermi do sistema. Uma diferença importante em relação ao caso 1d é que a superfície de Fermi agora não consiste em pontos (discreta), mas sim em uma linha (contínua) e pode, dessa forma, admitir diferentes topologias dependendo do número de elétrons no sistema (ver Fig. 2.3). Ela pode, por exemplo, possuir pontos em que o gradiente da relação de dispersão

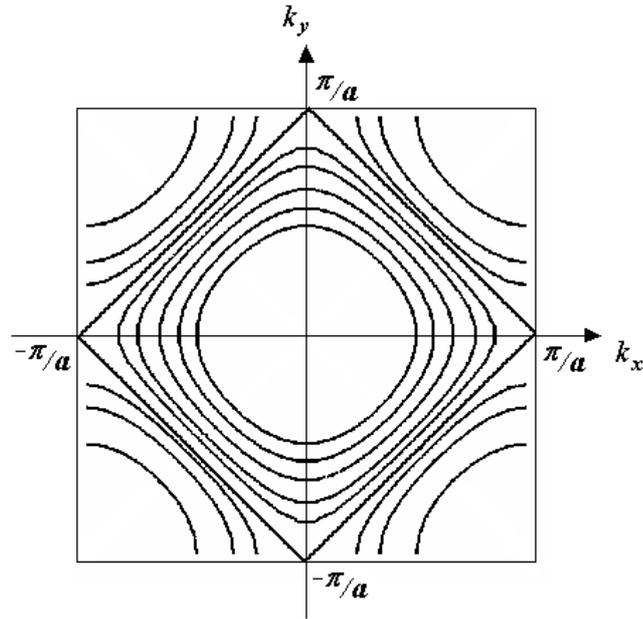


Figura 2.3: Diferentes topologias da superfície de Fermi em 2d. Na situação de banda exatamente semi-cheia, a SF é quadrada e apresenta singularidades de van Hove nela. Quando dopamos levemente esse sistema com buracos, a SF se torna aproximadamente quadrada com bordas arredondadas e sem singularidades de van Hove presentes.

é nulo ($\nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}} = 0$) e, conseqüentemente, a densidade de estados do sistema se torna divergente na superfície de Fermi. Esses pontos são conhecidos como singularidades de van Hove e podem desempenhar um papel importante na física de alguns sistemas. Além disso, podem existir, ainda, situações em que a superfície de Fermi tenha a propriedade de “nesting”. Essa condição pode fazer com que esses sistemas 2d possuam algumas semelhanças com o problema 1d discutido anteriormente.

Da nossa discussão anterior vimos que, em duas dimensões espaciais, as excitações elementares não devem ser apenas bosônicas o que está relacionado também com o fato de que a separação de carga e spin no modelo 2d nunca é exata. Dessa forma, é razoável admitir que, para $U \ll W$, o ponto de partida fermiônico seja uma boa aproximação para a descrição da física do sistema. Assim, teoria de perturbação, em geral, funciona para esses sistemas e as excitações elementares associadas ao caso interagente estão conectadas adiabaticamente aos elétrons do caso não-interagente.

2.2.4 Limite de forte acoplamento: $U \gg W$

Vamos, agora, examinar o limite oposto que é quando o termo de interação domina sobre o termo cinético, ou seja, $U \gg W$. Vamos considerar primeiro o caso de $U = \infty$ para uma situação de banda exatamente semi-cheia ($n = 1$). Como vimos anteriormente, a Hamiltoniana de Hubbard nesse limite fica simplesmente

$$H = -\frac{2U}{3} \sum_i (\mathbf{S}_i)^2, \quad (2.16)$$

onde desprezamos um termo aditivo constante. Nesse caso, o estado de energia mais baixa do sistema (estado fundamental) consiste, simplesmente, em estados com apenas um elétron em cada sítio da rede. Os elétrons estão “congelados” e imóveis, uma vez que estados com sítios duplamente ocupados são bastante dispendiosos energeticamente. O sistema é, claramente, um isolante de carga, ou seja, um isolante de Mott.

Como, nesse limite, o sistema é isolante, ele apresenta um “gap” de carga que, na verdade, é proporcional a U . Mesmo assim, existem várias excitações de spin que não custam energia alguma para serem excitadas. Elas consistem em mudanças na projeção dos spins em cada sítio da rede. Por essa razão, o estado fundamental do sistema, na verdade, é altamente degenerado, uma vez que cada um dos N ($\sim 10^{23}$) elétrons localizados pode apresentar projeções de spin para cima (up) ou para baixo (down). Para U/W grande mas finito, nós esperamos que o “gap” de carga seja mantido, mas essa enorme degenerescência de spin é quebrada.

Construindo uma teoria de perturbação usando como parâmetro de expansão t/U que é obviamente pequeno, pode-se mostrar que a Hamiltoniana efetiva que descreve a dinâmica de baixa energia de spin nesse sistema é a seguinte

$$H_{efetivo} = \frac{4t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.17)$$

onde $\langle ij \rangle$ significa que a soma se estende só sobre os primeiros vizinhos na rede cristala-

lina. Essa Hamiltoniana efetiva é conhecida como o modelo de Heisenberg bidimensional [74, 75] com um parâmetro de interação de troca efetivo $J = 4t^2/U$ que é, claramente, sempre positivo. É interessante notar nessa Hamiltoniana que a interação coulombiana inicial parametrizada por U gera indiretamente interações entre spins (ou seja, de natureza magnética) no sistema. Além disso, concluímos por meio dessa Hamiltoniana efetiva que o estado fundamental associado ao modelo de Hubbard 2d no limite de forte acoplamento e banda semi-cheia deve ser claramente um estado com um ordenamento de spins antiferromagnético.

Vamos considerar, agora, a situação em que a banda do sistema não se encontra exatamente semi-cheia. Se removermos, por exemplo, alguns elétrons do sistema (ou, de maneira equivalente, adicionando buracos nele), temos que alguns sítios ficarão sem elétrons. Dessa maneira, alguns elétrons (ou buracos) desse sistema se tornarão mais móveis, uma vez que eles podem tunelar para os sítios vazios e não experimentar a forte repulsão U em um mesmo sítio. A Hamiltoniana efetiva, nessa situação, fica portanto

$$H_{efetivo} = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{j\sigma} + \frac{4t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.18)$$

que é conhecido como o modelo $t - J$ [74, 75]. O modelo de Heisenberg 2d e o modelo $t - J$ são ferramentas valiosas que permitem o entendimento do papel de correlações eletrônicas extremas em problemas fermiônicos tipicamente bidimensionais. Durante as últimas duas décadas, muito progresso foi realizado teoricamente, utilizando exatamente esses dois modelos como referência [74, 75].

Infelizmente, em muitas situações fisicamente relevantes, mapear o modelo de Hubbard em um modelo quântico de spins consiste em uma supersimplificação do problema. As complicações devido à estatística fermiônica dos elétrons no modelo microscópico são levadas em conta por meio de uma média efetiva no parâmetro de troca J . Os operadores de spin são essencialmente bosônicos, uma vez que comutam em sítios diferentes na rede. Se levássemos em conta termos de ordem superior em t/U , interações bem mais complicadas

apareceriam como interações entre vários spins e também entre spins bastante distantes um do outro. Se U for da mesma ordem de grandeza de t , não é claro de maneira alguma que se possa truncar essa série apenas no termo de segunda ordem de perturbação. Na verdade, é justamente essa aproximação que reduz o complicado problema fermiônico em um modelo efetivo de spins.

2.2.5 O estado de Nagaoka

Como vimos na seção anterior, quando se dopa a Hamiltoniana de Hubbard no limite de forte acoplamento para fora da condição de banda exatamente semi-cheia, temos que o modelo de Heisenberg deve ser substituído pelo modelo $t - J$. No entanto, não discutimos ainda fisicamente qual é o efeito preciso da dopagem nas correlações do sistema. Essa questão fica particularmente evidente em um teorema demonstrado por Nagaoka [76] para o modelo de Hubbard no limite $U = \infty$. Nesse caso, a Hamiltoniana $t - J$ se torna

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} P_s \psi_{i\sigma}^\dagger \psi_{j\sigma} P_s, \quad (2.19)$$

onde P_s é um operador que projeta os estados de Fock na representação de Wannier $|n_{1\uparrow}, n_{1\downarrow}, n_{2\uparrow}, \dots \rangle$ para um subespaço que contenha somente estados com até, no máximo, um elétron em cada sítio, ou seja, $n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \leq 1$ para todo e qualquer sítio i .

O teorema de Nagaoka pode ser enunciado da seguinte maneira:

Teorema de Nagaoka 2.2.1 *No limite $U = \infty$, se doparmos com apenas um buraco o estado magnético altamente degenerado associado à condição de banda exatamente semi-cheia no modelo de Hubbard (Eq. 2.19), o estado fundamental do sistema resultante apresenta um ordenamento do tipo ferromagnético (que é também conhecido como o estado de Nagaoka).*

Esse resultado nos mostra que, nesse caso, os buracos adicionados ao sistema com banda semi-cheia preferem um ambiente ferromagnético onde eles podem minimizar sua energia

cinética se tornando mais móveis. Infelizmente, esse resultado não é facilmente generalizável para U/W finito ou outras concentrações de buracos. Mesmo assim, acredita-se que uma das grandes lições do teorema de Nagaoka seja o fato de que a dopagem nesses sistemas implica numa redução induzida por fortes flutuações quânticas do alcance das correlações antiferromagnéticas que se encontram inicialmente presentes na condição de banda exatamente semi-cheia.

2.2.6 Sistemas com acoplamentos intermediários ($U \sim W$)

A região mais complicada de se analisar no modelo de Hubbard 2d consiste na situação em que as escalas do problema associados aos termos cinético e de interação são da mesma ordem de grandeza, ou seja, $U \sim W$. Nesse regime, nenhuma escala do problema domina sobre a outra e, portanto, não existe nenhum parâmetro pequeno óbvio em que se possa expandir perturbativamente. Dessa maneira, esse problema nos coloca frente a uma situação inteiramente nova que requer o desenvolvimento de novos instrumentos teóricos para sua descrição. Além disso, outra grande motivação para essa análise vem da observação experimental que sugere também que os cupratos de alta temperatura se enquadram nessa situação.

Vendo de uma maneira diferente essa questão, como não existe nenhum parâmetro pequeno na teoria, não se sabe, em geral, qual deve ser o ponto de partida apropriado para descrever esse tipo de sistema. Na região de fraco acoplamento, vimos anteriormente que o ponto de partida adequado para a descrição do modelo eram férmions (isto é, quasipartículas) que estavam, por sua vez, conectados adiabaticamente com os elétrons do modelo não-interagente. Quando passamos para o regime de forte acoplamento, notamos que o ponto de partida apropriado tornavam-se bósons (ou seja, spins) e, como resultado disso, o sistema podia apresentar algum tipo de ordenamento magnético. Dessa maneira, podemos observar, qualitativamente, que algum tipo de transição no sistema deve ocorrer

à medida que variamos a interação do modelo U em relação ao termo cinético. Esse cenário é comumente denominado de transição de fase quântica⁴ no modelo, uma vez que ela representa uma transição entre natureza de estados fundamentais diferentes numa situação em que a temperatura do sistema é estritamente nula, ou seja, $T = 0$. Vamos voltar a discutir essa questão mas, primeiro, vamos definir a teoria de transição de fase dita clássica ou de Landau-Ginzburg-Wilson.

2.3 Teoria de transição de fase “clássica” ou de Landau-Ginzburg-Wilson

Ao longo deste capítulo, discutimos as peculiaridades relacionadas com a natureza do estado fundamental associado a sistemas de baixa dimensionalidade na presença de interações eletrônicas em geral. Porém, pouco foi dito a respeito do papel da temperatura na dinâmica desses sistemas. Intuitivamente, espera-se que, se incluirmos um banho térmico em um sistema cujo estado fundamental se encontra ordenado magneticamente, esse estado tenderá a reduzir suas correlações entre os spins devido às excitações térmicas. Quando a temperatura atingir um certo valor crítico T_c maior que o parâmetro típico de acoplamento J , esses spins não mais estarão correlacionados em longas distâncias e o modelo deixará de apresentar um ordenamento magnético macroscopicamente. Conseqüentemente, podemos ter um cenário de transição de fase termodinâmica de segunda ordem no sistema entre uma fase ordenada e outra desordenada em T_c . Além disso, nessa temperatura crítica, essas duas fases coexistem entre si, o que torna esse problema altamente não trivial. A teoria que explica esse tipo de transição de fase (que é, também, conhecida como um fenômeno crítico) foi, inicialmente, desenvolvida por Ginzburg e Landau [2] no

⁴Esse termo é usado para diferenciar esse tipo de transição da mais conhecida transição de fase termodinâmica (ou clássica) que é conseqüência da competição entre a energia interna do sistema e sua entropia.

início da década de 50. Em seguida, essa teoria foi aperfeiçoada por Wilson [42] vinte anos depois para incluir o importante efeito das flutuações, que culminou, dessa maneira, no desenvolvimento da nossa noção moderna da chamada teoria do grupo de renormalização (GR) para a descrição desses sistemas. Essa teoria resultante é extremamente bem sucedida e, normalmente, é denominada na literatura de teoria de Landau-Ginzburg-Wilson (LGW) para os fenômenos críticos.

Nessa teoria, o processo de transição é descrito por meio de um fenômeno intrínseco do sistema denominado de quebra espontânea de simetria. O estado desordenado que se manifesta em temperaturas mais altas, em geral, possui todas as simetrias associadas à Hamiltoniana que descreve o sistema (como, por exemplo, simetrias de conservação de carga $U(1)$ e de rotação de spin $SU(2)$). No entanto, pode ocorrer no estado ordenado que emerge quando se diminui a temperatura do sistema que alguma dessas simetrias não se manifeste. Quando isso ocorre, essa simetria (que, em geral, é contínua) é dita quebrada espontaneamente no sistema. Para exemplificar nossa discussão, considere o caso de uma transição de um paramagneto para um ferromagneto em um sistema com três dimensões espaciais (3d). No estado paramagnético (altas temperaturas) os spins se encontram completamente desordenados, de tal maneira que o sistema como um todo é invariante por rotação de spin $SU(2)$. Em contrapartida, quando os spins se ordenam no estado ferromagnético (baixas temperaturas), o sistema “escolhe” um eixo de quantização para os spins se alinharem, quebrando, dessa maneira, espontaneamente sua invariância inicial de rotação de spin.

Além disso, uma questão que está intimamente ligada com o conceito de quebra espontânea de simetria contínua é a noção de ordenamento de longo alcance ou macroscópico no sistema. De fato, sempre que o estado de baixa energia de um dado modelo apresentar quebra espontânea de simetria e, portanto, estiver situado em um ponto crítico, suas correlações nesse sistema se estenderão infinitamente no espaço real. Mais precisamente, isso significa que se calcularmos a chamada função de correlação entre quaisquer

dois pontos no sistema, ela não decai a zero mesmo se a separação entre pontos for infinita. Portanto, toda a dinâmica do sistema está acoplada e, por essa razão, dizemos que o sistema apresenta um ordenamento de longo alcance nesse estado. Esse ordenamento, por sua vez, é descrito por uma quantidade chamada parâmetro de ordem de longo alcance na teoria. No caso específico da transição paramagneto-ferromagneto descrita acima, o parâmetro de ordem é dado pela magnetização associada ao alinhamento dos spins no sistema.

Se a simetria contínua for quebrada em um sistema quântico, outra consequência interessante aparece. Nesse caso, como a Hamiltoniana que descreve o sistema é invariante pela simetria contínua, o estado fundamental associado ao problema é infinitamente degenerado. No momento em que o sistema “escolhe” um entre esses infinitos estados, um novo tipo de excitação de natureza bosônica emerge dentro desse quadro. Essas excitações, por sua vez, não apresentam “gap” para serem excitadas e elas são comumente chamadas de bósons de Goldstone [77, 78]. Quando isso ocorre, dizemos que a simetria subjacente do modelo se encontra realizada em um modo de Goldstone. Exemplos conhecidos de excitações de Goldstone são os fônons que aparecem devido à quebra da simetria de translação contínua em uma rede cristalina e os mágnons ferromagnéticos que aparecem quando se quebra a simetria de rotação de spin na transição paramagneto-ferromagneto descrita acima.

Em três dimensões espaciais, esse cenário de transição “clássica” de segunda ordem sempre é válido. No entanto, quando passamos para o caso de sistemas definidos em dimensões reduzidas como os modelos de baixa dimensionalidade discutidos ao longo de todo esse capítulo, essa teoria, infelizmente, não pode mais ser utilizada. Essa questão fica, particularmente, evidente em um famoso teorema conhecido como o teorema de Mermin-Wagner demonstrado para esses sistemas que vamos discutir a seguir.

2.4 Teorema de Mermin-Wagner

O teorema de Mermin-Wagner [8, 9] ilustra de maneira clara o papel drástico que pode ter o efeito da temperatura nas propriedades dos sistemas de baixa dimensionalidade. Seu conteúdo dentro de um contexto não-relativístico foi sugerido, inicialmente, por Hohenberg na década de 60 e demonstrado, rigorosamente, por Mermin e Wagner nessa mesma época. Esse teorema pode ser enunciado da seguinte maneira:

Teorema de Mermin-Wagner 2.4.1 *Para um modelo interagente definido com um parâmetro de interação de curto alcance, não pode haver quebra espontânea de simetria contínua em nenhuma temperatura finita do sistema nem em uma nem em duas dimensões espaciais.*

Como corolário direto desse teorema, temos que esses mesmos sistemas não podem apresentar um ordenamento genuinamente de longo alcance em temperaturas finitas. Dessa maneira, eles só podem apresentar dois tipos de ordenamento: A primeira possibilidade consiste em um ordenamento do tipo quase-longo alcance ou mesoscópico. Esse tipo de ordenamento se caracteriza pelo fato das correlações entre dois pontos no sistema decaírem de forma lenta em termos de uma lei de potência à medida que a separação entre pontos aumenta⁵. Ele é sintomático de sistemas que possuem, pelo menos, algum tipo de excitação sem “gap” presente. A segunda possibilidade consiste no fato do sistema apresentar simplesmente uma ordem de curto alcance ou microscópico. Esse tipo de ordenamento é, por sua vez, caracterizado por um decaimento exponencial rápido da função de correlação associada ao sistema e, em geral, é resultado de abertura de algum “gap” de excitação nele.

Esse teorema implica, também, que as excitações térmicas desordenam os spins em sistemas de baixa dimensionalidade em temperaturas arbitrariamente baixas. Dito de

⁵Note que essa correlação é zero no infinito, ao contrário do caso de ordenamento genuinamente de longo alcance em 3d onde essa mesma quantidade não se anula no mesmo limite.

outra forma, isso significa que a temperatura de transição nesses sistemas sempre ocorreria, estritamente falando, em $T = 0$. Por essa razão, nas últimas décadas, houve um grande aumento em física da matéria condensada no interesse em se analisar transições de fase que ocorrem em função de outro parâmetro de controle que não seja a temperatura como, por exemplo, o acoplamento que define o modelo ou a dopagem do sistema. Essas transições são de natureza completamente se comparadas com as transições clássicas descritas pela teoria de Landau-Ginzburg-Wilson. Elas não têm origem devido a uma competição entre energia interna e entropia do sistema, mas sim em uma competição entre diferentes termos presentes na Hamiltoniana que, por sua vez, não comutam entre si como, por exemplo, a energia cinética e o termo de interação. Esse novo tipo de transição de fase não envolve necessariamente quebra espontânea de simetria no sistema e, por essa razão, é comumente chamado de transição de fase quântica na literatura [79].

2.5 Considerações gerais

Neste capítulo, definimos os modelos que vamos usar ao longo de toda esta tese: os modelos de Hubbard 1d e 2d. Apesar do modelo de Hubbard em 1d poder sempre ser resolvido exatamente, o caso 2d se mostra bem mais desafiador nesse aspecto. De fato, em 2d, esse modelo só pode ser resolvido em duas situações especiais: fraco acoplamento e forte acoplamento. Nessa condições, sempre algum termo na Hamiltoniana domina sobre o outro o que simplifica, substancialmente, a análise final. No entanto, para o caso de acoplamentos intermediários, essas aproximações não podem mais ser invocadas e a solução do problema resultante se torna bem mais complicada. Além disso, vimos a importância desse caso para a descrição dos cupratos supercondutores.

No próximo capítulo, vamos começar a discutir uma importante técnica conhecida como o grupo de renormalização com o intuito de aplicar posteriormente nesta tese na descrição de alguns desses sistemas. Veremos que o grupo de renormalização revelar-se-á

uma técnica bastante poderosa e promissora para se inferir sobre a natureza do estado fundamental e das excitações elementares associadas a modelos que, tipicamente, não podem ser resolvidos exatamente.

Capítulo 3

O Grupo de Renormalização

Neste capítulo, vamos descrever a metodologia que será utilizada ao longo desta tese que consiste no chamado método do grupo de renormalização. Como ficará claro no que se segue, essa técnica se revelará um instrumento analítico poderoso que, por sua vez, permitirá a análise dos modelos eletrônicos fortemente correlacionados discutidos anteriormente. Dentro desse quadro, vamos, inicialmente, definir a filosofia subjacente do método para, em seguida, discutir as diferentes maneiras de se implementá-lo na prática. Veremos que, seguindo uma estratégia semelhante a que levou ao sucesso espetacular da teoria do grupo de renormalização aplicada aos fenômenos críticos, definiremos uma transformação entre Hamiltonianas (ou, equivalentemente, uma transformação entre ações) que, essencialmente, mapeia ou renormaliza o modelo inicial em um outro modelo dito efetivo. Esse último, por sua vez, é definido de tal forma a incluir exatamente a mesma física de baixa energia associada ao modelo original. Se, por hipótese, ao longo desse processo de renormalização, pelo menos um desses modelos efetivos puder ser resolvido exatamente, isso implicará que toda a classe de Hamiltoniana efetivas associadas a esse modelo incluindo o problema inicial também estarão resolvidos.

Devido à sua grande generalidade, existem aplicações do método do grupo de renormalização dentro dos mais variados contextos físicos e matemáticos. No entanto, vamos nos

concentrar aqui, essencialmente, em sua capacidade em determinar a natureza do estado fundamental associado a um dado modelo microscópico, bem como em caracterizar a natureza das excitações elementares¹ presentes ou não na descrição de baixa energia desse sistema.

Como já foi mencionado anteriormente, o grupo de renormalização pode ser formulado utilizando-se basicamente dois tipos de abordagens possíveis que, na verdade, se complementam: a formulação de Wilson e a formulação de teoria de campos. Assim, vamos iniciar nossa discussão explicando primeiro a abordagem devido à Wilson. Essa abordagem, embora tecnicamente mais difícil de ser implementada, tem a vantagem de ser bastante intuitiva fisicamente. Ela servirá de base para a nossa discussão posterior que tratará do grupo de renormalização seguindo a abordagem de teoria de campos. Essa abordagem, por sua vez, tem a seu favor a vantagem de ser tecnicamente mais simples de se implementar, embora seja um pouco mais abstrata em sua construção.

3.1 A filosofia do método

Vamos recapitular a nossa discussão do capítulo anterior. Considere mais uma vez o caso de um sistema de elétrons não-interagentes descritos por uma Hamiltoniana do tipo “tight-binding” que, para o nosso propósito aqui, pode ser 1d ou 2d. Como vimos, para o caso de banda semi-cheia ($n = 1$) ou quase semi-cheia ($n \approx 1$), esses sistemas não apresentam “gaps” de excitação no espectro de energia correspondente. Além disso, eles são trivialmente descritos por uma teoria de bandas ou, equivalentemente, pela teoria do líquido de Fermi de Landau que se baseia no conceito de partículas independentes (ou quasipartículas) presentes no sistema. Quando adicionamos os efeitos de interação elétron-elétron, observamos que a física de alguns desses sistemas se modifica drasticamente de

¹Essas excitações elementares de baixa energia são fundamentais, por exemplo, na determinação das propriedades termodinâmicas, magnéticas e de transporte nesses sistemas.

tal forma que outros tipos de abordagens devem ser utilizados.

Dessa maneira, torna-se natural fazer as seguintes perguntas para esses sistemas: Qual é a física de baixa energia associada ao modelo resultante quando adicionamos um dada interação à teoria livre? O sistema permanecerá sem “gap” ou não? Se o sistema continuar sem “gap”, qual é a teoria efetiva que descreve a física de baixa energia do modelo correspondente? Se, por outro lado, o sistema abrir um “gap” de excitação, qual é a natureza do estado fundamental nessa situação? Vamos mostrar que o grupo de renormalização provê uma nova maneira de responder essas questões em situações que podem ser testadas por vários outros métodos (como é o caso, por exemplo, do modelo de elétrons interagentes em 1d) e tem o potencial futuro de dar respostas categóricas a situações novas que não foram resolvidas até o presente momento.

Como já foi dito, vamos discutir primeiro a abordagem de Wilson para o grupo de renormalização (GR), uma vez que ela permite, na opinião do autor, um entendimento da filosofia associada ao método de uma maneira mais transparente. No cerne dessa formulação, está o conceito de Hamiltoniana (ou ação) efetiva que descreve as propriedades físicas do sistema em uma dada escala que pode ser, por exemplo, uma escala de energia ou uma escala de comprimento. Em matéria condensada, o interesse principal dessa teoria efetiva consiste em estudar o comportamento de um dado sistema no limite de baixas energias ou para escalas de comprimento macroscópicas. Essa análise permite, por exemplo, a caracterização da natureza do estado fundamental associado ao problema original e de suas excitações elementares que, por sua vez, podem ser inferidas de maneira indireta em situações experimentais.

Formalmente, a derivação dessa ação efetiva é bastante simples: Primeiro, define-se a teoria microscópica em termos de uma integral funcional que descreve o sistema como um todo (teoria chamada “nua”). Em seguida, integra-se os graus de liberdade associados a escalas de energia altas ou escalas de comprimento microscópicas (modos rápidos), incluindo-os de maneira efetiva nos graus de liberdade associados a escalas de energia

baixas ou escalas de comprimento macroscópicas (modos lentos). Depois, rescalona-se os graus de liberdade associados aos modos lentos, ou seja, faz-se uma mudança de unidades, a fim de comparar as duas teorias antes e depois da integração. Por fim, rescalonam-se também os campos dessa teoria. Todos esses estágios definem o chamado processo de renormalização do sistema.

Se iterarmos esse procedimento várias vezes, obtemos um mapeamento de Hamiltonianas ou ações definidas em um certo espaço de fase para ações definidas nesse mesmo espaço. Representando uma ação inicial como um ponto no espaço de constantes de acoplamento, esse ponto fluirá para um outro ponto com a transformação do GR e, assim, sucessivamente. Isso gerará possíveis trajetórias no espaço de ações ao longo desse processo que denominamos de diagrama de fluxo do sistema. Essa representação pictórica sugere uma possibilidade bastante interessante que consiste na noção de ponto fixo² do grupo, ou seja, um ponto que reproduz nele mesmo e não flui após a transformação do GR. Assim, se o sistema tiver um comprimento típico de correlação ξ nas unidades antigas, depois da transformação, esse comprimento terá um valor menor $\xi' < \xi$ nas novas unidades. No entanto, por definição, ele tem de continuar o mesmo antes e depois da transformação no ponto fixo. Isso significa que o comprimento de correlação nesse caso tem de ser zero ou infinito. O primeiro caso ($\xi = 0$) implica que o sistema não tem correlações presentes e, portanto, o estado é essencialmente livre e sem “gap”. Por outro lado, o segundo caso ($\xi = \infty$) significa que o estado se encontra fortemente correlacionado ao longo de todo o sistema. Fazendo uma analogia com a teoria de transição de fases de Landau-Ginzburg-Wilson, podemos dizer que, nessa situação, o sistema se encontra em um ponto de criticalidade. Essa situação implica que as funções de correlação associadas ao sistema decaem de forma lenta como uma lei de potência. Além disso, como vimos anteriormente, esse decaimento é sintomático de um ordenamento do tipo quase-longo al-

²Esse ponto fixo é conhecido também como ponto fixo infravermelho, uma vez que está relacionado com o limite de baixas energias no sistema. Pontos fixos ultravioletas não são importantes no contexto de matéria condensada e, por essa razão, não serão tratados nesta tese.

cance no sistema e da presença, pelo menos, de alguma excitação sem “gap” no espectro. Portanto, podemos constatar, de uma maneira bastante geral, que pontos fixos descrevem, naturalmente, sistemas sem “gaps” de excitação presentes.

Outro cenário que pode ocorrer também no processo de renormalização consiste na situação em que o fluxo de ações efetivas não converge para nenhum ponto fixo. Esses casos são, em geral, muito mais difíceis de se analisar, uma vez que o processo de renormalização não deixa claro qual é o modelo efetivo de baixa energia que descreve a física desses sistemas. Assim, em situações como essa, temos que recorrer ao cálculo de outras quantidades para inferirmos sobre o comportamento macroscópico exibido por esses sistemas. Na maioria das vezes, esses casos refletem uma abertura de “gap” no espectro de excitação que, por sua vez, está relacionado com uma presença de um ordenamento de curto alcance no sistema.

Uma outra consequência importante e natural do grupo de renormalização consiste no conceito de universalidade associado a esses sistemas. Considere, por exemplo, duas Hamiltonianas (ou ações) microscópicas completamente diferentes entre si. Vamos supor que, ao longo da transformação do GR, ambas convirjam para um mesmo ponto fixo no limite de baixa energia. Esse resultado significaria que os dois modelos, quando observados experimentalmente, exibiriam o mesmo tipo de comportamento macroscópico. Por essa razão, em inúmeras ocasiões, uma variedade de sistemas em matéria condensada podem ser descritos por apenas uma única teoria efetiva que é definida pelo ponto fixo correspondente. Sistemas que satisfazem essa condição são classificados como estando em uma chamada mesma classe de universalidade. Essa filosofia está implícita, por exemplo, na teoria de Landau do líquido de Fermi que descreve corretamente sistemas metálicos em três dimensões espaciais. Essa teoria define a classe de universalidade associada a um gás de quasipartículas (ou elétrons renormalizados) que estão essencialmente livres no sistema. Por essa razão, também, teoria de bandas, de uma maneira geral, funciona bem para esses sistemas 3d descritos em termos de partículas independentes.

Dessa maneira, fica claro que certas diferenças microscópicas entre modelos podem ou não influenciar a física de baixa energia do sistema dependendo da classe de universalidade a que eles estão associados. Por essa razão, é interessante introduzir aqui uma terminologia que diferencie cada situação nesses sistemas. Os parâmetros no modelo que fluem (ou renormalizam) para zero são chamados de *irrelevantes* do ponto de vista do GR e podem ser, naturalmente, desprezadas nessas teorias definidas dentro da mesma classe de universalidade. Por outro lado, existem também situações em que os parâmetros do modelo inicial crescem ao longo do fluxo do GR e estes, por sua vez, são classificados como *relevantes* na teoria. Já as quantidades que não variam ao longo desse processo são chamadas de grandezas *marginais* do modelo. Assim, visto por esse ângulo, podemos constatar que, se uma Hamiltoniana microscópica contiver parâmetros que são relevantes ou marginais nela, a sua dinâmica macroscópica será determinada, fundamentalmente, por essas quantidades.

3.2 O problema central desta tese

Antes de definirmos o processo de renormalização do ponto de vista formal, precisamos definir primeiro o problema central que será tratado nessa tese. Vamos voltar ao problema do modelo de Hubbard em duas dimensões espaciais que definimos no capítulo anterior. Como vimos, esse modelo é descrito pela seguinte Hamiltoniana

$$\bar{H} \equiv H - \mu N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [-2t (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - \mu] \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (3.1)$$

Nessa expressão, o termo de energia cinética está escrito na base de vetor de onda de Bloch, enquanto que o termo de interação está escrito na base de Wannier. Para colocar os dois termos na mesma representação, vamos fazer uma mudança de base no termo de interação, escrevendo-o também em termos da base de vetor de onda no sistema. Portanto,

temos

$$\bar{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [-2t (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - \mu] \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\sigma} + \left(\frac{U}{N_{sites}} \right) \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}} \psi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \psi_{\mathbf{q}\downarrow}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\downarrow} \psi_{\mathbf{p}\uparrow}. \quad (3.2)$$

Esse é o modelo de Hubbard bidimensional na forma em que trataremos daqui por diante nesta tese. Como vimos anteriormente, esse modelo não pode ser resolvido exatamente para todas as situações de dopagens e constantes de acoplamento. Dessa maneira, torna-se interessante o desenvolvimento de novos tipos de técnicas analíticas que permitam a determinação da natureza do seu estado fundamental e de suas excitações elementares em situações fisicamente importantes.

Vamos entender inicialmente qual é a situação física que queremos descrever. Recapitulando a nossa discussão sobre os cupratos supercondutores, vimos que, quando esses sistemas se encontram numa situação de banda exatamente semi-cheia (isto é, $n = 1$), eles são sempre isolantes de Mott. À medida em que eles são levemente dopados com buracos, eles exibem uma fase eletrônica bastante peculiar que se manifesta em temperaturas finitas conhecida como a fase de pseudogap. Essa fase, como vimos, é central para o correto entendimento do mecanismo da supercondutividade de alta temperatura nesses sistemas. Além disso, vimos também que o modelo de Hubbard 2d definido para acoplamentos de intensidade intermediária fornece um ponto de partida apropriado para a descrição desses materiais e, por essa razão, ele pode captar algumas das propriedades eletrônicas exóticas nessas regiões de dopagem.

Diante desse quadro teórico, o problema que vamos abordar nesta tese consiste no modelo de Hubbard 2d para o caso em que a banda do sistema se encontra quase semi-cheia ($n \approx 1$) como o resultado de uma leve dopagem por buracos. Dessa maneira, o nosso objetivo primordial consistirá em atacar esse problema usando o método do grupo de renormalização (GR) descrito anteriormente. Como já mencionamos, essa formulação do GR segue uma estratégia semelhante à abordagem original devido à Wilson na teoria de

transição de fases de Landau-Ginzburg-Wilson (LGW). Porém, ao contrário dessa teoria que é naturalmente adequada para a descrição de bósons no sistema, a nossa abordagem aqui será adaptada para o nosso problema específico que é fermiônico. Como ficará claro no que se segue, isso implicará em diferenças cruciais entre os dois métodos do GR o que faz com que a abordagem fermiônica seja extremamente interessante também de um ponto de vista exclusivamente teórico.

O nosso ponto de partida, portanto, será a superfície de Fermi não-interagente associada ao modelo de Hubbard 2d com banda quase semi-cheia (ver Fig. 3.1(a)). Usando taticamente uma linguagem já apropriada para formularmos o GR para esse sistema, como essa teoria livre não apresenta “gap” de excitação presente, esperamos, naturalmente, que ela sempre corresponda a um ponto fixo da transformação. Esse ponto fixo não-interagente é conhecido como o ponto fixo trivial do GR. Esse ponto define, por exemplo, a teoria do líquido de Fermi de Landau para esse sistema.

Como já explicamos anteriormente, quando adicionarmos o termo de interação nesse sistema, essa interação poderá fluir efetivamente em várias direções diferentes e, na verdade, o destino final desse fluxo determinará a natureza do estado fundamental do sistema e de suas excitações elementares observadas macroscopicamente. Além disso, outra questão bastante importante na discussão que se seguirá consiste na análise da possibilidade de existência ou não de outros pontos fixos da transformação que sejam não-triviais (ou não-livres). Em caso afirmativo, o modelo interagente se encontrará na mesma classe de universalidade de alguma outra teoria efetiva³ que, por sua vez, será de natureza bastante diferente da teoria de Landau.

Embora toda essa discussão se assemelhe bastante com o GR formulado para os fenômenos críticos, existem diferenças importantes com o caso que queremos analisar nesta tese. Essas diferenças estão, basicamente, relacionadas com a natureza do espaço de fase no limite de baixa energia que é bastante distinta nos dois sistemas. No caso

³Essa teoria efetiva também é comumente chamada de teoria do líquido de Não-Fermi na literatura.

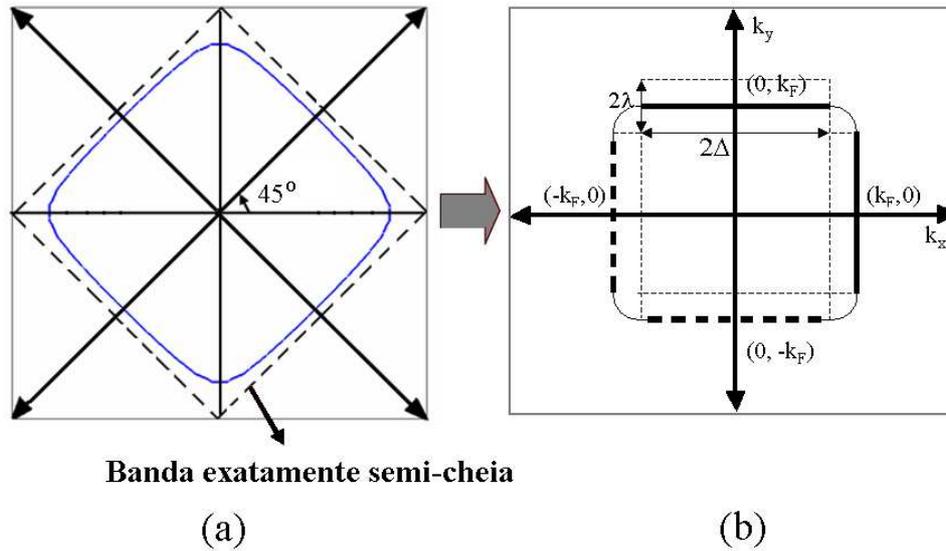


Figura 3.1: (a) A superfície de Fermi (SF) do caso de uma banda exatamente semi-cheia no modelo de Hubbard 2d (linha tracejada), a SF no caso levemente dopado por buracos (linha contínua), e (b) essa última SF depois de uma rotação dos eixos de 45° graus.

de fenômenos críticos bosônicos, o limite de baixa energia se concentra apenas em um ponto que é a origem do espaço de momentos da teoria. Dessa maneira, todo processo de renormalização se dá em direção a esse ponto, o que simplifica, substancialmente, a análise. Por outro lado, em sistemas tipicamente fermiônicos, o limite de baixa energia não é definido apenas por um ponto, mas sim por toda uma superfície, a superfície de Fermi⁴ (SF) do sistema. Dessa maneira, o processo de renormalização tem que ser definido em direção a essa superfície, o que implica em uma diminuição apenas da direção do momento perpendicular à SF. Assim, como a direção paralela à SF fica, essencialmente, inalterada devido a esse processo descrito, ela se revelará sempre importante para a correta descrição desses sistemas. Dito de outra maneira, os pontos fixos nesses sistemas serão sempre caracterizados por uma SF e por infinitos acoplamentos (ou funções de acoplamento) que estarão definidos nessa superfície. Note que o caso 1d é especial: a SF consiste em apenas dois pontos ($+k_F$ e $-k_F$). Com exceção do fato de ser dois pontos,

⁴A superfície de Fermi do sistema pode apresentar os mais variados tipos de topologia (ver, por exemplo, Fig. 2.3). Além disso, ela pode também, eventualmente, se alterar devido ao efeito das interações no sistema.

o que, basicamente, converte esse sistema de férmions não-relativísticos em férmions de Dirac, temos a mesma situação, se comparada com a teoria dos fenômenos críticos, em 1d, com poucas constantes de acoplamento na teoria efetiva de baixa energia. Isso explica o porquê do grande sucesso em se aplicar o GR para esses sistemas [11, 80] e a resistência igualmente grande em aplicar esses mesmos métodos em sistemas de dimensão espacial maiores ($d > 1$).

Agora, vamos voltar novamente ao nosso problema inicial que consiste no modelo de Hubbard 2d com banda quase semi-cheia. Como podemos ver na Fig. 3.1(a), a SF correspondente apresenta partes que se encontram, em uma boa aproximação, numa situação de “nesting”, ou seja, elas podem ser mapeadas uma na outra, fazendo-se apenas uma translação de um vetor de momento finito. Na verdade, esse fato faz com que esse sistema possua uma analogia bastante importante com o caso fermiônico 1d. Além disso, essa superfície tem bordas arredondadas, o que implica que o gradiente $\nabla_{\mathbf{k}}\xi_{\mathbf{k}}$ é sempre não-nulo ao longo dela. Conseqüentemente, não existe nenhuma singularidade de van Hove presente no sistema.

Se fizermos uma rotação no eixo dos momentos de 45° graus, a superfície de Fermi do sistema fica como está mostrada na Fig. 3.1(b). Por motivos que ficarão claros mais adiante, vamos dividi-la em quatro regiões cinemáticas que quase não possuem curvatura: duas regiões definidas com linhas contínuas e duas regiões definidas com linhas tracejadas. Dessa forma, estamos desprezando os efeitos das bordas no sistema. Além disso, como veremos com mais detalhes no Cap. 5 desta tese, os dois conjuntos formados por uma linha paralela e uma tracejada que são paralelas entre si não se misturarão, de tal forma que podemos nos restringir a apenas um dos conjuntos. Por conveniência, vamos considerar as regiões definidas pelo momento paralelo em relação à SF dado por $k_{\parallel} = k_x$ e o momento perpendicular correspondente dado por $k_{\perp} = k_y$. Dessa maneira, o momento paralelo está restrito ao intervalo $-\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta$, onde 2Δ consiste, basicamente, na extensão das regiões da SF.

Como estamos interessados apenas na dinâmica de baixa energia desse modelo, torna-se legítimo linearizar a relação de dispersão $\xi_{\mathbf{k}}$ em torno da superfície de Fermi do sistema definida nos novos eixos de momentos definidos após a rotação. Portanto, a Hamiltoniana não-interagente do modelo fica

$$\bar{H}_0 \equiv H_0 - \mu N = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} v_F (|k_{\perp}| - k_F) \psi_{\mathbf{k}\sigma(a)}^{\dagger} \psi_{\mathbf{k}\sigma(a)}, \quad (3.3)$$

onde $v_F = \nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}|_{k_{\perp}=\pm k_F}$ é a velocidade das excitações eletrônicas no nível de Fermi, isto é, a velocidade de Fermi do sistema. Além disso, o subscrito $a = \pm$ nos operadores de criação e destruição denotam a região da SF, ou seja, $k_{\perp} = \pm k_F$, em que essas excitações são criadas ou destruídas. Essa aproximação linear da relação de dispersão será válida apenas para alguns valores de k_{\perp} definidos dentro dos intervalos $[-k_F - \lambda; -k_F + \lambda]$ e $[k_F - \lambda; k_F + \lambda]$ (ver Fig. 3.1(b)). Estados que estão fora dessas regiões serão, portanto, desprezados, uma vez que eles introduziriam correções não lineares nessa expansão. Dessa maneira, podemos constatar que o parâmetro λ desempenha o papel de um ponte de corte máximo para os momentos definidos no modelo ou, de maneira essencialmente equivalente, um ponte de corte mínimo microscópico no espaço real do sistema. Por essa razão, esse ponte de corte é chamado comumente de “cutoff” ultravioleta (UV). A extensão desse “cutoff” na energia é, por sua vez, dada por $\Omega = 2v_F\lambda$.

3.3 A abordagem de Wilson

3.3.1 Representação de integral funcional do sistema

Nesta seção, vamos iniciar uma discussão mais técnica sobre a abordagem do GR de Wilson adequado ao nosso caso de interesse. Vamos considerar, novamente, o mesmo sistema eletrônico definido na seção anterior descrito pela Hamiltoniana não-interagente da Eq. (3.3). Fazendo uma simples transformação de Legendre, temos que a Lagrangiana

não-interagente que corresponde a esse modelo fica da seguinte forma

$$L_0 = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} \psi_\sigma^\dagger(\mathbf{k}, t) \left(i\partial_t - v_F \bar{k}_\perp \right) \psi_\sigma(\mathbf{k}, t), \quad (3.4)$$

onde, por conveniência, definimos a quantidade $\bar{k}_\perp = |k_\perp| - k_F$. Nessa expressão e nas que se seguirão, vamos abandonar o subscrito $a = \pm$ para não carregar, por enquanto, a nossa notação. Além disso, as quantidades $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{k}, t)$ e $\psi_\sigma(\mathbf{k}, t)$ são definidas, agora, como sendo campos fermiônicos (isto é, números de Grassmann) que estão associados aos operadores de criação e destruição de elétrons com momento \mathbf{k} e projeção de spin σ no formalismo canônico. No limite termodinâmico ($N, V \rightarrow \infty$), devemos obviamente substituir $\sum_{\mathbf{k}} = V/(2\pi)^2 \int d^2\mathbf{k}$.

A transformada de Fourier de $\psi(\mathbf{k}, t)$ em relação ao tempo com uma normalização apropriada para tomarmos o limite termodinâmico no sistema é a seguinte

$$\psi_\sigma(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int \frac{dk_0}{(2\pi)} e^{-ik_0 t} \psi_\sigma(k_0, \mathbf{k}). \quad (3.5)$$

Analogamente, define-se a mesma transformada também para $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{k}, t)$. Assim, a ação não-interagente do sistema, que é definida como sendo $S_0 = \int dt L_0$, fica

$$S_0[\psi^\dagger, \psi] = \sum_\sigma \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_\sigma^\dagger(k) \left(k_0 - v_F \bar{k}_\perp \right) \psi_\sigma(k), \quad (3.6)$$

onde, de agora em diante, estamos adotando uma notação “relativística” para $k = (k_0, \mathbf{k})$ onde k_0 é a energia e $\mathbf{k} = (k_\parallel, k_\perp)$ o momento do sistema. Além disso, temos que

$$\frac{d^3k}{(2\pi)^3} = \frac{dk_0}{(2\pi)} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2}. \quad (3.7)$$

Agora, estamos prontos para começar a discutir o efeito das interações nesse modelo não-interagente. Será instrutivo analisar o efeito de uma interação entre duas partículas escrita da maneira mais geral possível nesse sistema. Assim, seguindo os mesmos passos que acabamos de descrever, podemos mostrar que esse termo de interação genérico fica da seguinte forma

$$\begin{aligned}
 S_{int}[\psi^\dagger, \psi] = & - \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \int \prod_{i=1}^4 \left[\frac{d^3 p_i}{(2\pi)^3} \right] (2\pi)^3 \delta^{(3)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) g(p_1, p_2, p_3, p_4) \\
 & \times \psi_\delta^\dagger(p_4) \psi_\gamma^\dagger(p_3) \psi_\beta(p_2) \psi_\alpha(p_1), \tag{3.8}
 \end{aligned}$$

onde temos que

$$\delta^{(3)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) = \delta(p_{10} + p_{20} - p_{30} - p_{40}) \delta^{(2)}(\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_3 - \mathbf{p}_4). \tag{3.9}$$

Na representação de integral funcional, uma teoria de campos fica completamente definida se escrevermos o chamado funcional gerador dela. Esse objeto matemático, por sua vez, pode ser escrito da seguinte forma

$$Z[\eta^\dagger, \eta] = \int \mathcal{D}\psi^\dagger(k) \mathcal{D}\psi(k) e^{i(S_0[\psi^\dagger, \psi] + S_{int}[\psi^\dagger, \psi] + \int \eta^\dagger \psi + \int \eta \psi^\dagger)}, \tag{3.10}$$

onde η e η^\dagger são fontes externas que gerarão todas as funções de correlação associadas a esse sistema. Para simplificar a nossa discussão, vamos fazer com que essas quantidades sejam nulas, ou seja, $\eta = \eta^\dagger = 0$. Dessa maneira, a expressão final ficará

$$Z \equiv Z[\eta^\dagger = \eta = 0] = \int \mathcal{D}\psi^\dagger(k) \mathcal{D}\psi(k) e^{i(S_0[\psi^\dagger, \psi] + S_{int}[\psi^\dagger, \psi])}. \tag{3.11}$$

Como veremos a seguir, essa quantidade desempenhará um papel crucial para construirmos o método do GR de Wilson para esse sistema.

3.3.2 Estágios da transformação do GR de Wilson

Como vimos anteriormente, a nossa teoria não se encontra definida para qualquer momento \mathbf{k} no sistema. De fato, para o momento perpendicular à superfície de Fermi k_\perp , vimos que existe um “cutoff” ultravioleta λ associado que não permite excitações no modelo além dessa faixa. Nesse sentido, é interessante chamar a atenção para o fato de

que, fisicamente falando, esse “cutoff” ultravioleta no espaço real está associado a uma escala mínima microscópica no sistema. Essa escala, por sua vez, não permitirá flutuações quânticas no sistema que ocorram em distâncias menores que ela. Já para o momento paralelo k_{\parallel} , vimos que esse problema de definir um “cutoff” ultravioleta não aparece, uma vez que essa componente se encontra, naturalmente, definida dentro do intervalo $-\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta$. Na verdade, esse tratamento diferenciado nas duas componentes do momento é típico de sistemas que não são relativisticamente invariantes que é o caso do modelo tratado aqui que é invariante apenas pelo grupo de Galileu. Dentro desse quadro, pela mesma razão, não precisamos também tratar a energia k_0 em pé de igualdade com os momentos definidos na teoria. Dessa maneira, vamos fazer a escolha de não definir nenhum limite máximo (ou “cutoff” UV) para os valores que a energia pode assumir no sistema. Em outras palavras, isso equivale a dizer que a energia, por definição, satisfaz a seguinte condição, ou seja, $-\infty < k_0 < \infty$.

Agora, estamos prontos para definir o processo de renormalização do sistema no espírito da formulação de Wilson. Como vimos, esse processo consiste em vários estágios. Em primeiro lugar, temos que definir a teoria inicial também chamada de teoria “nua” que, por sua vez, representa a teoria efetiva do sistema definida na escala do cutoff ultravioleta ou, equivalentemente, a escala microscópica do sistema. O funcional gerador da teoria se escreve, portanto, da seguinte forma

$$Z(\lambda) = \int_{|\bar{k}_{\perp}| < \lambda} \mathcal{D}\psi^{\dagger}(k) \mathcal{D}\psi(k) e^{i(S_0[\psi^{\dagger}, \psi] + S_{int}[\psi^{\dagger}, \psi])}, \quad (3.12)$$

onde a notação $\int_{|\bar{k}_{\perp}| < \lambda}$ nos instrui a fazer a integração funcional apenas nas configurações de campo $\psi(k)$ que satisfazem as seguintes condições

$$\psi(k) = \begin{cases} \psi(k) & \text{para } k \text{ tal que } |k_0| < \infty, |k_{\parallel}| \leq \Delta \text{ e } |\bar{k}_{\perp}| < \lambda, \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

O segundo estágio do processo de renormalização consiste em integrar os graus de

liberdade rápidos ou associados a escalas de momento mais altas, incluindo-os de forma efetiva nos graus de liberdade lentos ou associados a escalas de momento mais baixas. Para isso, vamos definir, arbitrariamente, um parâmetro $b < 1$ de tal forma que a escala de momento $b\lambda$ funcionará como um divisor entre os modos lentos $\psi_{<}(k)$ e os modos rápidos $\psi_{>}(k)$ do sistema. Assim, escrevendo de uma maneira mais sistemática, temos que

$$\psi(k) = \psi_{<}(k) + \psi_{>}(k), \quad (3.13)$$

onde

$$\psi_{<}(k) = \begin{cases} \psi_{<}(k) & \text{se } |\bar{k}_{\perp}| < b\lambda, \\ 0 & \text{se } b\lambda < |\bar{k}_{\perp}| < \lambda, \end{cases}$$

e

$$\psi_{>}(k) = \begin{cases} 0 & \text{se } |\bar{k}_{\perp}| < b\lambda, \\ \psi_{>}(k) & \text{se } b\lambda < |\bar{k}_{\perp}| < \lambda. \end{cases}$$

Logo, a ação do sistema fica

$$S[\psi^{\dagger}, \psi] = S_0[\psi_{<}^{\dagger}, \psi_{<}] + S_0[\psi_{>}^{\dagger}, \psi_{>}] + S_{int}[\psi_{<}^{\dagger}, \psi_{<}; \psi_{>}^{\dagger}, \psi_{>}]. \quad (3.14)$$

Substituindo essa última expressão na Eq. (3.12), temos que

$$Z(\lambda) = \int \mathcal{D}\psi_{<}^{\dagger}(k) \mathcal{D}\psi_{<}(k) e^{iS_0[\psi_{<}^{\dagger}, \psi_{<}]} \int \mathcal{D}\psi_{>}^{\dagger}(k) \mathcal{D}\psi_{>}(k) e^{iS_0[\psi_{>}^{\dagger}, \psi_{>}]} e^{iS_{int}[\psi_{<}^{\dagger}, \psi_{<}; \psi_{>}^{\dagger}, \psi_{>}]}. \quad (3.15)$$

Vamos supor que nós pudéssemos resolver a segunda integral funcional obtendo

$$e^{i\delta S[\psi_{<}^{\dagger}, \psi_{<}]} = \int \mathcal{D}\psi_{>}^{\dagger}(k) \mathcal{D}\psi_{>}(k) e^{iS_0[\psi_{>}^{\dagger}, \psi_{>}]} e^{iS_{int}[\psi_{<}^{\dagger}, \psi_{<}; \psi_{>}^{\dagger}, \psi_{>}]}. \quad (3.16)$$

Assim, teríamos

$$Z(\lambda) = \int_{|\bar{k}_{\perp}| < b\lambda} \mathcal{D}\psi_{<}^{\dagger}(k) \mathcal{D}\psi_{<}(k) e^{i(S_0[\psi_{<}^{\dagger}, \psi_{<}] + \delta S[\psi_{<}^{\dagger}, \psi_{<}])}, \quad (3.17)$$

e, portanto, a ação efetivamente ficaria

$$S_{efetivo}[\psi_{<}^\dagger, \psi_{<}] = S_0[\psi_{<}^\dagger, \psi_{<}] + \delta S[\psi_{<}^\dagger, \psi_{<}]. \quad (3.18)$$

No entanto, como podemos facilmente ver, essa ação efetiva está definida numa região cinemática $|\bar{k}_\perp| < b\lambda$ menor se comparada com a teoria “nua” o que impossibilita nesse estágio ainda a comparação entre as duas teorias. Para remediar esse defeito, temos também que rescalonar os momentos perpendiculares da teoria efetiva da seguinte maneira $\bar{k}'_\perp = \bar{k}_\perp/b$. Assim, os novos momentos rescalonados passam a satisfazer $|\bar{k}'_\perp| < \lambda$, ou seja, igual a condição inicial associada à teoria “nua”. Por motivos que ficarão claros na próxima seção, devemos rescalonar, ainda, a energia k_0 associada ao sistema da mesma forma, ou seja, $k'_0 = k_0/b$.

O último estágio do processo de renormalização consiste também em levar em conta a possibilidade dos campos fermiônicos se alterarem ao longo desse processo. Dessa maneira, para compararmos as duas teorias antes e depois da integração, torna-se necessário o rescalonamento adicional dos campos da teoria, ou seja,

$$\psi'(k') = \zeta^{-1} \psi_{<}(bk'). \quad (3.19)$$

Todos esses estágios descritos definem o chamado GR de Wilson para o nosso problema. Além disso, se fizermos $b \rightarrow 1$ e iterarmos essa transformação, ela tenderá a ser uma transformação contínua de ações. Dessa maneira, o método de Wilson fornece um quadro bastante intuitivo do ponto de vista físico do processo de renormalização associado ao sistema representado por uma trajetória ou fluxo num espaço de possíveis ações definidas efetivamente para cada escala de observação.

3.3.3 O caso da teoria livre

Vamos ilustrar, nesta seção, como a transformação do GR definida anteriormente funciona no caso da teoria livre, ou seja, o sistema sem interações. Como vimos anterior-

mente, como essa teoria não apresenta “gap” de excitação no sistema, esperamos que ela seja naturalmente um ponto fixo da transformação. Assim, temos que, como $S_{int} = 0$, a Eq. (3.15) fica

$$Z(\lambda) = \int \mathcal{D}\psi_{<}^\dagger(k) \mathcal{D}\psi_{<}(k) e^{iS_0[\psi_{<}^\dagger, \psi_{<}]} \int \mathcal{D}\psi_{>}^\dagger(k) \mathcal{D}\psi_{>}(k) e^{iS_0[\psi_{>}^\dagger, \psi_{>}]}, \quad (3.20)$$

ou seja, os graus de liberdade lentos e rápidos do sistema não se misturam. Dessa forma, como a segunda integral funcional só depende de $\psi_{>}$ e $\psi_{>}^\dagger$, ela retornará apenas uma constante independente de $\psi_{<}$ e $\psi_{<}^\dagger$ que, portanto, pode ser desprezada. Logo,

$$Z(\lambda) = \int_{|k_\perp| < b\lambda} \mathcal{D}\psi_{<}^\dagger(k) \mathcal{D}\psi_{<}(k) e^{iS'_0[\psi_{<}^\dagger, \psi_{<}]}, \quad (3.21)$$

onde

$$S'_0[\psi_{<}^\dagger, \psi_{<}] = \sum_\sigma \int_{|k_\perp| < b\lambda} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \psi_{\sigma, <}^\dagger(k) (k_0 - v_F \bar{k}_\perp) \psi_{\sigma, <}(k). \quad (3.22)$$

Rescalonando a energia do sistema e a componente do momento perpendicular a superfície de Fermi

$$k'_0 = k_0/b \quad e \quad \bar{k}'_\perp = \bar{k}_\perp/b, \quad (3.23)$$

temos

$$S'_0 = \sum_\sigma \int_{|k'_\perp| < \lambda} b^2 \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \psi_{\sigma, <}^\dagger(bk') b (k'_0 - v_F \bar{k}'_\perp) \psi_{\sigma, <}(bk'). \quad (3.24)$$

Substituindo a Eq. (3.19) e fazendo $\zeta^{-1} = b^{3/2}$, temos

$$S'_0[\psi'^\dagger, \psi'] = \sum_\sigma \int_{|k'_\perp| < \lambda} \frac{d^3k'}{(2\pi)^3} \psi_{\sigma'}^\dagger(k') (k'_0 - v_F \bar{k}'_\perp) \psi'_\sigma(k'), \quad (3.25)$$

ou seja,

$$S'_0[\psi'^\dagger, \psi'] = S_0[\psi^\dagger, \psi] = S^*. \quad (3.26)$$

Portanto, constatamos que a teoria livre, de fato, é sempre um ponto fixo da transformação. Note que se não tivéssemos rescalonado também a energia do sistema essa

condição não seria satisfeita. Esse ponto fixo livre é conhecido como o ponto fixo trivial da transformação e define a teoria do líquido de Fermi no sistema.

3.3.4 Relevante, irrelevante ou marginal

Nesta seção, vamos classificar o papel das interações no sistema que, eventualmente, podem perturbar esse ponto fixo trivial. Vamos considerar novamente o termo de interação genérico entre duas partículas no sistema. Assim,

$$S_{int}[\psi_{<}^\dagger, \psi_{<}] = - \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \int \prod_{i=1}^4 \left[\frac{d^3 p_i}{(2\pi)^3} \right] (2\pi)^3 \delta^{(3)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4) g(p_1, p_2, p_3, p_4) \\ \times \psi_{\delta, <}^\dagger(p_4) \psi_{\gamma, <}^\dagger(p_3) \psi_{\beta, <}(p_2) \psi_{\alpha, <}(p_1). \quad (3.27)$$

Se procedermos de maneira essencialmente análoga nesse caso e usando a seguinte identidade que pode ser facilmente demonstrada

$$\delta^{(3)}(p'_1 + p'_2 - p'_3 - p'_4) = b^2 \delta^{(3)}(p_1 + p_2 - p_3 - p_4), \quad (3.28)$$

obtemos

$$S_{int}[\psi'^\dagger, \psi'] = - \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \int \prod_{i=1}^4 \left[\frac{d^3 p'_i}{(2\pi)^3} \right] (2\pi)^3 \delta^{(3)}(p'_1 + p'_2 - p'_3 - p'_4) g'(p'_1, p'_2, p'_3, p'_4) \\ \times \psi'^\dagger_{\delta}(p_4) \psi'^\dagger_{\gamma}(p_3) \psi'_{\beta}(p_2) \psi'_{\alpha}(p_1), \quad (3.29)$$

onde temos

$$g'(p'_1, p'_2, p'_3, p'_4) = g(bp'_{10}, bp'_{20}, bp'_{30}, bp'_{40}, b\vec{p}'_{1\perp}, b\vec{p}'_{2\perp}, b\vec{p}'_{3\perp}, b\vec{p}'_{4\perp}, p'_{1\parallel}, p'_{2\parallel}, p'_{3\parallel}, p'_{4\parallel}). \quad (3.30)$$

Esse resultado significa que o termo de interação entre duas partículas no sistema definido pela função de acoplamento $g(p_1, p_2, p_3, p_4)$ permanece constante ao longo de todo o processo de renormalização. Por essa razão, dizemos que essa função de acoplamento é

do tipo marginal. Mesmo assim, temos, ainda, que analisar separadamente nessa função as contribuições advindas de suas variáveis independentes, ou seja, as energias p_{i0} e os momentos $p_{i\parallel}$ e $p_{i\perp}$. Vamos supor que essa função seja analítica e admita uma expansão de Taylor nessas variáveis, ou seja,

$$g(p_1, p_2, p_3, p_4) = g_0 + \sum_i A_i p_{i0} + \sum_i B_i \bar{p}_{i\perp} + \sum_i C_i p_{i\parallel}. \quad (3.31)$$

Assim, levando em conta o resultado da Eq. (3.30), temos que

$$\left\{ \begin{array}{l} g'_0 = g_0 \quad (\text{Marginal}), \\ A'_i = bA_i \quad (\text{Irrelevante}), \\ B'_i = bB_i \quad (\text{Irrelevante}), \\ C'_i = C_i \quad (\text{Marginal}). \end{array} \right.$$

Nesse resultado, podemos constatar que, como o fator b definido anteriormente é menor que um, os coeficientes associados às energias e às componentes perpendiculares do momento no sistema diminuem a cada iteração ao longo do processo de renormalização. Logo, essas quantidades fluem, naturalmente, para zero no limite de baixa energia (ou seja, são irrelevantes do ponto de vista do GR) e podem ser desprezadas na descrição efetiva do sistema. Além disso, podemos também ver que os coeficientes associados com a dependência da função de acoplamento em relação às componentes paralelas dos momentos bem como o termo constante na expansão de Taylor não variam ao longo do processo de renormalização. Por essa razão, essas contribuições são, de fato, marginais na teoria e, portanto, imprescindíveis na descrição da física de baixa energia desse sistema bidimensional. Como veremos, esse resultado será de extrema importância ao longo desta tese e, por isso, vamos voltar a discutí-la mais adiante.

É interessante notar, também, que essa análise pode ser feita de maneira essencialmente análoga para o caso em que o sistema se encontra confinado uma dimensão espacial apenas. No entanto, nesse caso, não existe uma componente paralela à superfície de Fermi

associada ao momento. Dessa forma, as interações do sistema serão efetivamente descritas no limite de baixa energia apenas por constantes de acoplamento. Esse modelo efetivo, que explicaremos no próximo capítulo, é conhecido como o modelo de g-ologia e é definido, de uma maneira geral, por quatro constantes de acoplamento (denominadas por g_1 , g_2 , g_3 e g_4). De fato, levando-se em conta apenas esses processos, podemos parametrizar todas possíveis interações que ocorrem em baixas energias nesses sistemas.

Infelizmente, essa discussão que apresentamos não envolve ainda os efeitos associados às flutuações quânticas do modelo que, como vimos, são fundamentais para a correta descrição de sistemas de baixa dimensionalidade. Para incluir esses efeitos analiticamente, o termo de interação do modelo é, em geral, tratado dentro de um contexto perturbativo⁵. No entanto, ao contrário do que possa parecer à primeira vista, restringir a implementação do método do GR a uma simples abordagem perturbativa não implica necessariamente em uma limitação séria dessa técnica. Em muitas situações de interesse físico, o método do GR costuma ir além do simples regime perturbativo. O exemplo mais famoso disso consiste no ponto fixo de Wilson-Fisher [81] que descreve corretamente os expoentes críticos associados às transições de fase de segunda ordem em vários sistemas físicos mesmo em um regime de forte de acoplamento (ou seja, em $d = 3$).

O esquema perturbativo do GR pode ser implementado completamente dentro da abordagem de Wilson que foi explicada com detalhes ao longo deste capítulo. No entanto, essa análise se torna bastante complexa, principalmente, se considerarmos contribuições de ordens superiores na teoria como, por exemplo, até terceira ordem de perturbação (ou seja, até 2 loops)⁶. Isso está diretamente relacionado com o fato de que a abordagem de Wilson consiste em três etapas que devem sempre ser implementadas consistentemente. Dessa maneira, agora que já entendemos a idéia implícita associada ao método do GR de uma maneira geral, torna-se interessante desenvolver uma abordagem alternativa que

⁵Ou seja, calculando-se apropriadamente os diagramas de Feynman correspondentes da teoria.

⁶Nos próximos capítulos, vamos entender, mais precisamente, o papel central que essas contribuições desempenharão na teoria.

não contenha essas complicações e que, conseqüentemente, permita resolver de maneira direta essas dificuldades mencionadas. Esse método consiste na abordagem do GR de teoria de campos que, por sua vez, é totalmente equivalente ao método de Wilson para as teorias de campos ditas renormalizáveis. Vamos começar agora a discutir essa abordagem alternativa no restante deste capítulo. De fato, essa abordagem, como veremos, permitirá incluímos de maneira simples os efeitos das flutuações no sistema até qualquer ordem de perturbação na teoria. Por conseguinte, vamos, finalmente, poder extrair previsões importantes sobre a natureza do estado fundamental de um dado sistema e caracterizar, também, suas excitações elementares de baixa energia.

3.4 A abordagem de teoria de campos: Uma discussão qualitativa

Nesta seção, vamos começar a discutir qualitativamente a idéia associada ao método do GR de teoria de campos. Essa discussão será, por essa razão, bastante esquemática, uma vez que uma análise mais técnica se seguirá nos próximos capítulos.

Considere o modelo de Hubbard (que pode ser tanto 1d quanto 2d) escrito na representação de integral funcional do sistema. Como esse modelo é microscópico, todas as quantidades presentes na sua Lagrangiana correspondente como o parâmetro de interação U e os campos fermiônicos ψ^\dagger e ψ também estão definidos numa escala microscópica que, como vimos anteriormente, é representada pelo “cutoff” ultravioleta no momento λ (ou Ω na energia) definido anteriormente. Logo, esse modelo consiste na teoria “nua” e todos os parâmetros que o definem também são “nus”. Esses parâmetros são, em geral, inacessíveis em situações de interesse físico, pois, do ponto de vista experimental, apenas sua dinâmica de baixa energia é observada.

Ao construir uma teoria de perturbação convencional com os parâmetros da teoria

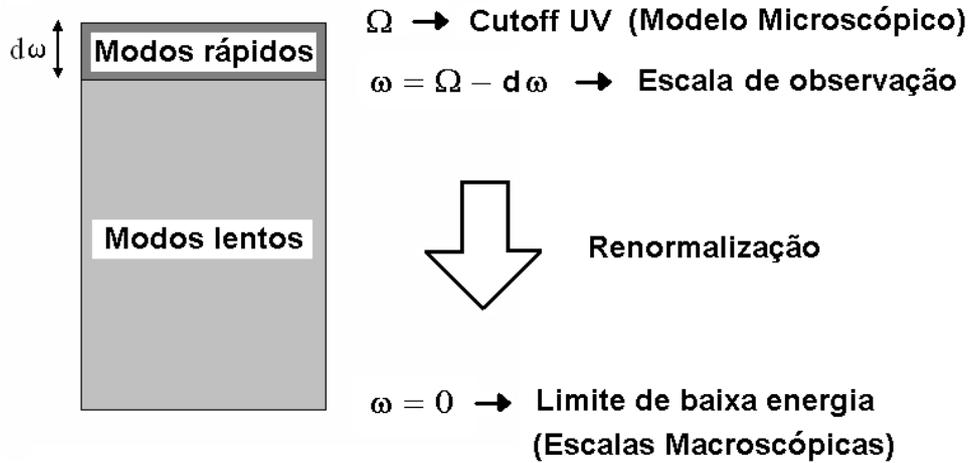


Figura 3.2: Representação pictórica do método do GR.

“nua”, nos deparamos com vários diagramas de Feynman que são divergentes no limite de baixa energia do modelo. Essas singularidades são denominadas, convencionalmente, de divergência no limite do infravermelho (IV) da teoria e elas ocorrem justamente na região do modelo em que estamos interessados. Isso implicaria, à primeira impressão, que, perturbativamente, não poderíamos acessar a dinâmica de baixa energia desses sistemas. Felizmente, isso não é o caso. Na verdade, apenas a maneira em que essa teoria de perturbação convencional é formulada simplesmente não é apropriada para essas situações.

Por conseguinte, torna-se necessário generalizar essa abordagem perturbativa de tal forma a eliminar todas as singularidades do cálculo de grandezas fisicamente observáveis. Essa é, justamente, a estratégia da renormalização do modelo em teoria de campos. Dentro desse esquema, devemos reescrever todas as quantidades não-observáveis do modelo (parâmetros “nus”) em termos das grandezas fisicamente observadas que são as quantidades ditas renormalizadas. A diferença entre esses parâmetros será dada por um novo termo (também chamado, convencionalmente, de contratermo), cujo papel essencial consiste no cancelamento das divergências do IV em cada ordem da nova teoria de perturbação formulada. Se esse programa descrito for bem sucedido no sistema, então a teoria efetiva é classificada como sendo renormalizável. Caso contrário, ela é dita não renormalizável.

Pode-se demonstrar, também, que o procedimento de renormalização de teoria de campos para teoria renormalizáveis é equivalente ao método do GR de Wilson no sentido em que os dois métodos reproduzem as mesmas respostas no limite de baixa energia associada ao sistema. Para enfatizarmos ainda mais as semelhanças entre os dois métodos e ressaltarmos suas diferenças, vamos representar, esquematicamente, o processo de renormalização na Fig. 3.2. Para simplificar essa figura, vamos representar nela apenas os graus de liberdade associados à energia do sistema. Dessa maneira, enquanto no método de Wilson a estratégia consiste em integrar os modos rápidos (energias altas) da teoria com o intuito de derivarmos uma teoria efetiva para os modos lentos (energias baixas), no método de teoria de campos a estratégia é diferente, uma vez que consiste em apenas redefinir os parâmetros da teoria para a escala de observação de interesse. Logo, podemos facilmente concluir que, enquanto no método de Wilson precisamos sempre rescalonarmos os momentos e as energias da teoria para obtermos regiões cinemáticas semelhantes antes e depois da integração, no método de teoria de campos esse rescalonamento simplesmente é desnecessário. De fato, é justamente essa diferença que faz com que o método de teoria de campos seja bem mais simples em sua implementação, levando-se em conta, também, contribuições de ordem elevada na teoria associadas a fortes correlações no sistema.

No próximo capítulo, vamos começar a discutir a abordagem do GR de teoria de campos do ponto de vista técnico, utilizando o modelo de Hubbard 1d fora de uma situação de banda semi-cheia ($n \neq 1$) como referência. A razão subjacente para essa escolha consiste no fato de que esse modelo pode ser resolvido exatamente por vários outros métodos analíticos. Assim, será instrutivo mostrar como a sistemática do GR de teoria de campos funciona na prática e mostrar que esse esquema, de fato, reproduz a física de baixa energia desse sistema. Em seguida, no Cap. 5, vamos finalmente aplicar essa sistemática convenientemente adaptada para o problema central desta tese que, como discutimos anteriormente, consiste no modelo de Hubbard 2d levemente dopado com buracos.

Capítulo 4

O Líquido de Luttinger em 1d

Neste capítulo, vamos descrever o método do GR de teoria de campos aplicado ao modelo de Hubbard 1d. Como vimos anteriormente, esse sistema pode ser resolvido exatamente para várias condições de preenchimento de banda usando uma variedade de técnicas analíticas a citar, por exemplo, o “ansatz” de Bethe [82], o método de bosonização [12, 72, 73], entre outros. Por essa razão, torna-se interessante analisar esse modelo de um ponto de vista também do grupo de renormalização (GR), a fim de testarmos se essa abordagem, de fato, reproduz alguns dos resultados exatos para esse sistema.

O modelo de Hubbard 1d numa situação de banda exatamente semi-cheia ($n = 1$) é sempre um isolante independente do parâmetro de interação local U . No entanto, à medida em que dopamos esse sistema para fora dessa condição (ou seja, $n \neq 1$), ele se torna um estado metálico do tipo líquido de Não-Fermi ou, como também é conhecido, um líquido de Luttinger. Esse estado metálico é caracterizado por algumas propriedades bastante peculiares que, de fato, o tornam extremamente interessante de se estudar do ponto de vista teórico. Essas propriedades são: uma distribuição de momento $n(p)$ contínua na superfície de Fermi do sistema, presença de uma dimensão anômala γ e, conseqüentemente, ausência de excitações do tipo quasipartículas fermiônicas no sistema, presença de excitações coletivas bosônicas sem “gaps” associados aos modos de carga (holons) e de

spin (spinons), presença de singularidades do tipo lei de potência em várias funções de correlação associadas tanto a um estado supercondutor quanto a um estado do tipo ondas de densidade de carga e spin e, finalmente, uma separação exata dos graus de liberdade associados à carga e ao spin no sistema.

Para começar essa análise, temos primeiro que definir alguns conceitos que são imprescindíveis para a descrição de sistemas com interações de curto alcance em 1d. Na próxima seção, vamos começar a discutir um importante modelo conhecido como o modelo de g-ologia que encerra, de maneira genérica, a física de baixa energia associada a esses sistemas.

4.1 O modelo de g-ologia

Considere uma Hamiltoniana não-interagente que descreve férmions em um dado sistema 1d. Essa Hamiltoniana livre pode ser, por exemplo, a associada ao modelo de “tight-binding” 1d que já explicamos no Cap. 2 desta tese. Como estamos sempre interessados na física de baixa energia, vamos linearizar a relação de dispersão ξ_k em torno da superfície de Fermi do sistema que, como vimos, consiste em apenas dois pontos: $+k_F$ e $-k_F$. Dessa maneira,

$$\bar{H}_0 \equiv H_0 - \mu N = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} v_F (|\mathbf{k}| - k_F) \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (4.1)$$

onde estamos introduzindo, a partir de agora, a notação \mathbf{k} em negrito para o momento 1d para diferenciar do nosso vetor de energia-momento bidimensional $k = (k_0, \mathbf{k})$. Além disso, temos que $v_F = (\partial \xi_{\mathbf{k}} / \partial \mathbf{k})|_{\mathbf{k}=k_F}$ representa a velocidade de Fermi do sistema. Essa aproximação linear só será válida numa região finita em torno dos dois pontos de Fermi. Como fizemos anteriormente para o caso 2d, vamos também definir aqui um “cutoff” ultravioleta λ de tal forma que essa aproximação se restrinja apenas para os intervalos $[-k_F - \lambda; -k_F + \lambda]$ e $[k_F - \lambda; k_F + \lambda]$ como está mostrada na Fig. 4.1. A extensão desse

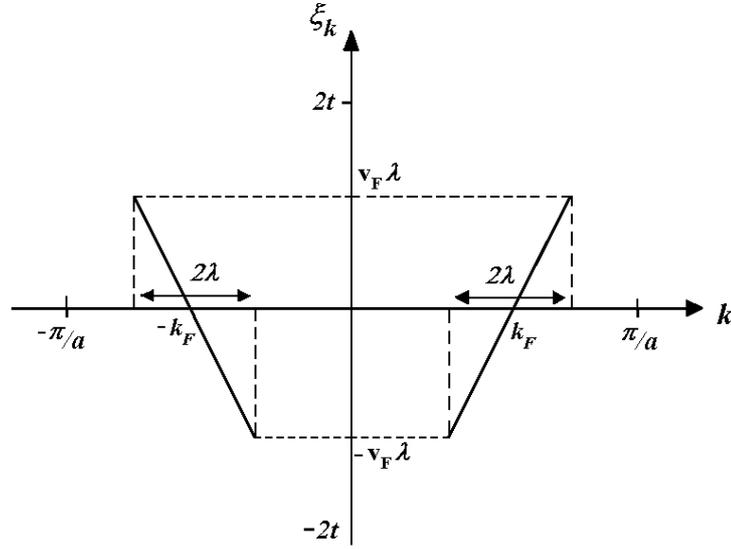


Figura 4.1: Estrutura de banda resultante no modelo de g-ologia.

“cutoff” na energia do sistema, por sua vez, será dada por $\Omega = 2v_F\lambda$. Dessa maneira, podemos notar claramente que a estrutura de banda resultante desse sistema se divide em dois ramos bem definidos: um ramo da direita ou ramo “+” que contem os estados dos elétrons que se propagam para a direita e um ramo da esquerda ou ramo “-” que, por sua vez, contem os estados eletrônicos que se propagam para a esquerda do sistema. Por conseguinte, torna-se útil definir a seguinte notação para a relação de dispersão

$$\begin{cases} \xi_{\mathbf{k}}^{(+)} = v_F(\mathbf{k} - k_F), \\ \xi_{\mathbf{k}}^{(-)} = -v_F(\mathbf{k} + k_F). \end{cases}$$

Como no caso 2d, vamos fazer agora uma transformação de Legendre e escrever a Lagrangiana que descreve esse sistema eletrônico não-interagente. Dessa maneira, temos

$$L_0 = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} \psi_{\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) (i\partial_t - \xi_{\mathbf{k}}^{(a)}) \psi_{\sigma(a)}(\mathbf{k}, t), \quad (4.2)$$

onde $\psi_{\sigma}^\dagger(\mathbf{k}, t)$ e $\psi_{\sigma}(\mathbf{k}, t)$ são definidos como sendo campos fermiônicos (ou seja, números de Grassmann) que estão associados aos operadores de criação e destruição de elétrons com momento \mathbf{k} , projeção de spin σ e ramo $a = \pm$ no formalismo canônico. Além

disso, obviamente, devemos sempre substituir $\sum_{\mathbf{k}} = L/(2\pi) \int d\mathbf{k}$ a fim de tomarmos apropriadamente o limite termodinâmico do sistema ($N, L \rightarrow \infty$).

Dessa Lagrangiana (4.2), podemos calcular, agora, a chamada função de Green não-interagente $G^{(0)}(k_0, \mathbf{k})$ associada ao sistema. Essa quantidade se encontra definida em qualquer livro-texto de física de muitos corpos (veja, por exemplo, em [83]) e, por essa razão, não vamos defini-la aqui. Vamos nos limitar a dizer que ela está relacionada com a amplitude de probabilidade de uma partícula livre com energia k_0 e momento \mathbf{k} de se propagar no sistema. Dessa maneira, podemos facilmente ver, que, na verdade, teremos duas funções de Green associadas a esse sistema: uma função $G_{(+)}^{(0)}(k_0, \mathbf{k})$ que corresponde à propagação de elétrons situados no ramo “+” e outra função $G_{(-)}^{(0)}(k_0, \mathbf{k})$ correspondente aos elétrons situados no ramo “-”. Portanto, temos

$$G_{(+)}^{(0)}(k_0, \mathbf{k}) = \left[\frac{\theta(\xi_{\mathbf{k}}^{(+)})}{k_0 - \xi_{\mathbf{k}}^{(+)} + i\delta} + \frac{\theta(-\xi_{\mathbf{k}}^{(+)})}{k_0 - \xi_{\mathbf{k}}^{(+)} - i\delta} \right], \quad (4.3)$$

$$G_{(-)}^{(0)}(k_0, \mathbf{k}) = \left[\frac{\theta(\xi_{\mathbf{k}}^{(-)})}{k_0 - \xi_{\mathbf{k}}^{(-)} + i\delta} + \frac{\theta(-\xi_{\mathbf{k}}^{(-)})}{k_0 - \xi_{\mathbf{k}}^{(-)} - i\delta} \right]. \quad (4.4)$$

Esses propagadores livres, por sua vez, podem ser representados diagramaticamente da seguinte forma:

$$\begin{aligned} iG_{(+)}^{(0)} &= \longrightarrow \\ iG_{(-)}^{(0)} &= \dashrightarrow \end{aligned}$$

Figura 4.2: Os dois propagadores livres do sistema.

Vamos passar, agora, para análise do papel das interações eletrônicas que podem atuar nesse sistema. A física de baixa energia genérica de um sistema fermiônico 1d com interações de curto alcance e invariância por rotação de spin pelo grupo $SU(2)$ (que, como vimos, é o caso do modelo de Hubbard 1d) está incorporada na Lagrangiana de interação

L_{int} ¹ que se segue

$$\begin{aligned}
 L_{int} = & - \frac{g_1}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\
 & - \frac{g_2}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{p}, t) \\
 & - \frac{g_3}{2L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} [\psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\
 & \quad + \psi_{(-)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{q}, t)] \\
 & - \frac{g_4}{2L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} [\psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\
 & \quad + \psi_{(-)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t)], \quad (4.5)
 \end{aligned}$$

onde todas as constantes de acoplamento têm de ser, naturalmente, independentes do spin para que a condição de invariância por rotação de spin no sistema seja satisfeita. A constante de acoplamento g_1 descreve os processos de interação que envolvem transferência de momento entre as partículas do sistema da ordem de $2k_F$. A esse tipo de interação, dá-se o nome de espalhamento “para trás” (do inglês *backscattering*). Já a constante de acoplamento g_2 descreve os processos de espalhamento que quase não envolvem transferência de momento entre partículas situadas em ramos opostos do sistema. Esses processos, por sua vez, são chamados de espalhamento frontal ou “para frente” (do inglês *forward scattering*). Além disso, para o caso específico em que o sistema se encontra exatamente numa situação de banda semi-cheia, podemos ter ainda os processos de interação do tipo *Umklapp*, descritos pela constante g_3 , que violam a conservação de momento do sistema a menos de um vetor da rede recíproca. Finalmente, podemos ter ainda um espalhamento do tipo frontal entre partículas situadas em um mesmo ramo do sistema. Esses processos são descritos pela constante de acoplamento g_4 . Esses acoplamentos podem ser representados diagramaticamente como está mostrado na Fig. 4.3. Vale a pena notar que essas quatro constantes de acoplamento, de fato, parametrizam todas as possíveis interações

¹Que é igual ao negativo da Hamiltoniana de interação, ou seja, $L_{int} = -H_{int}$.

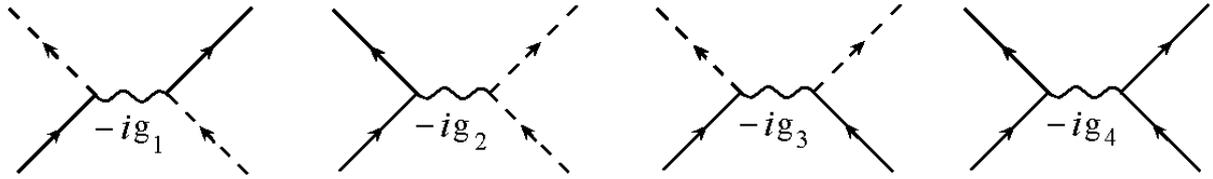


Figura 4.3: Os processos de interação no modelo de g-ologia.

que possam ocorrer no limite de baixa energia dos sistemas 1d. Além disso, como estamos interessados particularmente no modelo de Hubbard 1d, essas constantes têm de ser inicialmente definidas como sendo proporcionais ao parâmetro de interação local U do sistema.

Portanto, o modelo interagente descrito pela Lagrangiana total dada por

$$L = L_0 + L_{int}, \quad (4.6)$$

onde L_0 e L_{int} são, respectivamente, as Lagrangianas não-interagente e de interação descritas acima, é chamado, convencionalmente, de modelo de g-ologia [11]. O modelo de g-ologia não pode ser resolvido exatamente no seu caso mais geral possível. No entanto, no caso particular em que $g_1 = g_3 = 0$, esse modelo ganha um nome especial e passa a ser chamado de modelo de Tomonaga-Luttinger [14, 15]. Esse último modelo, por sua vez, pode ser resolvido exatamente por vários métodos (como, por exemplo, identidades de Ward [84, 85, 86, 87, 88] e bosonização [12, 72, 73]). Além disso, como veremos, ele será de extrema importância para a descrição da física de baixa energia associada a vários sistemas 1d.

4.2 Teoria de perturbação convencional até 1 loop

Para obtermos uma primeira idéia de como o modelo de g-ologia se comporta em baixas energias, vamos tratá-lo, inicialmente, usando uma teoria de perturbação convencional até segunda ordem ou, equivalentemente, até 1 loop. Dentro desse esquema, vamos calcular

as correções aos vértices do modelo induzidas por flutuações quânticas até essa ordem de perturbação que, no jargão de teoria de campos, equivale a calcular a função vértice irreduzível de quatro pontos² $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3, p_4)$ do sistema. No entanto, no que se segue, vamos, deliberadamente, desprezar os processos de interação associados a g_3 , uma vez que o nosso interesse central nesta tese se concentrará apenas em situações em que o sistema não se encontra com uma banda exatamente semi-cheia. Além disso, podemos desprezar, também, os processos de interação associados à constante de acoplamento g_4 , uma vez suas contribuições mais importantes só se manifestarão em ordens superiores da teoria de perturbação.

Ao longo desse cálculo perturbativo até 1 loop, dois tipos de amplitudes de probabilidade ou “bolhas” aparecerão, tipicamente, nos diagramas de Feynman da teoria. Essas “bolhas”, por sua vez, podem ser classificadas como sendo de dois diferentes tipos: as de partícula-partícula e as de partícula-buraco. Essas contribuições perturbativas representarão as de maior importância para o modelo até essa ordem de perturbação. Por essa razão, torna-se conveniente representá-las, de agora em diante, pelas seguintes funções

$$\Pi^{(0)}(p) = \int_k G_{(+)}^{(0)}(k) G_{(-)}^{(0)}(-k+p) \quad (\text{“Bolha” tipo partícula-partícula}), \quad (4.7)$$

$$\chi^{(0)}(q) = \int_k G_{(+)}^{(0)}(k) G_{(-)}^{(0)}(k+q) \quad (\text{“Bolha” tipo partícula-buraco}), \quad (4.8)$$

onde $\int_k = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \int_{k_F-\lambda}^{k_F+\lambda} \frac{d\mathbf{k}}{2\pi}$. Essas “bolhas” se encontram exibidas esquematicamente na Fig. 4.4. Assim, calculando essas integrais, obtemos

$$\begin{aligned} \Pi^{(0)}(p) &= \frac{i}{4\pi v_F} \left[\ln \left(\frac{\Omega - p_0 - v_F \mathbf{p} - i\delta}{-p_0 + v_F \mathbf{p} - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{-\Omega - p_0 + v_F \mathbf{p} + i\delta}{-p_0 - v_F \mathbf{p} + i\delta} \right) \right], \quad (4.9) \\ \chi^{(0)}(q) &= -\frac{i}{4\pi v_F} \left[\ln \left(\frac{\Omega + q_0 + v_F(\mathbf{q} + 2k_F) - i\delta}{q_0 - v_F(\mathbf{q} + 2k_F) - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{-\Omega + q_0 - v_F(\mathbf{q} + 2k_F) + i\delta}{q_0 + v_F(\mathbf{q} + 2k_F) + i\delta} \right) \right], \quad (4.10) \end{aligned}$$

²Veja a definição usual para essa quantidade em um livro-texto de teoria de campos como, por exemplo, em [41].

$$\Pi^{(0)}(\mathbf{p}) = \begin{array}{c} \text{---} k \text{---} \\ \curvearrowright \\ \text{---} -k + \mathbf{p} \text{---} \end{array}$$

$$\chi^{(0)}(\mathbf{q}) = \begin{array}{c} \text{---} k \text{---} \\ \curvearrowright \\ \text{---} k + \mathbf{q} \text{---} \end{array}$$

Figura 4.4: As “bolhas” do tipo partícula-partícula e partícula-buraco que aparecem tipicamente no cálculo perturbativo até 1 loop.

que para $\mathbf{p} = 0$ e $\mathbf{q} = -2k_F$ e $p_0 = q_0 \approx 0$ se reduzem a

$$\Pi^{(0)}(p) = \frac{i}{2\pi v_F} \ln\left(\frac{\Omega}{p_0}\right) \quad e \quad \chi^{(0)}(q) = -\frac{i}{2\pi v_F} \ln\left(\frac{\Omega}{q_0}\right), \quad (4.11)$$

ou seja, ambas as “bolhas” divergem logaritmicamente no limite de baixa energia do sistema (ou seja, $p_0 = q_0 \rightarrow 0$). Note que as partes imaginárias delas foram, deliberadamente, desprezadas, uma vez que elas não representam contribuições divergentes para a teoria de perturbação.

Dessa maneira, usando as regras de Feynman apropriadas para esse modelo, obtemos para a função vértice $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3, p_4)$ no chamado canal g_1 de espalhamento “para trás” (ou seja, para os momentos $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_3 = -\mathbf{p}_4 = k_F$) a seguinte expressão até segunda ordem em teoria de perturbação

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3) \Big|_{\text{canal } g_1} = -ig_1 + 2g_1g_2\Pi^{(0)}(p_1 + p_2) + (2g_1g_2 - 2g_1^2)\chi^{(0)}(p_2 - p_3), \quad (4.12)$$

onde, a partir de agora, estamos fazendo $p_4 = p_1 + p_2 - p_3$ devido à conservação de energia e momento no sistema. Os diagramas de Feynman que correspondem a essas contribuições estão exibidos na Fig. 4.5. Além disso, note que, nesse resultado, se fizermos $p_{10} + p_{20} = p_0$, $p_2 - p_3 = q_0$ e $p_0 = q_0 \approx 0$, a função vértice se reduz a

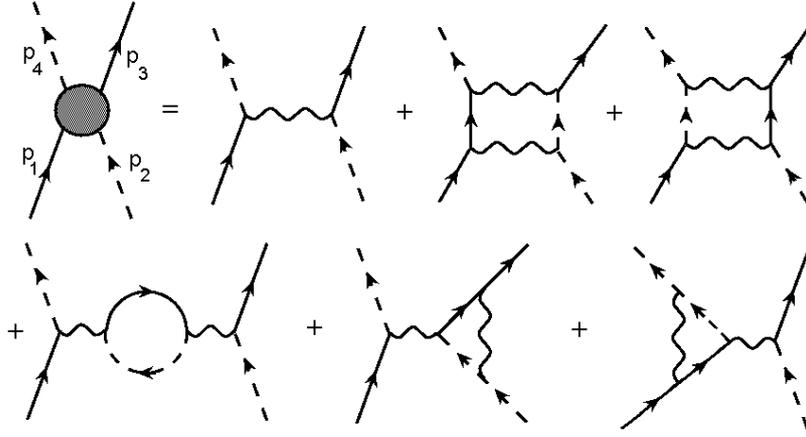


Figura 4.5: Os diagramas de Feynman correspondentes no canal de espalhamento “para trás” até 1 loop.

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3) \Big|_{\text{canal } g_1} = -ig_1 + \frac{i}{\pi v_F} g_1^2 \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right), \quad (4.13)$$

ou seja, se fizermos $p_0 \rightarrow 0$ a função vértice no canal g_1 , de fato, diverge logaritmicamente. De maneira análoga, podemos calcular, também, a função vértice no canal g_2 de espalhamento frontal (ou seja, para os momentos $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2 = -\mathbf{p}_3 = \mathbf{p}_4 = k_F$). Dessa forma, obtemos até segunda ordem de perturbação

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3) \Big|_{\text{canal } g_2} = -ig_2 + (g_1^2 + g_2^2)\Pi^{(0)}(p_1 + p_2) + g_2^2\chi^{(0)}(p_3 - p_1). \quad (4.14)$$

Nesse caso, os diagramas de Feynman correspondentes estão mostrados na Fig. 4.6. Além disso, fazendo $p_{10} + p_{20} = p_0$, $p_3 - p_1 = q_0$ e $p_0 = q_0 \approx 0$ esse resultado se reduz, naturalmente, a seguinte expressão

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3) \Big|_{\text{canal } g_2} = -ig_2 + \frac{i}{2\pi v_F} g_1^2 \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right), \quad (4.15)$$

o que implica que a função vértice no canal g_2 é, também, logaritmicamente divergente no limite de baixa energia do sistema, ou seja, para $p_0 \rightarrow 0$. Logo, podemos constatar aqui, claramente, que o tratamento perturbativo convencional até 1 loop falha completamente em acessar a física de baixa energia desses sistemas. De fato, nesse limite de energia, o

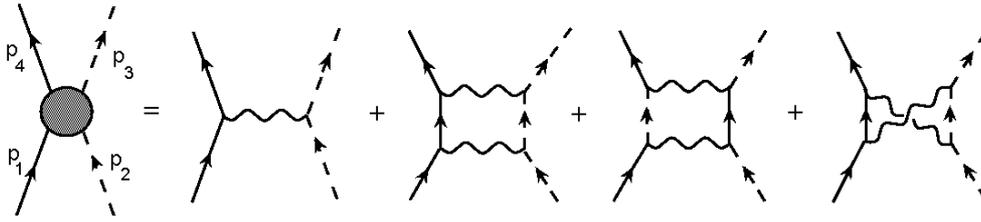


Figura 4.6: Os diagramas de Feynman correspondentes no canal de espalhamento frontal até 1 loop.

termo de segunda ordem da série se tornará infinitamente maior que o termo de primeira ordem, invalidando, portanto, essa expansão perturbativa.

Na realidade, essa contribuição singular não é uma particularidade apenas do cálculo de 1 loop, mas sim ela aparece em todas as ordens de perturbação. Contudo, enquanto os experimentos sempre encontram, em princípio, valores finitos para as quantidades físicas no limite de baixa energia, nossa série perturbativa está cheia de singularidades o que faz com que qualquer comparação com a situação experimental seja totalmente sem sentido nesse estágio. Esse fato sugere, ainda, que a origem dessas singularidades deva estar relacionada, de uma maneira mais profunda, com a formulação em si do método perturbativo com o qual lidamos. Em outras palavras, os parâmetros da teoria, em torno dos quais expandimos nesse modelo, não são os apropriados para construir uma teoria de perturbação bem definida para esse sistema. Para lidar corretamente com essa questão, vamos invocar, agora, o método do grupo de renormalização na formulação de teoria de campos para o problema.

4.3 O grupo de renormalização até 1 loop

Como vimos no capítulo anterior, o grupo de renormalização consiste em uma técnica analítica que permite rescrever o problema original em termos de um modelo efetivo apropriado para a escala de observação de interesse. Nesta seção, vamos, finalmente, mostrar como essa filosofia é implementada, levando-se em conta os importantes efeitos

das flutuações quânticas dentro de uma formulação de teoria de campos definida para o problema.

Na verdade, como o modelo de g-ologia é um modelo microscópico, todos os seus parâmetros (incluindo seus acoplamentos) estão definidos numa escala microscópica representada pela escala de momento λ ou, equivalentemente, pela escala de energia Ω . Esses parâmetros são os parâmetros “nus” da teoria que, por sua vez, não são observados experimentalmente. De fato, em escalas macroscópicas, apenas a dinâmica de baixa energia associada a um dado sistema é observada. Por conseguinte, torna-se interessante definir um acoplamento efetivo (ou seja, renormalizado) que seja definido justamente para essas escalas de energia. Dentro desse cenário, a nossa estratégia aqui consistirá, fundamentalmente, em reescrever toda a teoria de perturbação do modelo em termos desses novos acoplamentos efetivos que, por sua vez, serão definidos em uma escala arbitrária ω de energia. Como veremos a seguir, isso corresponderá a um simples rearranjo dos termos da série perturbativa e, conseqüentemente, permitirá a resolução do problema das divergências na teoria que discutimos anteriormente.

Logo, vamos agora substituir os acoplamentos “nus” da teoria pelos acoplamentos apropriadamente renormalizados e definidos, de maneira efetiva, para a escala de energia ω que pode, obviamente, ir para zero no limite de baixa energia associado ao modelo. Dessa maneira, vamos escrever formalmente que

$$g_1 = g_{1R} + \Delta g_{1R}, \quad (4.16)$$

$$g_2 = g_{2R} + \Delta g_{2R}. \quad (4.17)$$

A diferença entre os acoplamentos “nus” e os renormalizados são dados pelos termos Δg_{1R} e Δg_{2R} que são chamados, convencionalmente, de contratermos da teoria. Assim, substituindo essas expressões na Lagrangiana de interação do modelo³, obtemos

³Lembre-se que não estamos considerando nem g_3 nem g_4 .

$$\begin{aligned}
L_{int} = & - \frac{1}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} (g_{1R} + \Delta g_{1R}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\
& - \frac{1}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} (g_{2R} + \Delta g_{2R}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{p}, t).
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Utilizando essa Lagrangiana, veremos que é possível construir uma teoria de perturbação bem definida no sistema que, por sua vez, não contem nenhuma singularidade no limite de baixa energia do modelo.

De fato, usando essa nova Lagrangiana (4.18) e calculando, agora, a função vértice de quatro pontos no canal de espalhamento para “trás” da Eq. (5.12), obtemos

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0) \Big|_{\text{canal } g_1} = -ig_{1R} + \frac{i}{\pi v_F} g_{1R}^2 \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right) - i\Delta g_{1R}. \tag{4.19}$$

Como g_{1R} é, por definição, o acoplamento efetivo na escala de energia ω , precisamos impor a seguinte condição

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0 = \omega) \Big|_{\text{canal } g_1} = -ig_{1R}(\omega). \tag{4.20}$$

Logo, o contratermo Δg_{1R} da teoria se torna naturalmente

$$\Delta g_{1R}(\omega) = \frac{1}{\pi v_F} g_{1R}^2 \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right). \tag{4.21}$$

Se substituirmos essa expressão de volta na Eq. (4.19), obtemos finalmente

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0) \Big|_{\text{canal } g_1} = -ig_{1R}(\omega) + \frac{i}{\pi v_F} g_{1R}^2(\omega) \ln \left(\frac{\omega}{p_0} \right), \tag{4.22}$$

ou seja, desde que definamos uma escala ω de tal forma que sempre satisfaça a condição $\omega \approx p_0$, essa teoria de perturbação está bem definida no limite de baixa energia $p_0 \rightarrow 0$ do modelo.

Além disso, podemos ver também substituindo a Eq. (4.21) na Eq. (4.16), temos que

$$g_1 = g_{1R}(\omega) + \frac{1}{\pi v_F} g_{1R}^2(\omega) \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right), \quad (4.23)$$

onde podemos notar claramente que a constante de acoplamento “nua” g_1 é, de fato, igual à constante de acoplamento renormalizada definida na escala microscópica do “cutoff” ultravioleta Ω como havíamos explicado anteriormente, ou seja, $g_1 = g_{1R}(\omega = \Omega)$.

Vamos seguir, agora, o mesmo procedimento para a função vértice de quatro pontos no canal de espalhamento frontal g_2 da Eq. (5.14), ou seja,

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0) \Big|_{\text{canal } g_2} = -i g_{2R} + \frac{i}{2\pi v_F} g_{1R}^2 \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right) - i \Delta g_{2R}. \quad (4.24)$$

Estabelecendo a seguinte prescrição para o acoplamento efetivo g_{2R}

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0 = \omega) \Big|_{\text{canal } g_2} = -i g_{2R}(\omega), \quad (4.25)$$

obtemos para o contratermo Δg_{2R}

$$\Delta g_{2R}(\omega) = \frac{1}{2\pi v_F} g_{1R}^2 \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right). \quad (4.26)$$

Substituindo essa expressão de volta na Eq. (4.24), obtemos também

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0) \Big|_{\text{canal } g_1} = -i g_{2R}(\omega) + \frac{i}{2\pi v_F} g_{1R}^2(\omega) \ln \left(\frac{\omega}{p_0} \right), \quad (4.27)$$

que, também, torna essa expansão perturbativa convergente no limite de baixa energia $p_0 \rightarrow 0$ do modelo. Logo, podemos concluir que toda a teoria foi renormalizada até segunda ordem de perturbação. Isso significa que, agora, podemos extrair dela previsões finitas que podem ser, eventualmente, comparadas com o experimento. Por fim, se substituirmos a Eq. (4.26) na Eq. (4.17), obtemos

$$g_2 = g_{2R}(\omega) + \frac{1}{2\pi v_F} g_{1R}^2(\omega) \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right), \quad (4.28)$$

onde, também aqui, temos que a constante de acoplamento “nua” é $g_2 = g_{2R}(\omega = \Omega)$ semelhantemente ao caso anterior.

Vamos analisar, agora, como esses parâmetros renormalizados g_{1R} e g_{2R} variam quando mudamos a escala de observação ω em que eles estão definidos. Vamos considerar, primeiro, o acoplamento g_{1R} . Seguindo uma estratégia análoga ao GR de Wilson, vamos defini-lo em uma escala de energia ω de tal forma que ela satisfaça $\omega = \Omega - d\omega$. Assim, utilizando a Eq. (4.23), obtemos finalmente a seguinte equação diferencial

$$\omega \frac{dg_{1R}}{d\omega} = \frac{g_{1R}^2}{\pi v_F}, \quad (4.29)$$

que é chamada de equação do grupo de renormalização até 1 loop para a constante de acoplamento efetiva g_{1R} . Fazendo de maneira análoga para a Eq. (4.28), obtemos também a seguinte equação diferencial

$$\omega \frac{dg_{2R}}{d\omega} = \frac{g_{1R}^2}{2\pi v_F}, \quad (4.30)$$

que, por sua vez, é a equação do grupo de renormalização até 1 loop para a constante de acoplamento efetiva g_{2R} . Note que, examinando essas últimas equações, temos que a seguinte condição é sempre satisfeita

$$\omega \frac{d}{d\omega} (g_{1R} - 2g_{2R}) = 0, \quad (4.31)$$

o que implica que a quantidade $g_{1R} - 2g_{2R}$ é um invariante do grupo de renormalização. Como resultado disso, temos que

$$g_{1R} - 2g_{2R} = g_1 - 2g_2 = \text{constante}. \quad (4.32)$$

Logo, apenas um dos acoplamentos efetivos, que vamos considerar como sendo o acoplamento g_{1R} , é independente. Dessa maneira, resolvendo a Eq. (4.29), obtemos que

$$g_{1R}(\omega) = \frac{g_1}{1 + \frac{1}{\pi v_F} g_1 \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right)}, \quad (4.33)$$

ou seja, para modelos em que $g_1 > 0$, que é o caso, por exemplo, do modelo de Hubbard

1d repulsivo, se considerarmos o limite de baixa energia (*i.e.*, $\omega \rightarrow 0$), o acoplamento g_{1R} no modelo efetivo tenderá a zero logaritmicamente. Esse ponto $g_{1R}^* = 0$ representa um ponto fixo do GR uma vez que os acoplamentos associados ao modelo efetivo não mais se renormalizarão nessa situação limite. Além disso, ele independe do valor de g_{2R} que pode ser não-nulo, ou seja, $g_{2R}^* \neq 0$, nesse mesmo limite. Portanto, esse resultado significa que modelos definidos inicialmente com uma constante de acoplamento do tipo espalhamento “para trás” positivo podem ser descritos efetivamente por um modelo de Tomonaga-Luttinger⁴ no limite de baixa energia. Por essa razão, esses sistemas 1d estão englobados dentro da classe de universalidade do chamado líquido de Luttinger [12]. Vamos discutir mais sobre esse importante estado eletrônico ainda neste capítulo.

Por outro lado, é interessante notar que se tivéssemos modelos inicialmente definidos com $g_1 < 0$, constataríamos que a Eq. (4.33) diverge em $\omega_c = \Omega e^{-\frac{\pi v_F}{|g_1|}}$, ou seja, antes mesmo de acessarmos a física de baixa energia do sistema. Essa singularidade significa um instabilidade do sistema ou, em outras palavras, uma transição de fase, que ocorre na temperatura crítica $T_c = \omega_c$. Esse resultado claramente viola o Teorema de Mermin-Wagner [9] que, como vimos, atesta categoricamente que em sistemas 1d com interações de curto alcance não pode existir transições de fase ocorrendo em temperaturas finitas. Isso significa que a transição de fase obtida, na verdade, é um artifício da aproximação até 1 loop e, portanto, precisamos incluir correções de ordem superior na nossa teoria de perturbação que permita corrigir esse defeito na descrição da física de baixa energia desses sistemas.

Outra observação importante consiste no fato de que as correções dos vértices do modelo até 1 loop não levam em consideração os importantes efeitos das flutuações quânticas que afetam as excitações de uma partícula desses sistemas. Para fazer isso, temos que calcular agora a auto-energia⁵ associada a esse modelo.

⁴Que, como vimos anteriormente, despreza naturalmente os processos de interação associados à constante de acoplamento g_1 .

⁵Veja a definição dessa quantidade em um livro-texto de muitos corpos como, por exemplo, em [83].

4.4 Cálculo da auto-energia do modelo - O peso da quasipartícula

Como vimos na seção anterior, para definirmos uma teoria de perturbação convergente até 1 loop em teoria de perturbação, precisamos redefinir novos parâmetros no modelo definidos apropriadamente para a escala de observação de interesse. Dessa maneira, foi possível definir uma expansão perturbativa bem definida na teoria e pudemos extrair previsões finitas desse esquema. Nesta seção, vamos calcular perturbativamente a auto-energia associada a esse modelo. Para isso, vamos escrever como a nossa Lagrangiana renormalizada se encontra representada até o presente momento, ou seja,

$$\begin{aligned}
 L = & \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} \psi_{\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) \left(i\partial_t - \xi_{\mathbf{k}}^{(a)} \right) \psi_{\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) \\
 & - \frac{1}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} (g_{1R} + \Delta g_{1R}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\
 & - \frac{1}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} (g_{2R} + \Delta g_{2R}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{p}, t).
 \end{aligned} \tag{4.34}$$

Com essa expressão, vamos calcular agora a auto-energia $\Sigma(p)$ do sistema perturbativamente até 2 loops. Para simplificar a análise, vamos supor que o momento \mathbf{p} da partícula pertence ao ramo “+”. Dessa maneira, utilizando apropriadamente a regras de Feynman associadas a nossa Lagrangiana renormalizada, obtemos esquematicamente a seguinte expressão

$$-i\Sigma(p) = -i\Sigma^{(1)} - i\Sigma^{(2)} - i\Sigma_{\text{contratermos}}, \tag{4.35}$$

onde $\Sigma^{(1)}$ representa as contribuições na auto-energia até 1 loop, $\Sigma^{(2)}$ representa as contribuições até 2 loops e, finalmente, $\Sigma_{\text{contratermos}}$ consiste nos diagramas gerados pelos

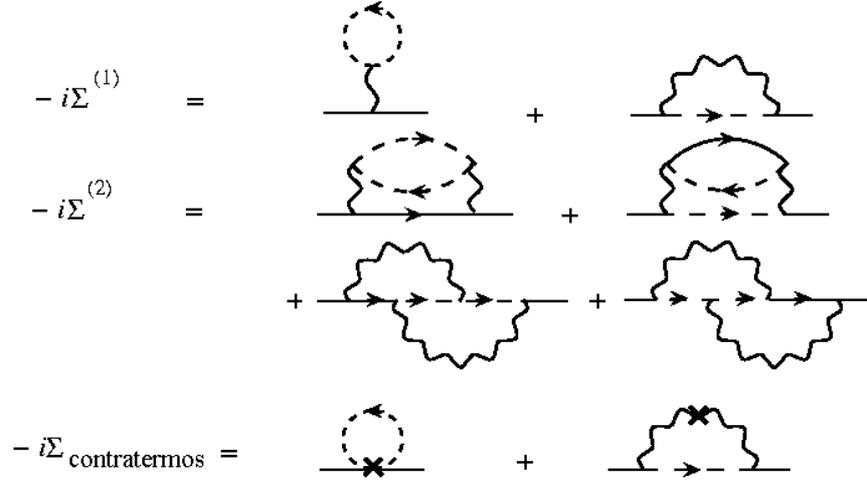


Figura 4.7: Os diagramas de Feynman até 2 loops associados à auto-energia do sistema.

contratermos definidos na teoria. Os diagramas de Feynman que correspondem a essa quantidade estão mostrados na Fig. 4.7. Primeiramente, vamos nos concentrar nos termos $\Sigma^{(1)}$ e $\Sigma_{\text{contratermos}}$ da expansão perturbativa. Dessa maneira, calculando $\Sigma^{(1)}$, obtemos

$$-i\Sigma^{(1)} = \frac{i\lambda}{2\pi}(g_{1R} - 2g_{2R}). \quad (4.36)$$

Como a quantidade $g_{1R} - 2g_{2R}$ é um invariante do grupo de renormalização, temos que essa quantidade só representará uma translação na auto-energia que pode ser, naturalmente, desprezada. É exatamente por essa razão que pudemos renormalizar a teoria até 1 loop sem mencionar nada sobre a auto-energia do sistema. Na verdade, a auto-energia pode ser desprezada da teoria só até essa ordem de perturbação.

Com relação ao termo $\Sigma_{\text{contratermos}}$, obtemos que

$$-i\Sigma_{\text{contratermos}} = \frac{i\lambda}{2\pi}(\Delta g_{1R} - 2\Delta g_{2R}). \quad (4.37)$$

Se substituirmos as Eqs. (4.21) e (4.26) nessa expressão, é fácil mostrar que $-i\Sigma_{\text{contratermos}} = 0$, ou seja, esse termo também não contribui efetivamente para a auto-energia do sistema.

Agora, vamos passar para análise das contribuições no sistema representadas pelo termo $\Sigma^{(2)}$. Desse cálculo, obtemos que

$$\begin{aligned}
 -i\Sigma^{(2)}(p; \omega) &= \frac{i}{8\pi^2 v_F^2} (p_0 - v_F(\mathbf{p} - k_F)) (g_{1R}^2 + g_{2R}^2 - g_{1R}g_{2R}) \\
 &\times \left[\ln \left(\frac{\Omega - v_F(\mathbf{p} - k_F) - p_0 - i\delta}{v_F(\mathbf{p} - k_F) - p_0 - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{\Omega - v_F(\mathbf{p} - k_F) + p_0 - i\delta}{v_F(\mathbf{p} - k_F) + p_0 - i\delta} \right) \right]. \quad (4.38)
 \end{aligned}$$

Assim, podemos notar nessa expressão que, para $\mathbf{p} = k_F$ e $p_0 \rightarrow 0$, $\Sigma^{(2)}$ tende naturalmente a zero. Portanto, não existem divergências no limite de baixa energia associada à auto-energia do sistema. Mesmo assim, apesar de $\Sigma^{(2)}$ ser bem definida em $p_0 \rightarrow 0$, não podemos dizer a mesma coisa de sua primeira derivada em relação a p_0 . De fato, se calcularmos $(\partial\Sigma^{(2)}/\partial p_0)|_{p_0 \rightarrow 0}$, veremos que essa quantidade diverge no limite do infravermelho. Logo, $\Sigma^{(2)}$ contém uma indesejável não-analiticidade no limite de baixa energia, que precisa ser eliminada dessa descrição.

Existe uma outra quantidade definida na teoria que ainda não renormalizamos e que lidará exatamente com esse problema da não-analiticidade da auto-energia, ou seja, os campos fermiônicos associados ao modelo Lagrangiano da Eq. (4.34). De fato, seguindo o mesmo espírito da renormalização da teoria até 1 loop, vamos reescrever os campos fermiônicos “nus” em termos dos campos fermiônicos renormalizados da seguinte maneira

$$\psi_{\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) = \psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) + \Delta\psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) \equiv Z^{1/2}\psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t), \quad (4.39)$$

$$\psi_{\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) = \psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) + \Delta\psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) \equiv Z^{1/2}\psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t), \quad (4.40)$$

onde $\Delta\psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t)$ e $\Delta\psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t)$ são os contratermos necessários para removermos a não-analiticidade discutida acima. Além disso, esses contratermos são usados para definir uma outra quantidade: o fator multiplicativo Z . Esse fator é uma medida da coerência das excitações do tipo quasipartículas fermiônicas no sistema e é, por essa razão, conhecido como o peso da quasipartícula. Para exemplificar essa discussão, considere um líquido de Fermi de Landau. Nesse caso especial, Z é sempre finito no limite de baixa energia

do sistema o que indica a existência de quasipartículas bem definidas nesse estado. Por outro lado, se analisarmos um estado eletrônico no qual esse fator Z se anula no limite do infravermelho do sistema, então sua física de baixa energia não contém excitações do tipo quasipartículas fermiônicas presentes. Dessa maneira, ele é naturalmente classificado como sendo um líquido de Não-Fermi.

Agora, vamos levar em consideração o fato de que essa renormalização dos campos influenciará também a nossa redefinição das constantes de acoplamento que fizemos na seção anterior. Dessa maneira, precisamos voltar a nossa Lagrangiana “nua” da Eq. (4.6) e reescrever, em primeiro lugar, os campos fermiônicos da teoria em termos dos seus campos renormalizados apropriados. Fazendo isso, a Lagrangiana resultante associada ao sistema fica da seguinte maneira

$$\begin{aligned}
 L &= \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} Z \psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) \left(i\partial_t - \xi_{\mathbf{k}}^{(a)} \right) \psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) \\
 &- \frac{1}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} Z^2 g_1 \psi_{R(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{R(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{R(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{R(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\
 &- \frac{1}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} Z^2 g_2 \psi_{R(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{R(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{R(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{R(+)\sigma}(\mathbf{p}, t). \quad (4.41)
 \end{aligned}$$

Como em ordem mais baixa (*i.e.*, em 1 loop) a auto-energia não precisa ser levada em conta, o peso da quasipartícula é obviamente igual a um nessa ordem de perturbação. É natural admitir, então, que as contribuições de ordem superior na teoria podem alterar quantitativamente esse valor. Dessa maneira, vamos escrever $Z = 1 + \Delta Z$, onde ΔZ representa suas correções perturbativas correspondentes. Além disso, como fizemos anteriormente, devemos reescrever, ainda, os acoplamentos da teoria em termos dos seus respectivos parâmetros renormalizados e seus contratermos. Portanto, as relações entre os acoplamentos “nus” e os acoplamentos renormalizados se generalizam da seguinte maneira

$$g_1 = Z^{-2} (g_{1R} + \Delta g_{1R}), \quad (4.42)$$

$$g_2 = Z^{-2} (g_{2R} + \Delta g_{2R}). \quad (4.43)$$

Fazendo essas substituições, a Lagrangiana renormalizada associada ao sistema fica, finalmente, da seguinte forma

$$L = L_0 + L_{int}, \quad (4.44)$$

onde a Lagrangiana não-interagente L_0 se torna

$$L_0 = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} \psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) (i\partial_t - \xi_{\mathbf{k}}^{(a)}) \psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t), \quad (4.45)$$

e a Lagrangiana de interação L_{int} , por sua vez, fica

$$\begin{aligned} L_{int} &= \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} \Delta Z \psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) (i\partial_t - \xi_{\mathbf{k}}^{(a)}) \psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) \\ &- \frac{1}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} (g_{1R} + \Delta g_{1R}) \psi_{R(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{R(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{R(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{R(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\ &- \frac{1}{L} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} (g_{2R} + \Delta g_{2R}) \psi_{R(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{R(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{R(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{R(+)\sigma}(\mathbf{p}, t). \end{aligned} \quad (4.46)$$

Utilizando essa Lagrangiana renormalizada, vamos passar agora para o cálculo perturbativo até 2 loops do inverso da função de Green $G^{-1}(p)$ associada ao sistema interagente. Essa quantidade também é conhecida como a função $\Gamma^{(2)}(p)$ da teoria no jargão de teoria de campos. Logo, ela pode ser facilmente calculada utilizando a chamada equação de Dyson para o sistema que, por sua vez, consiste em

$$\Gamma^{(2)}(p) = [G^{(0)}(p)]^{-1} - \Sigma(p). \quad (4.47)$$

Como anteriormente, vamos supor aqui que o momento \mathbf{p} da partícula pertence ao ramo da direita ou ramo “+”. Dessa maneira, obtemos

$$\Gamma^{(2)}(p) = [p_0 - v_F(\mathbf{p} - k_F)] \left\{ 1 + \Delta Z + \frac{1}{8\pi^2 v_F^2} (g_{1R}^2 + g_{2R}^2 - g_{1R}g_{2R}) \right. \\ \left. \times \left[\ln \left(\frac{\Omega - v_F(\mathbf{p} - k_F) - p_0 - i\delta}{v_F(\mathbf{p} - k_F) - p_0 - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{\Omega - v_F(\mathbf{p} - k_F) + p_0 - i\delta}{v_F(\mathbf{p} - k_F) + p_0 - i\delta} \right) \right] \right\}. \quad (4.48)$$

Para calcular ΔZ , precisamos estabelecer agora uma condição de renormalização para o inverso da função de Green $\Gamma^{(2)}(p)$. Vamos supor que essa quantidade satisfaça a seguinte condição

$$\Re \Gamma^{(2)}(p_0 = \omega, \mathbf{p} = k_F) = \omega, \quad (4.49)$$

o que significa que se considerarmos o limite de baixa energia do sistema, ou seja $\omega \rightarrow 0$, a função de Green correspondente terá um pólo na superfície de Fermi do modelo. Assim, obtemos que

$$\Delta Z = -\frac{1}{4\pi^2 v_F^2} (g_{1R}^2 + g_{2R}^2 - g_{1R}g_{2R}) \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right), \quad (4.50)$$

ou, escrevendo em termos do peso da quasipartícula Z , temos

$$Z(\omega) = 1 - \frac{1}{4\pi^2 v_F^2} (g_{1R}^2 + g_{2R}^2 - g_{1R}g_{2R}) \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right). \quad (4.51)$$

Seguindo o mesmo procedimento explicado na seção anterior, vamos derivar agora uma equação do grupo de renormalização que descreve como o fator Z varia quando nos aproximamos do limite de baixa energia do sistema. Dessa maneira, temos

$$\omega \frac{d \ln Z}{d\omega} = \frac{1}{4\pi^2 v_F^2} (g_{1R}^2 + g_{2R}^2 - g_{1R}g_{2R}) \equiv \gamma, \quad (4.52)$$

onde o parâmetro γ é, convencionalmente, chamado de dimensão anômala. Na vizinhança do ponto fixo do líquido de Luttinger, ou seja, $g_{1R}^* = 0$ e $g_{2R}^* \neq 0$, o peso da quasipartícula Z decai como uma lei de potência da seguinte forma: $Z \sim (\omega/\Omega)^{\gamma^*}$. Como $\gamma^* = (g_{2R}^{*2}/4\pi^2 v_F^2) > 0$, Z se anula se tomarmos o limite $\omega \rightarrow 0$. Esse resultado implica que, nesses sistemas, não existem excitações do tipo quasipartículas fermiônicas bem de-

finidas. Isso está de acordo com resultados exatos demonstrados para esses sistemas que asseguram, rigorosamente, que as únicas excitações possíveis neles são modos coletivos bosônicos de carga e spin no modelo (*i.e.*, os holons e os spinons).

Por outro lado, se substituirmos a Eq. (4.51) nas Eqs. (4.42) e (4.43), veremos que as correções devido à auto-energia do sistema naturalmente introduzem correções de terceira ordem na teoria de perturbação. Dessa maneira, para ser consistente em todo o cálculo devemos voltar a função vértice $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3)$ considerada anteriormente e calcular as contribuições em teoria de perturbação geradas pelos diagramas correspondentes que contenham dois loops. É justamente isso que vamos fazer na próxima seção.

4.5 O grupo de renormalização até 2 loops

Nesta seção, vamos derivar as equações do grupo de renormalização até 2 loops para as constantes de acoplamento efetivas do sistema. Para isso, temos que incluir as contribuições de terceira ordem de perturbação associadas ao cálculo da função vértice $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3)$ que consideramos anteriormente. Como podemos facilmente verificar, nessa ordem de perturbação, aparecem um número muito maior de diagramas de Feynman se comparado com o cálculo de 1 loop. Essas contribuições contêm, de uma maneira geral, tanto diagramas que divergem com $\ln(\Omega/p_0)$, quanto diagramas que divergem com $\ln^2(\Omega/p_0)$ no limite de baixa energia do sistema (ou seja, $p_0 \rightarrow 0$). Vamos examinar, agora, como todas essas contribuições são tratadas dentro do esquema do método de teoria de campos para o grupo de renormalização.

Vamos reescrever novamente a expressão que relaciona os acoplamentos “nus” e os seus respectivos acoplamentos renormalizados associados ao sistema. Assim,

$$g_i = Z^{-2} [g_{iR}(\omega) + \Delta g_{iR}(\omega)] \quad (\text{para } i = 1, 2), \quad (4.53)$$

onde Z é o peso da quasipartícula que, como discutimos na seção anterior, é dado pela Eq. (4.51) e $\Delta g_{iR}(\omega)$ representa os contratermos da teoria que devem, agora, cancelar todas as divergências relacionadas com o cálculo da função vértice de quatro pontos $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3)$ até 2 loops no nosso modelo. Para entendermos o papel exato dessas divergências, temos que voltar a nossa Lagrangiana renormalizada da Eq. (4.44). De fato, como cada termo presente na Lagrangiana de interação gera naturalmente diagramas de Feynman em teoria de perturbação, os contratermos que estão definidos nela também gerarão contribuições de ordem superior. Essas contribuições, obviamente, podem conter loops que são logicamente divergentes na teoria de tal forma que o diagrama resultante divergirá com $\ln(\Omega/\omega) \ln(\Omega/p_0)$. Como veremos mais detalhadamente no Apêndice A, esses diagramas cancelam todos as contribuições na teoria que dependem da energia p_0 e que divergem da mesma maneira, i.e., com o quadrado do logaritmo no limite de baixa energia. Dessa forma, as únicas contribuições que não são canceladas e que serão importantes para o sistema consistem nos diagramas de Feynman que divergem com $\ln(\Omega/p_0)$ em terceira ordem de perturbação e estes são usados para redefinirmos os contratermos até essa ordem. Como é fácil verificar, esses diagramas aparecerão tanto no canal de espalhamento “para trás” (ver Fig. 4.8), quanto no canal de espalhamento frontal (ver Fig. 4.9). Por conseguinte, os contratermos necessários redefinidos até essa ordem de perturbação se tornam

$$\Delta g_{1R}(\omega) = \frac{1}{\pi v_F} g_{1R}^2 \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right) + \frac{1}{2\pi^2 v_F^2} (g_{1R}^2 g_{2R} - g_{1R} g_{2R}^2) \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right), \quad (4.54)$$

$$\Delta g_{2R}(\omega) = \frac{1}{2\pi v_F} g_{1R}^2 \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right) + \frac{1}{2\pi^2 v_F^2} \left(g_{1R}^2 g_{2R} - g_{1R} g_{2R}^2 + \frac{1}{2} g_{1R}^3 - g_{2R}^3 \right) \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right). \quad (4.55)$$

Substituindo as Eqs. (4.51), (4.54) e (4.55) na Eq. (4.53) e seguindo o mesmo procedimento descrito anteriormente para o caso de 1 loop, obtemos finalmente as seguintes equações do GR até 2 loops para os acoplamentos efetivos no sistema

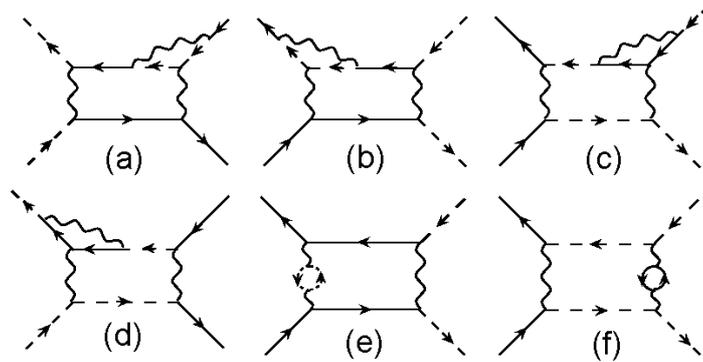


Figura 4.8: Os diagramas de Feynman de 2 loops relevantes para o cálculo da equação do GR para a interação efetiva do tipo espalhamento “para trás” até essa ordem de perturbação.

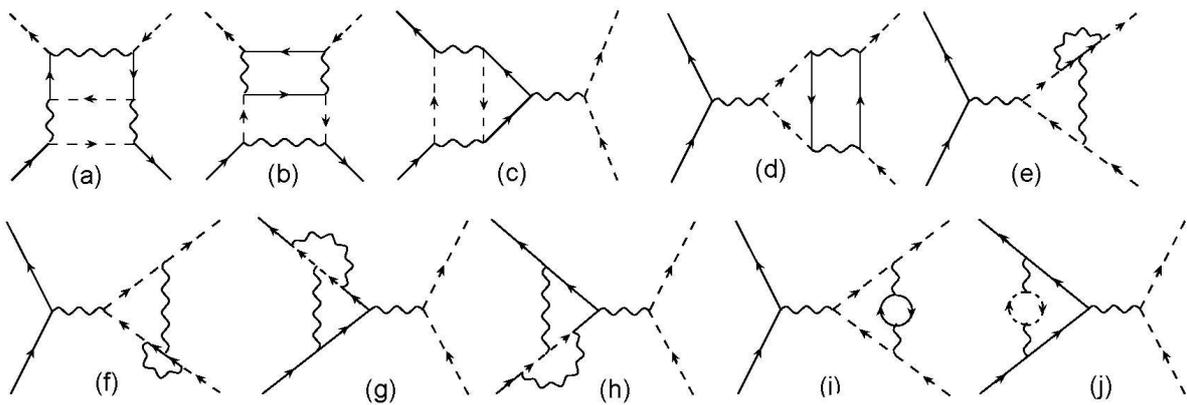


Figura 4.9: Os diagramas de Feynman de 2 loops relevantes para o cálculo da equação do GR para a interação efetiva do tipo espalhamento frontal até essa ordem de perturbação.

$$\omega \frac{dg_{1R}}{d\omega} = \frac{g_{1R}^2}{\pi v_F} + \frac{g_{1R}^3}{2\pi^2 v_F^2}, \quad (4.56)$$

$$\omega \frac{dg_{2R}}{d\omega} = \frac{g_{1R}^2}{2\pi v_F} + \frac{g_{1R}^3}{4\pi^2 v_F^2}, \quad (4.57)$$

onde essas equações, agora, ficam mais complicadas de serem resolvidas analiticamente. Mesmo assim, podemos notar que essas equações do GR até 2 loops continuam satisfazendo a seguinte condição, ou seja,

$$\omega \frac{d}{d\omega} (g_{1R} - 2g_{2R}) = 0, \quad (4.58)$$

o que implica que elas continuam não sendo independentes uma da outra. Por essa razão, mais uma vez, basta considerarmos apenas uma delas. Vamos escolher a equação do GR associada ao acoplamento g_{1R} para analisarmos o fluxo correspondente. Nessa equação, podemos ver que para modelo definidos inicialmente com $g_1 > 0$ (que é o caso do modelo de Hubbard 1d), o acoplamento renormalizado g_{1R} continua fluindo para zero no limite de baixa energia do sistema, mas agora não de uma maneira exatamente logarítmica como no caso de 1 loop. Portanto, sistemas que se enquadram nessa situação continuam, de fato, na mesma classe de universalidade do modelo de Tomonaga-Luttinger (ou seja, são líquidos de Luttinger), o que concorda com a nossa análise anterior do GR até 1 loop para esse sistema. Esse resultado até 2 loops parece sugerir ainda que o ponto fixo $g_{1R}^* = 0$ deve ser sempre um ponto fixo da transformação em 1d. De fato, pode-se demonstrar por outros métodos analíticos, isto é, fazendo o uso das chamadas identidades de Ward [84, 85, 86, 87, 88] associadas à conservação exata de partículas do ramos “+” e “-” nesses sistemas, que o modelo de Tomonaga-Luttinger é sempre um ponto fixo do GR para todas as ordens de teoria de perturbação [89]. Dessa maneira, constata-se que o ponto fixo associado a um estado do líquido de Luttinger no sistema é, fundamentalmente, de natureza não-perturbativa em 1d e não está relacionado a nenhum esquema especial

de truncagem em teoria de perturbação.

Sendo sempre um ponto fixo da transformação, podemos esperar, de acordo com a nossa discussão no Cap. 3, que o estado do líquido de Luttinger não possua naturalmente “gaps” no seu espectro de excitação. Para comprovarmos essa hipótese, vamos agora calcular duas quantidades que são centrais nessa determinação, ou seja, a compressibilidade de carga e a susceptibilidade de spin uniforme desses sistemas.

4.6 Cálculo das susceptibilidades de carga e spin uniformes

Nesta seção, vamos analisar o comportamento da compressibilidade de carga e da susceptibilidade de spin uniforme no Líquido de Luttinger do ponto de vista do grupo de renormalização. Para obtermos essas grandezas, precisamos, em primeiro lugar, calcular a função resposta linear gerada devido a um campo externo infinitesimal uniforme que acopla com o operador número de ocupação. Logo, vamos adicionar à Lagrangiana nua, ou seja, à Eq. (4.6), o seguinte termo

$$-h_{\text{externo}} \sum_{\mathbf{p}, a=\pm} \mathcal{T}_\alpha \psi_{(a)\alpha}^\dagger(\mathbf{p}, t) \psi_{(a)\alpha}(\mathbf{p}, t), \quad (4.59)$$

onde h_{externo} é um campo externo uniforme, \mathcal{T}_α é, por definição, a função resposta linear “nua” do sistema e $\psi_{(a)\alpha}^\dagger(\mathbf{p}, t)$ e $\psi_{(a)\alpha}(\mathbf{p}, t)$ são, naturalmente, os campos fermiônicos “nus” associados aos operadores de criação e destruição de elétrons no modelo. Quando adicionamos esse termo na Lagrangiana, uma nova função irreduzível passa, também, a conter singularidades no limite de baixa energia aparecendo em teoria de perturbação que é a função $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q} \approx 0)$ do modelo⁶. Dessa forma, essa função, também, tem de ser regularizada por meio de uma definição de novos contratermos que precisam cancelar

⁶Ver definição em um livro-texto de teoria de campos como, por exemplo, em [41].

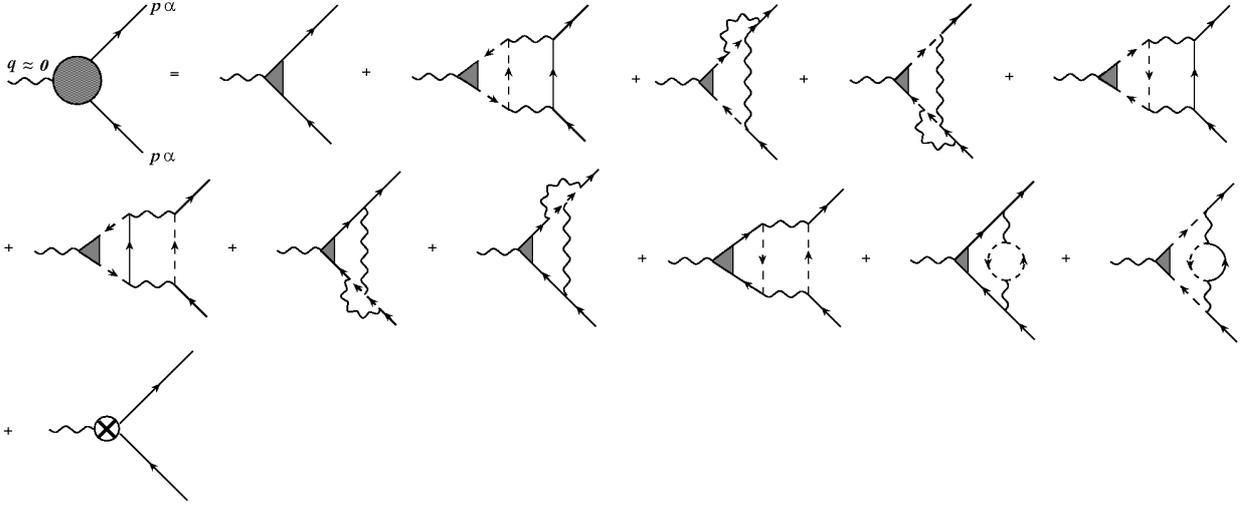


Figura 4.10: Os diagramas de Feynman correspondentes ao cálculo da função resposta uniforme do sistema até 2 loops.

essas divergências adicionais.

Como podemos facilmente verificar, em um cálculo perturbativo até 1 loop, não existem diagramas divergentes aparecendo em $\Gamma^{(2,1)}(\mathbf{p}, \mathbf{q} \approx 0)$. Dessa maneira, não podemos calcular essa quantidade consistentemente usando o método do GR nessa ordem de perturbação. Por outro lado, em um cálculo até 2 loops, vários diagramas singulares no limite de baixa energia emergem (ver Fig. 4.10) e, por essa razão, precisamos invocar o método do GR para extrairmos previsões finitas da teoria nessa ordem de perturbação. Dessa maneira, vamos seguir o mesmo procedimento explicado anteriormente e reescrever os campos da teoria na Eq. (4.59). Além disso, devemos, também, reescrever nessa mesma equação a função resposta “nua” \mathcal{T}_α em termos da sua grandeza renormalizada \mathcal{T}_α^R . Dessa maneira, obtemos a seguinte expressão

$$\mathcal{T}_\alpha = Z^{-1} [\mathcal{T}_\alpha^R + \Delta\mathcal{T}_\alpha^R], \quad (4.60)$$

onde $\Delta\mathcal{T}_\alpha^R$ é o contratermo necessário para fazer com que essa teoria de perturbação se torne bem definida. Como existem várias maneiras de se escolher esse contratermo, precisamos estabelecer uma condição de renormalização que nos informa em que escala a função resposta renormalizada está definida. Vamos escolher a condição de renormalização

canônica

$$\Gamma^{(2,1)}(p_0 = \omega, \mathbf{p} = k_F, \mathbf{q} \approx 0) = -i\mathcal{T}_\alpha^R(\omega), \quad (4.61)$$

onde ω desempenha o mesmo papel explicado anteriormente. Usando essa condição, o contratermo $\Delta\mathcal{T}_\alpha^R$ da teoria fica

$$\Delta\mathcal{T}_\alpha^R = \frac{1}{4\pi^2 v_F^2} (2g_{1R}g_{2R} - g_{1R}^2 - g_{2R}^2) \mathcal{T}_\alpha^R \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right). \quad (4.62)$$

Agora, podemos definir os dois diferentes tipos de função resposta uniformes que simplesmente decorrem de uma simetrização ou anti-simetrização do objeto \mathcal{T}_α^R em relação à projeção de spin α , ou seja,

$$\mathcal{T}_{Carga}^R(\omega) = \mathcal{T}_\uparrow^R(\omega) + \mathcal{T}_\downarrow^R(\omega), \quad (4.63)$$

$$\mathcal{T}_{Spin}^R(\omega) = \mathcal{T}_\uparrow^R(\omega) - \mathcal{T}_\downarrow^R(\omega), \quad (4.64)$$

onde \mathcal{T}_{Carga}^R e \mathcal{T}_{Spin}^R são, respectivamente, as funções respostas uniformes associadas à carga e ao spin no sistema. Assim, usando essas equações em Eq. (5.51) e seguindo o mesmo procedimento explicado anteriormente, podemos derivar as seguintes equações do GR até 2 loops para essas quantidades, ou seja,

$$\omega \frac{d}{d\omega} \mathcal{T}_{Carga}^R = \left(\frac{g_{1R}g_{2R}}{4\pi^2 v_F^2} \right) \mathcal{T}_{Carga}^R, \quad (4.65)$$

$$\omega \frac{d}{d\omega} \mathcal{T}_{Spin}^R = \left(\frac{g_{1R}g_{2R}}{4\pi^2 v_F^2} \right) \mathcal{T}_{Spin}^R. \quad (4.66)$$

Nós podemos observar que essas duas equações diferenciais são exatamente idênticas. Esse resultado tem uma simples interpretação associada, ou seja, não existe separação de carga e spin no nosso modelo. Em outras palavras, as excitações elementares do tipo holons e spinons, que sabemos que existem por outros métodos, têm a mesma velocidade de propagação aqui. Esse resultado, na verdade, está relacionado com o fato de que não

$$i \chi_{Carga(Spin)}^R(\omega) = \text{Diagrama de Feynman}$$

Figura 4.11: O diagrama de Feynman associado às susceptibilidades uniformes de carga e spin no sistema.

estarmos considerando os processos de interação descritos pela constante de acoplamento g_4 associados ao espalhamento frontal entre partículas situadas no mesmo ramo. Esse processos de interação são bastante interessantes de serem analisados, mas, infelizmente, são igualmente difíceis de serem incorporados consistentemente dentro de um esquema do GR. Mesmo assim, como veremos a seguir, é possível ainda extrair importantes previsões sobre o nosso modelo com relação às propriedades de baixa energia associadas à classe de universalidade do líquido de Luttinger.

Como vimos anteriormente, o ponto fixo do líquido de Luttinger é definido pelo modelo de Tomonaga-Luttinger, ou seja, $g_{1R}^* = 0$ e $g_{2R}^* \neq 0$. No entanto, esse ponto fixo só é alcançado assintoticamente no fluxo de renormalização. Além disso, como vimos anteriormente, pode ser demonstrado, fazendo-se o uso das identidades de Ward associadas com a conservação exata de partículas situadas no ramo da direita e do ramo da esquerda, que esse ponto fixo, de fato, vale para todas as ordens em teoria de perturbação. Logo, para trazermos o sistema físico apropriadamente para o regime do líquido de Luttinger na nossa abordagem, nós devemos fazer de início o acoplamento g_{1R} igual a zero nas Eqs (5.54) e (5.55). Dessa forma, obtemos

$$\omega \frac{d}{d\omega} \mathcal{T}_{Carga}^R = 0, \quad (4.67)$$

$$\omega \frac{d}{d\omega} \mathcal{T}_{Spin}^R = 0. \quad (4.68)$$

Isso significa que ambas funções respostas uniformes satisfazem trivialmente a condição de invariância do grupo de renormalização no ponto fixo do líquido de Luttinger. Além

disso, as susceptibilidades uniformes correspondentes são dadas por

$$\chi_{Carga}^R(\omega) = \frac{1}{2\pi v_F} \left[\mathcal{T}_{Carga}^R(\omega) \right]^2, \quad (4.69)$$

$$\chi_{Spin}^R(\omega) = \frac{1}{2\pi v_F} \left[\mathcal{T}_{Spin}^R(\omega) \right]^2, \quad (4.70)$$

onde o diagrama de Feynman associado encontra-se mostrado na Fig. (4.11). Portanto, como as funções respostas uniformes são invariantes do grupo de renormalização no ponto fixo do líquido de Luttinger, as susceptibilidades uniformes correspondentes também o serão. Esse resultado está relacionado com o fato de que a física de baixa energia desses sistemas, de fato, contem excitações coletivas sem “gaps” de carga e de spin, o que é indicativo de um estado fundamental metálico. Dessa maneira, podemos ver que a abordagem do grupo de renormalização reproduz qualitativamente alguns aspectos bastante importantes do líquido de Luttinger, isto é, que representa um estado metálico em 1d sem excitações do tipo quasipartículas fermiônicas no qual a dinâmica de baixa energia é dominada exclusivamente por excitações coletivas bosônicas de carga (holons) e spin (spinons).

Toda a discussão apresentada neste capítulo encontra-se publicada no nosso artigo [64].

Capítulo 5

Renormalização em Direção à Superfície de Fermi 2d

A nossa abordagem do grupo de renormalização no capítulo anterior foi bem sucedida no sentido em que ela reproduziu vários aspectos importantes relacionados à física de baixa energia do líquido de Luttinger em 1d como, por exemplo, a ausência de excitações fermiônicas do tipo quasipartículas e a presença de excitações coletivas bosônicas sem “gaps” de carga e de spin no sistema. Dessa forma, esse resultado nos leva a tentar aplicar o mesmo tipo de abordagem para problemas nos quais não existem soluções exatas do estado fundamental e das excitações elementares até o presente momento. Como vimos ao longo desta tese, essa situação ocorre, de uma maneira bastante geral, em sistemas definidos em dimensões espaciais superiores como é o caso do modelo de Hubbard em 2d. A razão subjacente para isso é que justamente os métodos analíticos que permitem a resolução exata do problema correspondente em 1d como o *ansatz* de Bethe e o método de bosonização, infelizmente, não são facilmente generalizáveis para esses sistemas definidos em dimensões maiores.

Neste capítulo, vamos voltar ao problema central desta tese que consiste no modelo de Hubbard 2d para o caso em que a banda do sistema se encontra quase semi-cheia

($n \approx 1$) como o resultado de uma leve dopagem por buracos. A importância desse modelo já foi enfatizada anteriormente, em particular, com relação ao seu potencial em conter uma possível explicação para o fenômeno da supercondutividade de alta temperatura nos cupratos.

5.1 O modelo de g-ologia para o caso 2d

Inicialmente, vamos recapitular a nossa discussão sobre o modelo de Hubbard 2d feita anteriormente. Esse modelo é representado, no espaço de momentos, pela seguinte Hamiltoniana

$$\bar{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [-2t (\cos(k_x a) + \cos(k_y a)) - \mu] \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\sigma} + \left(\frac{U}{N_{sites}} \right) \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}} \psi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \psi_{\mathbf{q}\downarrow}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\downarrow} \psi_{\mathbf{p}\uparrow}, \quad (5.1)$$

onde, agora, \mathbf{k} representa o vetor momento bidimensional do sistema $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, enquanto que todas as outras quantidades seguem as mesmas definições feitas anteriormente. O nosso ponto de partida aqui será a superfície de Fermi (SF) do modelo para o caso em que $n \approx 1$ como resultado de uma leve dopagem por buracos. Portanto, essa superfície (que está mostrada, mais uma vez, na Fig. 5.1(a)) define o limite de baixa energia associado ao sistema.

Fazendo uma rotação de 45° graus nos eixos dos momentos, a SF do sistema fica como está mostrada na Fig. 5.1(b). Como podemos facilmente ver, ela apresenta regiões que quase não possuem curvatura, ou seja, são regiões quase retas. Na verdade, isso faz com que esse sistema apresente semelhanças em muitos aspectos com o caso 1d descrito no capítulo anterior. Para enfatizar esse ponto, vamos dividir a SF em quatro regiões cinemáticas diferentes: duas regiões definidas com linhas contínuas que desempenharão o papel de ramo “+” e duas regiões definidas com linhas tracejadas que, por sua vez, farão o papel de ramo “-” (veja, novamente, a Fig. 5.1(b)). De fato, usando o caso 1d como

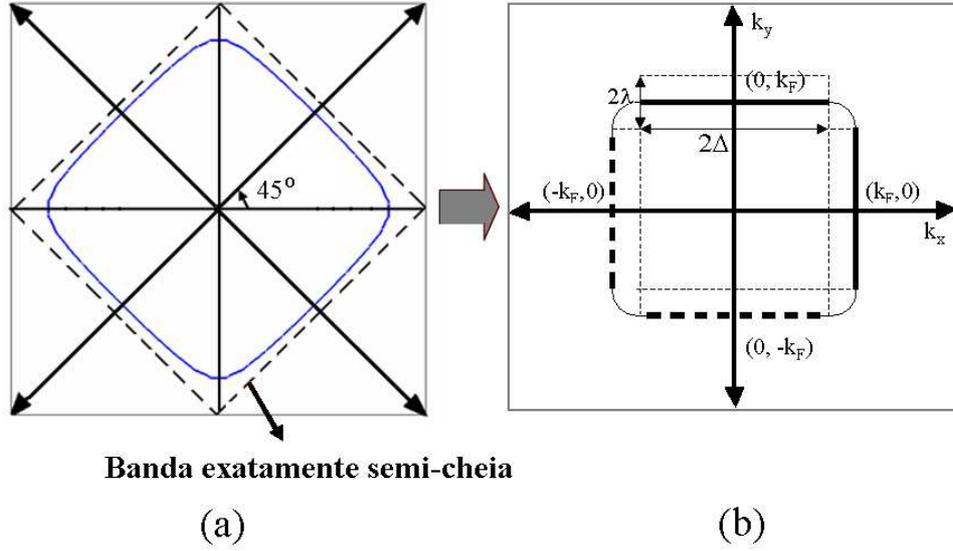


Figura 5.1: (a) A superfície de Fermi (SF) do caso de uma banda exatamente semi-cheia no modelo de Hubbard 2d (linha tracejada), a SF no caso levemente dopado por buracos (linha contínua), e (b) essa última SF depois de uma rotação dos eixos de 45° graus.

referência, podemos concluir que, em um cálculo perturbativo, os processos de interação que conectam as regiões da SF que são paralelas entre si (ou seja, formadas por uma linha contínua e uma linha tracejada) sempre gerarão diagramas de Feynman singulares no limite de baixa energia do sistema. Dessa maneira, esses processos terão de ser apropriadamente renormalizados e, assim, contribuirão efetivamente para as equações do GR do sistema. Além disso, nessa nossa abordagem do problema, não vamos considerar os processos de interação que conectam regiões perpendiculares entre si na SF. Portanto, esses processos não contribuirão para as equações do GR no nosso esquema. Dessa forma, como os conjuntos formados por duas regiões paralelas da SF não misturam entre si, podemos restringir a nossa atenção apenas para um deles, uma vez que para o outro conjunto o procedimento de renormalização seguir-se-á da mesma maneira. Assim, vamos considerar apenas as regiões definidas pelo momento paralelo em relação à SF dado por $k_{\parallel} = k_x$ e o momento perpendicular correspondente dado por $k_{\perp} = k_y$ no eixo dos momentos. Por conseguinte, o momento paralelo k_{\parallel} está, então, restrito ao intervalo $-\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta$, onde 2Δ consiste, basicamente, na extensão das regiões paralelas da SF.

Como estamos interessados apenas na dinâmica de baixa energia desse modelo, vamos linearizar, mais uma vez, a relação de dispersão em torno da superfície de Fermi do sistema. Dessa maneira, a Hamiltoniana de Hubbard da Eq. (5.1) fica

$$\bar{H} = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} v_F(|k_\perp| - k_F) \psi_{\mathbf{k}\sigma(a)}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\sigma(a)} + \left(\frac{U}{N_{\text{sites}}} \right) \sum_{\mathbf{p}, \mathbf{k}, \mathbf{q}} \psi_{\mathbf{p}+\mathbf{k}-\mathbf{q}\uparrow}^\dagger \psi_{\mathbf{q}\downarrow}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\downarrow} \psi_{\mathbf{p}\uparrow}, \quad (5.2)$$

onde $v_F = \nabla_{\mathbf{k}} \xi_{\mathbf{k}}|_{|k_\perp|=k_F}$ é a velocidade de Fermi do sistema. O subscrito $a = \pm$ nos operadores de criação e destruição denotam a região da SF, ou seja, relativa às linhas contínua (ramo “+”) e tracejada (ramo “-”) em que essas excitações são criadas ou destruídas. É interessante notar também que, nessa relação de dispersão linearizada, a dependência com o momento paralelo aparece apenas implicitamente na velocidade de Fermi do sistema. Essa dependência pode, numa boa aproximação, ser desprezada no nosso caso. Dessa maneira, a relação de dispersão resultante passa a depender apenas da componente perpendicular do momento o que faz com que esse sistema se assemelhe bastante com o caso 1d visto no capítulo anterior. Além disso, como fizemos antes, vamos também definir aqui um “cutoff” ultravioleta de tal forma que essa aproximação linear se restrinja apenas para valores de k_\perp dentro dos intervalos $[-k_F - \lambda; -k_F + \lambda]$ e $[k_F - \lambda; k_F + \lambda]$. Por conseguinte, a extensão desse “cutoff” na energia do sistema será dada por $\Omega = 2v_F\lambda$.

Dada a semelhança desse sistema 2d com caso 1d considerado no capítulo anterior, torna-se útil definir, também, aqui a seguinte notação para a relação de dispersão

$$\begin{cases} \xi_{\mathbf{k}}^{(+)} = v_F(k_\perp - k_F), \\ \xi_{\mathbf{k}}^{(-)} = -v_F(k_\perp + k_F). \end{cases}$$

Além disso, usando a Hamiltoniana (5.2), podemos calcular, agora, a função de Green não-interagente $G^{(0)}(k_0, \mathbf{k})$ associada a esse sistema. De maneira análoga ao caso 1d, teremos também aqui duas funções de Green não-interagentes associadas: uma função $G_{(+)}^{(0)}(k_0, \mathbf{k})$

que corresponde à propagação de elétrons situados na região contínua da SF (ou ramo “+”) e outra função $G_{(-)}^{(0)}(k_0, \mathbf{k})$ que corresponde à propagação dos elétrons situados na região tracejada da SF (ou ramo “-”). Logo, temos

$$G_{(+)}^{(0)}(k_0, \mathbf{k}) = \left[\frac{\theta(\xi_{\mathbf{k}}^{(+)})}{k_0 - \xi_{\mathbf{k}}^{(+)} + i\delta} + \frac{\theta(-\xi_{\mathbf{k}}^{(+)})}{k_0 - \xi_{\mathbf{k}}^{(+)} - i\delta} \right], \quad (5.3)$$

$$G_{(-)}^{(0)}(k_0, \mathbf{k}) = \left[\frac{\theta(\xi_{\mathbf{k}}^{(-)})}{k_0 - \xi_{\mathbf{k}}^{(-)} + i\delta} + \frac{\theta(-\xi_{\mathbf{k}}^{(-)})}{k_0 - \xi_{\mathbf{k}}^{(+)} - i\delta} \right]. \quad (5.4)$$

Esses propagadores livres podem, também, ser representados diagramaticamente da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} iG_{(+)}^{(0)} &= \longrightarrow \\ iG_{(-)}^{(0)} &= \dashrightarrow \end{aligned}$$

Figura 5.2: Os dois propagadores livres do sistema.

Seguindo a mesma estratégia do caso 1d, vamos definir agora a Lagrangiana total associada a esse modelo 2d. Portanto, temos

$$\begin{aligned} L &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, a=\pm} \psi_{(a)\sigma}^\dagger(\mathbf{k}, t) (i\partial_t - \xi_{\mathbf{k}}^{(a)}) \psi_{(a)\sigma}(\mathbf{k}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} g_1 \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma \sigma'}} g_2 \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{p}, t). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Esse é o modelo de g-ologia generalizado para o caso bidimensional. Como nesse modelo as constantes acoplamentos são independentes do orientação de spin das partículas, ele é naturalmente invariante pelo grupo $SU(2)$. Já as quantidades $\psi_\sigma^\dagger(\mathbf{k}, t)$ e $\psi_\sigma(\mathbf{k}, t)$ são, claramente, os campos fermiônicos associados aos operadores de criação e destruição

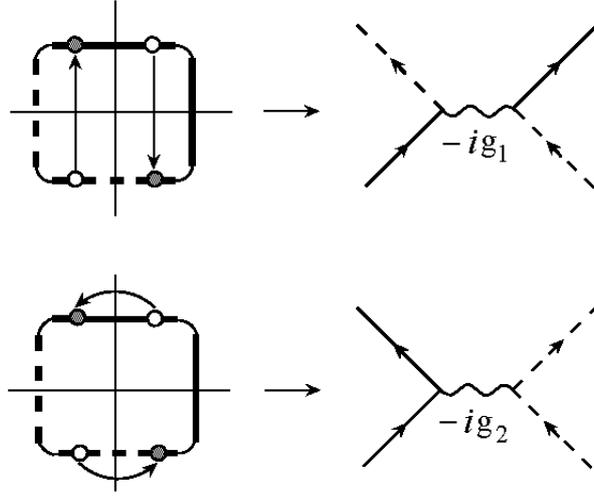


Figura 5.3: O processos de interação no nosso modelo 2d.

de elétrons com momento $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, projeção de spin σ e ramo $a = \pm$ no formalismo canônico. O somatório sobre os momentos, por sua vez, deve ser entendido como $\Sigma_{\mathbf{k}} = V/(2\pi)^2 \int d^2\mathbf{k}$ no limite termodinâmico do sistema ($N, V \rightarrow \infty$). Nessa expressão, a constante de acoplamento g_1 descreve os espalhamentos que envolvem transferência de partículas entre as regiões “+” e “-” da SF 2d. Por razões óbvias, vamos chamar esses processos de interação, de agora em diante, de espalhamento “para trás” 2d. Já a constante de acoplamento g_2 descreve os processos de interação que não envolvem transferência entre partículas entre as regiões “+” e “-” da SF 2d. Eles, por sua vez, serão denominados de espalhamento frontal 2d no nosso modelo. Como estamos interessados em relacionar esse modelo com o modelo de Hubbard 2d, podemos facilmente constatar que as constantes de acoplamento devem ser inicialmente definidas como $g_1 = g_2 = (V/N_{sites})U$. Além disso, vamos desprezar aqui os processos de interação do tipo Umklapp associados ao acoplamento g_3 , uma vez que o sistema não se encontra em uma situação de banda exatamente semi-cheia e, de maneira análoga ao caso 1d, vamos desprezar também os processos de interação associados à constante de acoplamento g_4 . Assim, os únicos processos de interação considerados no nosso modelo estão mostrados esquematicamente na Fig. 5.3.

5.2 Teoria de perturbação convencional até 1 loop

Nesta seção, vamos calcular a função vértice irreduzível de quatro pontos $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3, p_4)$ desse modelo até segunda ordem (ou até 1 loop) em teoria de perturbação. Como veremos, esse cálculo se assemelhará bastante com caso 1d considerado no capítulo anterior. De fato, ao longo da série perturbativa até 1 loop, dois tipos de amplitudes ou “bolhas” aparecerão também tipicamente aqui: as “bolhas” do tipo partícula-partículas e as “bolhas” do tipo partícula-buraco. Essas contribuições perturbativas também representarão aquelas de maior importância para o nosso modelo 2d até essa ordem de perturbação. Dessa maneira, vamos representá-las, convenientemente, pelas seguintes funções

$$\Pi^{(0)}(p) = \int_k G_{(+)}^{(0)}(k) G_{(-)}^{(0)}(-k+p) \quad (\text{“Bolha” tipo partícula-partícula}), \quad (5.6)$$

$$\chi^{(0)}(q) = \int_k G_{(+)}^{(0)}(k) G_{(-)}^{(0)}(k+q) \quad (\text{“Bolha” tipo partícula-buraco}), \quad (5.7)$$

onde agora $\int_k = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \int_{-\Delta}^{+\Delta} \frac{dk_{\parallel}}{2\pi} \int_{k_F-\lambda}^{k_F+\lambda} \frac{dk_{\perp}}{2\pi}$. Essas “bolhas” se encontram representadas esquematicamente na Fig. 5.4. Assim, calculando essas integrais, obtemos

$$\Pi^{(0)}(p) = \frac{i}{8\pi^2 v_F} \left[\ln \left(\frac{\Omega - p_0 - v_F p_{\perp} - i\delta}{-p_0 + v_F p_{\perp} - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{-\Omega - p_0 + v_F p_{\perp} + i\delta}{-p_0 - v_F p_{\perp} + i\delta} \right) \right], \quad (5.8)$$

$$\chi^{(0)}(q) = -\frac{i}{8\pi^2 v_F} \left[\ln \left(\frac{\Omega + q_0 + v_F(q_{\perp} + 2k_F) - i\delta}{q_0 - v_F(q_{\perp} + 2k_F) - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{-\Omega + q_0 - v_F(q_{\perp} + 2k_F) + i\delta}{q_0 + v_F(q_{\perp} + 2k_F) + i\delta} \right) \right], \quad (5.9)$$

que, para $p_{\perp} = 0$ e $q_{\perp} = -2k_F$ e $p_0 = q_0 \approx 0$, se reduzem naturalmente a

$$\Pi^{(0)}(p) = \frac{i}{4\pi^2 v_F} \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right) \quad e \quad \chi^{(0)}(q) = -\frac{i}{4\pi^2 v_F} \ln \left(\frac{\Omega}{q_0} \right), \quad (5.10)$$

isto é, ambas as “bolhas” divergem logaritmicamente no limite de baixa energia do sistema (ou seja, $p_0 = q_0 \rightarrow 0$). Note que as partes imaginárias delas foram, mais uma vez, desprezadas, uma vez que elas também não representam contribuições divergentes para

$$\Pi^{(0)}(\mathbf{p}) = \begin{array}{c} \text{---} k \text{---} \\ \curvearrowright \\ \text{---} -k + \mathbf{p} \text{---} \end{array}$$

$$\chi^{(0)}(\mathbf{q}) = \begin{array}{c} \text{---} k \text{---} \\ \curvearrowleft \\ \text{---} k + \mathbf{q} \text{---} \end{array}$$

Figura 5.4: As “bolhas” do tipo partícula-partícula e partícula-buraco que aparecem tipicamente no cálculo perturbativo até 1 loop.

essa teoria de perturbação aqui.

Portanto, usando as regras de Feynman apropriadas para esse modelo 2d, obtemos para a função vértice $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3, p_4)$ no canal g_1 (ou seja, para os momentos $p_{1\perp} = -p_{2\perp} = p_{3\perp} = -p_{4\perp} = k_F$) a seguinte expressão até segunda ordem em teoria de perturbação

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3) \Big|_{\text{canal } g_1} = -ig_1 + 2g_1g_2\Pi^{(0)}(p_1 + p_2) + (2g_1g_2 - 2g_1^2)\chi^{(0)}(p_2 - p_3), \quad (5.11)$$

onde, obviamente, estamos fazendo $p_4 = p_1 + p_2 - p_3$ devido à conservação de energia e momento no sistema. Os diagramas de Feynman que correspondem a essas contribuições estão exibidos na Fig. 5.5. Note que esses digramas são os mesmos do caso 1d. O que muda aqui são apenas as regras de Feynman associadas que devem ser apropriadamente adaptadas para o caso 2d. Além disso, note que, nessa última expressão, se fizermos $p_{10} + p_{20} = p_0$, $p_2 - p_3 = q_0$ e $p_0 = q_0 \approx 0$, a função vértice se reduz a

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3) \Big|_{\text{canal } g_1} = -ig_1 + \frac{i}{2\pi^2 v_F} g_1^2 \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right), \quad (5.12)$$

ou seja, se fizermos $p_0 \rightarrow 0$, a função vértice no canal g_1 , de fato, diverge logaritmicamente. De maneira semelhante, podemos calcular, também, a função vértice no canal g_2 (ou seja, para os momentos $p_{1\perp} = -p_{2\perp} = -p_{3\perp} = p_{4\perp} = k_F$). Dessa maneira, obtemos até segunda

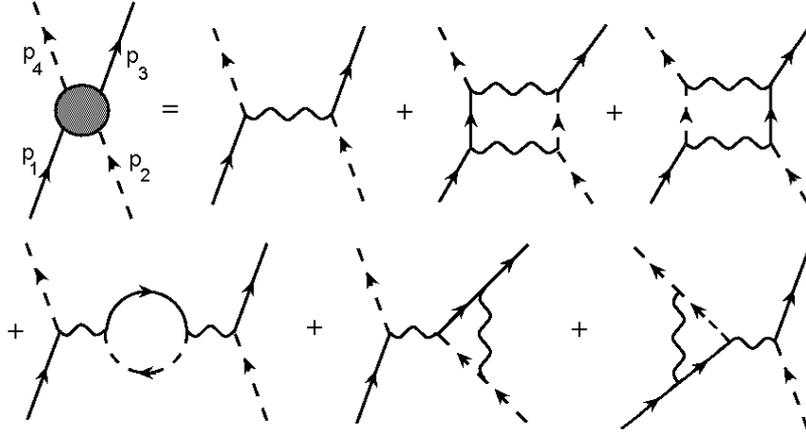


Figura 5.5: Os diagramas de Feynman correspondentes no canal de espalhamento “para trás” até 1 loop.

ordem a seguinte expressão

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3) \Big|_{\text{canal } g_2} = -ig_2 + (g_1^2 + g_2^2)\Pi^{(0)}(p_1 + p_2) + g_2^2\chi^{(0)}(p_3 - p_1). \quad (5.13)$$

Para esse caso, os diagramas de Feynman correspondentes estão mostrados na Fig. 5.6. Esses diagramas também são os mesmos do caso 1d e o que muda aqui são apenas as regras de Feynman associadas a eles. Finalmente, fazendo $p_{10} + p_{20} = p_0$, $p_3 - p_1 = q_0$ e $p_0 = q_0 \approx 0$, esse último resultado se reduz a seguinte expressão

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3) \Big|_{\text{canal } g_2} = -ig_2 + \frac{i}{4\pi^2 v_F} g_1^2 \ln\left(\frac{\Omega}{p_0}\right), \quad (5.14)$$

o que implica que a função vértice no canal g_2 é, também, logaritmicamente divergente no limite de baixa energia do sistema 2d, ou seja, para $p_0 \rightarrow 0$. Portanto, podemos concluir também aqui que o tratamento perturbativo convencional até 1 loop falha totalmente em acessar a física de baixa energia desse sistema considerado. De fato, o termo de segunda ordem da série nesse limite sempre se tornará infinitamente maior que o termo de primeira ordem, invalidando, assim, a expansão até segunda ordem.

Como no caso 1d, todas essas contribuições singulares não são particularidade apenas do cálculo de 1 loop, mas sim elas aparecem em todas as ordens de perturbação. Dessa maneira, precisamos reescrever os parâmetros dessa teoria de tal forma que tenhamos uma

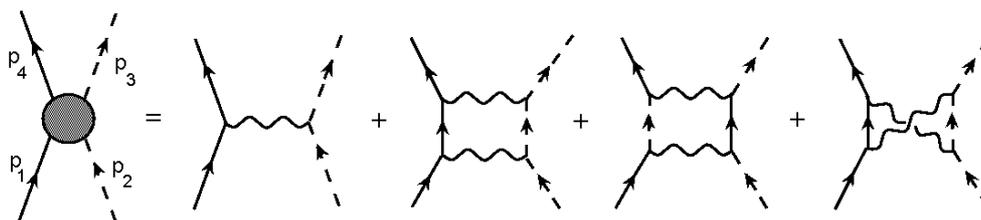


Figura 5.6: Os diagramas de Feynman correspondentes no canal de espalhamento frontal até 1 loop.

série perturbativa bem definida para esse sistema. Isso significa que temos que invocar a sistemática do grupo de renormalização também para esse sistema 2d. É justamente isso que vamos fazer na próxima seção.

5.3 O grupo de renormalização até 1 loop

No capítulo anterior, vimos que a razão subjacente para o aparecimento dessas divergências no infravermelho em um dado modelo está relacionada com o fato de que os parâmetros que estamos expandindo na teoria de perturbação simplesmente não são os apropriados para descrever o limite de baixa energia do sistema. Dessa forma, devemos, em situações como essa, reescrever os acoplamentos da Lagrangiana “nua” do modelo (ou seja, no nosso caso presente, da Eq. (5.5)) por parâmetros efetivos que estejam definidos para uma escala de energia variável ω . Obviamente, se fizermos $\omega \rightarrow 0$, temos de recuperar o limite de baixa energia associado a esse sistema. No entanto, aqui nesse ponto se evidencia uma diferença marcante entre o caso 1d considerado anteriormente e o caso 2d que pretendemos considerar agora. Como vimos no Cap. 3, demonstramos através da abordagem de Wilson para o GR perturbativo que, para uma dada função de acoplamento $g(p_1, p_2, p_3, p_4)$, a sua dependência com os momentos paralelos à SF é sempre importante para a descrição correta da física de baixa energia desses sistemas. Isso deve ser contrastado com o caso 1d em que todos os processos de interação de baixa energia podem ser apropriadamente parametrizados por apenas constantes de acoplamento. No sistema

2d que estamos considerando agora, é necessário um número infinito de acoplamentos para parametrizar corretamente os processos de interação de baixa energia. Assim, temos que reescrever os acoplamentos “nus” do modelo em termos dos acoplamentos renormalizados da seguinte maneira

$$g_1 = g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) + \Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}), \quad (5.15)$$

$$g_2 = g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) + \Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}), \quad (5.16)$$

onde, naturalmente, fizemos $p_{4\parallel} = p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}$ devido à conservação de momento no sistema. Isso significa que devemos definir um número igualmente infinito de contratermos para construirmos uma teoria de perturbação livre de divergências no limite de baixa energia desse sistema. Apesar disso, essa teoria é renormalizável¹. Portanto, esse modelo 2d fornece um exemplo bastante interessante de teoria renormalizável que necessita de um número infinito de contratermos para ser apropriadamente renormalizada. De fato, se fizermos as substituições acima, a Lagrangiana renormalizada até 1 loop do modelo fica

$$\begin{aligned} L &= \sum_{\mathbf{k}, \sigma, a=\pm} \psi_{(a)\sigma}^\dagger(\mathbf{k}, t) \left(i\partial_t - \xi_{\mathbf{k}}^{(a)} \right) \psi_{(a)\sigma}(\mathbf{k}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma\sigma'}} g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma\sigma'}} g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{p}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma\sigma'}} \Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma\sigma'}} \Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{p}, t). \end{aligned} \quad (5.17)$$

Com essa Lagrangiana, veremos, agora, que é possível construir um teoria de perturbação

¹Vamos discutir esse ponto mais detalhadamente no Apêndice A.

que não contenha nenhuma singularidade até 1 loop no limite de baixa energia do sistema. De fato, usando essa expressão e calculando, agora, a função vértice de quatro pontos no canal g_1 até 1 loop, obtemos

$$\begin{aligned}
 \Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0) \Big|_{\text{canal } g_1} &= -ig_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) + \frac{i}{4\pi^2 v_F} \left\{ \int_{\mathcal{D}_1} dk_{\parallel} \left[g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, k_{\parallel}, p_{3\parallel}) \right. \right. \\
 &\times g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) + g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \Big] \\
 &+ \int_{\mathcal{D}_2} dk_{\parallel} \left[2g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) - g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, k_{\parallel}) \right. \\
 &\times g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}) - g_{1R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) \Big] \Big\} \\
 &\times \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right) - i\Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}), \tag{5.18}
 \end{aligned}$$

onde, por conveniência, os domínios de integração \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_2 estão dados no Apêndice B desta tese. Como g_{1R} é, por definição, o acoplamento efetivo do modelo na escala de energia ω , precisamos impor a seguinte condição de renormalização

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0 = \omega) \Big|_{\text{canal } g_1} = -ig_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega). \tag{5.19}$$

Logo, o contratermo $\Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ do modelo se torna

$$\begin{aligned}
 \Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega) &= \frac{1}{4\pi^2 v_F} \left\{ \int_{\mathcal{D}_1} dk_{\parallel} \left[g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, k_{\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \right. \right. \\
 &+ g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \Big] \\
 &+ \int_{\mathcal{D}_2} dk_{\parallel} \left[2g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) - g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, k_{\parallel}) \right. \\
 &\times g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}) - g_{1R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) \Big] \Big\} \\
 &\times \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right). \tag{5.20}
 \end{aligned}$$

Como podemos ver, se substituirmos esse contratermo na Eq. (5.18), essa teoria de perturbação se torna bem definida no limite de baixa energia ($p_0 \rightarrow 0$), desde que definamos uma escala de energia ω de tal forma que satisfaça sempre a condição $\omega \approx p_0$.

Vamos seguir, agora, o mesmo procedimento para o cálculo da função vértice de quatro pontos até 1 loop. Logo, temos

$$\begin{aligned}
 \Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0) \Big|_{\text{canal } g_2} &= -i g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) + \frac{i}{4\pi^2 v_F} \left\{ \int_{\mathcal{D}_1} dk_{\parallel} \left[g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \right. \right. \\
 &\times g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) + g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(-k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, k_{\parallel}, p_{3\parallel}) \left. \right] \\
 &- \int_{\mathcal{D}_3} dk_{\parallel} \left[g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{3\parallel} - p_{1\parallel} + k_{\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel} - p_{1\parallel} + k_{\parallel}) \right] \left. \right\} \\
 &\times \ln \left(\frac{\Omega}{p_0} \right) - i \Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}), \tag{5.21}
 \end{aligned}$$

onde os domínios de integração \mathcal{D}_1 e \mathcal{D}_3 estão dados no Apêndice B. Da mesma maneira, estabelecendo a seguinte prescrição para o acoplamento efetivo $g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$, ou seja,

$$\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3; p_0 = \omega) \Big|_{\text{canal } g_2} = -i g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega), \tag{5.22}$$

obtemos que o contratermo $\Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ do modelo fica

$$\begin{aligned}
 \Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega) &= \frac{1}{4\pi^2 v_F} \left\{ \int_{\mathcal{D}_1} dk_{\parallel} \left[g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) \right. \right. \\
 &\times g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) + g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(-k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, k_{\parallel}, p_{3\parallel}) \left. \right] \\
 &- \int_{\mathcal{D}_3} dk_{\parallel} \left[g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{3\parallel} - p_{1\parallel} + k_{\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel} - p_{1\parallel} + k_{\parallel}) \right] \left. \right\} \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right). \tag{5.23}
 \end{aligned}$$

Esse contratermo, por sua vez, torna também essa expansão perturbativa convergente no limite de baixa energia $p_0 \rightarrow 0$ do modelo. Portanto, todo o modelo 2d que estamos tratando foi renormalizado até segunda ordem de perturbação. Isso significa que, agora, podemos extrair dele previsões finitas que podem, eventualmente, ser comparadas com a situação experimental.

Vamos discutir, agora, como esses parâmetros renormalizados da teoria variam quando alteramos a escala ω em que eles estão definidos. Vamos considerar, primeiro, o acoplamento $g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$. Usando a Eq. (5.15) e definindo uma escala de energia de tal forma que satisfaça $\omega = \Omega - d\omega$, obtemos a seguinte equação diferencial

$$\begin{aligned}
\omega \frac{dg_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega)}{d\omega} &= \frac{1}{4\pi^2 v_F} \left\{ \int_{\mathcal{D}_1} dk_{\parallel} \left[g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, k_{\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \right. \right. \\
&+ \left. \left. g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \right] \right. \\
&+ \int_{\mathcal{D}_2} dk_{\parallel} [2g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \\
&- g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}) \\
&- \left. \left. g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \right] \right\}, \tag{5.24}
\end{aligned}$$

que é a equação do GR até 1 loop para a constante efetiva $g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ do sistema 2d. Fazendo de maneira análoga para a Eq. (5.16), obtemos a seguinte equação diferencial

$$\begin{aligned}
\omega \frac{dg_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega)}{d\omega} &= \frac{1}{4\pi^2 v_F} \left\{ \int_{\mathcal{D}_1} dk_{\parallel} \left[g_{2R}(-k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, k_{\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \right. \right. \\
&+ \left. \left. g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \right] \right. \\
&- \left. \int_{\mathcal{D}_3} dk_{\parallel} \left[g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{3\parallel} - p_{1\parallel} + k_{\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel} - p_{1\parallel} + k_{\parallel}) \right] \right\}, \tag{5.25}
\end{aligned}$$

que é, por sua vez, a equação do GR até 1 loop para a constante efetiva $g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ do sistema 2d.

Como podemos facilmente ver, essas equações do GR não são mais equações diferenciais ordinárias relativamente simples de serem resolvidas como no caso 1d, mas sim complicadas equações íntegro-diferenciais que estão, além disso, acopladas entre si. Como essas equações são bastante difíceis de se resolver analiticamente, temos que recorrer naturalmente a métodos numéricos para extrairmos matematicamente as soluções delas. No entanto, vamos postergar essa discussão sobre a nossa estratégia numérica para o Cap. 6 desta tese. Neste capítulo, vamos nos limitar apenas a uma discussão sobre a imple-

mentação analítica do nosso método para o modelo 2d que estamos considerando.

Como vimos anteriormente, as equações do GR até 1 loop não levam em conta o importante efeito das flutuações quânticas que afetam as excitações de uma partícula no sistema. De fato, como vimos no Cap. 4, foi necessário ir até 2 loops para chegarmos à conclusão de que a física de baixa energia dos sistemas descritos pelo ponto fixo do líquido de Luttinger realmente não apresenta excitações fermiônicas do tipo quasipartículas em sua descrição.

No restante deste capítulo, vamos seguir esse mesmo procedimento com o intuito de analisarmos a possibilidade de existência de possíveis regimes do tipo líquido de Não-Fermi em sistemas 2d. Como vimos anteriormente, essa discussão está longe de ser puramente acadêmica devido ao fato de que essas fases exóticas são realmente observadas em materiais bidimensionais como, por exemplo, nos cupratos supercondutores. Além disso, do ponto de vista teórico, não existe, até o presente momento, nenhuma teoria microscópica que descreva corretamente as propriedades de baixa energia dessas fases não-convencionais.

Dessa maneira, na próxima seção, vamos começar o cálculo até 2 loops associado ao nosso modelo 2d de interesse. Para isso, temos que primeiro calcular a auto-energia associada ao sistema até essa ordem de perturbação.

5.4 Cálculo da auto-energia do modelo 2d - O peso da quasipartícula nesse sistema

Nesta seção, vamos calcular a auto-energia do nosso modelo bidimensional até 2 loops em teoria de perturbação. Para simplificar essa discussão, vamos supor que o momento \mathbf{p} da partícula pertence à região contínua da SF, ou seja, a um ramo “+”. Como veremos, esse cálculo perturbativo também terá algumas semelhanças com o caso 1d considerado no capítulo anterior. De fato, utilizando apropriadamente as regras de Feynman associa-

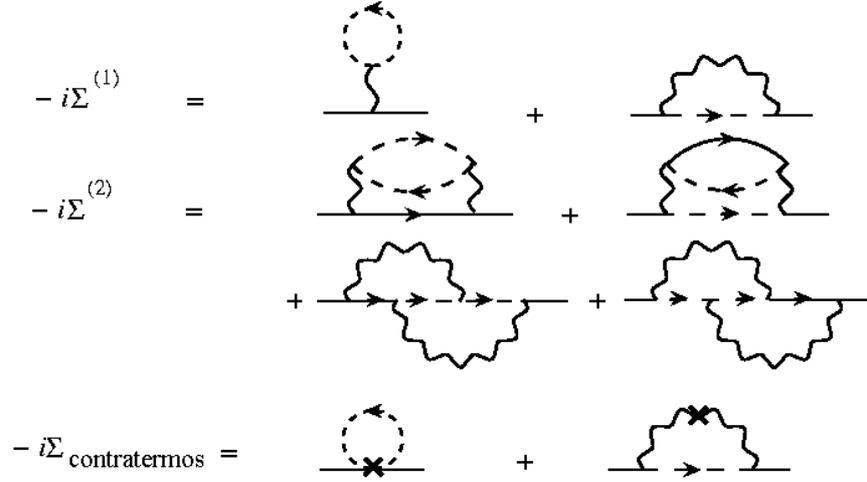


Figura 5.7: Os diagramas de Feynman até 2 loops associados à auto-energia do sistema.

das à Lagrangiana renormalizada da Eq. (5.17), obtemos, esquematicamente, a seguinte expressão para auto-energia do sistema

$$-i\Sigma(p) = -i\Sigma^{(1)} - i\Sigma^{(2)} - i\Sigma_{\text{contratermos}}, \quad (5.26)$$

onde $\Sigma^{(1)}$ representa as contribuições na auto-energia até 1 loop, $\Sigma^{(2)}$ representa as contribuições até 2 loops e $\Sigma_{\text{contratermos}}$ consiste nos diagramas gerados pelos contratermos definidos na teoria. Os diagramas de Feynman associados, por sua vez, estão mostrados na Fig. (5.7). Do cálculo de $\Sigma^{(1)}$ e $\Sigma_{\text{contratermos}}$, obtemos aqui, respectivamente,

$$-i\Sigma^{(1)} = \frac{i\lambda}{4\pi^2} \int_{-\Delta}^{\Delta} dk_{\parallel} \left[g_{1R}(p_{\parallel}, k_{\parallel}, p_{\parallel}) - 2g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel}) \right], \quad (5.27)$$

$$-i\Sigma_{\text{contratermos}} = \frac{i\lambda}{4\pi^2} \int_{-\Delta}^{\Delta} dk_{\parallel} \left[\Delta g_{1R}(p_{\parallel}, k_{\parallel}, p_{\parallel}) - 2\Delta g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel}) \right]. \quad (5.28)$$

No entanto, a análise dessas contribuições se revela bem mais sutil do que a discussão análoga feita no capítulo anterior para o caso 1d. Como podemos facilmente verificar, $g_{1R}(p_{\parallel}, k_{\parallel}, p_{\parallel}) - 2g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel})$ não é uma quantidade invariante do GR no caso presente. Além disso, as contribuições divergentes associadas a $\Delta g_{1R}(p_{\parallel}, k_{\parallel}, p_{\parallel})$ e $\Delta g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel})$

não se cancelam nesse caso. De fato, pode-se demonstrar que esses termos implicariam que o parâmetro k_F associado à SF do modelo se transladaria para o infinito no limite de baixa energia, o que, por sua vez, contradiz a nossa hipótese inicial de que a SF é definida sempre como um ponto fixo ou um ponto de criticalidade da transformação. Portanto, o que devemos fazer é um ajuste fino no parâmetro k_F de tal forma que ele sempre permaneça crítico (ou seja, constante) ao longo de toda a transformação do GR. Fazendo isso, as contribuições relacionadas aos termos $\Sigma^{(1)}$ e $\Sigma_{contratermos}$ não influem na transformação do GR e podem, dessa maneira, ser desprezadas do cálculo. É interessante notar aqui que esse procedimento que acabamos de descrever possui uma analogia bastante forte com a teoria de Landau-Ginzburg-Wilson no qual o parâmetro de massa que define a distância do modelo ao ponto crítico tem de ser sempre ajustado para zero de tal forma que o sistema se encontre sempre em um estado de criticalidade na teoria.

Agora, vamos passar para análise das contribuições no sistema representadas pelo termo $\Sigma^{(2)}$. Desse cálculo, obtemos que

$$\begin{aligned}
 -i\Sigma^{(2)}(p_0, p_\perp, p_\parallel; \omega) &= \frac{i}{64\pi^4 v_F^2} (p_0 - v_F(p_\perp - k_F)) \int_{\mathcal{D}_4} dk_\parallel dq_\parallel \left[2g_{1R}(-k_\parallel + p_\parallel + q_\parallel, k_\parallel, q_\parallel) \right. \\
 &\times g_{1R}(p_\parallel, q_\parallel, k_\parallel) + 2g_{2R}(p_\parallel, q_\parallel, -k_\parallel + p_\parallel + q_\parallel) g_{2R}(k_\parallel, -k_\parallel + p_\parallel + q_\parallel, q_\parallel) - g_{1R}(p_\parallel, q_\parallel, k_\parallel) \\
 &\times g_{2R}(k_\parallel, -k_\parallel + p_\parallel + q_\parallel, q_\parallel) - g_{2R}(p_\parallel, q_\parallel, -k_\parallel + p_\parallel + q_\parallel) g_{1R}(k_\parallel, -k_\parallel + p_\parallel + q_\parallel, p_\parallel) \left. \right] \\
 &\times \left[\ln \left(\frac{\Omega - v_F(p_\perp - k_F) - p_0 - i\delta}{v_F(p_\perp - k_F) - p_0 - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{\Omega - v_F(p_\perp - k_F) + p_0 - i\delta}{v_F(p_\perp - k_F) + p_0 - i\delta} \right) \right], \quad (5.29)
 \end{aligned}$$

onde o domínio de integração \mathcal{D}_4 está dado no Apêndice B desta tese. Nessa expressão, podemos observar que, para $p_\perp = k_F$ e $p_0 \rightarrow 0$, $\Sigma^{(2)}$ vai naturalmente para zero. Dessa forma, não existem também aqui divergências no limite de baixa energia na auto-energia desse sistema. Apesar disso, sua derivada em relação a p_0 , ou seja, $(\partial\Sigma^{(2)}/\partial p_0)|_{p_0 \rightarrow 0}$ não é bem definida. Conseqüentemente, essa função não é analítica e, por essa razão, precisamos remover essa não-analiticidade do modelo. Como no caso 1d, para fazer isso, devemos reescrever os campos fermônicos “nus” da teoria, ou seja, $\psi_{\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t)$ $\psi_{\sigma(a)}(\mathbf{k}, t)$,

em termos dos campos apropriadamente renormalizados $\psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t)$ e $\psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t)$. Logo,

$$\psi_{\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) = \psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) + \Delta\psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) \equiv Z^{1/2}(k_{\parallel})\psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t), \quad (5.30)$$

$$\psi_{\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) = \psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) + \Delta\psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) \equiv Z^{1/2}(k_{\parallel})\psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t), \quad (5.31)$$

onde $\Delta\psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t)$ e $\Delta\psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t)$ são os contratermos necessários para removermos a não-analiticidade discutida acima. Esses contratermos podem ser usados para definir o peso da quasipartícula $Z(k_{\parallel})$. Diferentemente do caso 1d, esse fator multiplicativo no caso presente será uma função do momento paralelo, uma vez que, como vimos, essa dependência desempenha um papel fundamental na descrição da física de baixa energia desse sistema. Além disso, como já sabemos, esse fator representa uma medida da coerência das excitações do tipo quasipartículas fermiônicas no sistema. Se $Z(k_{\parallel})$ for zero para algum momento paralelo k_{\parallel} no limite de baixa energia do sistema, isso implicará que o sistema não apresenta excitações do tipo quasipartículas fermiônicas sem “gap” nessa direção da SF do modelo.

De maneira análoga ao procedimento descrito no capítulo anterior no caso 1d, se incluirmos a renormalização dos campos nessa teoria 2d, as relações entre os acoplamentos “nus” do sistema e os acoplamentos correspondentes renormalizados se generalizarão da seguinte maneira

$$g_1 = \left[\prod_{i=1}^4 Z^{-1/2}(p_{i\parallel}) \right] \left(g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) + \Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \right), \quad (5.32)$$

$$g_2 = \left[\prod_{i=1}^4 Z^{-1/2}(p_{i\parallel}) \right] \left(g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) + \Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \right). \quad (5.33)$$

Fazendo essas substituições, a Lagrangiana renormalizada associada ao sistema fica, finalmente, da seguinte forma

$$L = L_0 + L_{int}, \quad (5.34)$$

onde a Lagrangiana não-interagente L_0 se torna

$$L_0 = \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} \psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) \left(i\partial_t - \xi_{\mathbf{k}}^{(a)} \right) \psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t), \quad (5.35)$$

e a Lagrangiana de interação L_{int} , por sua vez, fica

$$\begin{aligned} L_{int} &= \sum_{\substack{\mathbf{k}, \sigma \\ (a=\pm)}} \Delta Z(k_{\parallel}) \psi_{R\sigma(a)}^\dagger(\mathbf{k}, t) \left(i\partial_t - \xi_{\mathbf{k}}^{(a)} \right) \psi_{R\sigma(a)}(\mathbf{k}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma\sigma'}} g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma\sigma'}} g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{p}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma\sigma'}} \Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(+)\sigma'}(\mathbf{p}, t) \psi_{(-)\sigma}(\mathbf{q}, t) \\ &- \frac{1}{V} \sum_{\substack{\mathbf{p}, \mathbf{q}, \mathbf{k} \\ \sigma\sigma'}} \Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \psi_{(+)\sigma}^\dagger(\mathbf{p} + \mathbf{q} - \mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}^\dagger(\mathbf{k}, t) \psi_{(-)\sigma'}(\mathbf{q}, t) \psi_{(+)\sigma}(\mathbf{p}, t), \end{aligned} \quad (5.36)$$

onde, obviamente, $\Delta Z(k_{\parallel}) = Z(k_{\parallel}) - 1$.

Utilizando essa Lagrangiana renormalizada, vamos passar agora para o cálculo perturbativo até 2 loops do inverso da função de Green $G^{-1}(p)$, ou seja, a função $\Gamma^{(2)}(p)$ da teoria no jargão de teoria de campos. Assim, como

$$\Gamma^{(2)}(p) = [G^{(0)}(p)]^{-1} - \Sigma(p), \quad (5.37)$$

temos que

$$\begin{aligned} \Gamma^{(2)}(p) &= [p_0 - v_F(p_{\perp} - k_F)] \left\{ 1 + \Delta Z(p_{\parallel}) + \frac{1}{64\pi^4 v_F^2} \int_{\mathcal{D}_4} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[2g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, k_{\parallel}, q_{\parallel}) \right. \right. \\ &\times g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) + 2g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \\ &\times g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, p_{\parallel}) \left. \right] \\ &\times \left[\ln \left(\frac{\Omega - v_F(p_{\perp} - k_F) - p_0 - i\delta}{v_F(p_{\perp} - k_F) - p_0 - i\delta} \right) + \ln \left(\frac{\Omega - v_F(p_{\perp} - k_F) + p_0 - i\delta}{v_F(p_{\perp} - k_F) + p_0 - i\delta} \right) \right] \left. \right\}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Para calcular ΔZ , precisamos estabelecer agora uma condição de renormalização para o inverso da função de Green $\Gamma^{(2)}(p)$. Vamos supor que essa quantidade satisfaz a seguinte condição

$$\Re\Gamma^{(2)}(p_0 = \omega, p_{\parallel}, p_{\perp} = k_F) = \omega, \quad (5.39)$$

o que significa que se considerarmos o limite de baixa energia do sistema, ou seja $\omega \rightarrow 0$, a função de Green correspondente terá um pólo em toda a superfície de Fermi 2d do modelo. Dessa maneira, obtemos

$$\begin{aligned} \Delta Z(p_{\parallel}; \omega) = & -\frac{1}{32\pi^4 v_F^2} \int_{\mathcal{D}_4} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[2g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, k_{\parallel}, q_{\parallel})g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \right. \\ & + 2g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel})g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \\ & \times g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel})g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, p_{\parallel}) \left. \right] \\ & \times \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right), \end{aligned} \quad (5.40)$$

ou, escrevendo em termos do peso da quasipartícula Z , temos

$$\begin{aligned} Z(p_{\parallel}; \omega) = & 1 - \frac{1}{32\pi^4 v_F^2} \int_{\mathcal{D}_4} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[2g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, k_{\parallel}, q_{\parallel})g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \right. \\ & + 2g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel})g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \\ & \times g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel})g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, p_{\parallel}) \left. \right] \\ & \times \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right). \end{aligned} \quad (5.41)$$

Seguindo o mesmo procedimento explicado no capítulo anterior, vamos derivar agora uma equação do grupo de renormalização que descreve como o fator Z varia quando nos aproximamos do limite de baixa energia do sistema. Dessa maneira, temos

$$\omega \frac{d \ln Z(p_{\parallel}; \omega)}{d\omega} = \gamma(p_{\parallel}), \quad (5.42)$$

onde a dimensão anômala $\gamma(p_{\parallel})$ é dada por

$$\begin{aligned} \gamma(p_{\parallel}) = & \frac{1}{32\pi^4 v_F^2} \int_{\mathcal{D}_4} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[2g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, k_{\parallel}, q_{\parallel}) g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \right. \\ & + 2g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \\ & \left. \times g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, p_{\parallel}) \right]. \end{aligned} \quad (5.43)$$

Essa equação do GR precisa ser resolvida juntamente com as equações do GR para os acoplamentos do sistema. Dessa maneira, essa equação também não pode ser resolvida analiticamente. Por conseguinte, temos que recorrer a métodos numéricos para resolvê-la. Vamos discutir mais detalhadamente a nossa abordagem numérica no próximo capítulo. No presente capítulo, como já dissemos anteriormente, vamos nos limitar apenas a discussão sobre a implementação analítica desse problema.

Se substituirmos a Eq. (5.41) nas Eqs. (5.32) e (5.33), podemos constatar que as correções devido à auto-energia do sistema introduzem, naturalmente, correções de terceira ordem em nossa teoria de perturbação. Portanto, para que o cálculo perturbativo até essa ordem na teoria seja consistente, precisamos incluir, agora, os efeitos de terceira ordem que aparecem na função vértice irreduzível de quatro pontos $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3)$. É isso que vamos fazer na próxima seção.

5.5 O grupo de renormalização até 2 loops

Nesta seção, vamos derivar as equações do grupo de renormalização até 2 loops para as constantes de acoplamento efetivas do sistema 2d. Para isso, vamos considerar, agora, as contribuições de terceira ordem (ou de 2 loops) associadas ao cálculo da função vértice $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3)$. De maneira análoga à nossa discussão para o caso 1d, nessa ordem de perturbação, um número muito maior de diagramas de Feynman singulares aparecem na

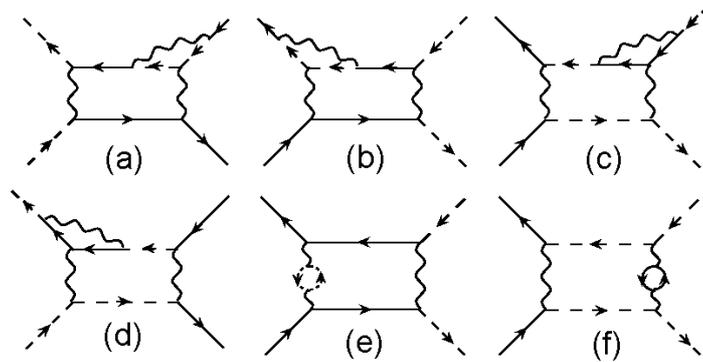


Figura 5.8: Os diagramas de Feynman de 2 loops relevantes para o cálculo da equação do GR para a interação efetiva do tipo espalhamento “para trás” até essa ordem de perturbação.

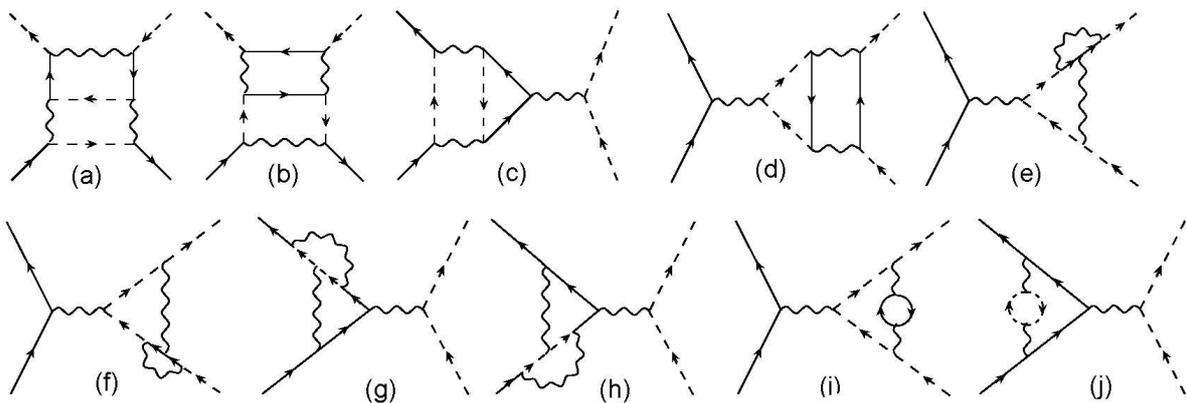


Figura 5.9: Os diagramas de Feynman de 2 loops relevantes para o cálculo da equação do GR para a interação efetiva do tipo espalhamento frontal até essa ordem de perturbação.

teoria se comparado com o cálculo perturbativo até 1 loop. Dessa maneira, vamos seguir a mesma estratégia adotada no capítulo anterior e considerar apenas as contribuições que serão efetivamente importantes para a derivação das equações do GR.

De fato, como vimos em 1d, no cálculo até essa ordem, aparecem tanto diagramas que divergem com $\ln(\Omega/p_0)$ no limite de baixa energia do sistema quanto diagramas que divergem com $\ln^2(\Omega/p_0)$ nesse mesmo regime. Por razões que ficarão mais claras no Apêndice A desta tese, apenas as contribuições de $\ln(\Omega/p_0)$ contribuem efetivamente para as equações do GR associadas ao sistema. Esses diagramas, por sua vez, se encontram mostrados na Fig. 5.8 para a função vértice no canal de espalhamento “para trás” (ou canal g_1) e na Fig. 5.9 para a mesma função no canal de espalhamento frontal (ou canal g_2).

Como vimos anteriormente, para renormalizarmos essa teoria tivemos que estabelecer prescrições para a função vértice $\Gamma^{(4)}(p_1, p_2, p_3)$, seja no canal g_1 (Eq. (5.19)) ou no canal g_2 (Eq. (5.22)). Para que a teoria de perturbação até 2 loops continue satisfazendo essas condições, temos que redefinir, apropriadamente, os contratermos do modelo de tal forma que eles cancelem essas novas contribuições singulares que aparecem nessa ordem. Fazendo isso, os contratermos da teoria, esquematicamente, ficam

$$\begin{aligned} \Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) &= \Delta g_{1R}^{1-loop} + \Delta g_{1R(a)}^{2-loop} + \Delta g_{1R(b)}^{2-loop} + \Delta g_{1R(c)}^{2-loop} + \Delta g_{1R(d)}^{2-loop} \\ &+ \Delta g_{1R(e)}^{2-loop} + \Delta g_{1R(f)}^{2-loop}, \end{aligned} \quad (5.44)$$

e

$$\begin{aligned} \Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) &= \Delta g_{2R}^{1-loop} + \Delta g_{2R(a)}^{2-loop} + \Delta g_{2R(b)}^{2-loop} + \Delta g_{2R(c)}^{2-loop} + \Delta g_{2R(d)}^{2-loop} \\ &+ \Delta g_{2R(e)}^{2-loop} + \Delta g_{2R(f)}^{2-loop} + \Delta g_{2R(g)}^{2-loop} + \Delta g_{2R(h)}^{2-loop} + \Delta g_{2R(i)}^{2-loop} \\ &+ \Delta g_{2R(j)}^{2-loop}, \end{aligned} \quad (5.45)$$

onde Δg_{1R}^{1-loop} e Δg_{1R}^{1-loop} correspondem às contribuições de 1 loop calculadas anteriormente

e $\Delta g_{1R(x)}^{2-loop}$ e $\Delta g_{1R(y)}^{2-loop}$ correspondem, por sua vez, às contribuições de 2 loops associadas aos diagramas $x = a\dots f$ e $y = a\dots j$ mostrados, respectivamente, nas Figs. 5.8 e 5.9.

Dessa forma, uma vez calculados esses contratermos, podemos proceder agora para o cálculo das equações do GR para os acoplamentos efetivos do sistema até 2 loops. Seguindo o mesmo procedimento já explicado anteriormente, essas equações ficam finalmente

$$\begin{aligned}
 \omega \frac{dg_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega)}{d\omega} &= \frac{1}{4\pi^2 v_F} \left\{ \int_{\mathcal{D}_1} dk_{\parallel} \left[g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, k_{\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \right. \right. \\
 &+ g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \left. \right] + \int_{\mathcal{D}_2} dk_{\parallel} \left[2g_{1R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \right. \\
 &\times g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, k_{\parallel}) - g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}) \\
 &\left. - g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel} - p_{3\parallel} + k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \right] \left. \right\} + \frac{1}{32\pi^4 v_F^2} \left\{ \int_{\mathcal{D}_8} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \right. \\
 &\left[g_{1R}(k_{\parallel} + p_{1\parallel} - p_{3\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) g_{1R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{3\parallel}, k_{\parallel} + p_{1\parallel} - p_{3\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{3\parallel}) \right. \\
 &+ g_{1R}(k_{\parallel} + p_{1\parallel} - p_{3\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{3\parallel}, q_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, p_{3\parallel}) \\
 &\left. - 2g_{1R}(k_{\parallel} + p_{1\parallel} - p_{3\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{3\parallel}, q_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{3\parallel}) \right] \\
 &+ \int_{\mathcal{D}_7} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[g_{2R}(q_{\parallel}, k_{\parallel}, p_{4\parallel}) g_{1R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{1\parallel}, p_{3\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{4\parallel}, p_{2\parallel}, q_{\parallel}) \right. \\
 &+ g_{1R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{1\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{4\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{1\parallel}) g_{1R}(q_{\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{4\parallel}) \\
 &\left. - 2g_{2R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, p_{4\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{4\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{1\parallel}) g_{1R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{1\parallel}, p_{3\parallel}) \right] \left. \right\} \\
 &+ \frac{1}{2} g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \sum_{i=1}^4 \gamma(p_{i\parallel}), \tag{5.46}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \omega \frac{dg_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega)}{d\omega} &= \frac{1}{4\pi^2 v_F} \left\{ \int_{\mathcal{D}_1} dk_{\parallel} \left[g_{2R}(-k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, k_{\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \right. \right. \\
 &+ g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{1\parallel} + p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \left. \right] - \int_{\mathcal{D}_3} dk_{\parallel} g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{3\parallel} - p_{1\parallel} + k_{\parallel}, p_{3\parallel}) \\
 &g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel} - p_{1\parallel} + k_{\parallel}) \left. \right\} + \frac{1}{32\pi^4 v_F^2} \left\{ \int_{\mathcal{D}_5} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[g_{1R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{1\parallel}, k_{\parallel}) \right. \right. \\
 &\times g_{1R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}, q_{\parallel}, p_{4\parallel}) - 2g_{1R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{1\parallel}, k_{\parallel}) \\
 &\left. \times g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}, q_{\parallel}, p_{4\parallel}) + g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}, q_{\parallel}, p_{4\parallel}) \right. \\
 &\left. \left. \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times g_{2R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{1\parallel}, q_{\parallel}) + g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})g_{2R}(k_{\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{1\parallel}) \\
 & \times g_{1R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{1\parallel}, k_{\parallel}) - 2g_{2R}(k_{\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})g_{2R}(k_{\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{1\parallel}) \\
 & \times g_{2R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{1\parallel}, q_{\parallel}) \Big] + \int_{\mathcal{D}_6} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \Big[g_{1R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel}, p_{4\parallel})g_{1R}(q_{\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{2\parallel}) \\
 & \times g_{1R}(k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{2\parallel}, p_{2\parallel}, q_{\parallel}) - 2g_{2R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel})g_{1R}(q_{\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{2\parallel}) \\
 & \times g_{1R}(k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{2\parallel}, p_{2\parallel}, q_{\parallel}) + g_{2R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel})g_{1R}(q_{\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{2\parallel}) \\
 & \times g_{2R}(k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{2\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) + g_{2R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel})g_{1R}(k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{2\parallel}, p_{2\parallel}, q_{\parallel}) \\
 & \times g_{2R}(q_{\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) - 2g_{2R}(p_{1\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel})g_{2R}(k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{2\parallel}, p_{2\parallel}, k_{\parallel}) \\
 & \times g_{2R}(q_{\parallel}, k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \Big] \Big\} + \frac{1}{2}g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \sum_{i=1}^4 \gamma(p_{i\parallel}), \tag{5.47}
 \end{aligned}$$

onde, mais uma vez, podemos ver que essas equações são simplesmente impossíveis de ser tratadas por meio de métodos analíticos. Da mesma maneira, vamos postergar a discussão de sua resolução para o próximo capítulo.

5.6 Cálculo das susceptibilidades de carga e spin uniformes

Nesta seção, vamos analisar o comportamento da compressibilidade de carga e da susceptibilidade de spin uniforme desse sistema 2d do ponto de vista do grupo de renormalização. Como vimos anteriormente, essas quantidades são centrais para a determinação da natureza das excitações elementares presentes nesse sistema.

Analogamente ao caso 1d, para obtermos essas grandezas, precisamos, em primeiro lugar, calcular a função resposta linear gerada devido a um campo externo infinitesimal uniforme que acopla com o operador número de ocupação. Dessa maneira, temos que adicionar à Lagrangiana nua (*i.e.*, Eq. (5.5)) o seguinte termo

$$-h_{\text{externo}} \sum_{\mathbf{p}, a=\pm} \mathcal{T}_{\alpha} \psi_{(a)\alpha}^{\dagger}(\mathbf{p}, t) \psi_{(a)\alpha}(\mathbf{p}, t), \tag{5.48}$$

termos da sua grandeza renormalizada $\mathcal{T}_\alpha^R(p_\parallel)$. Assim, obtemos a seguinte expressão

$$\mathcal{T}_\alpha = Z^{-1}(p_\parallel) \left[\mathcal{T}_\alpha^R(p_\parallel) + \Delta\mathcal{T}_\alpha^R(p_\parallel) \right], \quad (5.49)$$

onde $\Delta\mathcal{T}_\alpha^R(p_\parallel)$ é o contratermo necessário para tornar essa teoria de perturbação bem definida. Vamos, agora, escolher a seguinte condição de renormalização para a função resposta renormalizada

$$\Gamma^{(2,1)}(p_0 = \omega, p_\parallel, p_\perp = k_F, \mathbf{q} \approx 0) = -i\mathcal{T}_\alpha^R(p_\parallel; \omega), \quad (5.50)$$

onde ω é a escala em que estamos definindo todas as grandezas renormalizadas do problema. Usando essa condição, o contratermo $\Delta\mathcal{T}_\alpha^R$ da teoria fica

$$\begin{aligned} \Delta\mathcal{T}_\alpha^R(p_\parallel; \omega) = & \frac{1}{32\pi^4 v_F^2} \int_{\mathcal{D}_9} dk_\parallel dq_\parallel \left\{ \left[g_{1R}(p_\parallel, -k_\parallel + q_\parallel + p_\parallel, q_\parallel) g_{2R}(q_\parallel, k_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel) \right. \right. \\ & + g_{2R}(p_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel, k_\parallel) g_{1R}(q_\parallel, k_\parallel, p_\parallel) + g_{1R}(p_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel, k_\parallel) g_{2R}(k_\parallel, q_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel) \\ & + g_{2R}(p_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel, q_\parallel) g_{1R}(k_\parallel, q_\parallel, p_\parallel) - 2g_{1R}(p_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel, k_\parallel) g_{1R}(k_\parallel, q_\parallel, p_\parallel) \\ & \left. - 2g_{2R}(p_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel, k_\parallel) g_{2R}(q_\parallel, k_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel) \right] \mathcal{T}_\alpha^R(q_\parallel) + \left[g_{1R}(p_\parallel, q_\parallel, -k_\parallel + q_\parallel + p_\parallel) \right. \\ & \times g_{1R}(p_\parallel, q_\parallel, -k_\parallel + q_\parallel + p_\parallel) + g_{2R}(p_\parallel, q_\parallel, -k_\parallel + q_\parallel + p_\parallel) g_{2R}(k_\parallel, -k_\parallel + q_\parallel + p_\parallel, q_\parallel) \\ & \left. - g_{1R}(p_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel, q_\parallel) g_{1R}(q_\parallel, k_\parallel, p_\parallel) - g_{2R}(p_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel, q_\parallel) g_{2R}(k_\parallel, q_\parallel, k_\parallel + q_\parallel - p_\parallel) \right] \\ & \left. \times \sum_\sigma \mathcal{T}_\sigma^R(q_\parallel) \right\} \ln \left(\frac{\Omega}{\omega} \right). \end{aligned} \quad (5.51)$$

Agora, estamos prontos para definir os dois diferentes tipos de função resposta uniformes que aparecem da simetrização ou anti-simetrização do objeto \mathcal{T}_α^R em relação à projeção de spin α , ou seja,

$$\mathcal{T}_{Carga}^R(p_\parallel; \omega) = \mathcal{T}_\uparrow^R(p_\parallel; \omega) + \mathcal{T}_\downarrow^R(p_\parallel; \omega), \quad (5.52)$$

$$\mathcal{T}_{Spin}^R(p_\parallel; \omega) = \mathcal{T}_\uparrow^R(p_\parallel; \omega) - \mathcal{T}_\downarrow^R(p_\parallel; \omega), \quad (5.53)$$

onde \mathcal{T}_{Carga}^R e \mathcal{T}_{Spin}^R são, respectivamente, as funções respostas uniformes associadas à

carga e ao spin no sistema. Assim, usando essas equações e a Eq. (5.51) e seguindo o mesmo procedimento explicado anteriormente, podemos derivar as seguintes equações do GR até 2 loops para essas quantidades, ou seja,

$$\begin{aligned}
 \omega \frac{d}{d\omega} \mathcal{T}_{Carga}^R(p_{\parallel}; \omega) = & \frac{1}{32\pi^4 v_F^2} \left\{ \int_{\mathcal{D}_9} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[g_{1R}(p_{\parallel}, -k_{\parallel} + q_{\parallel} + p_{\parallel}, q_{\parallel}) g_{2R}(q_{\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}) \right. \right. \\
 & + g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{1R}(q_{\parallel}, k_{\parallel}, p_{\parallel}) + g_{1R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}) \\
 & + g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, q_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, p_{\parallel}) - 2g_{1R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, p_{\parallel}) \\
 & - 2g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(q_{\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}) + 2g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + q_{\parallel} + p_{\parallel}) \\
 & \times g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + q_{\parallel} + p_{\parallel}) + 2g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + q_{\parallel} + p_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + q_{\parallel} + p_{\parallel}, q_{\parallel}) \\
 & \left. - 2g_{1R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, q_{\parallel}) g_{1R}(q_{\parallel}, k_{\parallel}, p_{\parallel}) - 2g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, q_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}) \right] \\
 & \times \mathcal{T}_{Carga}^R(q_{\parallel}) + \int_{\mathcal{D}_4} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[2g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, k_{\parallel}, q_{\parallel}) g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \right. \\
 & + 2g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \\
 & \left. \times g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, p_{\parallel}) \right] \\
 & \left. \times \mathcal{T}_{Carga}^R(p_{\parallel}) \right\}, \tag{5.54}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \omega \frac{d}{d\omega} \mathcal{T}_{Spin}^R(p_{\parallel}; \omega) = & \frac{1}{32\pi^4 v_F^2} \left\{ \int_{\mathcal{D}_9} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[g_{1R}(p_{\parallel}, -k_{\parallel} + q_{\parallel} + p_{\parallel}, q_{\parallel}) g_{2R}(q_{\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}) \right. \right. \\
 & + g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{1R}(q_{\parallel}, k_{\parallel}, p_{\parallel}) + g_{1R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}) \\
 & + g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, q_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, p_{\parallel}) - 2g_{1R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, q_{\parallel}, p_{\parallel}) \\
 & \left. - 2g_{2R}(p_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(q_{\parallel}, k_{\parallel}, k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel}) \right] \mathcal{T}_{Spin}^R(q_{\parallel}) + \int_{\mathcal{D}_4} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[2g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) \right. \\
 & \times g_{1R}(-k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, k_{\parallel}, q_{\parallel}) + 2g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) \\
 & \left. - g_{1R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, k_{\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, q_{\parallel}) - g_{2R}(p_{\parallel}, q_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}) g_{1R}(k_{\parallel}, -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel}, p_{\parallel}) \right] \\
 & \left. \times \mathcal{T}_{Spin}^R(p_{\parallel}) \right\}, \tag{5.55}
 \end{aligned}$$

onde, mais uma vez, podemos ver que essas equações são extremamente complicadas de se resolver analiticamente.

$$i \chi_{Carga(Spin)}^R(\omega) = \text{Diagrama de Feynman}$$

Figura 5.11: O diagrama de Feynman associado às susceptibilidades uniformes de carga e spin no sistema.

Como vimos anteriormente no caso 1d, uma vez que a função resposta é obtida podemos proceder para o cálculo das susceptibilidades uniformes associadas. Elas são dadas pelo diagrama da Fig. 5.11. Assim, elas ficam

$$\chi_{Carga}^R(\omega) = \frac{1}{4\pi^2 v_F} \int_{-\Delta}^{\Delta} dp_{\parallel} [\mathcal{T}_{Carga}^R(p_{\parallel}, \omega)]^2, \quad (5.56)$$

$$\chi_{Spin}^R(\omega) = \frac{1}{4\pi^2 v_F} \int_{-\Delta}^{\Delta} dp_{\parallel} [\mathcal{T}_{Spin}^R(p_{\parallel}, \omega)]^2. \quad (5.57)$$

Como podemos ver, essas quantidades não têm equações do GR associadas. Elas dependem das funções respostas correspondentes $\mathcal{T}_{Carga(Spin)}^R(p_{\parallel}, \omega)$ que, por sua vez, possuem equações do GR. Vamos analisar numericamente o fluxo de todas essas quantidades no limite de baixa energia do sistema no próximo capítulo desta tese.

Toda a discussão apresentada neste capítulo encontra-se publicada nos nossos artigos [65, 66].

Capítulo 6

Resultados Numéricos

No capítulo anterior, constatamos que todas as equações do GR associadas ao nosso modelo 2d são equações íntegro-diferenciais bastante complicadas e que estão, além disso, acopladas entre si. Por essa razão, essas equações não podem ser resolvidas apenas por meios analíticos. De fato, para extrairmos alguma informação sobre a física de baixa energia desse sistema, temos que recorrer a algum método numérico para resolver esse problema. É justamente isso que vamos fazer neste capítulo.

6.1 A estratégia numérica

Nesta seção, vamos começar a discutir a nossa abordagem numérica que permitirá resolver as equações íntegro-diferenciais obtidas no capítulo anterior. Como vimos, no nosso modelo 2d, todas as grandezas renormalizadas se tornam funções dos momentos paralelos à SF no limite de baixa energia do sistema. A razão subjacente para isso está diretamente relacionada com o fato de que o processo de renormalização reduz apenas a direção perpendicular à SF, deixando a direção paralela inalterada ao longo desse mesmo processo. Conseqüentemente, as componentes paralelas dos momentos se tornam cruciais para a descrição correta da física de baixa energia desse modelo.

Como todas as grandezas renormalizadas são funções dos momentos paralelos do sistema, para tratá-las do ponto de vista numérico, temos que, obviamente, discretizar a SF 2d contínua em vários pontos. Aqui nesta tese, vamos fazer a escolha de discretizar cada região sem curvatura da SF (ou seja, as regiões definidas por $-\Delta \leq p_{\parallel} \leq \Delta$) em 33 pontos. Dessa maneira, a SF do sistema, como um todo, possuirá 132 pontos. Além disso, é conveniente definir aqui o parâmetro “ l ” que consistirá no passo da transformação do GR. Esse parâmetro está diretamente relacionado com a escala ω do problema da seguinte forma $\omega = \Omega \exp(-l)$, onde, obviamente, Ω é o “cutoff” ultravioleta associado à energia definido anteriormente. Em função dessa escolha do número de pontos para a discretização da SF, é fácil constatar que teremos um limite mínimo de energia (ou um l máximo) para acessarmos a física de baixa energia desse sistema. Esse limite é dado por $l_{max} \approx 2,8$. Isso está relacionado com o fato de que a distância da escala de observação à SF nunca poder ser menor que a distância mínima entre pontos, uma vez que, nessa situação, o procedimento de discretização não mais se aplicaria.

A escolha das condições iniciais em $l = 0$ dos acoplamentos “nus” da teoria $g_1 = g_2 = g$ necessários para a resolução das equações íntegro-diferenciais correspondentes é, em princípio, arbitrária. Ela está relacionada com a escolha do regime de interação do modelo microscópico (no nosso caso, do modelo de Hubbard 2d) que queremos investigar. Aqui, vamos definir o parâmetro de interação local U como sendo $U = (g/\pi v_F)t$, onde v_F é, obviamente, a velocidade de Fermi do sistema e t , como vimos anteriormente, é a amplitude de probabilidade de tunelamento das partículas que constituem o sistema para os sítios vizinhos. Além disso, como veremos a seguir, a natureza do estado fundamental e das excitações elementares de baixa energia desse modelo será fundamentalmente influenciada por essa escolha da condição inicial.

Ao longo deste capítulo, vamos analisar o fluxo do GR dos acoplamentos renormalizados do sistema quando nos aproximamos do limite de baixa energia do modelo. Para isso, vamos utilizar o método numérico de Runge-Kutta de quarta ordem para resolver

auto-consistentemente todas as equações do GR correspondentes. Essa rotina foi implementada em linguagem Fortran 77 e pode ser, basicamente, encontrada em [90].

Em primeiro lugar, vamos discutir a situação do modelo de Hubbard 2d definido com um acoplamento que pode ser classificado como fraco, ou seja, em que o parâmetro de interação U é menor que a largura da banda do sistema dada por $W = 8t$. Nesse caso, vamos escolher $U = 4t$ (ou, equivalentemente, $U/W = 0,5$). Vamos discutir os resultados numéricos para essa situação utilizando a abordagem do GR até 1 loop e, em seguida, utilizando também a abordagem do GR até 2 loops. Nessa última análise, vamos discutir, ainda, o fluxo do GR associado ao peso da quasipartícula $Z(p_{\parallel})$ do sistema.

Posteriormente, vamos repetir toda essa discussão para o caso do modelo de Hubbard 2d definido com um acoplamento dito intermediário que, no nosso caso, escolheremos como sendo $U = 8t$ (ou, equivalentemente, $U/W = 1$). Esse regime de interação é extremamente interessante do ponto de vista físico, basicamente, por duas razões. A primeira consiste no fato de que, como vimos anteriormente, esse caso é notoriamente difícil de ser resolvido por meios analíticos, uma vez que ele claramente não apresenta nenhum parâmetro pequeno no problema que possa ser expandido perturbativamente. A segunda razão, que também já foi discutida, é que esse regime de interação está diretamente relacionado ao problema da supercondutividade de alta temperatura que se manifesta nos cupratos bidimensionais. Dessa maneira, vamos investigar a natureza do estado fundamental desse modelo que é levemente dopado com buracos e que, por essa razão, pode conter, possivelmente, alguma informação que permitirá a explicação teórica da importante fase de pseudogap exibida nesses sistemas.

Por último, para completarmos a nossa discussão a respeito da natureza das excitações elementares presentes nesses problemas, vamos analisar o fluxo do GR das susceptibilidades uniformes associadas à carga e ao spin para vários regimes de acoplamento. Nesse caso, o nosso objetivo será o de investigar a possibilidade de uma eventual transição de fase quântica no problema à medida em que variamos o parâmetro de interação U do modelo.

6.2 O modelo de Hubbard 2d no regime de fraco acoplamento

6.2.1 O fluxo de renormalização até 1 loop

Aqui, vamos analisar o fluxo do GR até 1 loop das funções de acoplamento renormalizadas $g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ e $g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ quando nos aproximamos do limite de baixa energia do modelo de Hubbard 2d definido, inicialmente, com um parâmetro de interação $U = 4t$. Como já chamamos a atenção anteriormente, nesse regime, o termo de energia cinética do modelo domina o termo de interação, uma vez que a largura da banda do sistema W é maior do que o parâmetro U . Por essa razão, do ponto de vista físico, é natural esperar que a tendência do elétron de se deslocalizar, ou seja, do sistema como um todo se comportar como um metal, domine a sua tendência de localização que, por sua vez, está relacionada com um comportamento tipicamente isolante no sistema.

Resolvendo auto-consistentemente as Eqs. (5.24) e (5.25) utilizando o método numérico explicado anteriormente, obtemos o fluxo do GR para os acoplamentos exibido na Fig. 6.1 para algumas escolhas dos momentos paralelos no sistema. Nessa figura e em todas as outras que se seguirão, vamos definir, por conveniência, o parâmetro \bar{g}_i como sendo $\bar{g}_i = g_i/\pi v_F$ para $i = 1, 2$. Dessa maneira, podemos observar, claramente, que apesar dos acoplamentos no modelo de Hubbard 2d serem inicialmente definidos iguais a uma constante, eles, de fato, adquirem uma forte dependência com os momentos paralelos quando nos aproximamos do limite de baixa energia do sistema. Além disso, como podemos facilmente ver, esses acoplamentos não se aproximam assintoticamente de nenhum ponto fixo da transformação do GR nessa ordem de perturbação. Ao invés disso, eles divergem rapidamente quando nos aproximamos de uma escala de energia que vamos definir como sendo $\omega_c^{U=4t}$ (que corresponderá ao passo $l_c^{U=4t}$). Esse cenário está de acordo, qualitativamente,

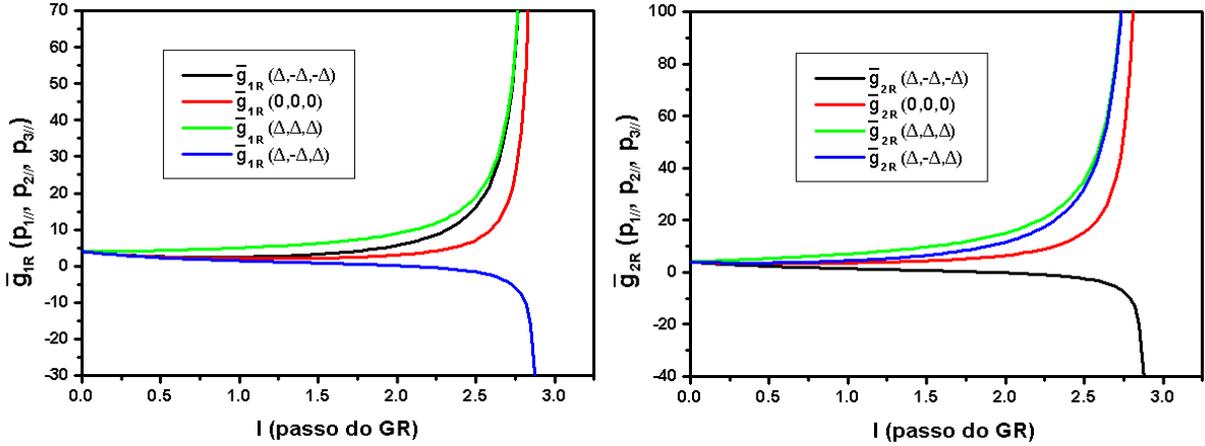


Figura 6.1: Fluxo de renormalização até 1 loop dos acoplamentos efetivos do modelo de Hubbard 2d no regime de interação fraca dada por $U = 4t$.

com outras abordagens desse problema também baseadas em um cálculo perturbativo de 1 loop como, por exemplo, o método de parquet ou método do GR de Wilson até 1 loop presentes na literatura [36, 51, 52, 53, 56, 57, 59]. Essa singularidade, por sua vez, indica uma instabilidade do sistema, ou seja, uma transição de fase ocorrendo na temperatura crítica dada por $T_c^{U=4t} = \omega_c^{U=4t}$. Esse resultado claramente viola o Teorema de Mermin-Wagner que, por sua vez, assegura que, em sistemas 2d com interações de curto alcance, não se pode existir transições de fase em temperaturas finitas. Essa transição de fase, como veremos adiante, representa um artifício da aproximação de 1 loop, mas não vamos nos preocupar com ela por enquanto.

Vamos analisar agora do ponto de vista físico o que fluxo do GR até 1 loop dos acoplamentos nos informa a respeito da física de baixa energia desse modelo. Como podemos ver, os processos de interação associados a $g_{2R}(\Delta, \Delta, \Delta)$ (ou também $g_{2R}(-\Delta, -\Delta, -\Delta)$) divergem mais rapidamente do que todos os outros e, por essa razão, são as contribuições mais importantes na física de baixa energia desse sistema. Esse processo está intimamente ligado à propriedade de “nesting” da SF 2d e estão relacionados com fortes flutuações antiferromagnéticas (ou, mais precisamente, de ondas de densidade de spin) presentes no sistema. Em função disso, essas correlações são dominantes na dinâmica

de baixa energia do modelo. Isso fica, particularmente, evidente quando calculamos as chamadas susceptibilidades não-uniformes associadas aos vários tipos de parâmetros de ordem no sistema¹. Além disso, como também podemos ver na Fig. 6.1, existem vários outros tipos de processos de interação que competem entre si e induzem, potencialmente, outros tipos de tendência de ordenamento no sistema. De fato, a segunda instabilidade mais importante do sistema consiste na formação de um estado supercondutor do tipo d . Dessa maneira, se reduzirmos a propriedade de “nesting” da SF 2d como, por exemplo, dopando ainda mais o sistema, isso enfraqueceria a primeira instabilidade que, por sua vez, depende crucialmente dessa propriedade e, conseqüentemente, o sistema se tornaria um estado supercondutor do tipo d . Esse resultado estaria, portanto, de acordo qualitativamente com o cenário observado experimentalmente nos cupratos supercondutores de alta temperatura como já explicamos anteriormente.

Por outro lado, como já chamamos a atenção, a abordagem de 1 loop não leva em conta as singularidades que afetam as excitações de uma partícula do sistema. Para isso, temos que ir pelo menos até 2 loops em teoria de perturbação. Por essa razão, torna-se legítimo perguntar se o resultado associado ao cálculo de 1 loop descrito acima mudaria ou não nessa situação. Dito de outra maneira, queremos analisar qual é o efeito da adição de mais flutuações quânticas (ou seja, até 2 loops) no resultado obtido nesta seção até 1 loop. É isso que vamos fazer na seção seguinte.

6.2.2 O fluxo de renormalização até 2 loops

Vamos considerar agora o fluxo do GR até 2 loops das funções de acoplamento renormalizadas $g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ e $g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ no modelo de Hubbard 2d definido inicialmente com $U = 4t$. Assim, resolvendo auto-consistentemente as Eqs. (5.46) e (5.47) utilizando

¹Essas quantidades foram recentemente calculadas pelo nosso grupo utilizando a mesma abordagem explicada ao longo desta tese. No entanto, não vamos discutir a implementação desse cálculo aqui nesta tese. Para ver essa explicação de uma maneira detalhada, o autor refere o leitor para o nosso artigo [91].

o método numérico já explicado anteriormente, obtemos o fluxo do GR exibido na Fig. 6.2 para as mesmas escolhas dos momentos paralelos do caso até 1 loop. Como podemos facilmente constatar, o fluxo se torna bem mais suave no caso presente e a singularidade que antes se manifestava no cenário de 1 loop não mais aparece dentro do intervalo em que podemos confiantemente ir numericamente (ou seja, $l_{max} \leq 2, 8$). Por conseguinte, podemos concluir que a singularidade apontada no caso anterior, de fato, não representa uma divergência real no sistema e, sim, um mero artifício daquela aproximação. Isso, por sua vez, é corrigido no caso de 2 loops. Mesmo assim, como podemos facilmente ver, a ordem relativa de importância dos processos de interação na descrição efetiva do sistema no caso de 2 loops, felizmente, não se altera em comparação com o cálculo anterior. Dessa maneira, as conclusões relativas à dinâmica de baixa energia do sistema aqui são qualitativamente as mesmas discutidas para o caso de 1 loop. Fisicamente, é razoável esperarmos esse resultado para essa situação, uma vez que, em um regime de fraco acoplamento, as correções na teoria devido aos diagramas de 1 loop dominam naturalmente os diagramas correspondentes no caso de 2 loops.

Por outro lado, precisamos caracterizar ainda a natureza do estado de baixa energia do modelo nesse regime de interação. Para analisarmos isso, precisamos considerar, agora, o fluxo de renormalização do peso da quasipartícula $Z(p_{\parallel})$ do sistema quando nos aproximamos do limite de baixa energia. Essa discussão, como já enfatizamos anteriormente, só pode ser feita consistentemente em um cálculo perturbativo até 2 loops ou, então, além dessa ordem de perturbação. Vamos discutir esse fluxo de renormalização na próxima seção.

6.2.3 O fluxo do peso da quasipartícula no sistema

Como derivamos no capítulo anterior, a equação do GR que descreve o fluxo do peso da quasipartícula nesse sistema 2d é dada pela Eq. (5.40). Dessa maneira, temos que

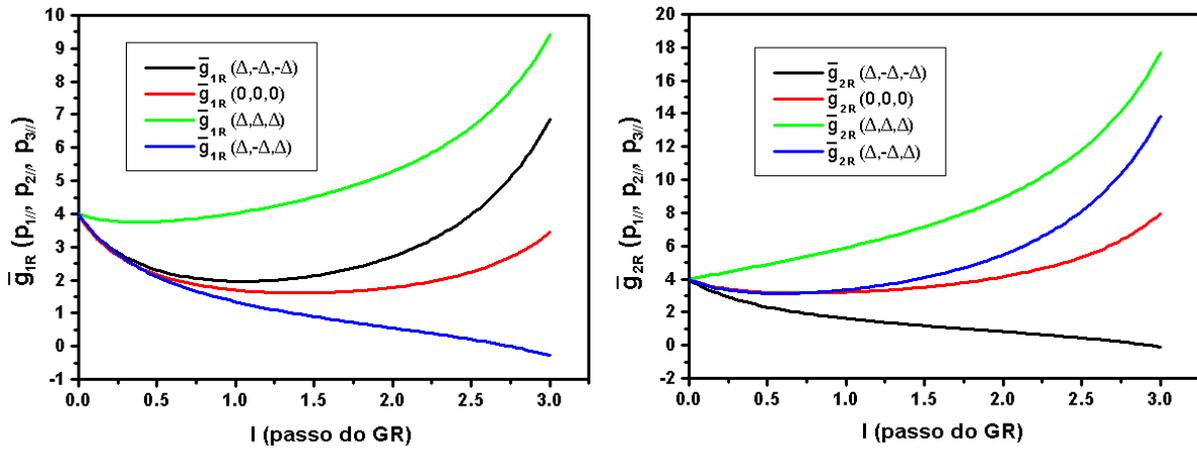


Figura 6.2: Fluxo de renormalização até 2 loops dos acoplamentos efetivos do modelo de Hubbard 2d no regime de interação fraca dada por $U = 4t$.

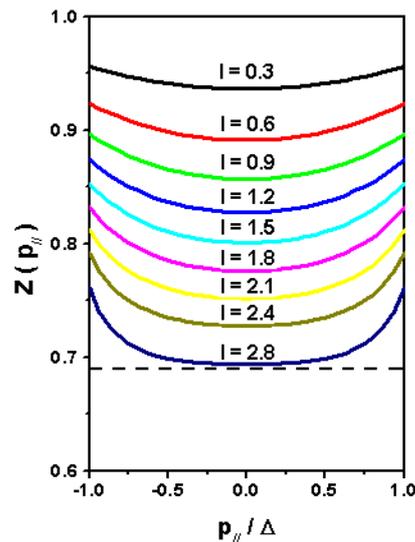


Figura 6.3: Fluxo de renormalização até 2 loops do peso da quasipartícula associada ao modelo de Hubbard 2d no regime de interação fraca dada por $U = 4t$.

resolvê-la conjuntamente com as equações do GR até 2 loops dos acoplamentos do sistema. Além disso, essa equação tem de ser resolvida levando-se em conta o fato de que, na teoria “nua”, esse fator deve satisfazer a seguinte condição inicial, ou seja, $Z(p_{\parallel}; l = 0) = 1$. Ao fazer isso, obtemos numericamente o fluxo de renormalização na descrição de baixa energia desse modelo mostrado na Fig. 6.3. Como podemos ver, o peso da quasipartícula $Z(p_{\parallel})$ se renormaliza razoavelmente devido às interações presentes no sistema. Mesmo assim, até onde podemos ir confiantemente no nosso método numérico (ou seja, $l_{max} \leq 2, 8$), esse fator é finito no limite de baixa energia do sistema. Por conseguinte, podemos associar esse resultado com a existência de excitações elementares do tipo quasipartículas fermiônicas bem definidas na descrição de baixa energia do sistema. Isso significa que a teoria do líquido de Fermi de Landau ou, de maneira equivalente, a teoria de bandas se aplica nesse modelo para o regime de interação considerado. Conseqüentemente, como esse modelo 2d descreve um sistema eletrônico com uma banda quase semi-cheia resultado de uma leve dopagem com buracos, a sua dinâmica de baixa energia será, portanto, de natureza metálica. Esse resultado está de acordo com a nossa expectativa inicial de que o modelo de Hubbard 2d com banda quase semi-cheia e definido com um acoplamento de intensidade fraca deve descrever, naturalmente, um estado metálico.

6.3 O modelo de Hubbard 2d no regime de acoplamento intermediário

6.3.1 O fluxo de renormalização até 1 loop

Vamos passar agora para a discussão do fluxo de renormalização até 1 loop das funções de acoplamento renormalizadas $g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ e $g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ associadas ao modelo de Hubbard 2d definido com um parâmetro de interação de intensidade intermediária.

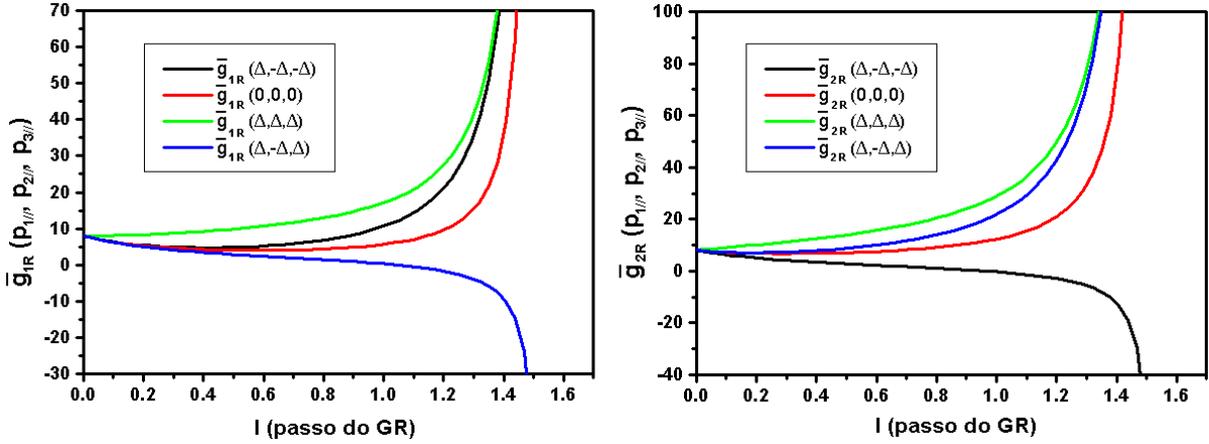


Figura 6.4: Fluxo de renormalização até 1 loop dos acoplamentos efetivos do modelo de Hubbard 2d no regime de interação intermediária dada por $U = 8t$.

Para isso, vamos escolher o parâmetro de interação do problema como sendo $U = 8t$. Como vimos anteriormente, esse regime de interação é notoriamente difícil de ser resolvido por outros métodos analíticos, uma vez que a largura da banda do sistema W é exatamente igual ao parâmetro de interação U . Dessa maneira, nenhum dos termos associados à Hamiltoniana do sistema como a energia cinética e o termo de interação dominam um sobre o outro e, como consequência disso, não existe nenhum parâmetro pequeno óbvio no problema em que se possa expandir perturbativamente. Por essa razão, não podemos inferir, de antemão, qual é a natureza do estado fundamental do modelo nesse caso. Isso será determinado justamente pelo fluxo de renormalização associado à dinâmica efetiva de baixa energia do sistema. Esse fato ilustrará, de maneira evidente, o potencial do método do GR em prover respostas aproximadas para situações físicas nas quais o modelo de Hubbard 2d não pode ser resolvido (exata ou aproximadamente) por meio de outras técnicas.

Resolvendo numericamente as Eqs. (5.24) e (5.25) para essa situação, obtemos o fluxo de renormalização mostrado na Fig. 6.4 para as mesmas escolhas dos momentos paralelos dos casos analisados anteriormente. Nessa figura, podemos constatar que os acoplamentos renormalizados também não se aproximam assintoticamente de nenhum

ponto fixo no limite de baixa energia do sistema. Ao invés disso, de maneira análoga ao fluxo de renormalização correspondente no caso de fraco acoplamento, esses acoplamentos novamente divergem em uma escala de energia que vamos definir agora como sendo $\omega_c^{U=8t}$ (que corresponderá, por sua vez, ao passo $l_c^{U=8t}$). Além disso, essa divergência ocorre agora de maneira bem mais rápida do que a divergência no caso anterior, isto é, $l_c^{U=8t} < l_c^{U=4t}$. Como já discutimos antes, essa singularidade indica uma instabilidade do sistema em relação a uma transição de fase na temperatura crítica dada por $T_c^{U=8t} = \omega_c^{U=8t}$. Esse resultado, claramente, viola o teorema de Mermin-Wagner. Como vimos, ele representa um artifício da aproximação do GR até 1 loop que se revela, mais uma vez, insuficiente para descrever acuradamente esse aspecto do sistema. Para corrigirmos esse defeito, temos naturalmente que considerar as contribuições de ordem superior na teoria e os efeitos associados à auto-energia do modelo. Dessa forma, devemos analisar o fluxo de renormalização associado ao cálculo até 2 loops no sistema.

6.3.2 O fluxo de renormalização até 2 loops

Nesse caso, resolvendo numericamente as Eqs. (5.46) e (5.47) para esse regime de interação, obtemos o fluxo de renormalização para os acoplamentos efetivos no sistema mostrado na Fig. 6.5. Como podemos facilmente observar, esse fluxo de renormalização se modifica drasticamente se comparado com o resultado associado ao cálculo do GR perturbativo até 1 loop. A taxa de variação dos acoplamentos renormalizados diminui abruptamente quando nos aproximamos do limite de baixa energia do sistema. Por conseguinte, esses acoplamentos não mais divergem nesse limite o que está de acordo, como já discutimos, com o teorema de Mermin-Wagner. No entanto, embora os acoplamentos efetivos aparentem alcançar assintoticamente valores fixos no fluxo de renormalização (ou *plateaus* na Fig. 6.5), não podemos associar esse resultado com a existência de pontos fixos na descrição efetiva de baixa energia do sistema. A razão disso está relacionada

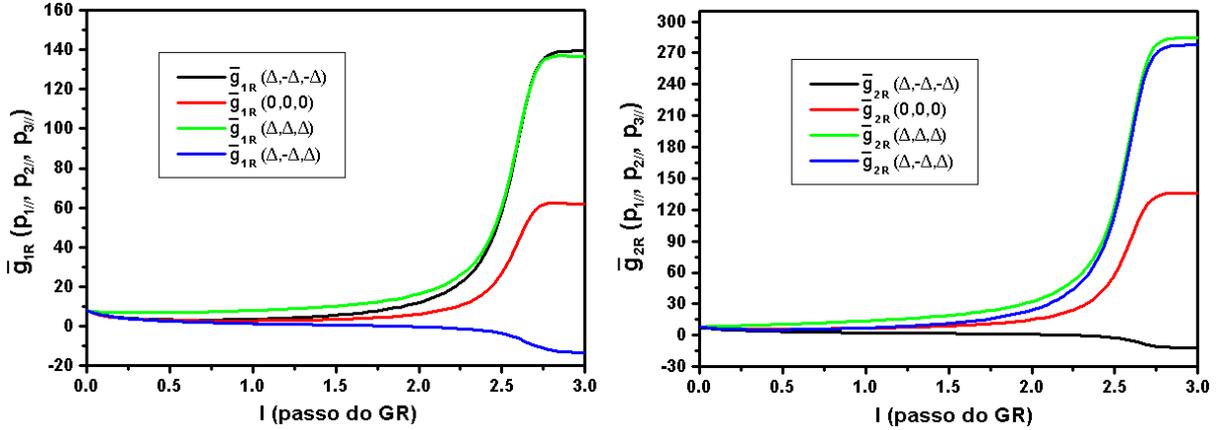


Figura 6.5: Fluxo de renormalização até 2 loops dos acoplamentos efetivos do modelo de Hubbard 2d no regime de interação intermediária dada por $U = 8t$.

com o fato de que esses valores são, infelizmente, muito sensíveis ao procedimento de discretização da SF do sistema. Isso significa, por exemplo, que se dobrarmos o número de pontos necessários para discretizar a SF 2d do modelo, esses valores fixos sempre aumentarão aproximadamente pelo mesmo fator. Eles deveriam alcançar um limitante superior para que pudéssemos caracterizá-los como verdadeiros pontos fixos da nossa abordagem do GR nessa ordem de aproximação.

Além dessas diferenças marcantes que se manifestam nessa aproximação, existem outras diferenças que são igualmente importantes entre o cálculo anterior até 1 loop e o cálculo presente até 2 loops nesse regime de acoplamento. Enquanto na primeira aproximação, todos acoplamentos divergem em alguma escala crítica de energia ao longo do processo de renormalização, em 2 loops, existem vários acoplamentos que fluem para zero no limite de baixa energia do sistema. Assim, sempre que $\bar{g}_i(p_{1||}, p_{2||}, p_{3||})$ for tal que $p_{1||} \neq p_{2||} \neq p_{3||}$, esses acoplamentos renormalizados serão irrelevantes na descrição efetiva de baixa energia do sistema. O fluxo de renormalização de alguns desses acoplamentos encontra-se mostrado na Fig. 6.6. Com esse resultado, o modelo efetivo que descreve a física de baixa energia do sistema fica bastante simplificado e, por essa razão, pode ser potencialmente mais ameno a uma tentativa de solução exata, fazendo-se o uso de outros

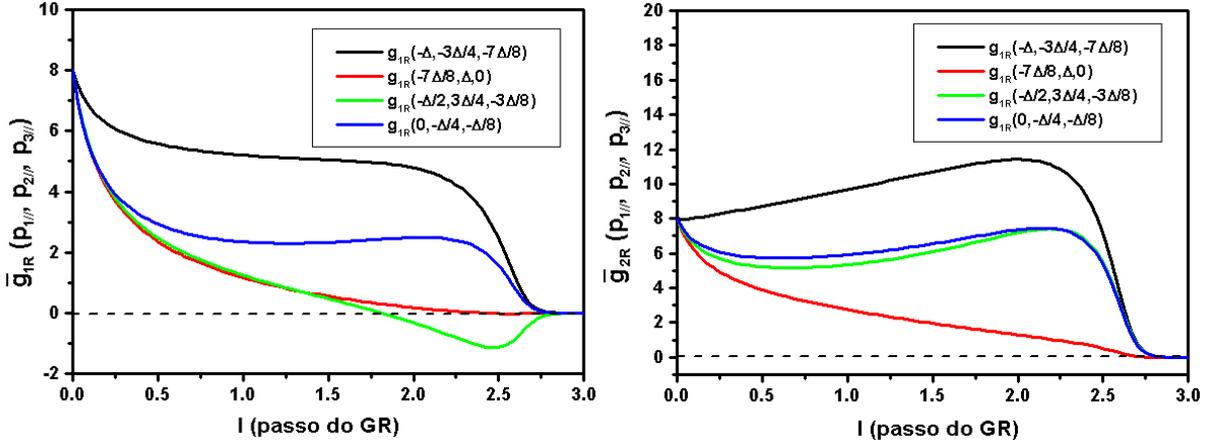


Figura 6.6: O fluxo de renormalização até 2 loops para algumas escolhas de acoplamentos irrelevantes na teoria efetiva de baixa energia do sistema.

métodos. Isso, porém, não será explorado aqui, uma vez que essa análise fugiria ao escopo desta tese.

Vamos analisar agora o que o fluxo de renormalização dos acoplamentos nos informa sobre a dinâmica de baixa energia desse sistema. Como podemos constatar, apesar desse fluxo de acoplamento ser bastante diferente do caso do modelo com fraco acoplamento, a ordem de relevância dos acoplamentos é qualitativamente a mesma se comparada com aquela situação. Isso significa que é razoável esperar que as flutuações antiferromagnéticas e associadas ao um estado supercondutor tipo d continuem a desempenhar um papel importante na dinâmica de baixa energia desse sistema. Isso fica particularmente evidente no cálculo das susceptibilidades não-uniformes associadas a esses parâmetros de ordem no sistema o que está, por sua vez, explicado detalhadamente em [91]. De fato, ao fazer isso, podemos mostrar ainda que essas quantidades permanecem sempre finitas ao longo do processo de renormalização. Isso representa um forte indicativo de que o sistema não apresenta quebra espontânea de simetria associada e, conseqüentemente, não apresenta nenhum tipo de ordenamento de longo alcance.

Dessa maneira, precisamos caracterizar, de maneira precisa, qual é a natureza do estado fundamental do modelo nesse regime de interação. Para isso, vamos analisar,

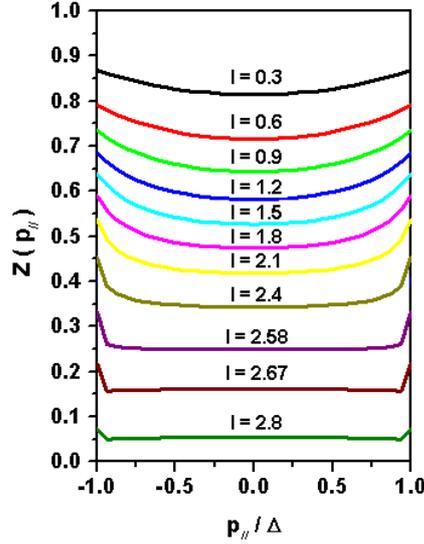


Figura 6.7: Fluxo de renormalização até 2 loops do peso da quasipartícula associada ao modelo de Hubbard 2d no regime de interação intermediária dada por $U = 8t$.

primeiro, o fluxo de renormalização associado ao peso da quasipartícula $Z(p_{\parallel})$ quando nos aproximamos do limite de baixa energia desse sistema.

6.3.3 O fluxo do peso da quasipartícula no sistema

Vamos considerar aqui o fluxo de renormalização do peso da quasipartícula $Z(p_{\parallel})$ nesse sistema de interação intermediária. Para isso, temos que resolver, obviamente, a Eq. (5.40) conjuntamente com as equações do GR até 2 loops para os acoplamentos efetivos associados ao sistema. Além disso, a equação do $Z(p_{\parallel})$ tem de ser resolvida, levando-se em conta mais uma vez o fato de que, na teoria “nua”, esse parâmetro deve satisfazer a seguinte condição inicial, ou seja, $Z(p_{\parallel}; l = 0) = 1$. Por conseguinte, obtemos numericamente o fluxo de renormalização mostrado explicitamente na Fig. 6.7.

Analisando essa figura, podemos constatar que o peso da quasipartícula se anula rapidamente quando nos aproximamos do limite de baixa energia do sistema. Isso significa que esse sistema não apresenta excitações do tipo quasipartículas fermiônicas bem definidas presentes. Dessa maneira, esse modelo interagente representa um estado associado

a um regime do tipo líquido de Não-Fermi, cuja natureza precisa tem de ser investigada calculando-se outras quantidades físicas do sistema. Esse resultado indica, ainda, que o modelo de Hubbard 2d definido em regimes de acoplamentos diferentes pode realmente descrever estados finais bastante distintos fisicamente. Nas nossas estimativas numéricas, existe uma forte indicação de uma transição de fase quântica entre um regime do tipo líquido de Fermi para um outro associado a um estado de líquido de Não-Fermi quando variamos continuamente o parâmetro de interação U do modelo.

Na próxima seção, vamos caracterizar, finalmente, a natureza desse estado de líquido de Não-Fermi presente nesse sistema interagente. Além disso, vamos investigar também a natureza da transição de fase quântica descrita acima. Como já discutimos, essa análise será feita a partir do cálculo das susceptibilidades uniformes associadas à carga e ao spin no sistema.

6.4 O fluxo das susceptibilidades de carga e spin uniformes - O cenário do líquido de spin isolante

Nesta seção, vamos discutir o fluxo de renormalização das susceptibilidades uniformes de carga e spin associadas ao sistema. Como já chamamos a atenção, essas quantidades são extremamente importantes para a caracterização de um dado sistema eletrônico, uma vez que elas fornecem informações cruciais sobre a natureza de suas excitações elementares de baixa energia.

As expressões que correspondem às susceptibilidades uniformes de carga e spin nesse sistema estão dadas nas Eqs. (5.56) e (5.57). Para calculá-las, precisamos resolver auto-consistentemente as Eqs. (5.54) e (5.55) utilizando o método numérico já explicado, conjuntamente com as Eqs. (5.46) e (5.47) que descrevem o fluxo de renormalização dos acoplamentos efetivos do sistema. Fazendo isso, obtemos, numericamente, os gráficos

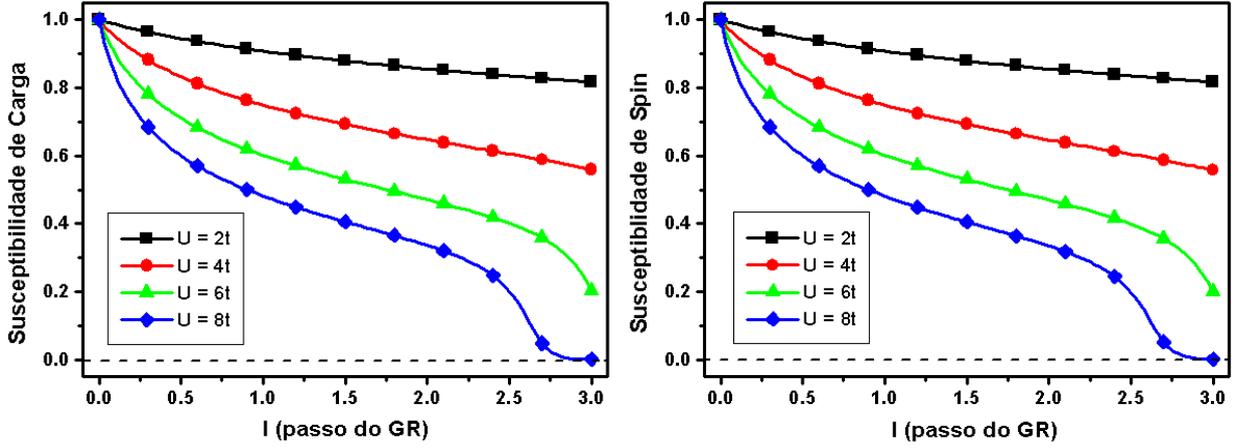


Figura 6.8: Fluxo de renormalização das susceptibilidades uniformes de carga e spin associadas ao modelo de Hubbard 2d para vários regimes de acoplamento.

exibidos na Fig. 6.8.

Nessa figura, podemos constatar que os fluxos de renormalização associados às susceptibilidades de carga e spin no sistema são bastante semelhantes entre si quando nos aproximamos do limite de baixa energia do sistema. Esse resultado implica que a nossa abordagem, simplesmente, não consegue detectar uma separação de carga e spin nesse sistema 2d. No entanto, não podemos associar esse resultado com uma inexistência completa de tal separação nesse modelo. De fato, se usarmos o caso 1d como referência, parece razoável esperar que essa separação de graus de liberdade poderia ocorrer se tivéssemos incluídos os processos de interação associados ao acoplamento do tipo g_4 no sistema. Porém, incluir consistentemente esses efeitos dentro de um esquema completo do GR é um problema considerado bastante difícil de ser implementado já no caso 1d [11, 87, 88]. Por essa razão, esses efeitos não foram considerados nesta tese. Mesmo assim, como vimos anteriormente no caso 1d, é possível extrair informações importantes sobre a dinâmica de baixa energia do nosso modelo 2d analisando o fluxo de renormalização das susceptibilidades uniformes de carga e spin, levando-se em conta apenas os efeitos dos acoplamentos g_1 e g_2 no sistema.

Analisando o fluxo de renormalização das susceptibilidades uniformes, observamos que, para regimes de interação do tipo fraca (como, por exemplo, $U = 2t$ e $4t$), essas

quantidades permanecem finitas no limite de baixa energia do sistema. Esse resultado está de acordo com a nossa conclusão anterior de que o modelo de Hubbard 2d com banda quase semi-cheia e definido com um acoplamento de intensidade fraca descreve, naturalmente, um estado metálico. No entanto, à medida em que aumentamos o parâmetro de interação U do modelo, os fluxos de renormalização associados às susceptibilidades uniformes se modificam drasticamente. De fato, quando consideramos acoplamentos de intensidade intermediária (como, por exemplo, $U = 6t$ e $8t$), essas quantidades passam a exibir uma tendência de serem anuladas no limite de baixa energia do sistema. Isso fica, particularmente, evidente no caso em que $U = 8t$, onde ambas as quantidades fluem inequivocamente para zero. Esse resultado, por sua vez, sugere que o estado fundamental associado a esse sistema, na verdade, possui “gaps” no espectro de excitação tanto de carga quanto de spin. Dessa maneira, ele não pode conter nenhum tipo de excitação coletiva bosônica de baixa energia presente. Isso implica, também, que esse estado não pode ser associado a nenhuma quebra espontânea de simetria contínua obtida a partir das interações presentes no modelo, pois, caso contrário, ele deveria possuir pelo menos um tipo de excitação elementar sem “gap” no sistema dado, obviamente, pelo bóson de Goldstone. Por essa razão, esse estado de baixa energia deve apresentar somente um ordenamento de curto alcance. Assim, dentro desse cenário, é razoável esperar que o sistema continue em um estado eletrônico líquido (ou seja, sem nenhuma simetria contínua quebrada) cuja natureza precisa é de caráter claramente isolante.

Conseqüentemente, dentro da nossa abordagem presente, verificamos que o modelo de Hubbard 2d definido com acoplamentos diferentes realmente descreve regimes eletrônicos bastante distintos entre si. Os nossos resultados numéricos sugerem a existência de uma transição de fase quântica (no caso, uma transição de Mott) entre uma fase metálica em um regime de fraco acoplamento para uma fase líquida de caráter isolante no modelo (veja Fig. 6.9). Esse resultado está de acordo com abordagens puramente numéricas para esse problema como, por exemplo, o algoritmo de CDMFT (“Cellular Dynamical Mean-Field

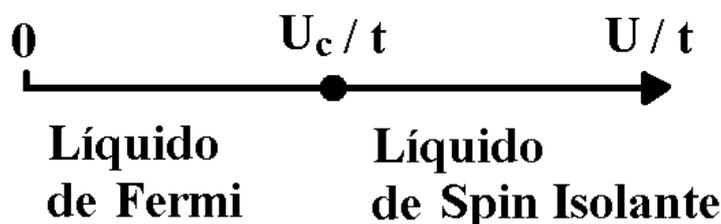


Figura 6.9: Representação pictórica da transição de Mott no modelo de Hubbard 2d levemente dopado na nossa aproximação do GR até 2 loops.

Theory”) [92, 93]. Esses estudos realmente observam uma transição de Mott no modelo de Hubbard 2d ocorrendo quando o parâmetro de interação local é da ordem de $U \sim 8t$. Isso fica, particularmente, evidente em [94] onde se observa uma fase eletrônica no modelo com, essencialmente, as mesmas propriedades do estado obtido nesta tese. Além disso, outro trabalho publicado recentemente na literatura [95] baseado, por sua vez, em um cálculo numérico auto-consistente da auto-energia do modelo de Hubbard 2d levemente dopado também chega à mesma conclusão nossa de que o estado fundamental resultante é, de fato, de natureza isolante. No entanto, esses trabalhos têm a desvantagem de não considerarem o cálculo da susceptibilidade uniforme de spin do modelo e, por essa razão, na opinião do autor, eles falham em caracterizar de maneira precisa a natureza desse estado resultante do tipo isolante de Mott.

Dessa forma, podemos observar no nosso caso que a física de baixa energia do modelo de Hubbard 2d levemente dopado e definido com $U = 8t$ possui muitas analogias com o estado previsto por Anderson [34] há duas décadas atrás. Como já explicamos, esse estado é comumente denominado de líquido de spin isolante (LSI) por razões evidentes. Esse estado eletrônico é produzido por efeitos de desordem associados a fortes flutuações quânticas presentes no sistema que, nesta tese, foram levadas em consideração por meio do método do grupo de renormalização perturbativo usando a aproximação até 2 loops. Esse resultado encontra-se, por sua vez, publicado no nosso artigo [66].

Por outro lado, uma desvantagem da abordagem perturbativa do GR de uma maneira

geral é que essa técnica não nos permite saber, de antemão, se incluíssemos termos de ordens superiores na nossa teoria, o resultado descrito acima mudaria ou não. Isso está diretamente relacionado com o fato de que, no modelo de Hubbard 2d para acoplamentos de intensidade intermediária, não existe nenhum parâmetro pequeno no problema que poderia controlar de maneira evidente essa aproximação perturbativa. Dessa maneira, para analisarmos esse ponto, precisamos considerar o limite oposto do modelo, ou seja, de forte acoplamento, para ver se a física obtida nesta tese para acoplamento intermediário pode vir a ser consistente ou não. Para isso, precisamos recapitular a nossa discussão sobre o estado de Nagaoka que vale para acoplamento bastante forte (formalmente infinito). Nessa situação, vimos que o efeito da dopagem nesse sistema consiste em reduzir o alcance das correlações antiferromagnéticas presentes no modelo para o caso de uma banda exatamente semi-cheia. Dessa maneira, podemos constatar que esse resultado está de acordo, qualitativamente, com a física do LSI obtida nesta tese, ou seja, de que os buracos no sistema provocariam uma frustração do estado antiferromagnético resultando em um ordenamento de curto alcance apenas. Esse cenário parece sugerir que a física do LSI pode ser robusta e, dessa maneira, não seria drasticamente alterada com a adição de mais flutuações quânticas (*i.e.*, 3 ou mais loops) nesse sistema.

Portanto, como o modelo de Hubbard 2d definido com acoplamentos intermediários é amplamente considerado um modelo adequado para a descrição da física subjacente dos cupratos supercondutores, torna-se natural a interpretação da fase de pseudogap exibida por esses sistemas em termos da fase de LSI encontrada nesta tese. Essa interpretação é, de fato, confirmada por experimentos ARPES recentes em que se observa uma abertura de “gap” de carga em certas regiões da SF desses sistemas [27]. Além disso, através de medidas das propriedades magnéticas desses compostos, existem fortes evidências também de uma abertura de “gap” de spin no espectro de excitação desses sistemas [26]. Conseqüentemente, os nossos resultados obtidos nesta tese estariam de acordo, qualitativamente, com essas observações experimentais.

Por fim, apesar de termos ganhado algum “insight” sobre como se dá a física de baixa energia nesses sistemas levemente dopados e, por conseguinte, da fase de pseudo-gap exibida nesses compostos, o mecanismo da supercondutividade de alta temperatura continua um importante problema teórico em aberto. De fato, parece plausível admitir que o “gap” de spin associado ao LSI tenha alguma relação com uma espécie de par de Cooper “pré-formado” e incoerente presente no sistema e que um estado supercondutor do tipo d poderia ser obtido dopando-se esse estado. No entanto, até o presente momento, não existe uma teoria microscópica que explique, fisicamente, como é que se daria esse processo.

A maior parte da discussão apresentada neste capítulo encontra-se publicada nos nossos artigos [65, 66].

Capítulo 7

Conclusão

Nesta tese, o nosso objetivo principal consistiu em analisar as propriedades de baixa energia, ou seja, a natureza do estado fundamental e das excitações elementares, do modelo de Hubbard 2d levemente fora de uma situação de banda exatamente semi-cheia. Para isso, utilizamos a metodologia do grupo de renormalização na aproximação até 2 loops. O interesse em se trabalhar com esse modelo interagente se deve, basicamente, a duas razões principais. A primeira consiste no fato de que, mesmo após 40 anos sob forte investigação teórica, o seu diagrama de fases correspondente é ainda pobremente conhecido do ponto de vista físico. A segunda razão está relacionada com o fato de que esse modelo é amplamente considerado um paradigma para o estudo de elétrons fortemente correlacionados em 2d. Além disso, espera-se, de maneira natural, que ele contenha os ingredientes mínimos para a descrição do mecanismo da supercondutividade de alta temperatura exibida nos chamados cupratos supercondutores que, por sua vez, são sistemas efetivamente 2d.

Apesar do modelo de Hubbard 2d numa situação de banda quase semi-cheia não poder ser resolvido exatamente para quaisquer parâmetros de interação no sistema, ele pode ser resolvido em algumas situações bastante especiais como, por exemplo, a situação de fraco acoplamento e a de forte acoplamento. No primeiro caso, é razoável esperar que esse modelo seja bem descrito pela teoria do líquido de Fermi de Landau e que seja, portanto,

um estado de natureza metálica. No segundo caso, o modelo passa a descrever um estado de natureza isolante (ou seja, um isolante de Mott) e, portanto, representa uma violação clara da teoria do líquido de Fermi nesse sistema. Dentro desse cenário, formulamos a hipótese de que esse modelo deve efetuar pelo menos uma transição de fase quântica (*i.e.*, uma transição ocorrendo em $T = 0$) à medida em que aumentamos continuamente o parâmetro de interação do sistema. Além disso, chamamos a atenção também para o fato de que acredita-se que os cupratos supercondutores sejam razoavelmente descritos pelo modelo de Hubbard 2d definido com acoplamentos de intensidade intermediária, uma vez que eles exibem naturalmente uma fase do tipo isolante de Mott numa situação de banda exatamente semi-cheia (ou dopagem zero). Obviamente, resolver tal modelo para esse regime de interação do ponto de vista teórico representa um desafio intelectual do mais alto nível.

Uma questão importante para a resolução desse problema consiste no entendimento do papel central que as flutuações quânticas desempenham tipicamente na dinâmica de baixa energia de sistemas de baixa dimensionalidade em geral (ou seja, tanto em 1d quanto em 2d). Dentro desse quadro, o método do grupo de renormalização (GR) emerge como o esquema analítico mais promissor e menos enviesado na análise consistente desses sistemas eletrônicos fortemente correlacionados.

Nesse sentido, nós desenvolvemos, ao longo desta tese, uma formulação do GR convenientemente adaptada ao caso de um sistema de elétrons interagentes na vizinhança de uma superfície de Fermi (SF) bem definida. No nosso problema central, a SF do sistema era aproximadamente quadrada (ou seja, apresentava a propriedade de “nesting”) e, além disso, não continha nenhuma singularidade de van Hove presente. Dessa maneira, vimos que, seguindo uma estratégia semelhante a que levou ao sucesso espetacular da metodologia do GR aplicada aos fenômenos críticos (teoria de Landau-Ginzburg-Wilson), foi possível definir uma transformação entre modelos que mapeia o modelo inicial em outros modelos chamados de renormalizados ou efetivos. Esses modelos renormalizados são de-

finidos de tal forma a incluir exatamente a mesma física de baixa energia do problema original que pretendemos analisar.

Essa filosofia associada à teoria do GR foi formulada aqui seguindo duas abordagens gerais possíveis. A primeira consistiu na abordagem de Wilson e a segunda na chamada abordagem de teoria de campos. A abordagem de Wilson, apesar de fornecer um quadro fisicamente bastante intuitivo, se revelou, infelizmente, um pouco mais complicada tecnicamente em sua implementação. Mesmo assim, mostramos através dela, em um cálculo simples sem levar em conta os efeitos das flutuações quânticas em um primeiro estágio, que as dependências dos acoplamentos com as componentes paralelas à SF de todos os momentos definidos no sistema são fundamentais na correta descrição da física de baixa energia do nosso modelo 2d. Ao mesmo tempo, vimos também que as dependências com as componentes perpendiculares dos momentos correspondentes e com as energias das partículas representavam contribuições irrelevantes do ponto de vista do GR e puderam, dessa maneira, ser desprezadas dentro dessa descrição.

Para incluirmos os importantes efeitos das flutuações quânticas no sistema, escolhemos a abordagem do GR de teoria de campos por ser uma técnica mais simples de ser formulada dentro de um contexto de teoria de perturbação. Além disso, chamamos a atenção que, em muitas situações fisicamente importantes, essa implementação do GR costuma ir além de um simples regime perturbativo [81]. Assim, como um teste inicial para essa metodologia, nós a aplicamos para o caso do modelo de Hubbard 1d fora de uma situação de banda exatamente semi-cheia. A escolha desse modelo está relacionada com o fato de que ele pode ser resolvido exatamente fazendo-se o uso de outras técnicas analíticas como, por exemplo, o “ansatz” de Bethe [82] e o método de bosonização [72, 73]. Dessa maneira, essa discussão serviu de base para mostrar que a sistemática do GR, de fato, reproduz corretamente vários aspectos da física de baixa energia associada a esse modelo.

Nesse sistema 1d, observamos que ao aplicarmos ingenuamente uma teoria de perturbação convencional utilizando os parâmetros originais (ou seja, os parâmetros “nus”)

do problema, nos confrontamos naturalmente com uma série perturbativa cheia de singularidades no limite de baixa energia. Esse resultado refletia, em um nível mais profundo, a inadequação dessa formulação da teoria de perturbação para lidar corretamente com esse aspecto do sistema. Dessa maneira, fazia-se necessário invocar o método do GR para resolver consistentemente esse problema. De fato, vimos que, reescrevendo todos os parâmetros iniciais presentes no modelo, como os acoplamentos e os seus campos fermiônicos, foi possível formular uma nova teoria de perturbação em termos desses parâmetros renormalizados de tal forma que essa expansão fosse sempre bem definida no limite de baixa energia do sistema. Como resultado disso, pudemos extrair respostas finitas desse problema que podiam, eventualmente, ser comparadas com o experimento.

Dentro desse esquema, nós renormalizamos, em primeiro lugar, o modelo de Hubbard 1d até 1 loop e derivamos, subsequente, as equações do GR para os acoplamentos efetivos do sistema até essa ordem de perturbação. Por conseguinte, vimos que a física de baixa energia desse modelo é descrita por um ponto fixo correspondente a um modelo de Tomonaga-Luttinger [14, 15] efetivo e que, por essa razão, esse sistema é naturalmente denominado de líquido de Luttinger [11, 12]. Em seguida, observamos que, para caracterizarmos de maneira precisa a natureza desse estado resultante do ponto de vista do GR, era preciso renormalizar esse modelo pelo menos até 2 loops. Conseqüentemente, tivemos que levar em conta os efeitos da auto-energia e também as correções aos vértices do modelo até essa ordem de perturbação. Após renormalizarmos apropriadamente essas contribuições, derivamos as equações do GR para os acoplamentos efetivos até 2 loops. Dessa maneira, vimos que o resultado de que a física de baixa energia do sistema é dada pelo ponto fixo do líquido de Luttinger permaneceu inalterada nesse caso. Além disso, observamos que isso representa um forte indicativo de que esse resultado vale para todas as ordens de perturbação e, portanto, não está relacionado a nenhum esquema especial de truncagem do método do GR.

Nesse cálculo do GR até 2 loops, foi possível derivar também as equações que descrevem

o fluxo do peso da quasipartícula Z e das susceptibilidades uniformes associadas à carga e ao spin no limite de baixa energia do sistema. No primeiro caso, mostramos que, no ponto fixo do líquido de Luttinger, Z flui naturalmente para zero. Isso significa que o sistema não apresenta quasipartículas fermiônicas bem definidas no limite de baixa energia e, portanto, é de fato um líquido de Não-Fermi. Já no segundo caso, vimos que as susceptibilidades uniformes de carga e spin permaneciam finitas no ponto fixo do líquido de Luttinger, o que significa que, mesmo assim, existem excitações elementares associadas tanto à carga quanto ao spin sem “gaps” no sistema. Dessa maneira, os nossos resultados estão de acordo com vários resultados exatos que demonstram que o modelo de Hubbard 1d fora de uma situação de banda semi-cheia é realmente um líquido de Luttinger [12] no limite de baixa energia. Por conseguinte, ele descreve um estado metálico sem quasipartículas presentes e com uma dinâmica de baixa energia dominada por excitações coletivas bosônicas dadas pelos chamados holons (associados à carga) e spinons (associados ao spin).

Como a sistemática do GR se revelou bem sucedida na análise do modelo de Hubbard 1d, isso nos levou a aplicar a mesma metodologia para o problema central desta tese que consiste, como já mencionamos, no modelo de Hubbard 2d levemente fora de uma situação de banda semi-cheia. Nesse modelo, ao aplicarmos uma teoria de perturbação convencional utilizando os parâmetros iniciais (ou seja, os parâmetros “nus”) do problema, obtemos também uma série perturbativa cheia de singularidades no limite de baixa energia do sistema. Esse fato, na verdade, fez com que esse modelo 2d possuísse algumas analogias bastante importantes com o caso 1d. Dentro desse cenário, fazia-se necessário invocar o método do GR também para o problema 2d. Dessa maneira, reescrevendo todos os parâmetros iniciais do modelo em termos dos seus respectivos parâmetros renormalizados, mostramos que a expansão perturbativa correspondente se tornava bem definida no limite de baixa energia. Conseqüentemente, pudemos extrair dela respostas finitas que podiam também ser comparadas com o experimento.

Nesse ponto, ficou evidente uma diferença marcante entre os modelos de Hubbard 1d

e 2d considerados nesta tese. Enquanto no caso 1d, apenas um número finito de acoplamentos era necessário para parametrizar a física de baixa energia do modelo, no caso 2d, foi necessário definir um número infinito de acoplamentos (ou, equivalentemente, funções contínuas de acoplamentos) para descrever corretamente a dinâmica de baixa energia desse sistema. Conseqüentemente, tivemos que definir também um número infinito de contra-termos (ou funções contínuas de contra-termos) para eliminar todas as singularidades que apareciam em teoria de perturbação. Como esse programa se revelou bem sucedido para esse sistema 2d, explicamos que o modelo efetivo correspondente constitui em um exemplo bastante interessante de teoria de campo renormalizável que necessita de um número infinito de contra-termos para ser renormalizada.

Nesse esquema, nós renormalizamos primeiro o modelo de Hubbard 2d até 1 loop. Porém, diferentemente do caso 1d em que as equações do GR para os acoplamentos eram equações diferenciais ordinárias, em 2d, as equações do GR correspondentes se tornavam complicadas equações íntegro-diferenciais que, além disso, estavam acopladas entre si. Por essa razão, fazia-se necessário calculá-las por meio de uma abordagem numérica. Nesta tese, escolhemos o algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem para resolver auto-consistentemente todas as equações acopladas. Ao fazer isso, observamos que os acoplamentos efetivos do sistema não se aproximavam assintoticamente de nenhum ponto fixo do GR até essa ordem de perturbação. Ao invés disso, eles divergiam sempre, independentemente das condições iniciais que consistiam nos acoplamentos “nus” do problema. Esse resultado reproduziu, qualitativamente, outras abordagens desse problema também baseadas no método do GR até 1 loop presentes na literatura [36, 51, 52, 53, 56, 57, 59]. Essa divergência indica uma instabilidade do sistema e, conseqüentemente, uma transição de fase no modelo ocorrendo numa temperatura crítica não-nula. Como explicamos, isso viola o teorema de Mermin-Wagner [9], demonstrado rigorosamente para esse tipo de sistema e, na verdade, representa um artifício da aproximação até 1 loop.

Em seguida, passamos para o cálculo das equações do GR dos acoplamentos efetivos

do sistema até 2 loops. Esse cálculo completo do GR em 2d foi feito, pela primeira vez, pelo autor e colaboradores e encontra-se publicado no nosso artigo [65]. Por conseguinte, consideramos primeiramente o caso do modelo de Hubbard 2d definido com um acoplamento do tipo fraco. Nessa situação, vimos que a divergência mencionada acima não mais ocorria até onde podíamos confiantemente ir no nosso método numérico. Mesmo assim, os acoplamentos também não se aproximavam assintoticamente de nenhum ponto fixo do GR até essa ordem de perturbação. Dessa maneira, para inferirmos sobre a física de baixa energia desse sistema, calculamos também as equações do GR até 2 loops do peso da quasipartícula $Z(p_{\parallel})$ e das susceptibilidades uniformes associadas à carga e ao spin no modelo. Ao fazer isso, constatamos numericamente que o fator $Z(p_{\parallel})$ permanecia finito ao longo do processo de renormalização. Isso significa que as excitações do tipo quasipartícula são coerentes nesse sistema e implica, portanto, que o estado resultante é descrito pela teoria do líquido de Fermi (ou, equivalentemente, por uma teoria de bandas). Portanto, como o sistema se encontra em uma situação de banda quase semi-cheia, é razoável esperar que ele descreva um regime do tipo metálico. Essa expectativa foi confirmada pela análise do fluxo das susceptibilidades uniformes de carga e spin no sistema que, de fato, permaneciam finitas ao longo do processo de renormalização.

O cenário ficou mais interessante quando passamos a considerar um regime de interação de intensidade intermediária nesse modelo. Nesse caso, os fluxos de renormalização associados aos acoplamentos efetivos do sistema se modificaram drasticamente em comparação à situação anterior. A taxa de variação de alguns acoplamentos diminuía abruptamente quando nos aproximávamos do limite de baixa energia do sistema, formando, assim, vários “plateaus” no fluxo de renormalização correspondente. Enquanto isso, outros acoplamentos fluíam inequivocamente para zero na descrição efetiva de baixa energia. No entanto, chamamos a atenção para o fato de que os acoplamentos efetivos que se encaixavam na primeira categoria, não podiam ser associados com a existência de pontos fixos do GR nessa ordem perturbação, uma vez que eles eram muito sensíveis ao processo de discretização

da SF do sistema.

Para caracterizar esse estado resultante, analisamos o fluxo do peso da quasipartícula para esse regime de interação. Por conseguinte, observamos que esse fator se anulava quando nos aproximávamos do limite de baixa energia do sistema. Conseqüentemente, esse sistema não possui excitações coerentes do tipo quasipartículas fermiônicas presentes e, dessa maneira, representa um estado do tipo líquido de Não-Fermi em 2d. Esse resultado também se encontra publicado no nosso artigo [65]. Além disso, examinando ainda o fluxo de renormalização associado às susceptibilidades uniformes de carga e spin nesse sistema, constatamos que ambas as quantidades fluíam inequivocamente para zero ao longo do processo de renormalização. Esse resultado é um indicativo de que o sistema abre “gaps” de excitação tanto no espectro de carga quanto no espectro de spin e, portanto, esse estado não pode conter nenhum tipo de excitação coletiva bosônica sem “gap” presente. Por conseguinte, ele não pode ser associado a nenhuma quebra espontânea de simetria contínua obtida a partir das interações presentes no modelo. Por essa razão, esse estado eletrônico deve apresentar um ordenamento de curto alcance apenas. Como explicamos, esses resultados são consistentes com uma interpretação de formação de um estado do tipo líquido de spin isolante (LSI) nesse sistema e essa discussão se encontra, por sua vez, publicada no nosso artigo [66].

Por fim, concluímos que o líquido de Luttinger como ocorre no modelo de Hubbard 1d fora de uma situação de banda semi-cheia não pode ser realizado no modelo de Hubbard 2d correspondente. Nesta tese, argumentamos a possibilidade da existência de uma transição de Mott no modelo de Hubbard 2d entre uma fase metálica descrita pelo líquido de Fermi em um regime de fraco acoplamento e uma fase isolante dada pelo estado de LSI para regimes de interações intermediárias. Além disso, chamamos a atenção também para o fato de que esse modelo 2d definido com acoplamentos intermediários é amplamente considerado um modelo adequado para a descrição da física da supercondutividade de alta temperatura exibida nos chamados cupratos supercondutores. Dessa maneira,

como explicamos, torna-se natural a interpretação da fase de pseudogap observada nesses sistemas levemente dopados em termos da fase do LSI encontrada nesta tese. Essa interpretação é confirmada por vários experimentos que, por sua vez, observam evidências de aberturas de “gaps” tanto no espectro de excitação de carga [27] quanto no de spin [26] em determinadas direções no espaço dos momentos desses compostos. Conseqüentemente, acreditamos que a física do LSI seja, de fato, robusta e poderia ser observada também em outras classes de materiais efetivamente bidimensionais nas quais os efeitos das interações eletrônicas desempenham um papel crucial na dinâmica do sistema.

Apêndice A

Sobre a Renormalizabilidade das Teorias 1d e 2d

Neste apêndice, vamos mostrar que os modelos tratados nesta tese (ou seja, os modelos 1d e 2d) são, de fato, renormalizáveis. Do ponto de vista histórico, a análise geral dessa questão da renormalizabilidade de uma dada teoria de campo começou em meados da década de 50 com o eminente físico-matemático Bogoliubov e seu colaborador Parasiuk [96], sendo elegantemente refinada anos depois pelos matemáticos Hepp [97] e Zimmermann [98] no final da década de 60 e início de 70. Esse importante teorema conhecido como o teorema BPHZ assegura, categoricamente, que uma teoria de campos dita renormalizável sempre pode se tornar finita em todas as ordens de teoria de perturbação, desde que conheçamos exatamente os contratermos dela.

Infelizmente, na prática, nunca sabemos quais são os contratermos de uma dada teoria de campo exatamente. Por essa razão, temos que calculá-los ordem a ordem em teoria de perturbação. Ao longo desta tese, vimos que esses contratermos, por definição, cancelavam as singularidades no limite de baixa energia (ou seja, $p_0 \rightarrow 0$) do tipo $\ln(\Omega/p_0)$ que assolavam a teoria perturbativamente. No entanto, postergamos a importante discussão sobre como as divergências do tipo $\ln^2(\Omega/p_0)$ que apareciam em 2 loops são canceladas

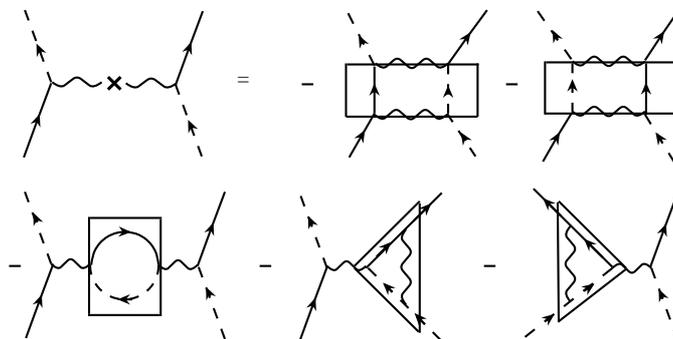


Figura A.1: O contratermo Δg_{1R} representado diagramaticamente.

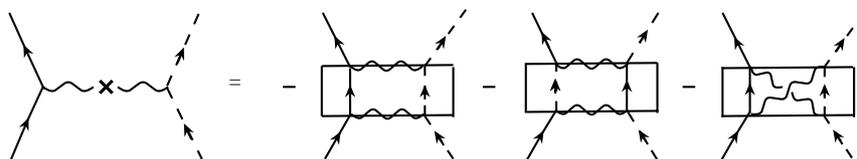


Figura A.2: O contratermo Δg_{2R} representado diagramaticamente.

por esses mesmos contratermos que estão presentes na teoria. É isso que vamos fazer explicitamente agora.

A nossa discussão se concentrará na explicação de como esses cancelamentos ocorrem na função vértice de quatro pontos $\Gamma^{(4)}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ do modelo 2d que é, por sua vez, o caso mais complicado considerado nesta tese. Como ficará bastante claro, a extensão dessa prova para o modelo 1d também tratado nesta tese será mais que direta.

Para ilustrar o nosso argumento, considere os contratermos do modelo 2d, ou seja, $\Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ e $\Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ representados diagramaticamente em termos de blocos constituintes como estão mostrados nas Figs. A.1 e A.2. Esses contratermos, como estão presentes na Lagrangiana do modelo, também gerarão, perturbativamente, vários diagramas de Feynman em ordens superiores. Por exemplo, observe os diagramas das Figs. A.3 e A.4. Esses diagramas, como veremos a seguir, cancelarão as divergências do tipo $\ln^2(\Omega/p_0)$ que naturalmente aparecem em teoria de perturbação até 2 loops.

Vamos mostrar agora como se dá esse cancelamento. Considere os diagramas de Feynman da Fig. (A.5). O Diag.(a) aparece de maneira natural em teoria de perturbação

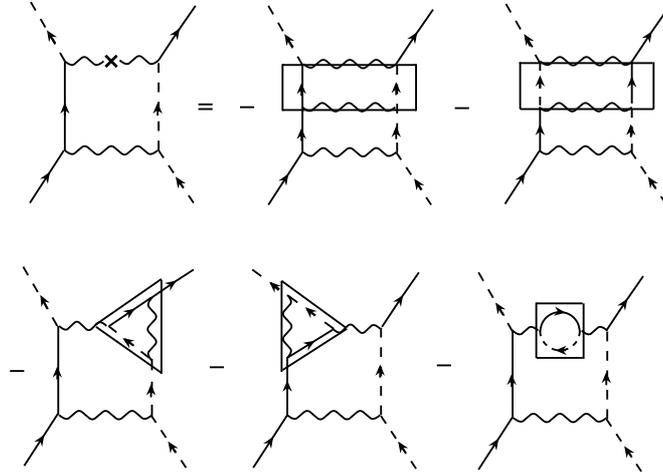


Figura A.3: Os diagramas de Feynman gerados pelo contratermo Δg_{1R} em 2 loops.

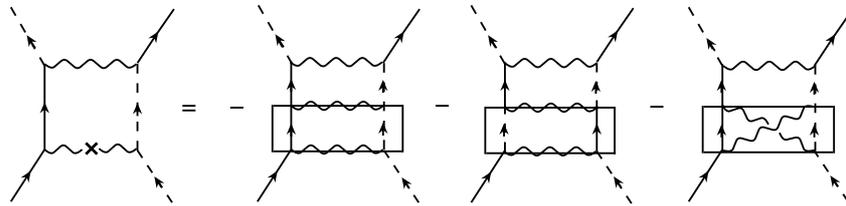


Figura A.4: Os diagramas de Feynman gerados pelo contratermo Δg_{2R} em 2 loops.

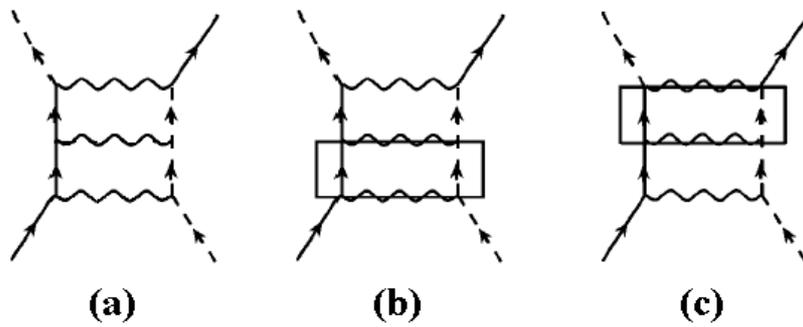


Figura A.5: Um exemplo de cancelamento de diagramas de Feynman em 2 loops.

em um cálculo até 2 loops. Assim, usando apropriadamente as regras de Feynman, esse diagrama fica

$$\begin{aligned} \text{Diag. (a)} &= -\frac{i}{16\pi^2 v_F^2} \ln^2\left(\frac{\Omega}{p_0}\right) \int_{\mathcal{D}_i} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[g_{1R}(q_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - q_{\parallel}, p_{3\parallel}) \right. \\ &\quad \left. \times g_{2R}(k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - q_{\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - k_{\parallel}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Por outro lado, os Diags. (b) e (c) são gerados pelos contratermos definidos na teoria. Usando a regras de Feynman apropriadas para essa teoria, pode-se facilmente mostrar que esses dois diagramas dão exatamente a mesma expressão, ou seja,

$$\begin{aligned} \text{Diag. (b)} + \text{Diag. (c)} &= 2 \times \frac{i}{16\pi^2 v_F^2} \ln\left(\frac{\Omega}{p_0}\right) \ln\left(\frac{\Omega}{\omega}\right) \int_{\mathcal{D}_i} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[g_{1R}(q_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - q_{\parallel}, p_{3\parallel}) \right. \\ &\quad \left. \times g_{2R}(k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - q_{\parallel}) g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - k_{\parallel}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Dessa maneira, a soma dos três diagramas de Feynman fica portanto

$$\begin{aligned} \text{Diag. (a)} + \text{Diag. (b)} + \text{Diag. (c)} &= -\frac{i}{16\pi^2 v_F^2} \left[\ln^2\left(\frac{\omega}{p_0}\right) - \ln^2\left(\frac{\Omega}{\omega}\right) \right] \\ &\quad \times \int_{\mathcal{D}_i} dk_{\parallel} dq_{\parallel} \left[g_{1R}(q_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - q_{\parallel}, p_{3\parallel}) g_{2R}(k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - k_{\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - q_{\parallel}) \right. \\ &\quad \left. \times g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - k_{\parallel}) \right]. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Como $\ln^2(\Omega/\omega)$ independe da energia do sistema ele pode ser absorvido em uma redefinição dos contratermos da teoria. Dessa maneira, podemos ver claramente que a soma dos três diagramas é finita no limite de baixa energia ($p_0 \rightarrow 0$) do sistema. Usando esse argumento, pode-se mostrar que esses cancelamentos sempre vão acontecer para todos os diagramas de Feynman em 2 loops, provando, portanto, que a teoria foi consistentemente renormalizada até essa ordem de perturbação.

Por outro lado, vimos também que para desaparecer com o termo divergente $\ln^2(\Omega/\omega)$ independente da energia p_0 do sistema, precisamos redefinir os contratermos da teoria de tal forma a absorver essas contribuições. Mas, então, cabe uma questão: esses novos termos podem mudar ou não as equações do GR do sistema até essa ordem de perturbação? Vamos analisar agora esse ponto.

Como vimos ao longo desta tese, os contratermos naturalmente dependem de $\ln(\Omega/\omega)$. Dessa maneira, com a redefinição mencionada, esses contratermos ficariam esquematicamente da seguinte forma

$$\Delta g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) = A(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \ln(\Omega/\omega) + B(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \ln^2(\Omega/\omega), \quad (\text{A.4})$$

$$\Delta g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) = C(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \ln(\Omega/\omega) + D(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \ln^2(\Omega/\omega), \quad (\text{A.5})$$

onde $A(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$, $B(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$, $C(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ e $D(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel})$ são funções dos momentos paralelos à SF que multiplicam os termos divergentes. Assim, para derivar as equações do grupo de renormalização, devemos usar as Eqs. (5.32) e (5.33) que relacionam os parâmetros “nus” da teoria e os respectivos parâmetros renormalizados. Dessa maneira, fazendo $\omega = \Omega - d\omega$, obtemos

$$\omega \frac{dg_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega)}{d\omega} = A(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) + \frac{1}{2} g_{1R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \sum_{i=1}^4 \gamma(p_{i\parallel}) B(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \left(\frac{d\omega}{\omega} \right), \quad (\text{A.6})$$

$$\omega \frac{dg_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}; \omega)}{d\omega} = C(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) + \frac{1}{2} g_{2R}(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \sum_{i=1}^4 \gamma(p_{i\parallel}) + D(p_{1\parallel}, p_{2\parallel}, p_{3\parallel}) \left(\frac{d\omega}{\omega} \right), \quad (\text{A.7})$$

ou seja, os coeficientes que multiplicam os termos que divergem com $\ln^2(\Omega/\omega)$ são infinitesimalmente menores que os termos que multiplicam $\ln(\Omega/\omega)$. Por essa razão, essa nova redefinição não modifica as equações do GR até 2 loops obtidas anteriormente.

Apêndice B

Os Domínios de Integração \mathcal{D}_i

Neste apêndice, vamos escrever explicitamente os domínios de integração \mathcal{D}_i considerados ao longo desta tese. Esses domínios podem ser obtidos se levarmos em conta que, no limite de baixa energia do sistema, as componentes paralelas de todos os momentos têm de estar situadas na SF, ou seja, entre $-\Delta$ e Δ . Assim,

$$\mathcal{D}_1 = \begin{cases} -\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq p_{1\parallel} + p_{2\parallel} - k_{\parallel} \leq \Delta, \end{cases}$$

$$\mathcal{D}_2 = \begin{cases} -\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel} \leq \Delta, \end{cases}$$

$$\mathcal{D}_3 = \begin{cases} -\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{1\parallel} \leq \Delta, \end{cases}$$

$$\mathcal{D}_4 = \begin{cases} -\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq q_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq p_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel} \leq \Delta, \end{cases}$$

$$\mathcal{D}_5 = \begin{cases} -\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq q_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{1\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + p_{2\parallel} - p_{3\parallel} \leq \Delta, \end{cases}$$

$$\mathcal{D}_6 = \begin{cases} -\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq q_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{2\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{2\parallel} \leq \Delta, \end{cases}$$

$$\mathcal{D}_7 = \begin{cases} -\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq q_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{4\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + p_{3\parallel} - p_{1\parallel} \leq \Delta, \end{cases}$$

$$\mathcal{D}_8 = \begin{cases} -\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq q_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{3\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + p_{1\parallel} - p_{3\parallel} \leq \Delta, \end{cases}$$

$$\mathcal{D}_9 = \begin{cases} -\Delta \leq k_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq q_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq p_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq -k_{\parallel} + p_{\parallel} + q_{\parallel} \leq \Delta, \\ -\Delta \leq k_{\parallel} + q_{\parallel} - p_{\parallel} \leq \Delta. \end{cases}$$

Além disso, devemos ter obviamente

$$-\Delta \leq p_{i\parallel} \leq \Delta \quad (\text{para } i = 1, \dots, 4).$$

Referências Bibliográficas

- [1] L. D. Landau, Sov. Phys - JETP **3**, 920 (1957); *ibid.* **8**, 70 (1959).
- [2] V. L. Ginzburg e L.D. Landau, Zh Ekaper. Teoret. Fiz. **20**, 1064 (1950).
- [3] P. Nozières, *Interacting Fermi Systems* (New York: Benjamin, 1964).
- [4] D. Vollhardt e P. Wölfle, *The Superfluid Phases of Helium 3* (London: Taylor&Francis, 1990).
- [5] Veja, por exemplo, P. A. Lee, T. M. Rice, J. W. Serene, L. J. Sham e J. W. Wilkins, Comments Condens. Matter. Phys., **12**, 99 (1986).
- [6] Para um artigo de revisão, veja J. Orenstein, and A. J. Millis, Science **288**, 468 (2000).
- [7] Veja, por exemplo, H. Ishii, H. Kataura, H. Shiozawa, H. Yoshioka, H. Otsubo, Y. Takayama, T. Miyahara, S. Suzuki, Y. Achiba, M. Nakatake, T. Narimura, M. Higashiguchi, K. Shimada, H. Namatame e M. Taniguchi, Nature **426**, 540 (2003).
- [8] P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
- [9] N. D. Mermin e H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [10] S. Coleman, Comm. Math. Phys. **31**, 259 (1973).
- [11] J. Sólyom, Adv. Phys. **28**, 201 (1979).

- [12] F. D. M. Haldane, Phys. Rev. Lett. **45**, 1358 (1980); *ibid.* **47**, 1840 (1981); Phys. Lett. A **81**, 153 (1981); J. Phys. C **14**, 2585 (1981).
- [13] Para um artigo de revisão relativamente recente, veja J. Voit, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995).
- [14] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys., Osaka **5**, 544 (1950).
- [15] J. M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).
- [16] R. Claessen, R. O. Anderson, J. W. Allen, C. G. Olson, C. Janwitez, W. P. Ellis, S. Harm, M. Kalning, R. Manzke e M. Skibowski, Phys. Rev. Lett. **69**, 808 (1992).
- [17] J. G. Bednorz e K. A. Müller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).
- [18] N. Mott, *Metal-Insulator Transitions* (London: Taylor and Francis, 1997).
- [19] F. Gebhard, *The Mott Metal-Insulator Transition* (Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 1997).
- [20] P. Wyder (Editor), *Proceedings of the International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity: High Temperature Superconductors IV* (Amsterdam: North-Holland).
- [21] W. E. Pickett, H. Krakauer, R. E. Cohen e D. J. Singh, Science **255**, 46 (1992).
- [22] Z. -X. Shen e D. S. Dessau Phys. Rep. **253**, 1 (1995).
- [23] J. Bardeen, N. Cooper e J. R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).
- [24] D. A. Wollman, D. J. Van Harlingen, J. Giapintzakis e D. M. Ginsberg, Phys. Rev. Lett. **74**, 797 (1995).
- [25] J. R. Kirtley, C. C. Tsuei, J. Z. Sun, C. C. Chi, L. S. Yu-Jahnes, A. Gupta, M. Rupp e M. B. Ketchen, Nature **373**, 225 (1995).

- [26] Para um artigo de revisão, veja T. Timusk e B. Statt, *Rep. Prog. Phys.* **62**, 61 (1999).
- [27] K. M. Shen, T. Yoshida, D. H. Lu, F. Ronning, N. P. Armitage, W. S. Lee, X. J. Zhou, A. Damascelli, D. L. Feng, N. J. C. Ingle, H. Eisaki, Y. Kohsaka, H. Takagi, T. Kakeshita, S. Uchida, P. K. Mang, M. Greven, Y. Onose, Y. Taguchi, Y. Tokura, S. Komiya, Y. Ando, M. Azuma, M. Tkano, A. Fujimori e Z. -X. Shen, *Phys. Rev. B* **69**, 054503 (2004).
- [28] L. Balents e M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B* **53**, 12133 (1996).
- [29] H. H. Lin, L. Balents e M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B* **56**, 6569 (1997).
- [30] H. H. Lin, L. Balents e M. P. A. Fisher, *Phys. Rev. B* **58**, 1794 (1998).
- [31] M. P. A. Fisher, *cond-mat/9806164* (1998).
- [32] E. Dagotto e T. M. Rice, *Science* **271**, 618 (1996).
- [33] S. Ledowski, P. Kopietz e A. Ferraz, *Phys. Rev. B* **71**, 235106 (2005).
- [34] P. W. Anderson, *Science* **235**, 1196 (1987).
- [35] N. Furukawa, T. M. Rice e M. Salmhofer, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3195 (1998).
- [36] C. Honerkamp, M. Salmhofer, N. Furukawa e T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **63**, 35109 (2001).
- [37] M. Gell-Mann e F. Low, *Phys. Rev.* **95**, 1300 (1954).
- [38] E. Stückelberg e A. Petermann, *Helv. Phys. Acta* **26**, 499 (1953).
- [39] C. G. Callan, *Phys. Rev. D* **2**, 1541 (1970).
- [40] K. Symanzik, *Comm. Math. Phys.* **18**, 227 (1970).
- [41] Veja, por exemplo, M. E. Peskin e D. V. Schroeder, *An Introduction to Quantum Field Theory* (Perseus, 1995).

- [42] K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971); *ibid.* **4**, 3184 (1971).
- [43] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena* (Oxford University Press, 1996).
- [44] P. W. Anderson e G. Yuval, Phys. Rev. Lett. **23**, 89 (1970).
- [45] P. Nozières, J. Low. Temp. Phys. **17**, 31 (1974).
- [46] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [47] G. Benfatto e G. Gallavotti, J. Stat. Phys. **59**, 541 (1991).
- [48] J. Feldman e E. Trubowitz, Helv. Phys. Acta **63**, 156 (1990).
- [49] R. Shankar, Physica A **177**, 530 (1991).
- [50] R. Shankar, Rev. Mod. Phys. **66**, 129 (1994).
- [51] D. Zanchi e H. J. Schulz, Phys. Rev. B **54**, 9509 (1996).
- [52] D. Zanchi e H. J. Schulz, Phys. Rev. B **61**, 13609 (2000).
- [53] A. T. Zheleznyak, V. M. Yakovenko e I. E. Dzyaloshinskii, Phys. Rev. B **55**, 3200 (1997).
- [54] J. Gonzalez, F. Guinea e M. A. H. Vozmediano, Phys. Rev. Lett. **79**, 3514 (1997).
- [55] J. Gonzalez, F. Guinea e M. A. H. Vozmediano, Phys. Rev. Lett. **84**, 4930 (2000).
- [56] F. Vistulo de Abreu e B. Douçot, Phys. Rev. Lett. **86**, 2866 (2001).
- [57] C. J. Halboth e W. Metzner, Phys. Rev. B **61**, 7364 (2000).
- [58] P. Kopietz e T. Busche, Phys. Rev. B **64**, 155101 (2001).
- [59] B. Binz, D. Baeriswyl e B. Douçot, Eur. Phys. J. B **25**, 69 (2002).

- [60] S. Dusuel, F. Vistulo de Abreu e B. Douçot, Phys. Rev. B **65**, 94505 (2002).
- [61] T. Baier, E. Bick e C. Wetterich, Phys. Rev. B **70**, 125111 (2004).
- [62] A. Ferraz, Phys. Rev. B **68**, 075115 (2003).
- [63] H. Freire, E. Corrêa e A. Ferraz, Physica C **408**, 254 (2004).
- [64] H. Freire, E. Corrêa e A. Ferraz, J. Phys. A: Math. Gen. **39**, 7977 (2006).
- [65] H. Freire, E. Corrêa e A. Ferraz, Phys. Rev. B **71**, 165113 (2005).
- [66] H. Freire, E. Corrêa e A. Ferraz, Phys. Rev. B **73**, 073103 (2006).
- [67] M. C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 159 (1963).
- [68] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London Ser. A **276**, 238 (1963); *ibid.* **277**, 237 (1963).
- [69] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. London **281**, 401 (1964).
- [70] J. Kanamori, Prog. Theor. Phys. **30**, 275 (1963).
- [71] E. H. Lieb e F. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).
- [72] D. C. Mattis e E. H. Lieb, J. Math. Phys. **6**, 304 (1965).
- [73] A. Luther e I. Peschel, Phys. Rev. B **9**, 2911 (1974).
- [74] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (New York: Springer-Verlag, 1994).
- [75] E. Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Physics* (Addison-Wesley, 1991).
- [76] Y. Nagaoka, Phys. Rev. **147**, 392 (1966).
- [77] Y. Nambu, Phys. Rev. Lett. **4**, 380 (1960).
- [78] J. Goldstone, Nuovo Cim. **19**, 15 (1961).

- [79] Veja, por exemplo, S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, 1999).
- [80] C. Bourbonnais e L. G. Caron, *Int. J. Mod Phys. B* **5**, 1033 (1991).
- [81] K. G. Wilson e M. E. Fisher, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 240 (1972).
- [82] H. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [83] A. L. Fetter e J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, 1971).
- [84] J. C. Ward, *Phys. Rev.* **78**, 182 (1950); Y. Takahashi, *Nuovo Cim.* **6**, 371 (1957).
- [85] I. E. Dzyaloshinskii e A. I. Larkin, *Sov. Phys - JETP* **38**, 2002 (1974).
- [86] C. Di Castro e W. Metzner, *Phys. Rev. Lett.* **67**, 3852 (1991).
- [87] F. Schütz, L. Bartosch e P. Kopietz, *Phys. Rev. B* **72**, 125111 (2005).
- [88] A. Ferraz, *J. Phys. A: Math. Gen.* **39**, 7963 (2006).
- [89] G. Benfatto e V. Mostropietro, *Commun. Math. Phys.* **258** 609 (2005).
- [90] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling e Brian P. Flannery, *Numerical Recipes in Fortran 77* (Cambridge University Press, 1992).
- [91] E. Corrêa, H. Freire e A. Ferraz, *cond-mat/0512626* (2005).
- [92] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth e M. J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [93] A. -M. S. Tremblay, B. Kyung e D. Sénéchal, *cond-mat/0511334* (2005).
- [94] B. Kyung, S. S. Kancharla, D. Sénéchal, A. -M. S. Tremblay, M. Civelli e G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **73**, 165114 (2006).

- [95] T. P. Choy e P. Phillips, Phys. Rev. Lett. **95**, 196405 (2005).
- [96] N. N. Bogoliubov e O. S. Parasiuk, Acta Math. **97**, 227 (1957).
- [97] K. Hepp, Comm. Math. Phys. **2**, 301 (1966).
- [98] W. Zimmermann, Comm. Math. Phys. **11**, 1 (1968); *ibid.* **15**, 208 (1969).