

André Schuwartz Ferreira

Transições Quânticas Induzidas por Flutuações em Sistemas Fortemente Correlacionados

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do
título de Doutor em Física

**UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
INSTITUTO DE FÍSICA**

Orientador: **Dr. Mucio Amado Continentino**

Niterói - Rio de Janeiro
2005

Agradecimentos

Agradeço à toda minha família especialmente aos meus pais, José Armínio e Maria José.

Agradeço aos meus orientadores, Mucio Continentino e Eduardo Marino, pelas boas idéias e soluções sem as quais seria impossível realizar este trabalho. Também agradeço ao professor Pascoal Pagliuso pelo interesse e disponibilidade com a qual efetuou algumas medidas propostas pelos resultados teóricos do trabalho.

Agradeço aos professores e colegas do grupo de estado sólido pelas elucidativas discussões sobre os assuntos contidos aqui.

Agradeço aos funcionários da UFF especialmente aos da pós-graduação e da biblioteca.

Agradeço aos amigos e colegas, em especial ao Edson com quem dividi sala por uns quatro anos e discutimos vários temas apresentados aqui; ao Adriano pelas dicas para melhorar algumas figuras do trabalho e ao Luiz Alberto que apesar de meio sumido da universidade sempre colaborou.

Também agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro.

Agradeço finalmente a todas pessoas que faltaram aqui. Devem ser muitas pois a parte de agradecimentos foi a última que escrevi (na correria de tudo que fica para última hora).

Resumo

Este trabalho explora dois pontos de interesse atual em sistemas de férmions pesados: competição entre estados fundamentais e transições com brusca variação de volume. O estudo destes dois temas específicos proporcionou, entretanto, resultados muito mais gerais sobre transições de fase quânticas, mecanismos que levam à mudança de sua natureza e transições de fase quânticas de primeira ordem. No caso de transições volumétricas, a analogia entre um sistema tipo rede de Kondo sobre a linha de instabilidades e o sistema de ^3He sobre sua linha de fusão ainda levou a especulação sobre a utilização prática desses sistemas para construção de refrigeradores de baixas temperaturas.

No estudo de competição entre fases supercondutoras e antiferromagnéticas consideramos um modelo que contém os parâmetros de ordem de ambas as fases e um termo de interação entre eles. O método do potencial efetivo foi utilizado para calcular correções quânticas e corrigir os possíveis diagramas de fase obtidos classicamente. Foi observada quebra de simetria na fase normal separando a supercondutividade do antiferromagnetismo e mudança na natureza das transições quânticas para transições de primeira ordem. No caso de um ponto bicrítico em $T = 0$ mostramos que as correções têm pouco efeito sobre a transição quântica e construímos uma teoria de escala simples encontrando o comportamento de grandezas termodinâmicas e a forma das linhas de transição em temperatura finita.

Generalização da teoria de escala para transições de primeira ordem em $T = 0$ e considerações gerais sobre os mecanismos que levam transições contínuas a mudar para transições desta natureza em baixas temperaturas também são discutidos. Neste caso deixamos claro que a analogia entre transições quânticas em d dimensões e transições clássicas em $d + z$ dimensões pode ser enganosa pois transições quânticas são, em geral, muito mais ricas.

As transições volumétricas em sistemas de férmions pesados também foram investigadas como uma versão radical do *crossover* contínuo que ocorre na fase desordenada desses materiais na proximidade do ponto crítico quântico. Sob este ponto de vista, um modelo microscópico simples foi considerado e a instabilidade de volume prevista em função de um parâmetro que mede a razão entre o módulo volumétrico e a pressão Kondo da rede. Mostramos que a instabilidade ocorre em regiões interessantes do diagrama em um intervalo de valores que concorda com os valores experimentais para sistemas que sofrem a transição. Finalmente, para a transição no sistema de YbInCu_4 , a comparação com o sistema de ^3He sugere que esse sistema tipo rede de Kondo pode ter aplicação prática para construção de refrigeradores de baixa temperatura. Cálculos de rendimento e a proposta de refrigeração magnética são discutidos, assim como uma primeira medida experimental do efeito.

Conteúdo

1	Introdução	1
1.1	Introdução a este trabalho	1
1.2	Transições de fase quânticas e sua importância	2
1.3	Sistemas de férmions pesados	3
1.4	Transições quânticas \times transições clássicas	4
1.4.1	Transições de fase e expoentes críticos	4
1.4.2	Transições a temperatura nula	6
1.5	Teoria de escala para as transições de fase quânticas	8
2	Modelo e método do potencial efetivo	11
2.1	Modelagem do problema	11
2.2	Propagadores livres	11
2.2.1	Ação livre do modelo	11
2.2.2	Proximidade de uma fase magnética e o propagador de paramagnons* .	13
2.3	Potencial efetivo	18
2.3.1	Limite clássico	18
2.3.2	A primeira correção quântica	19
2.3.3	Generalização para diversos campos escalares*	23
3	Transições quânticas de primeira ordem	26
3.1	Introdução	26
3.2	Supercondutor acoplado com um campo de calibre	28
3.2.1	Modelo e potencial efetivo	28
3.2.2	Teoria de escala na transição quântica de primeira ordem	33
4	Flutuações quânticas em férmions pesados supercondutores	37
4.1	Introdução	37
4.2	Modelo	38
4.3	Mínimos clássicos	40
4.3.1	Extremos do potencial clássico	40
4.3.2	Condições de mínimo clássicas*	41

4.4	Potencial efetivo paramagnon-supercondutor	47
4.5	Diagrama de fases	49
4.6	Efeitos quânticos na fase normal entre as fases AF e SC	51
4.6.1	Efeitos de flutuação na fase normal perto da supercondutividade	51
4.6.2	Efeitos das flutuações na fase normal perto do ponto crítico AF	54
4.7	Ponto quântico bicrítico	58
4.8	Grupo de renormalização e considerações gerais	59
4.8.1	Mecanismos	59
4.8.2	Acoplamento com modos de Goldstone e <i>Generic Scale invariance</i>	60
4.8.3	Acoplamento entre parâmetros de ordem e a dimensão efetiva	62
5	Transições volumétricas em sistemas de férmions pesados	66
5.1	Introdução	66
5.2	A linha de <i>crossover</i>	66
5.3	Transições volumétricas	67
5.4	Modelo e análise das condições de estabilidade	68
6	Efeito Pomeranchuk e o refrigerador de estado sólido	73
6.1	O efeito Pomeranchuk em sistemas de ^3He	73
6.2	Efeito Pomeranchuk no YbInCu_4	74
6.3	Efeito do campo magnético	77
6.4	Cálculo das entropias	80
6.5	Trabalho magnético	82
6.6	Tentativa experimental	82
7	Conclusão	85
7.1	Resultados	85
7.2	Perspectivas	87
A	Ação efetiva	89
A.1	Funcionais geradores e a ação efetiva	89
B	Potencial de Coleman-Weinberg	92
B.1	Potencial efetivo	92
C	Regularização das integrais e renormalização	94
C.1	Integração	94
C.2	Renormalização	96

Lista de Figuras

2.1	Expansão em diagramas de 1 loop para Γ	22
3.1	Transição de primeira ordem em temperatura nula no potencial tipo Coleman-Weinberg.	30
3.2	Função de escala $I_3(y)$ ($d = 3$).	32
3.3	Diagrama de fases para um superfluido carregado acoplado com um campo eletromagnético. Mostramos além da linha de primeira ordem a linha crítica do superfluido neutro. Ao longo da trajetória $m^2 = m_c^2$ podemos distinguir regimes distintos explicados no texto.	33
3.4	Calor específico em função da temperatura sobre a trajetória $m^2 = m_c^2$ correspondente a transição de primeira ordem em $T = 0$. Os diferentes regimes são discutidos no texto. Note que a linha pontilhada reta desenhada no gráfico indica o comportamento $\ln T$ do regime II.	34
4.1	Diagrama de fases obtido pelo estudo do ponto crítico quântico (PCQ) em férmions pesados. Na fase desordenada a linha pontilhada representa a temperatura de coerência T_{coh} que separa duas regiões com diferentes comportamentos. A linha é discutida em mais detalhes no Capítulo 5.	38
4.2	Resultado geral da análise de extremos do potencial clássico no caso em que $m^2 < 0$ e $m_p^2 < 0$. As fases supercondutoras (SC) possuem $\varphi_c \neq 0$ e as antiferromagnéticas (AF) possuem $\phi_{3c} \neq 0$	46
4.3	Diagramas de 1 loop. Os campos supercondutores são representados pelos índices α ou $\beta = 1, 2$. A linha pontilhada representa o propagador de paramagnons da Eq. (4.2).	48
4.4	Esboço dos possíveis diagramas de fase para férmions pesados supercondutores.	49
4.5	Definição do Δ^2 como a distância entre os PCQs das fases AF e SC. m_p^2 e m^2 são as distâncias do ponto onde o sistema está sendo medido as fases AF e SC respectivamente.	53
4.6	Diagrama esquematizado levando em conta termos quânticos. O ponto crítico quântico supercondutor é deslocado quando incluímos as flutuações quânticas. O novo ponto de transição é um ponto de primeira ordem em $T = 0$	53

4.7	Novos mínimos aparecem no potencial para $um^2 \neq 0$. Na figura apresentamos o potencial em duas situações: para $M_p^2 = M_p^{c2}$ mostramos a coexistência de fases LMAF e SMAF na transição de primeira ordem (veja discussão no texto). Também mostramos o potencial no ponto de espinodal onde a fase LMAF se torna instável dentro da fase LMAF.	55
4.8	Diagrama de fases para $u = 0$ e $u \neq 0$. Δ^2 é a distância entre os PCQ's das fases AF e SC. m_p^2 e m^2 são as distâncias do ponto onde o sistema é medido para a fase AF e SC respectivamente. Quando $M_p^2 \approx m_p^2$ é reduzido, isto é, o ponto de medida se move na direção da fase AF, há uma transição de primeira ordem em M_p^{c2} entre duas fases AF com valores diferentes do parâmetro de ordem.	56
4.9	Razão $R = \langle \phi_c^{SM} \rangle / \langle \phi_c^{LM} \rangle$ entre as magnetizações de sub-rede dos estados fundamentais SMAF e LMAF em função do parâmetro relevante u^2/g	57
4.10	Diagrama de fases do sistema YbRh ₂ Si ₂ retirado da referência [54]. Na parte superior apresentamos os dados para temperatura de ordenamento (T_m) determinados por Mossbauer (círculos escuros) e resistividade (quadrados escuros). Dados para o valor do momento μ_{Yb} em função da pressão também são apresentados (quadrados brancos). No diagrama esquemático a fase de momentos altos é representada por HM e a de momentos pequenos por LM.	58
4.11	Um ponto quântico bicrítico separando uma fase antiferromagnética (AF) de uma supercondutora (SC). As duas linhas críticas em temperatura finita saem de $T = 0$ como o mesmo expoente ψ . Para $d=3$, $\psi = \nu z = 1$	60
5.1	Gráfico esquematizado da forma da susceptibilidade de sistemas como o YbInCu ₄	68
5.2	Pressão P como função do volume v_0 para uma distância fixa do PCQ, $\delta_V = 0.1$, e diversos valores de temperatura. Para $T/T_{coh} = 0.04$ o sistema está abaixo da linha espinodal apresentada na Figura 5.3 e é estável. Veja que a derivada da curva é sempre negativa conduzindo a valores positivos da compressibilidade. Para $T/T_{coh} \approx 0.07$ o sistema está sobre a espinodal e $v_0 = 1$ é o limite de estabilidade (neste ponto a derivada é zero). Para $T/T_{coh} = 0.11$ estamos acima da espinodal e o sinal da derivada da figura indica que o volume deve sofrer uma mudança brusca para um valor menor e estável (compressibilidade positiva), como indicado pela seta na Figura 5.3.	71
5.3	Diagrama de fases da rede de Kondo. O regime quântico local é válido à direita da linha $q_c \xi = 1$. A linha T_{coh} marca o crossover do comportamento tipo momentos locais (LM) para o comportamento tipo líquido de Fermi (FL). Acima das linhas espinodais $T_S(\alpha)$ o sistema é instável. A seta indica o colapso de volume do sistema localizado acima de T_{S1} . As linhas $T_S(\alpha)$ correspondem a $\alpha = 6, 20$ e 60 de baixo para cima.	72

6.1	Entropia das fases sólida e líquida do sistema de ^3He a baixas temperaturas. A transformação adiabática AB demonstrada pela linha pontilhada na figura reduz a temperatura do sistema.	74
6.2	Pressão em função da temperatura sobre a linha de fusão do ^3He . Podemos observar que a derivada é negativa em uma extensa região de temperaturas. . .	75
6.3	Pressão em função da temperatura sobre a linha de coexistência da transição volumétrica do YbInCu_4 . Os dados foram obtidos das medidas de resistividade na Ref. [69]	76
6.4	Linha de primeira ordem da transição volumétrica do Ce metálico no plano (H, T) (linha cheia). A linha pontilhada corresponde a aproximação circular discutida no texto. Figura obtida de [70].	78
6.5	Ciclo de Carnot com duas isotermas longas AB e CD and duas adiabáticas curtas AD e BC para derivação da equação de Clausius-Clapeyron em função do campo crítico na transição de primeira ordem.	79
6.6	Entropia das fases de momento locais (LM) e líquido de Fermi (FL) do YbInCu_4 a pressão ambiente e campo de instabilidade H_c , tal que, $T_V(H_V)/T_V(0) = 0.99$ [62]. O processo adiabático AB reduz a temperatura do sistema. Compare com a Figura 6.1.	81
6.7	Medida da susceptibilidade magnética em uma amostra de YbInCu_4 . Compare com o esquema apresentado na Figura 5.1.	83
6.8	Medida da temperatura em função do campo no YbInCu_4 . A primeira curva de cima para baixo se encontra acima da temperatura de transição a campo nulo e por isso não observamos efeito nenhum. Nas três curvas abaixo observamos uma queda de temperatura assim que o campo atinge o valor crítico indicado pelas setas. Os valores de campo crítico estão de acordo com os calculados neste capítulo.	84
A.1	Representação diagramática das funções de Green Γ_m	90

Lista de Tabelas

6.1	Parâmetros termodinâmicos para o YbInCu_4 retirados da referência [69]. . . .	75
6.2	Parâmetros termodinâmicos do ^3He , Ref. [74] e YbInCu_4 , Ref. [69]. (T_\times, P_\times) para o YbInCu_4 foram obtidos extrapolando a entropia do líquido de Fermi até que a curva encontre o valor da entropia dos momentos locais não interagentes.	77

Capítulo 1

Introdução

1.1 Introdução a este trabalho

Não há dúvida atualmente que o estudo de transições de fase e fenômenos críticos fornece importantes resultados para a física de materiais teórica e experimental. Este trabalho representa mais um passo para o melhor conhecimento de propriedades de uma classe de materiais a baixas temperaturas, os materiais conhecidos como férmions pesados.

Do ponto de vista teórico, apesar da simples idéia inicial de estudar efeitos de flutuações quânticas nesses sistemas (Capítulo 4) através do método do potencial efetivo descrito no Capítulo 2, os resultados conseguintes nos incentivaram a entrar em conceitos muito mais gerais. Destacamos a análise dos mecanismos que mudam a natureza das transições no estado fundamental e mostram que estas podem ser em muitos casos (se não todos) de primeira ordem. A partir daí, quando “esbarramos” com transições de primeira ordem no estado fundamental e percebemos que elas eram *fracas*¹, permitindo a aplicação aproximada de métodos de transições contínuas, também percebemos que não havia generalização dos métodos de temperatura finita para o estado fundamental. Resolvemos isso no Capítulo 3, deixando o leitor preparado para os resultados do capítulo seguinte.

Do ponto de vista experimental, os modelos estudados levam não só ao aparecimento de transições de primeira ordem em temperaturas baixas (o que já vem sendo medido, veja Capítulo 4) como também ao surgimento de fases antiferromagnéticas de momento pequeno próximas ao antiferromagnetismo usual. Talvez o nosso seja o primeiro modelo “claro” que explica este fenômeno, sem a necessidade de um parâmetro ordem oculto, como o de uma das propostas existentes. Também analisando férmions pesados mostramos porque ocorrem as transições volumétricas de primeira ordem em alguns destes sistemas através de um modelo simples (Capítulo 5). Na linha de primeira ordem desse tipo de transição foi observado que um desses sistemas, o YbInCu_4 , apresentava interessante efeito conhecido como efeito Pomeran-

¹Veja o Capítulo 3.

chuk. Logo, em analogia ao sistema de ^3He , o efeito abre a possibilidade para aplicação destes sistemas (já patenteada) para construção de refrigeradores a baixas temperaturas (Capítulo 6).

O trabalho está dividido como se segue: neste primeiro capítulo fazemos uma breve introdução ao problema das transições de fases quânticas e sistemas de férmions pesados. A introdução está deveras incompleta mas as referências citadas devem completar os espaços em branco. No Capítulo 2 descrevemos o método do potencial efetivo. Este método, usado com frequência em teoria quântica de campos, foi adaptado aqui para permitir o estudo de flutuações quânticas no modelo estudado. O Capítulo 3 generaliza a teoria de escala aplicada aos problemas de transições de primeira ordem em temperaturas finitas para as transições quânticas de maneira que as ferramentas para estudar os resultados do Capítulo 4 são fornecidas. Neste, talvez o mais importante capítulo do trabalho, apresentamos em detalhe o cálculo do potencial efetivo para um modelo que descreve a competição entre fases no estado fundamental de férmions pesados supercondutores. Discutimos a mudança de natureza da transição quântica, quebra de simetria induzida pelas flutuações e generalização do resultado para outros tipos de mecanismo. Esboçamos o tratamento por Grupo de Renormalização e discutimos porque ele é muitas vezes necessário para determinar ao certo a natureza das transições. No Capítulo 5 entramos em outra área de interesse nos sistemas de férmions pesados, as transições com bruscas variações de volume que ocorrem em alguns desses materiais. Usando métodos mais tradicionais de fenômenos críticos explicamos porque estas transições ocorrem e discutimos a possibilidade de aplicação destes materiais para construção de refrigeradores explicada em detalhe no Capítulo 6. O Capítulo 7 apresenta as conclusões gerais e perspectivas para trabalhos futuros.

Alguns cálculos desenvolvidos neste texto são tediosos e foram deixados em apêndices ou em seções marcadas com um asterisco (*). As seções marcadas não precisam ser necessariamente lidas para o entendimento do trabalho e foram adicionadas para o leitor interessado em mais detalhes.

1.2 Transições de fase quânticas e sua importância

O estudo de fenômenos críticos ganhou novo entusiasmo quando introduzido o conceito de transições de fase quânticas [1]. A análise destas transições, que se distinguem das transições usuais por ocorrerem em temperatura nula, se mostra hoje de extrema importância para a compreensão das propriedades de sistemas correlacionados em baixas temperaturas [2]. Neste trabalho estudamos transições quânticas e seus efeitos em sistemas de férmions pesados mas diversas conclusões e resultados se aplicam a transições quânticas em geral. Além dos métodos tradicionais de fenômenos críticos quânticos como *Scaling* e Grupo de Renormalização utilizamos aqui nova aproximação para este tipo de problema através do método do potencial efetivo, extensivamente usado em problemas de Teoria de Campos. O método permite a inclusão direta de flutuações quânticas na ação do sistema e o estudo da ação efetiva quântica resultante

pode ser feito através de métodos de mínimo clássicos. Em $T = 0$ observamos que a inclusão destas flutuações pode levar a transições quânticas de primeira ordem, um novo conceito para transições em $T = 0$, formalizado de maneira breve neste trabalho.

Apresentamos também, com a utilização de métodos mais tradicionais, uma modelagem que permite explicar a transformação do *crossover* contínuo entre dois comportamentos metálicos distintos em férmions pesados em uma transição abrupta de primeira ordem (Transição volumétrica conhecida com transição α - γ nos compostos de Ce). Ainda observamos que, em alguns casos, esta transição de primeira ordem pode ser utilizada de maneira prática para a refrigeração de sistemas através do efeito Pomeranchuk em analogia com o Hélio líquido. As possibilidades da construção de um sistema de refrigeração baseado no férmion pesado YbInCu₄ e resultados experimentais preliminares demonstrando o efeito também são apresentados.

1.3 Sistemas de férmions pesados

Férmions pesados são sistemas onde os elétrons em geral das camadas f de energia apresentam um comportamento instável entre localizado (elétron preso em um íon da rede deste material) e itinerante (elétron passeia “livre” pelo material) [3, 4, 5]. Esse comportamento ambíguo ocorre, por exemplo, nos elementos do início e do fim da série das terras raras, especificamente no Cério (Ce) e Itérbio (Yb) e neste caso a camada eletrônica relevante é a $4f$. Também na série dos actinídeos os elétrons da camada $5f$ apresentam esta ambiguidade em particular no Urânio (U). O comportamento instável leva a muitos efeitos interessantes como valência intermediária. Por outro lado se desprezamos flutuações de carga, encontramos nos férmions pesados uma importante competição entre o efeito Kondo [6, 7] e a interação RKKY mediada pelos elétrons de condução [8]. Esta competição é fundamental e irá determinar o diagrama de fases destes sistemas. Em geral encontramos uma rica variedade de estados fundamentais (magnéticos, supercondutores etc...). O que ocorre em grande parte dos casos é que observamos um ponto crítico quântico (PCQ) separando uma fase com ordem magnética de longo alcance de uma fase não magnética tipo líquido de Fermi, mas com parâmetros renormalizados. Este ponto crítico em $T = 0$ é responsável por várias propriedades de baixas temperaturas nestes materiais [2, 9, 10]. Em adição, novos experimentos nestes sistemas mostram que eles podem exibir fases supercondutoras (SC) próximas ou em coexistência com a fase antiferromagnética (AF) [11]. A observação da transição depende da variação não da temperatura mas de outro parâmetro como a concentração de algum elemento ou pressão [12]. A competição entre supercondutividade e magnetismo é portanto mais uma peça importante para determinação das propriedades destes sistemas e procuramos apresentar aqui algumas contribuições para melhorar a compreensão da interface e os efeitos mútuos entre essas duas fases.

Diferente dos supercondutores de alta temperatura crítica (high- T_c) que apresentam fases

normais isolantes, nos férmions pesados a fase normal é metálica e abaixo da linha de coerência² o material é essencialmente um líquido de Fermi fortemente correlacionado na proximidade de uma fase antiferromagnética [9]. Acima desta linha e em especial sobre o ponto crítico quântico encontramos um comportamento não líquido de Fermi que em geral pode ser bem explicado em termos de uma teoria crítica e expoentes associados ao PCQ [10]. Tendo bom conhecimento da fase normal estudamos a competição entre os estados fundamentais nestes materiais com um modelo fenomenológico do tipo Ginzburg-Landau contendo parâmetros de ordem supercondutores e magnéticos. Incluímos correções quânticas através do método do potencial efetivo e investigamos os efeitos das correções em algumas possibilidades para o diagrama de fases obtido classicamente.

1.4 Transições quânticas × transições clássicas

1.4.1 Transições de fase e expoentes críticos

Grande parte deste trabalho procura caracterizar transições quânticas em férmions pesados e supercondutores. Fazemos então breve introdução às transições de fase quânticas e transições de fase em geral. Há longa bibliografia especializada para uma revisão mais detalhada em métodos de estudo de fenômenos críticos [13].

Fazemos usualmente referência a transições de fase quando observamos uma mudança brusca das propriedades de um sistema. Essas transições podem ser estudadas pela termodinâmica e são caracterizadas por singularidades nos potenciais termodinâmicos e, conseqüentemente, por singularidades também nas grandezas físicas no ponto de transição³. Uma transição de fase “clássica” é movida pelo efeito térmico e portanto é caracterizada por uma temperatura de transição (temperatura crítica). Por isso, próximo a uma transição dessa espécie, procuramos descrever o comportamento singular das grandezas físicas do sistema através de comportamentos assintóticos em função de uma variável térmica

$$t = \frac{(T_c - T)}{T_c}. \quad (1.1)$$

Para algumas grandezas importantes o comportamento assintótico é descrito por:

- Calor específico (campo nulo):

$$c \propto t^{-\alpha} \quad (1.2)$$

- Susceptibilidade isotérmica:

$$\chi \propto t^{-\gamma} \quad (1.3)$$

²O conceito da linha de coerência será introduzido nos próximos capítulos

³Neste caso nos referimos às transições de segunda ordem. No caso de transições de primeira ordem não há de fato divergências. Veja o Capítulo 3.

Definimos em muitos casos também, para caracterizar as transições, um parâmetro ϕ , conhecido como parâmetro de ordem. O parâmetro de ordem caracteriza a fase do sistema assumindo o valor $\phi = 0$ em toda região de uma das fases e qualquer valor $\phi \neq 0$ na região da fase oposta. No caso de um ferromagneto, por exemplo, o parâmetro de ordem pode ser a magnetização m que assume um valor não nulo na fase “ordenada” ($T < T_c$) e um valor nulo na fase “desordenada” ($T > T_c$). O comportamento assintótico do parâmetro de ordem também é estudado:

$$\phi \propto t^\beta \quad (1.4)$$

Na presença de campos externos estamos interessados ainda no comportamento assintótico do parâmetro de ordem em relação ao campo conjugado na isoterma crítica:

$$\phi(t = 0) \propto |H_e|^{1/\tilde{\delta}} \text{sgn}(H_e) \quad (1.5)$$

onde H_e é um campo externo e $\text{sgn}(x)$ é a função sinal.

Observamos que o comportamento assintótico das funções termodinâmicas é determinado pelos expoentes das relações acima, conhecidos como expoentes críticos. Estes expoentes não são independentes e estão relacionados entre si por algumas desigualdades derivadas da termodinâmica:

- Desigualdade de Rushbrooke

$$\alpha + 2\beta + \gamma \geq 2 \quad (1.6)$$

- Primeira desigualdade de Griffiths

$$\alpha + \beta(1 + \tilde{\delta}) \geq 2 \quad (1.7)$$

- Segunda desigualdade de Griffiths

$$\gamma \geq \beta(\tilde{\delta} - 1) \quad (1.8)$$

- Desigualdade de Fisher

$$\gamma \geq (2 - \eta)\nu \quad (1.9)$$

- Desigualdade de Josephson

$$d\nu \geq 2 - \alpha. \quad (1.10)$$

Nas duas últimas relações d é a dimensão e os expoentes ν e η são expoentes referentes ao comportamento assintótico de duas grandezas importantes quando estudamos transições de fase. São elas respectivamente:

- Comprimento de correlação ξ

$$\xi \propto |t|^{-\nu} \quad (1.11)$$

- Função de correlação $\Gamma(\mathbf{r}) = \langle \Phi(\mathbf{r})\Phi(0) \rangle - \langle \Phi(0) \rangle^2$

$$\Gamma(\mathbf{r}) \propto \frac{1}{r^{d-2+\eta}} \quad (1.12)$$

É interessante observar que na criticalidade ($t = 0$) essas desigualdades entre expoentes críticos são satisfeitas como igualdades e conhecidas como leis de escala.

Outro ponto interessante é a universalidade que ocorre nos valores dos expoentes. Diversos modelos, a princípio muito diferentes, podem apresentar propriedades idênticas no limite de longos comprimentos de onda e conseqüentemente possuírem os mesmos expoentes críticos associados. Entretanto, a posição do ponto crítico e as amplitudes associadas às formas de escala são em geral não-universais [13] e dependem de propriedades microscópicas de cada modelo. Uma interessante exceção encontramos estudando a condutividade a temperatura nula em sistemas supercondutor-isolante [14] e metal-isolante [15]. Valores universais para a condutividade em $T = 0$ são obtidos e os resultados sobre a existência de um valor universal dessa amplitude voltaram a discussão [16].

1.4.2 Transições a temperatura nula

De maneira diferente das transições clássicas que são induzidas pela variação da temperatura, as transições em $T = 0$ envolvem uma mudança no estado fundamental do sistema através da variação de outro parâmetro do modelo. Este parâmetro pode ser por exemplo a dopagem em um supercondutor de alta temperatura crítica ou a desordem em um condutor próximo a sua transição metal isolante. As transições a temperatura nula apresentam como principal diferença (em relação as transições a temperaturas finitas) a necessidade imprescindível de levar em conta os efeitos quânticos do sistema. Na verdade é difícil saber exatamente a que temperatura os efeitos quânticos se tornam importantes na descrição de um sistema mas é certo que a $T = 0$ esses efeitos são relevantes. Por isso nos referimos às transições a $T = 0$ como transições de fase quânticas enquanto as demais transições a temperaturas finitas são denominadas “clássicas” mesmo quando envolvem sistemas essencialmente quânticos como hélio líquido ou supercondutores. Transições de fase a temperatura finita em sistemas quânticos desse tipo podem ser perfeitamente explicadas pela mecânica estatística clássica. Para entender isso melhor temos que definir com mais detalhes o comprimento e a função de correlação introduzidos nas Eq. (1.11) e (1.12). A função de correlação (densidade-densidade, spin-spin, etc. . .) é definida como

$$\Gamma(\mathbf{r}) = \langle \Phi(\mathbf{r})\Phi(0) \rangle - \langle \Phi(0) \rangle \langle \Phi(\mathbf{r}) \rangle \quad (1.13)$$

e está relacionada, dependendo do sistema, com amplitudes de espalhamento ou susceptibilidades. Seu comportamento assintótico geral para longas distâncias (e longe do ponto crítico) é dado por

$$\Gamma(\mathbf{r}) \sim e^{-r/\xi} \text{ quando } r \rightarrow \infty \quad (1.14)$$

Essa relação define o comprimento de correlação ξ tal que se $r \gg \xi$ as partes do sistema estão descorrelacionadas. Agora, tendo em mente as definições acima, podemos mostrar através de resultados experimentais que $\xi \rightarrow \infty$ no ponto crítico (PC). Experimentalmente sabemos que perto do PC há divergência de susceptibilidades (por exemplo em ferromagnetos a campo nulo) e amplitudes de espalhamento (por exemplo em espalhamento em líquidos binários ou espalhamento de neutrons em ferromagnetos). Usando a relação entre flutuações e susceptibilidades

$$\chi(T, H) = \int d\mathbf{r} \Gamma(\mathbf{r}, T, H) \quad (1.15)$$

chegamos a conclusão que perto do PC a integral deve divergir. Entretanto a função de correlação é limitada e se seu comportamento em longas distâncias é exponencial, dado pela Eq. (1.14), a integral é certamente convergente. Por isso, perto do PC, o decaimento exponencial deve ser “amortecido” o que só é possível se $\xi \rightarrow \infty$. Ainda há, além da divergência do comprimento de correlação espacial, divergência de um “comprimento temporal” no PC, importante quando temos que considerar esse tipo de flutuações. Por isso, as transições de fase contínuas são usualmente acompanhadas por um comprimento e um tempo de correlação divergentes. Temos que considerar então, na proximidade do PC, apenas as correlações de grandes comprimentos de onda e de longos tempos de relaxação.

De acordo com estes resultados podemos entender porque as transições em temperatura nula são diferentes das transições usuais em temperatura finita. Em temperatura finita, mesmo para modelos essencialmente quânticos, as flutuações importantes perto do PC são bem capturadas classicamente. Isso acontece pois podemos dizer que um sistema quântico se comporta classicamente quando a energia associada às flutuações de temperatura excede a energia associada às frequências de interesse, isto é

$$\hbar\omega^* \ll k_B T_c \quad (1.16)$$

onde ω^* é a frequência relacionada às flutuações quânticas. Como vimos, se a transição é acompanhada por um tempo de correlação divergente $\omega^* \rightarrow 0$ quando $T \rightarrow T_c$ e por isso para qualquer transição com $T \neq 0$ encontramos uma temperatura suficientemente próxima de T_c tal que a relação (1.16) é satisfeita. Ou seja, sempre encontramos uma temperatura suficientemente próxima de T_c para a qual o sistema se comporta quase classicamente. Para transições em $T = 0$ não podemos dizer o mesmo, o que torna este tipo de transição de fase diferente e justificando sua referência por transição de fase quântica⁴.

⁴Para temperaturas muito baixas os efeitos quânticos são observados experimentalmente e influem até mesmo em transições térmicas se $T_c \approx 0$ [2].

1.5 Teoria de escala para as transições de fase quânticas

As transições de fase quânticas, como discutimos nas seções anteriores, são caracterizadas por divergências de um comprimento e um tempo característicos:

$$\xi \sim \delta^{-\nu} \quad (1.17)$$

$$\tau \sim \delta^{-\nu z} \quad (1.18)$$

onde δ mede a distância até a instabilidade em $T = 0$ e as relações definem respectivamente os expoentes críticos ν e z . Repare que o expoente z é definido devido à possível anisotropia entre a dimensão temporal e as dimensões espaciais. No caso isotrópico temos simplesmente $z = 1$ e a divergência do “comprimento de correlação temporal” na criticalidade é idêntica a divergência do comprimento de correlação espacial.

A variável que mede a distância do ponto crítico δ é do tipo $J - J_c$ onde J é um parâmetro da Hamiltoniana. De acordo com a hipótese de Kadanoff é possível reescalar

$$J' = b^{-y} J \quad (1.19)$$

$$\delta' = b^a \delta \quad (1.20)$$

$$\tau' = b^z \tau \quad (1.21)$$

onde o fator de escala $b = (L/L')$, L e L' são as dimensões lineares do sistema original e do sistema reescalado respectivamente. Podemos relacionar estes expoentes y e a com os expoentes críticos. O comprimento de correlação deve escalar como

$$\xi'(|\delta'|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b} \quad (1.22)$$

para um valor de b arbitrário. Usando (1.20) temos

$$\xi'(b^a |\delta|) = \frac{\xi(|\delta|)}{b} \quad (1.23)$$

e fazendo $b^a |\delta| = 1$ ou $b = |\delta|^{-1/a}$ encontramos para o comportamento do comprimento de correlação próximo da criticalidade

$$\xi = |\delta|^{-1/a} \xi'. \quad (1.24)$$

Portanto, de acordo com (1.17) o expoente ν é

$$\nu = \frac{1}{a}. \quad (1.25)$$

Para encontrar a relação com o expoente z basta exigir que a incerteza

$$\Delta E \Delta \tau \geq \hbar \quad (1.26)$$

seja invariante de escala. Observamos que ΔE (uma energia) deve escalar como J (outra energia) em (1.19) e o tempo característico escala como (1.21) na medida que podemos escrever

$$\begin{aligned} \Delta E' \Delta \tau' &= \Delta E \Delta \tau \quad (\text{invariante de escala}) \\ \Rightarrow b^{(z-y)} \Delta E \Delta \tau &= \Delta E \Delta \tau \\ &\Rightarrow z = y. \end{aligned} \quad (1.27)$$

A parte singular da energia livre a $T = 0$ se comporta como:

$$f_s = \frac{F_s}{L^d} = J f(\delta) \quad (1.28)$$

e por isso reescalando por $L' = L/b$ temos

$$f'_s = \frac{F_s}{(L')^d} = b^d f_s = J' f(|\delta'|). \quad (1.29)$$

Usando (1.19) e (1.20) encontramos

$$b^d f_s = b^{-y} J f(b^a |\delta|) \quad (1.30)$$

e fazendo $b = |\delta|^{-1/a}$ temos

$$\frac{f_s}{J} = |\delta|^{\frac{y+d}{a}} f(1). \quad (1.31)$$

Mas a parte singular da densidade de energia se comporta como

$$f_s \propto |\delta|^{2-\alpha} \quad (1.32)$$

o que define o expoente α . Com o uso das relações para z e ν (1.25) e (1.27) em (1.31) obtemos que a densidade de energia livre escala como

$$f_s \propto |\delta|^{\nu(d+z)} \quad (1.33)$$

e portanto os expoentes satisfazem a igualdade

$$2 - \alpha = \nu(d + z). \quad (1.34)$$

Podemos observar que esta relação é idêntica a desigualdade de Josephson satisfeita como igualdade com uma dimensão efetiva $d + z$. Como já argumentamos, é característica das transições a $T = 0$, onde a dinâmica do sistema deve obrigatoriamente ser levada em conta, que o “tempo” seja tomado como uma dimensão. Se $z = 1$, tempo e espaço são isotrópicos,

e o modelo quântico de d dimensões pode ser tratado como um modelo clássico em $(d + 1)$ dimensões⁵. Neste caso, as relações entre os expoentes críticos devem valer para a dimensão efetiva $d + 1$. Neste trabalho trataremos casos com $z \neq 1$ de forma que o comprimento temporal contribui de maneira diferente para dimensão efetiva do modelo. Formas de escala para temperatura finita e o estudo completo das teorias de escala em transições quânticas utilizadas neste trabalho podem ser encontradas em [2].

⁵Isso nem sempre é verdade, veja discussão na seção 4.8.

Capítulo 2

Modelo e método do potencial efetivo

2.1 Modelagem do problema

O método fundamental utilizado para estudar os efeitos de correções quânticas na proximidade de transições de fase nos sistemas considerados foi o método do potencial efetivo. O método representa uma maneira direta e eficiente de se incluir flutuações na ação associada a um determinado sistema [17, 18, 19]. No estado fundamental, as flutuações quânticas são de grande importância para as transições e podem levar a interessantes resultados como quebra espontânea de simetria e transições de primeira ordem.

Este capítulo é especialmente dedicado ao método do potencial efetivo e sua aplicação em problemas de matéria condensada. Entretanto, o cálculo do potencial requer o conhecimento da parte livre da ação do sistema (explicamos porquê na seção 2.3.2). Essa parte livre é geralmente a parte associada ao termo de energia cinética da ação, contudo, definimos aqui como parte livre qualquer termo quadrático da ação que possa ser integrado diretamente mesmo que inclua interações. Achar a parte livre em modelos interagentes pode então ser um problema difícil e vamos observar que a sua forma exata tem grande importância para os resultados. Portanto, antes de discutir o método do potencial efetivo, vamos discutir algumas aproximações para a parte livre e os propagadores associados as fases que vamos estudar neste trabalho.

2.2 Propagadores livres

2.2.1 Ação livre do modelo

Como discutido acima a parte quadrática associada ao potencial é importante para o cálculo das flutuações quânticas. Mesmo esta parte quadrática pode ser complicada de se obter e em

geral depende do tipo de flutuações que induzem a transição. No caso dos férmions pesados supercondutores a supercondutividade aparece em geral próxima de uma fase antiferromagnética e a competição entre esses estados é parte fundamental deste trabalho. Por isso nesta seção discutimos a forma da ação livre para os campos da fase supercondutora (SC) e da antiferromagnética (AF).

A parte livre associada ao supercondutor pode ser obtida diretamente da generalização quântica do Ginzburg-Landau clássico. Neste caso consideramos um modelo invariante de Lorentz (caracterizado por um expoente dinâmico $z = 1$). Entretanto, encontrar a ação livre do supercondutor em $T = 0$ é um problema complicado visto que o tipo das flutuações que levam à supercondutividade podem modificar a parte quadrática. Para muitos casos de interesse como supercondutores tipo BCS, a transição quântica ocorre para qualquer interação atrativa U diferente de zero. Como consequência de uma interação crítica nula ($U_c = 0$) encontramos uma ação quadrática com propriedades anômalas [21]. Já na situação em que interações com impurezas magnéticas quebram os pares supercondutores a ação quadrática correta é associada com um expoente $z = 2$ [20]. O caso de $z = 2$ também será discutido neste trabalho (discussão no final da seção 4.8). Por enquanto, consideramos a forma invariante de Lorentz mais simples

$$G_0^{Mink}(k) = G_0(\omega, \mathbf{q}) = \frac{i}{k^2 - m^2} \quad (2.1)$$

onde k é um quadrivetor (ω, \mathbf{q}) e $k^2 = \omega^2 - q^2$. Ou, como vamos optar em trabalhar no espaço euclidiano,

$$G_0(k) = G_0(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{k^2 + m^2} \quad (2.2)$$

onde $k^2 = \omega^2 + q^2$. No propagador está clara a relação isotrópica entre tempo e espaço associada com o expoente dinâmico $z = 1$. Assumimos o momento de Fermi $q_F = 0$ (equivalente a contar os vetores q a partir do valor de q_F). Desta maneira o propagador descreve um *gap* ou *pseudogap* na fase precursora da supercondutividade. Há evidências deste *pseudogap* principalmente em supercondutores High- T_c [22] e atualmente em férmions pesados [23]. Modelos de Hubbard com interação atrativa também possuem fases normais com ordem de carga e *gaps* que desaparecem no PCQ supercondutor [24]. O método do potencial efetivo é originalmente desenvolvido no espaço de Minkowski [18] e seguimos demonstração semelhante aqui mas optamos em problemas de matéria condensada trabalhar diretamente no espaço euclidiano.

Para a fase AF utilizamos um propagador que leva em consideração a interação eletrônica em uma aproximação de RPA (Random Phase Approximation). É o termo de interação eletrônica que induz a transição magnética e a parte quadrática da ação é modificada pela inclusão das flutuações de spin associadas. Para proximidade de uma transição antiferromagnética esta ação modificada fornece o propagador

$$D_0(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{|\omega|\tau + q^2 + m_p^2} \quad (2.3)$$

onde τ é um tempo de relaxação característico e o parâmetro m_p^2 está relacionado com a repulsão de Coulomb local U e a densidade de estados no nível de Fermi $N(E_F)$ por

$$m_p^2 = 1 - UN(E_F). \quad (2.4)$$

Este propagador é conhecido como propagador de paramagnons antiferromagnéticos [25]. Reparamos que ele tem uma forma dissipativa e o expoente dinâmico associado é $z = 2$. Na seção seguinte demonstramos detalhadamente a forma da Eq. (2.3) seguindo o trabalho original de Hertz [25].

2.2.2 Proximidade de uma fase magnética e o propagador de paramagnons*

Na proximidade de uma fase magnética em baixas temperaturas é possível encontrar uma forma simples para o propagador livre incluindo interações eletrônicas em RPA (Random Phase Approximation) [25].

Começamos encontrando um funcional efetivo para a teoria utilizando a transformação de Hubbard-Stratonovich. Consideramos um modelo com interação do tipo Hubbard

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

$$\mathcal{H}' = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} = \frac{U}{4} \sum_i (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow})^2 - \frac{U}{4} \sum_i (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})^2. \quad (2.5)$$

Temos que calcular a função de partição na representação de interação, dada por [26]

$$\mathcal{Z} = Tr \left(e^{-\beta \mathcal{H}_0} T_\tau \left\{ \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} \mathcal{H}'(\tau) d\tau \right] \right\} \right). \quad (2.6)$$

Estamos interessados apenas em flutuações de spin e desprezamos o segundo termo de \mathcal{H}' na Eq. (2.5) de maneira que¹

$$\mathcal{Z} = Tr \left(e^{-\beta \mathcal{H}_0} T_\tau \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta \hbar} d\tau \frac{1}{2} \left[\left(\frac{U}{2} \right)^{1/2} \sum_{i,\sigma} \sigma n_{i,\sigma}(\tau) \right]^2 \right\} \right) \quad (2.7)$$

onde escrevemos $n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow} = \sum_\sigma \sigma n_{i,\sigma}$. A idéia da transformação de Hubbard-Stratonovich é simples, aplicamos para cada tempo τ e sítio i a identidade

$$e^{a^2/2} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2 - ax}. \quad (2.8)$$

¹O tratamento do termo desprezado e demais características do modelo podem ser encontrados em [27].

Isso pode ser feito para a Eq. (2.7) com

$$a = \left(\frac{U}{2}\right)^{1/2} \sum_{i,\sigma} \sigma n_{i,\sigma}(\tau).$$

Se desprezamos as constantes multiplicativas e introduzimos o campo auxiliar $\psi_i(\tau)$ temos

$$\mathcal{Z} = Tr \left(e^{-\beta\mathcal{H}_0} T_\tau \int \prod_i d\psi_i(\tau) e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \sum_i \psi_i^2(\tau) d\tau - \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \sigma n_{i,\sigma}(\tau) \left(\frac{U}{2}\right)^{1/2} \psi_i(\tau)} \right) \quad (2.9)$$

onde fizemos $\hbar = 1$ por economia de notação. Na prática o que conseguimos com a transformação é descrever o sistema em um formalismo de integrais de trajetória. O operador de ordenamento temporal não age no campo auxiliar visto que $\psi_i(\tau)$ é apenas uma função e não um operador. A exponencial pode então ser fatorada o que fornece

$$\mathcal{Z} = Tr \left[e^{-\beta\mathcal{H}_0} \int \mathcal{D}\psi_i(\tau) e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \sum_i \psi_i^2(\tau) d\tau} T_\tau \left(e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \sigma V_i(\tau) \hat{n}_{i,\sigma}(\tau)} \right) \right] \quad (2.10)$$

onde fizemos

$$\mathcal{D}\psi_i(\tau) = \prod_i d\psi_i(\tau)$$

e

$$V_i(\tau) = \left(\frac{U}{2}\right)^{1/2} \psi_i(\tau). \quad (2.11)$$

A notação $\hat{n}_{i,\sigma}(\tau)$ também deixa claro que \hat{n} é um operador e por isso sofre ordenamento temporal e a ação do traço. Desta forma, desprezando as constantes multiplicativas, o traço só atua no último fator e temos

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\psi_i(\tau) e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \sum_i \psi_i^2(\tau) d\tau} Tr \left[e^{-\beta\mathcal{H}_0} T_\tau \left(e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \sigma V_i(\tau) \hat{n}_{i,\sigma}(\tau)} \right) \right]. \quad (2.12)$$

Ainda, usando a definição de média, podemos escrever

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_0 \int \mathcal{D}\psi_i(\tau) e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \sum_i \psi_i^2(\tau) d\tau} \left\langle T_\tau \left(e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \sigma V_i(\tau) \hat{n}_{i,\sigma}(\tau)} \right) \right\rangle_0 \quad (2.13)$$

onde

$$\left\langle T_\tau \left(e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \sigma V_i(\tau) \hat{n}_{i,\sigma}(\tau)} \right) \right\rangle_0 = \frac{1}{\mathcal{Z}_0} Tr \left[e^{-\beta\mathcal{H}_0} T_\tau \left(e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \sigma V_i(\tau) \hat{n}_{i,\sigma}(\tau)} \right) \right]. \quad (2.14)$$

Observe que a média é calculada em um funcional quadrático pois \hat{n} envolve dois operadores apenas. Podemos então integrar exatamente esta parte obtendo

$$\begin{aligned} \left\langle T_\tau \left(e^{-\int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \sigma V_i(\tau) \hat{n}_{i,\sigma}(\tau)} \right) \right\rangle_0 &= \det \left[G_0 (G_0^{-1} - \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \sigma V_i(\tau)) \right]^{-1} \\ &= \det \left[1 - \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \sigma V_i(\tau) G_0 \right]^{-1} \end{aligned} \quad (2.15)$$

resultado que pode ser substituído na expansão Eq. (2.13)

$$\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_0 \int \mathcal{D}\psi_i(\tau) e^{-\frac{1}{2} \int_0^\beta \sum_i \psi_i^2(\tau) d\tau} e^{\text{tr} \ln [1 - \sigma V G_0]} \quad (2.16)$$

onde

$$V = V_{ij}(\tau, \tau') = V_i(\tau) \delta_{ij} \delta(\tau - \tau'). \quad (2.17)$$

Ainda usamos na forma para \mathcal{Z} acima que $\ln[\det M] = \text{Tr} \ln M$ e a operação de traço soma nos índices e integra em $d\tau$.

Todo esse cálculo foi feito apenas para encontrar uma ação efetiva para a teoria em um formalismo de integrais de trajetória dada pela Eq. (2.16). Entretanto a integral acima é tão difícil de resolver quanto o modelo original. Sua vantagem é que permite simples expansão em função do campo ψ . Este campo auxiliar representa agora o parâmetro de ordem do modelo e por isso é pequeno perto de uma transição de segunda ordem, exatamente a região em que estamos interessados. Temos então que expandir a ação obtida na Eq. (2.16) e dada por

$$S[\psi] = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau \sum_i \psi_i^2(\tau) - \text{tr} \ln [1 - \sigma V G_0]. \quad (2.18)$$

Para isso usamos que

$$\sum_\sigma \text{tr} \ln [1 - \sigma V G_0] = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \text{tr} [(V G_0)^{2n}]. \quad (2.19)$$

Nesta equação todas as potências ímpares desaparecem por causa da soma em σ . Calculamos agora o primeiro termo da expansão

$$\text{tr} [(V G_0)^2] = \int d\tau d\tau' \sum_{i,j} V_i(\tau) V_j(\tau') G_0^{ij}(\tau, \tau') G_0^{ji}(\tau', \tau). \quad (2.20)$$

Para entender este cálculo basta lembrar que o traço soma nos índices e integra nos tempos. Ainda note que os V 's são matrizes diagonais mas as funções de Green livres não necessariamente ($G_0 = G_{ij}^0(\tau, \tau')$). Vamos agora inserir transformadas de Fourier

$$V_i(\tau) = \sum_{k,n} V_k(\omega_n) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i - i\omega_n\tau} \quad (2.21)$$

$$G_{ij}^0(\tau, \tau') = \sum_{k,n} G_0^k(\omega_n) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) - i\omega_n(\tau - \tau')} \quad (2.22)$$

na Eq.(2.20). Os argumentos das exponenciais fornecem restrições nos momentos e nas frequências do tipo

$$\delta(\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_3 - \mathbf{k}_4) \delta(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3 + \mathbf{k}_4) \delta(\omega_1 + \omega_3 - \omega_4) \delta(\omega_2 - \omega_3 + \omega_4) \quad (2.23)$$

e portanto

$$\text{Tr}[(VG_0)^2] = \sum_{k1, k3, \omega1, \omega3} V_{k1}(\omega_1) V_{-k1}(-\omega_1) G_0^{k3}(\omega_3) G_0^{k1+k3}(\omega_1 + \omega_3). \quad (2.24)$$

Agora, lembre que o campo ψ , sobre o qual estamos expandindo, está dentro da definição de V na Eq. (2.11)

$$V_i(\tau) = \left(\frac{U}{2}\right)^{1/2} \psi_i(\tau) \quad (2.25)$$

tal que a Eq. (2.24) fica

$$\text{Tr}[(VG_0)^2] = \frac{U}{2} \sum_{q,m} |\psi(q, \omega_m)|^2 \sum_{k,n} G_0(k, \omega_n) G_0(k+q, \omega_n + \omega_m). \quad (2.26)$$

E lembrando a definição da susceptibilidade

$$\chi_0(q, \omega) = \sum_{k,n} G_0(k, \omega_n) G_0(k+q, \omega_n + \omega) \quad (2.27)$$

temos para o primeiro termo da expansão

$$\text{Tr}[(VG_0)^2] = \frac{U}{2} \sum_{q,m} \chi_0(q, \omega_m) |\psi(q, \omega_m)|^2. \quad (2.28)$$

Note que o coeficiente do primeiro termo é dado pela susceptibilidade de um sistema de elétrons na rede. Podemos, incluindo interações, calcular esta susceptibilidade em RPA (Random Phase Approximation) [26, 28]

$$\text{Im}\chi(\omega, \mathbf{q}) = \text{Im} \left(\frac{\chi_0(\omega, \mathbf{q})}{1 - U\chi_0(\omega, \mathbf{q})} \right) \quad (2.29)$$

Onde χ_0 é a susceptibilidade do modelo livre. Esta susceptibilidade fornece uma boa representação para o propagador dos paramagnons associado ao termo de primeira ordem da expansão. Se estamos perto de uma instabilidade magnética podemos expandir χ_0 para longos comprimentos de onda e baixas frequências. Para o caso ferromagnético a instabilidade ocorre em $q = 0$ e a expansão substituída na Eq. (2.29), em unidades apropriadas, fornece o propagador (inverso do termo quadrático)

$$G_{fm}(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{\frac{|\omega|}{q} + q^2 + m_p^2}. \quad (2.30)$$

O resultado indica que o tempo de vida de uma excitação com vetor de onda q é proporcional a $1/q$. Essa diferença é fundamental para o caso de nosso interesse, em que estamos na proximidade de uma instabilidade antiferromagnética. Isso porque a instabilidade agora ocorre em um vetor $q = q_0 \neq 0$ exigindo uma expansão em torno de q_0 . O resultado para o tempo de relaxação não contém nenhuma dependência especial em q e por isso obtemos o propagador de paramagnons

$$D_0(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{|\omega|\tau + q^2 + m_p^2} \quad (2.31)$$

onde τ é o tempo de relaxação característico e m_p^2 é relacionado com a interação de Coulomb U e a densidade de estados no nível de Fermi $N(E_F)$ por

$$m_p^2 = 1 - UN(E_F). \quad (2.32)$$

Não é difícil (mas é trabalhoso) mostrar que o termo seguinte é quártico em ψ e tem a forma

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\Omega_4} \sum_{\{q_i\}, \{\omega_i\}} v_4(q_1, \omega_1, q_2, \omega_2, q_3, \omega_3, q_4, \omega_4) \times \\ &\quad \times \psi(q_1, \omega_1) \psi(q_2, \omega_2) \psi(q_3, \omega_3) \psi(q_4, \omega_4) \delta\left(\sum_i^4 q_i\right) \delta\left(\sum_i^4 \omega_i\right) \end{aligned} \quad (2.33)$$

de maneira que a expansão geral é

$$\begin{aligned} S_{mag}(\psi) &= \int d^4k v_2(k) |\psi(k)|^2 \\ &+ \int d^4k_1 d^4k_2 d^4k_3 d^4k_4 v_4(k_1, k_2, k_3, k_4) \psi(k_1) \psi(k_2) \psi(k_3) \psi(k_4) \delta(k_1 + k_2 + k_3 + k_4) \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (2.34)$$

e os coeficientes v_m são proporcionais ao loop de m propagadores de elétrons [29].

Finalmente, observamos que a derivação acima é facilmente generalizada para uma forma que preserva a invariância rotacional de uma Hamiltoniana com vetores $\vec{\psi}$ no lugar dos ψ 's. A Hamiltoniana nesta situação deve conter um termo de spins $\vec{s}_i \cdot \vec{s}_i$ no lugar de apenas o termo $s_i^z s_i^z$. A demonstração segue a mesma linha e o resultado final para o termo quadrático, que nos fornece o propagador, é idêntico mas com $|\vec{\psi}|^2$ no lugar de $|\psi|^2$. No termo quártico da Eq. (2.34) encontramos agora a forma simples

$$(|\vec{\psi}| \cdot |\vec{\psi}|)(|\vec{\psi}| \cdot |\vec{\psi}|) \quad (2.35)$$

mas também podemos considerar a interação

$$(|\vec{\psi}| \times |\vec{\psi}|)(|\vec{\psi}| \times |\vec{\psi}|).$$

No caso dos férmions pesados estudados encontramos em geral forte anisotropia [30] e por isso desenvolvemos aqui os cálculos para um escalar ψ . Entretanto, não é difícil mostrar que se consideramos o caso vetorial e apenas a interação quártica mais simples da Eq. (2.35) o resultado para o potencial efetivo tem a mesma forma com mudanças apenas nas constantes dos termos obtidos. No Capítulo 4, depois de obter potenciais efetivos em diversas situações, vamos discutir aspectos gerais e esperamos deixar claro que a dinâmica das flutuações, em especial a dimensão efetiva ($d + z_{din}$), é a maior responsável pela forma qualitativa dos resultados obtidos.

2.3 Potencial efetivo

2.3.1 Limite clássico

Vamos agora desenvolver de maneira resumida o método exaustivamente usado neste trabalho para calcular correções quânticas, o método do potencial efetivo. Começaremos definindo funções de Green e soluções clássicas para depois mostrar que o método consiste em uma expansão em torno destas soluções.

A função de Green dos operadores $\varphi(x_1) \dots \varphi(x_m)$ é dada por

$$G_m(x_1 \dots x_m) = \left[\int \mathcal{D}\phi \phi(x_1) \dots \phi(x_m) e^{\frac{i}{\hbar} S[\phi]} \right] \left[\int \mathcal{D}\phi e^{\frac{i}{\hbar} S[\phi]} \right]^{-1}. \quad (2.36)$$

Repare que estamos trabalhando no espaço de Minkowski mas a troca para o espaço euclidiano pode ser feita por $iS[\phi] \rightarrow (-S_E[\phi])$ na equação anterior. Todas conclusões desta seção são equivalentes para funções de Green no espaço euclidiano.

Quando $\hbar \rightarrow 0$ o comportamento oscilatório do integrando sugere que o termo que minimiza a ação S tal que $S = S_{cl}[\phi_c]$ domina toda a soma de maneira que este termo é sozinho

o responsável pelas propriedades físicas do modelo. Este mínimo da ação, ou seja, a ação clássica, é dado pelo campo ϕ_c que é solução de

$$\frac{\delta S[\phi]}{\delta \phi(x)} = 0. \quad (2.37)$$

Se há apenas uma solução temos para a função de Green

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} G_m(x_1 \dots x_m) = G_m^c(x_1 \dots x_m) = \phi_c^m \quad (2.38)$$

pois

$$G_m^c(x_1 \dots x_m) = G_m^c(x_1 \dots x_{m-r}) G_m^c(x_{m-r+1} \dots x_m) \quad (2.39)$$

que indica a inexistência de correlação quântica como é esperado de uma teoria clássica. Para um modelo quântico ($\hbar \neq 0$) deve ser possível de alguma forma fazer uma expansão em \hbar em torno da solução clássica procurando assim incluir termo a termo as correções quânticas de ordem cada vez maior. Aparentemente, em (2.36), tal expansão não é razoável desde que é a soma infinita em termos de \hbar que traz os efeitos quânticos. No entanto, uma expansão nesse sentido é possível para os funcionais W ou Γ e pode fornecer uma boa comparação entre a teoria quântica e a clássica. No Apêndice A discutimos estes funcionais e o significado do potencial efetivo.

2.3.2 A primeira correção quântica

Procurando pelas correções quânticas a partir do resultado clássico partimos do funcional gerador normalizado

$$\tilde{Z}[j, \phi] = \int \mathcal{D}\phi \exp \frac{i}{\hbar} \left[S[\phi] + \int j\phi \right]. \quad (2.40)$$

Para simplificar o cálculo a renormalização é suposta implícita de forma que

$$S[\phi] = S_R[\phi] + \hbar \delta S[\phi] \quad (2.41)$$

onde $S_R[\phi]$ é a ação renormalizada e $\hbar \delta S[\phi]$ são os contratermos necessários². No limite $\hbar \rightarrow 0$ o campo $\phi = \phi_c[j]$ é a solução clássica tal que

$$\left. \frac{\delta S_R}{\delta \phi(x)} \right|_{\phi=\phi_c[j]} + j(x) = 0 \quad (2.42)$$

pois a ação está na presença de uma fonte externa j . Vamos agora expandir $S_R + \int j\phi$ em torno da solução $\phi_c[j] = \phi_c^j$ usando

$$\phi(x) = \phi_c^j + \hbar^{1/2} \eta(x). \quad (2.43)$$

²A primeira correção é de ordem \hbar e por isso colocamos este fator explicitamente nos contratermos.

O novo campo $\eta(x)$ descreve as flutuações do campo $\phi(x)$ em torno do resultado clássico. Encontramos

$$\tilde{Z}[j, \eta] = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[S[\phi_c^j + \hbar^{1/2}\eta] + \int d^4x j(x)(\phi_c^j + \hbar^{1/2}\eta(x)) \right] \right\}. \quad (2.44)$$

Em torno de $\phi = \phi_c^j$, usamos a expansão funcional para $S[\phi]$

$$\begin{aligned} S[\phi_c^j + \delta\eta] &= S[\phi_c^j] + \int d^4x_1 \frac{\delta S[\phi]}{\delta\phi} \Big|_{\phi=\phi_c^j} \delta\eta(x_1) + \\ &+ \frac{1}{2} \int d^4x_1 d^4x_2 \delta\eta(x_1) \frac{\delta^2 S[\phi]}{\delta\phi(x_1)\delta\phi(x_2)} \Big|_{\phi=\phi_c^j} \delta\eta(x_2) + \mathcal{O}(\delta\eta^3) \end{aligned} \quad (2.45)$$

e se S tem uma parte quadrática $\frac{1}{2}\phi(x)\hat{K}\phi(x)$ e uma parte auto-interagente $U(\phi)$, a derivada segunda da ação é

$$\frac{\delta^2 S[\phi]}{\delta\phi(x_1)\delta\phi(x_2)} \Big|_{\phi=\phi_c} = \int d^4x \left[\hat{K} + U''(\phi_c^j) \right] \delta(x-x_1)\delta(x-x_2) \quad (2.46)$$

onde $U''(\phi_c^j)$ é a derivada segunda da auto-interação em relação ao campo $\phi(x)$ calculada no mínimo clássico. Em geral temos uma ação livre da forma

$$\begin{aligned} S_0[\phi] &= \frac{1}{2} \int \left(\partial_\mu\phi\partial^\mu\phi - \frac{1}{2}m^2\phi^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \int \phi[\square + m^2]\phi \end{aligned} \quad (2.47)$$

e $\square = \nabla^2 - \partial_t^2$. Portanto geralmente lidamos com

$$\hat{K} = \square + m^2. \quad (2.48)$$

Substituindo (2.46) na expansão funcional de $S[\phi_c^j + \hbar^{1/2}\eta]$ e usando o resultado em (2.44) encontramos

$$\begin{aligned} \tilde{Z} &= \exp \left\{ i\hbar^{-1} \left(S[\phi_c^j] + \hbar\delta S[\phi_c^j] + \int j\phi_c^j \right) \right\} \times \\ &\times \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ i\hbar^{-1/2} \int d^4x \left(\frac{\delta S}{\delta\phi} \Big|_{\phi_c^j} + j \right) \eta + \frac{i}{2} \int d^4x \eta(\hat{K} + U''(\phi_c^j))\eta \right\}. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Na derivação da expressão acima usamos a invariância de translação do elemento de integração $\mathcal{D}\phi$ e retiramos da integração funcional a parte constante que depende apenas da solução clássica ϕ_c^j . A integração agora é feita nas correções de primeira e segunda ordem no funcional

em relação a solução clássica. Observe entretanto que a correção de primeira ordem é nula desde que o campo clássico ϕ_c^j é solução da equação

$$\left. \frac{\delta S}{\delta \phi} \right|_{\phi_c^j} + j = 0 \quad (2.50)$$

e portanto a primeira correção não nula é a de segunda ordem. Repare ainda que o termo de segunda ordem é quadrático logo pode ser facilmente integrado pela relação

$$\frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi e^{\frac{i}{2} \int \phi \hat{\mathcal{V}} \phi d^4x} = \left[\frac{\det(\hat{K})}{\det(\hat{\mathcal{V}})} \right]^{1/2} \quad (2.51)$$

onde Z_0 é a normalização (funcional livre). Lembramos também que em geral a parte quadrática livre \hat{K} é da forma $\square + m^2$ de maneira que

$$\frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\phi e^{\frac{i}{2} \int \phi \hat{\mathcal{V}} \phi d^4x} = \left[\frac{\det(\square + m^2)}{\det(\hat{\mathcal{V}})} \right]^{1/2}. \quad (2.52)$$

Usando (2.51) em (2.49) com $\hat{\mathcal{V}} = \hat{K} + U''$ temos

$$Z = \exp \left\{ i\hbar^{-1} \left(S[\phi_c^j] + \hbar \delta S[\phi_c^j] + \int j \phi_c^j \right) \right\} \left[\frac{\det(\hat{K})}{\det(\hat{K} + U'')} \right]^{1/2}. \quad (2.53)$$

Agora, calculando o funcional $W[j]$, podemos observar que esta é de fato a primeira correção quântica. A partir de Z fazemos

$$\begin{aligned} W[j] &= -i\hbar \ln Z \\ &= S[\phi_c^j] + \int j \phi_c^j + \hbar \delta S[\phi_c^j] + \frac{i}{2} \hbar \ln \left[\frac{\det(\hat{K} + U'')}{\det(\hat{K})} \right] \end{aligned} \quad (2.54)$$

e usando que

$$\ln \det \hat{\mathcal{V}} = \text{Tr} \ln \hat{\mathcal{V}} \quad (2.55)$$

obtemos finalmente

$$W[j] = S[\phi_c^j] + \int j \phi_c^j + \hbar \left\{ \delta S[\phi_c^j] + \frac{i}{2} \text{Tr} \ln \left[1 + \frac{U''}{\hat{K}} \right] \right\}. \quad (2.56)$$

A expressão entre chaves é de ordem \hbar e corrige a solução clássica $S[\phi_c^j]$ de ordem zero. Os contratermos necessários para renormalização estão devidamente incluídos. A ação efetiva pode agora ser identificada

$$\begin{aligned} \Gamma[\phi_c^j] &= W[j] - \int j \phi_c^j \\ &= \Gamma^{(0)}[\phi_c^j] + \hbar \Gamma^{(1)}[\phi_c^j] + \mathcal{O}(\hbar^2) \end{aligned} \quad (2.57)$$

e a correção é

$$\Gamma^{(1)}[\phi_c^j] = \frac{i}{2} \text{Tr} \ln [1 + U'' i \hat{G}_0] + \text{contratermos} \quad (2.58)$$

onde $i \hat{G}_0 = [\hat{K}]^{-1}$ é o propagador da ação livre. No espaço dos momentos a primeira correção quântica assume uma forma mais familiar obtida tomando a transformada de Fourier de (2.58)

$$\Gamma_k^{(1)}[\phi_c^j] = \frac{i}{2} \int d^4 k \text{Tr} \ln [1 + U'' i G_0(k)] + \text{contratermos}. \quad (2.59)$$

Nesta última equação $i G_0(k)$ é o propagador livre no espaço dos momentos. Em geral, para uma ação livre da forma de (2.47) $i G_0(k)$ é

$$i G_0(k) = -\frac{1}{k^2 - m^2}. \quad (2.60)$$

Reconhecemos a expansão em loops se expandimos o logaritmo

$$\Gamma_k^{(1)}[\phi_c^j] = \frac{i}{2} \int d^4 k \text{Tr} \left[U'' i G_0 - \frac{1}{2} (U'' i G_0)^2 + \frac{1}{3} (U'' i G_0)^3 + \dots \right] \quad (2.61)$$

que é equivalente a expansão em diagramas da Figura 2.1.

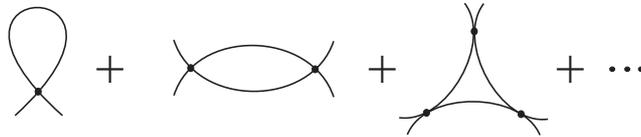


Figura 2.1: Expansão em diagramas de 1 loop para Γ .

No espaço euclidiano temos o resultado similar

$$\Gamma_k^{(1)}[\phi_c^j] = \frac{1}{2} \int d^4 k \text{Tr} \ln [1 + U'' G_0^E(k)] + \text{contratermos}. \quad (2.62)$$

onde $G_0^E(k)$ em geral tem a forma dada na Eq. (2.2)

$$G_0^E(k) = G_0^E(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{k^2 + m^2}. \quad (2.63)$$

2.3.3 Generalização para diversos campos escalares*

O resultado anterior é aplicável para uma ação com apenas um campo escalar $\phi(x)$ e termos de auto-interação. Nosso objetivo agora é generalizar o método para uma ação com diversos campos escalares ϕ_i . Em geral, todos campos escalares têm a parte cinética dada por (2.47) e por isso propagadores livres iguais. Neste caso a principal mudança vem do termo de interação que agora pode envolver interações entre os diversos campos. Aqui, entretanto, vamos precisar de um método ainda mais geral em que os campos ϕ_i também podem ter propagadores livres diferentes. A ação geral assume a forma

$$S[\{\phi_i\}] = \int d^4x \left[\sum_i \phi_i \hat{K}_i \phi_i + U(\{\phi_i\}) \right] \quad (2.64)$$

onde os \hat{K}_i denominam a parte quadrática em geral dada por $\hat{K}_i = \square + m_i^2$ e U é a parte potencial que pode conter termos de auto-interação dos campos e termos de interação entre os campos. A notação $\{\phi_i\}$ indica que o funcional depende de um conjunto de diversos campos ϕ . A solução clássica determina os valores dos campos de maneira que a ação na presença da fonte $j(x)$ é minimizada. Denotamos a solução clássica por $\{\phi_i\} = \phi_c^j$.

Prosseguimos como anteriormente expandindo o funcional gerador normalizado em torno da solução clássica

$$\tilde{Z}[j, \eta] = \int \mathcal{D}\phi \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[S[\phi_c^j + \hbar^{1/2}\eta] + \int d^4x j(x)(\phi_c^j + \hbar^{1/2}\eta(x)) \right] \right\}. \quad (2.65)$$

e agora temos para a ação

$$\begin{aligned} S[\phi_c^j + \delta\eta] &= S[\phi_c^j] + \int d^4x_1 \sum_l \frac{\delta S[\{\phi_i\}]}{\delta \phi_l} \Big|_{\{\phi_i\}=\phi_c^j} \delta\eta_l(x_1) + \\ &+ \frac{1}{2} \int d^4x_1 d^4x_2 \sum_{l,m} \delta\eta_l(x_1) \frac{\delta^2 S[\{\phi_i\}]}{\delta \phi_l(x_1) \delta \phi_m(x_2)} \Big|_{\{\phi_i\}=\phi_c^j} \delta\eta_m(x_2) + \mathcal{O}(\delta\eta^3) \end{aligned} \quad (2.66)$$

e a derivada segunda deve ser

$$\frac{\delta^2 S[\{\phi_i\}]}{\delta \phi_l(x_1) \delta \phi_m(x_2)} \Big|_{\{\phi_i\}=\phi_c} = \int d^4x \left[\hat{K}_l \delta_{l,m} + \frac{\partial^2 U(\{\phi_i\})}{\partial \phi_l(x_1) \partial \phi_m(x_2)} \right] \Big|_{\{\phi_i\}=\phi_c} \delta(x-x_1) \delta(x-x_2) \quad (2.67)$$

o que permite definir uma matriz $[\tilde{M}]_{l,m}$ dada por

$$[\tilde{M}]_{l,m} = \left[\hat{K}_l \delta_{l,m} + \frac{\partial^2 U(\{\phi_i\})}{\partial \phi_l(x_1) \partial \phi_m(x_2)} \right] \Big|_{\{\phi_i\}=\phi_c}. \quad (2.68)$$

de maneira que a expansão agora é

$$\begin{aligned} \tilde{Z} = & \exp \left\{ i\hbar^{-1} \left(S[\phi_c^j] + \hbar\delta S[\phi_c^j] + \int j\phi_c^j \right) \right\} \times \\ & \times \int \mathcal{D}\eta \exp \left\{ \frac{i}{\hbar^{1/2}} \int d^4x \left(\sum_l \frac{\delta S[\{\phi_i\}]}{\delta\phi_l} \Big|_{\{\phi_i\}=\phi_c^j} + j \right) \eta + \frac{i}{2} \int d^4x \eta_l [\tilde{M}]_{l,m} \eta_m \right\} \end{aligned} \quad (2.69)$$

onde no último termo uma soma nos índices repetidos está implícita. O termo de ordem $\hbar^{-1/2}$ é novamente nulo pela condição de mínimo e a integração da primeira correção não nula pode ser facilmente realizada

$$\frac{1}{Z_0} \int \mathcal{D}\eta e^{\frac{i}{2} \int d^4x \eta_l [\tilde{M}]_{l,m} \eta_m} = \left[\frac{\det(\hat{K}_i)}{\det(\tilde{M})} \right]^{1/2}. \quad (2.70)$$

O funcional Z é dado então por

$$Z = \exp \left\{ i\hbar^{-1} \left(S[\phi_c^j] + \hbar\delta S[\phi_c^j] + \int j\phi_c^j \right) \right\} \left[\frac{\det(\hat{K}_i)}{\det(\tilde{M})} \right]^{1/2}. \quad (2.71)$$

Como anteriormente calculamos a ação efetiva $\Gamma = -i\hbar \ln Z - \int j\phi_c^j$ e encontramos

$$\Gamma[\phi_c] = \Gamma^{(0)}[\phi_c^j] + \frac{i}{2} \hbar \ln \left[\frac{\det(\tilde{M})}{\det(\hat{K}_i)} \right] + \text{contratermos}. \quad (2.72)$$

A parte quadrática agora possui diversos campos ϕ_i mas de acordo com (2.64) tem a forma diagonal

$$S_0 = \int d^3x \sum_i \phi_i \hat{K}_i \phi_i = \int d^3x \sum_{lm} \phi_l \hat{K}_l \delta_{l,m} \phi_m \quad (2.73)$$

de maneira que o inverso de seu determinante é apenas um produto dos propagadores correspondentes $i\hat{G}_0^{(l)} = [\hat{K}_l]^{-1}$, logo

$$\Gamma[\phi_c] = \Gamma^{(0)}[\phi_c^j] + \frac{i}{2} \hbar \ln \left[\det \left(i\hat{G}_0^{(l)} \tilde{M}_{l,m} \right) \right] + \text{contratermos} \quad (2.74)$$

ou

$$\Gamma[\phi_c] = \Gamma^{(0)}[\phi_c^j] + \frac{i}{2} \hbar \text{Tr} \ln \left[i\hat{G}_0^{(l)} \tilde{M}_{l,m} \right] + \text{contratermos}. \quad (2.75)$$

Para calcular mais facilmente a primeira correção e identificar a expansão em loops transformamos um pouco mais o resultado (2.75). De acordo com a definição (2.68) da matriz \tilde{M} podemos escrever

$$i\hat{G}_0^{(l)}[\tilde{M}]_{l,m} = \left[\delta_{l,m} + \frac{1}{\hat{K}_l} \frac{\partial^2 U(\{\phi_i\})}{\partial\phi_l(x_1) \partial\phi_m(x_2)} \right] \Big|_{\{\phi_i\}=\phi_c} \quad (2.76)$$

o que permite a expansão do logaritmo em termos de uma matriz $M = -(\tilde{M} - 1)$ dada por

$$M = -\frac{1}{\hat{K}_l} \frac{\partial^2 U(\{\phi_i\})}{\partial \phi_l(x_1) \partial \phi_m(x_2)} \Bigg|_{\{\phi_i\}=\phi_c} \quad (2.77)$$

tal qual a correção é dada por

$$\Gamma[\phi_c] = \Gamma^{(0)}[\phi_c^j] + \frac{i}{2} \hbar \text{Tr} \ln[1 - M] + \text{contratermos} \quad (2.78)$$

justificando a expansão diagramática em função de uma matriz geral dependente dos propagadores $i\hat{G}_0^{(l)}$. Observamos isso mais facilmente no espaço dos momentos onde

$$\Gamma_k[\phi_c] = \Gamma_k^{(0)}[\phi_c^j] + \frac{i}{2} \hbar \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \text{Tr} \ln [1 - M(k)] + \text{contratermos} \quad (2.79)$$

e $M(k)$ é a transformada de (2.77)

$$M = -iG_0^{(l)}(k) \frac{\partial^2 U(\{\phi_i\})}{\partial \phi_l(x_1) \partial \phi_m(x_2)} \Bigg|_{\{\phi_i\}=\phi_c} \quad (2.80)$$

onde $G_0^{(l)}(k)$ é o propagador correspondente ao campo ϕ_l .

No espaço euclidiano temos os resultados equivalentes

$$\Gamma_k^E[\phi_c] = \Gamma_k^{E0}[\phi_c^j] + \frac{1}{2} \hbar \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \text{Tr} \ln [1 - M(k)] + \text{contratermos} \quad (2.81)$$

e

$$M = -G_{E0}^{(l)}(k) \frac{\partial^2 U(\{\phi_i\})}{\partial \phi_l(x_1) \partial \phi_m(x_2)} \Bigg|_{\{\phi_i\}=\phi_c} \quad (2.82)$$

onde $G_{E0}^{(l)}(k)$ é agora o propagador euclidiano correspondente ao campo ϕ_l . Nos capítulos seguintes vamos trabalhar apenas no espaço euclidiano e por isso o índice E dos propagadores euclidianos será retirado.

Toda demonstração que fizemos acima permite calcular corretamente o termo de correção quântica de primeira ordem. O cálculo direto em ordem maior é muito trabalhoso e para isso é mais fácil aproveitar que a expansão é identificada com a expansão em loops permitindo o uso de diagramas de Feynman. Neste trabalho vamos fazer apenas correções de primeira ordem (1 loop) mas em todo caso vamos mostrar a expansão diagramática deixando claro como ir em ordens mais altas.

O capítulo seguinte é dedicado ao estudo teórico de transições de primeira ordem em $T = 0$. Esse estudo é importante desde que, como veremos nos capítulos seguintes, um dos efeitos de flutuações quânticas no estado fundamental é mudar a natureza da transição contínua usual para uma transição de primeira ordem.

Capítulo 3

Transições quânticas de primeira ordem

3.1 Introdução

Assim como em temperaturas finitas, teorias de escala são ferramentas importantes para o estudo de fenômenos críticos em $T = 0$ [2, 25]. Através delas encontramos relações entre expoentes críticos que governam o comportamento de diversas grandezas termodinâmicas em baixas temperaturas. No estudo de metais fortemente correlacionados perto de uma instabilidade em $T = 0$, essas relações levam a interessantes resultados, como a descoberta da nova temperatura característica que marca o limite do comportamento tipo líquido de Fermi [9, 10]. Aqui estudamos a extensão das idéias das teorias de escala para transições de fase quânticas de primeira ordem [31]. Embora nessas transições não haja comprimento de correlação divergente, as teorias de escala se mostraram muito úteis em transições de primeira ordem em temperaturas finitas [32, 33], e portanto esperamos o mesmo no caso em que $T = 0$.

Vamos considerar a forma de escala da densidade de energia livre no estado fundamental perto de uma transição de fases quântica,

$$f \propto |\delta|^{2-\alpha} \quad (3.1)$$

onde δ mede a distância até a transição que ocorre em $\delta = 0$. O expoente α se relaciona com ν através da relação de hiperscala $2 - \alpha = \nu(d + z)$ onde d é a dimensão do sistema e z o expoente crítico dinâmico de acordo com as definições do Capítulo 1. A energia interna total perto da transição pode ser escrita como

$$U(\delta = 0^\pm) = U(\delta = 0) \pm A_\pm |\delta|^{2-\alpha} \quad (3.2)$$

para $\delta \rightarrow 0^\pm$. A existência de uma transição de primeira ordem em $T = 0$ com uma descontinuidade em $dU/d\delta$ e um *calor latente* implica $\alpha = 1$. Se a relação de hiperscala for válida,

o expoente do comprimento de correlação assume o valor $\nu = 1/(d+z)$. Este é o equivalente quântico do resultado clássico $\nu = 1/d$ para transições de primeira ordem em temperaturas finitas [32, 33]. Associado a este valor do expoente do comprimento de correlação há no lado desordenado do diagrama de fases uma nova escala de energia, $T^* \propto |\delta|^{z/(d+z)}$.

A descontinuidade no parâmetro de ordem e a hipótese de que não há decaimento de sua função de correlação levam aos resultados $\beta = 0$ (como no caso clássico [33]) e $d+z-2+\eta = 0$, respectivamente. Também de maneira similar ao que ocorre em temperaturas finitas o expoente $\tilde{\delta} = \infty$ (não confunda com a distância para o ponto crítico quântico δ) e para haver consistência entre as relações de escala a susceptibilidade relativa ao parâmetro de ordem deve divergir com o expoente $\gamma = 1$ [33].

Outro aspecto interessante é a generalização do *calor latente*. Na transição quântica induzida pela pressão por exemplo, $\delta \propto (P - P_c)/P_c$ onde P_c é a pressão crítica e um *calor latente* finito significa neste caso uma quantidade finita de trabalho, $W = A_+ + A_- = P_c \Delta V$, para transformar uma fase na outra. Esse *calor latente* finito é associado com uma mudança de volume desde que a variável intensiva, no caso a pressão, permanece constante na transição. Outro exemplo seriam transições induzidas pela densidade onde o potencial químico fica fixo enquanto o número de partículas varia.

Além da própria transição de fase quântica de primeira ordem ser objeto de interesse, pois novos resultados experimentais indicam que elas ocorrem em férmions pesados e metais de transição magnéticos [34], nos preocupamos aqui também com os mecanismos que mudam sua natureza contínua para descontínua perto de $T = 0$. Há muitos mecanismos que podem ser os responsáveis. Em antiferromagnetos [35] ou supercondutores [36] um campo magnético externo suficientemente grande pode causar este efeito. Em magnetos compressíveis também a pressão pode ser a responsável. Aqui vamos apontar outros mecanismos mais fracos mas que se tornam importantes a partir do momento que baixamos muito a temperatura, ou seja, na mesma região em que os efeitos da transição e flutuações quânticas são relevantes. Estudamos duas possibilidades [37]: no primeiro caso consideramos o acoplamento do parâmetro de ordem da transição com modos de Goldstone (sem massa) [38]. Fazemos isso através do exemplo de um supercondutor acoplado com um campo eletromagnético. Esse é o problema investigado por Halperin, Lubensky and Ma [39] mas, visto que queremos considerar o problema quântico em $T = 0$ nosso tratamento é similar ao apresentado por Coleman e Weinberg para física de partículas [18]. O segundo mecanismo é o acoplamento do parâmetro de ordem com flutuações associadas a uma segunda fase em competição com a primeira na mesma região do diagrama de fases. A mudança na natureza da transição devido a este tipo de flutuação é um dos resultados mais importantes deste trabalho e cálculos detalhados serão apresentados no Capítulo 4. O problema de competição de fases é especialmente relevante nos materiais de férmions pesados supercondutores e estados inhomogêneos com regiões supercondutoras e antiferromagnéticas já foram observados [40]. Este acoplamento leva a efeitos que sugerem fortemente essa situação.

Nas seções seguintes, como comentamos acima, vamos estudar o interessante problema do acoplamento do parâmetro de ordem supercondutor como o campo eletromagnético. O acoplamento induz uma transição de primeira ordem e confirmamos os resultados acima com

base na teoria de escala. Os resultados também mostram o limite da aplicação desta teoria em um sistema onde, na verdade, a criticalidade em $T = 0$ não ocorre.

3.2 Supercondutor acoplado com um campo de calibre

3.2.1 Modelo e potencial efetivo

Como exemplo de um dos mecanismos que podem mudar a natureza da transição quântica (neste caso o acoplamento com modos de Goldstone) vamos estudar a transição de fase supercondutora em $T = 0$ quando acoplamos o parâmetro de ordem a um campo de calibre. O campo de gauge representa então o modo não massivo (modo de Goldstone) cujas flutuações podem influir na transição. Embora estejamos estudando um caso particular enfatizamos que diversos resultados devem ser válidos para qualquer transição de fase quântica de primeira ordem como discutimos nas seções seguintes.

O ponto de partida, seguindo o tratamento original apresentado por Coleman e Weinberg [18], é a densidade de Lagrangiana deste sistema

$$\begin{aligned}
 L = & -\frac{1}{4}(F_{\mu\nu})^2 + \frac{1}{2}(\partial_\mu\varphi_1 + qA_\mu\varphi_2)^2 + \\
 & + \frac{1}{2}(\partial_\mu\varphi_2 - qA_\mu\varphi_1)^2 + \\
 & -\frac{1}{2}m^2(\varphi_1^2 + \varphi_2^2) - \frac{\lambda}{4!}(\varphi_1^2 + \varphi_2^2)^2.
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

Observamos que a Lagrangiana descreve em física de partículas mesons acoplados minimamente com um campo eletromagnético. No caso de matéria condensada devemos dar mais algumas explicações. Em primeiro lugar, consideramos φ o parâmetro de ordem supercondutor, que é representado por um complexo ou dois escalares reais como na Eq. (3.3). Podíamos escrever a mesma Lagrangiana com campos complexos mas para calcular o potencial efetivo campos reais são mais indicados. A Eq. (3.3) representa então uma expansão tipo Guinzburg-Landau do parâmetro de ordem generalizada para o caso quântico onde a dependência temporal também é importante. Por simplicidade, na generalização para o caso quântico consideramos o tempo e o espaço isotrópicos (invariância de Lorentz), ou equivalentemente, consideramos o expoente dinâmico $z = 1$. É claro que a ação do supercondutor em $T = 0$ nem sempre possui essa isotropia e no Capítulo 4 discutimos os casos de interesse (com $z = 1$ e $z = 2$). Assim como em física de partículas, o acoplamento do parâmetro de ordem com o campo eletromagnético é mínimo e pode ser entendido como o primeiro termo da expansão de um acoplamento mais complicado. Todo o resto é padrão:

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu \tag{3.4}$$

onde os índices μ, ν correm de 0 até $d = 3$. O acoplamento é feito pela carga elétrica q e trabalhamos em unidades com $\hbar = c = 1$. Para o problema sem carga ($q = 0$) a Lagrangiana é associada com uma transição quântica superfluido-isolante em $m^2 = 0$ [2]. Além disso, estamos interessados em três dimensões espaciais ($d = 3$) e a dimensão efetiva do problema quântico é $d_{eff} = d + z = 4$.

O potencial efetivo em temperatura nula para este caso é calculado em diversos trabalhos e na aproximação de um loop é dado por [2, 18, 41] (Apêndice B)

$$V_{eff}^0(\varphi_c) = \frac{m^2 \varphi_c^2}{2} - \frac{m^2 \varphi_c^4}{4 \langle \varphi \rangle^2} + \frac{3q^4 \varphi_c^4}{64\pi^2} \left[\ln\left(\frac{\varphi_c^2}{\langle \varphi \rangle^2}\right) - \frac{1}{2} \right] \quad (3.5)$$

onde φ_c é o valor clássico do campo e $\langle \varphi \rangle$ é um extremo do potencial efetivo tal que

$$(dV_{eff}/d\varphi_c)_{\varphi_c = \langle \varphi \rangle} = 0.$$

Observamos que se o termo de massa for nulo o resultado se reduz ao de Coleman-Weinberg [18]. Na Figura 3.1 apresentamos o gráfico do potencial efetivo para diferentes valores da massa m^2 . Em um valor crítico m_c^2 dado por

$$m_c^2 = \frac{3q^4}{32\pi^2} \langle \varphi \rangle^2 \quad (3.6)$$

há uma transição de primeira ordem em temperatura nula para um novo estado de simetria quebrada ($\varphi_c \neq 0$). Vamos examinar a estabilidade dos dois diferentes estados fundamentais na proximidade de m_c . Para valores $m > m_c$, o estado estável, dado pelo mínimo do potencial efetivo da Eq. (3.5), ocorre em $\varphi_c = 0$, tal que, $V_{eff}(\varphi_c = 0) = 0$. O valor no mínimo metaestável $\varphi_c = \langle \varphi \rangle$ é dado por

$$V_{eff}^0(\langle \varphi \rangle) = \frac{1}{4} m^2 \langle \varphi \rangle^2 \left[1 - \frac{m_c^2}{m^2} \right] \quad (3.7)$$

Logo, em $m^2 = m_c^2$ os dois estados fundamentais com $\varphi_c = 0$ e $\varphi_c = \langle \varphi \rangle$ são degenerados e para $m^2 < m_c^2$, o verdadeiro estado fundamental é o que possui $\varphi_c = \langle \varphi \rangle$. Perto da massa crítica o potencial efetivo (que em $T = 0$ equivale a energia livre) pode ser escrito como $V_{eff} \propto |m^2 - m_c^2| \propto |\delta|^{2-\alpha}$ o que implica um expoente crítico $\alpha = 1$ e aplicando a relação de hiperescala $\nu = 1/(d + z)$ verificando a teoria de escala da seção anterior. O *calor latente* é

$$L_h = (A_+ + A_-) = \frac{1}{4} m_c^2 \langle \varphi \rangle^2$$

onde usamos $A_+ = 0$. Os resultados obtidos estão de acordo com a teoria usual de transições de primeira ordem. Nestas transições, as duas fases coexistem em um ponto (ou linha em temperaturas finitas) de primeira ordem. Na vizinhança deste ponto uma das fases sempre é mais estável mas a outra ainda é representada pela existência de um mínimo metaestável. Definimos as *espínodais* como os pontos que marcam o limite a partir do qual aparecem estes

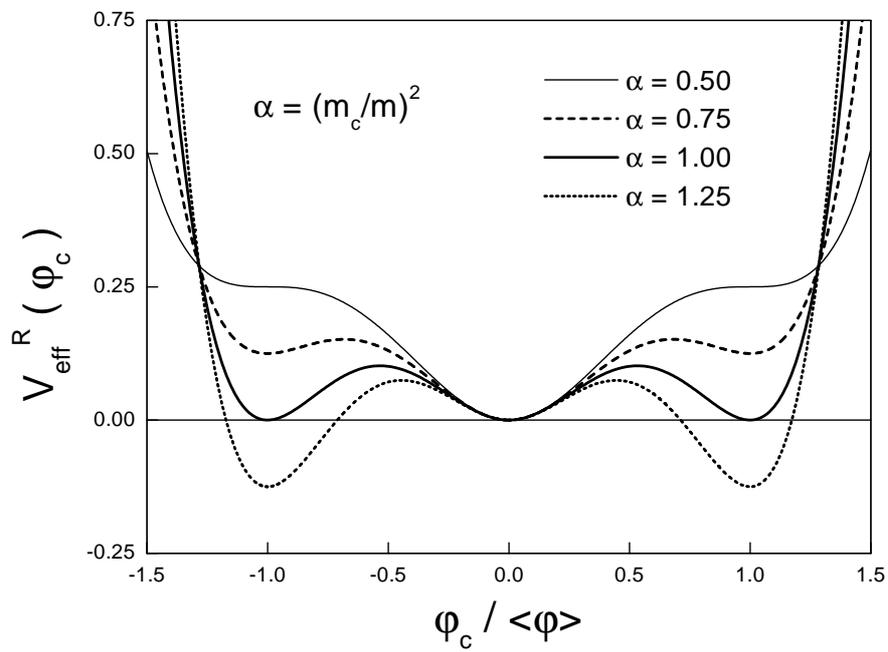


Figura 3.1: Transição de primeira ordem em temperatura nula no potencial tipo Coleman-Weinberg.

mínimos metaestáveis, ou seja, na região entre espinodais a fase estável coexiste com fortes flutuações da fase concorrente. Note a existência de uma espinodal em $(m_c/m)^2 = 0.5$ que marca o limite de metaestabilidade do supercondutor dentro da fase normal. Por outro lado parece sempre haver um mínimo metaestável em $\varphi_c = 0$ na fase supercondutora¹.

A vantagem de estudar um modelo simples como o dado pela Lagrangiana da Eq. (3.3) é que podemos encontrar sem dificuldades resultados para temperaturas finitas e testar a teoria de escala nestas condições. Neste caso notamos que em teorias quânticas de campos euclidianos em temperaturas finitas o potencial efetivo é equivalente a energia livre termodinâmica [42]. A generalização do potencial efetivo para temperaturas finitas é obtida trocando as integrais na frequência por somas nas frequências de Matsubara. O resultado para T finito é ($k_B = 1$) [2]

$$V_{eff}(T) = \frac{1}{4}m^2\langle\varphi\rangle^2|\delta|\left\{1 + \frac{2}{\pi^2m^2\langle\varphi\rangle^2}\frac{T^{d+1}}{|\delta|}I\left(\frac{M(\varphi_c)}{T}\right)\right\} \quad (3.8)$$

onde $M^2(\varphi_c) = m^2 + q^2\varphi_c^2$ e

$$I_d(y) = \int_0^\infty dx x^{d-1} \ln[1 - e^{-\sqrt{x^2+y^2}}].$$

O gráfico da função $I_3(y) = I(y)$ para três dimensões está apresentado na Figura 3.2. No limite $T \gg M$ e perto do ponto crítico, temos

$$\begin{aligned} V_{eff}(\varphi_c, T) = & -\frac{\pi^2}{18}T^4 - \frac{1}{8}m^2T^2 + \frac{1}{2}m_T^2\varphi_c^2 \\ & - \frac{m_T^2}{4\langle\varphi\rangle^2}\varphi_c^4 + \frac{3q^4}{64\pi^2}\varphi_c^4\left[\ln\left(\frac{\varphi_c^2}{\langle\varphi\rangle^2}\right) - \frac{1}{2}\right] \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde definimos uma massa renormalizada dependente da temperatura

$$m_T^2 = |m^2|(1 - T^2/T_{MF}^2)$$

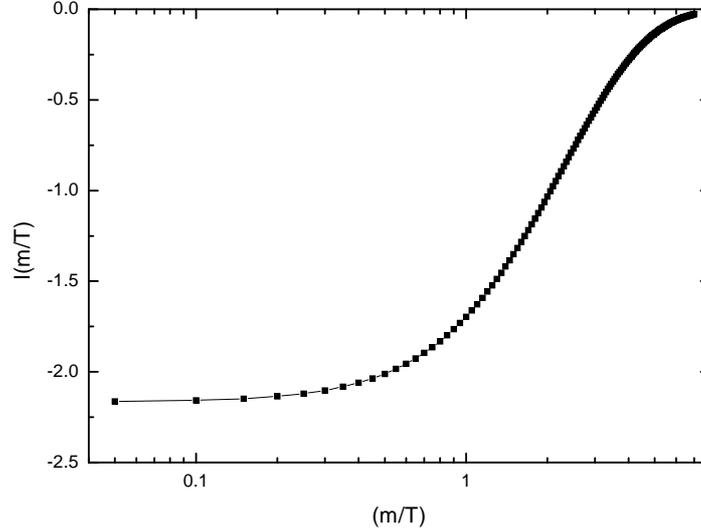
com $T_{MF}^2 \approx 12|m^2|/3q^2$. Ou, de maneira alternativa, podemos escrever m_T como

$$m_T^2 = m^2 + (q^2/4)T^2. \quad (3.10)$$

Vamos agora discutir esses resultados. Note da Eq. (3.10) que a linha em que a massa (que agora depende da temperatura) se anula é dada por

$$T_{MF} = \frac{2}{q}|m^2|^{1/2}$$

¹Esse resultado não é confiável pois a expansão apresentada só vale perto da transição assim como o resultado para o potencial efetivo. Por isso, em algum ponto longe da transição e além dos limites do nosso modelo o mínimo metaestável pode desaparecer.


 Figura 3.2: Função de escala $I_3(y)$ ($d = 3$).

Se consideramos apenas a contribuição dos termos de ordem $O(\lambda)$ esta temperatura é na verdade dada por $T_{MF}^2 = 12|m^2|/(4\lambda + 3q^2)$. Esta linha, entretanto, não tem mais nenhum significado especial no caso carregado, pois quando resfriamos o sistema uma transição de primeira ordem ocorre antes, como mostramos abaixo (veja a Figura 3.3). A linha é governada pelo mesmo expoente de *shift* de campo médio $\psi = z/(d + z - 2) = 1/2$ da linha crítica do superfluido neutro dada por $T_{SF}^2 = 12|m^2|/(4\lambda)$. Note então que no caso em que $d = 3$ a transição superfluido isolante em temperatura nula é descrita exatamente pelo potencial efetivo já que $d + z = d_c = 4$ é a dimensão crítica superior para esta transição. Esta transição já foi exaustivamente estudada por Fisher et al. [43]. O caráter isolante da fase desordenada se deve a presença de um gap para excitações $\Delta = |m^2|^{\nu z} = |m^2|^{1/2}$ desde que o expoente do comprimento de correlação ν assume seu valor de campo médio para $d = d_c$.

No superfluido carregado (supercondutor) as verdadeiras transições são bem diferentes e ocorrem para

$$m_T^2 = m^2 + (q^2/4)T_c^2 = m_c^2 \quad (3.11)$$

onde m_c^2 é dada pela Eq. (3.6). A linha de primeira ordem é

$$T_c = \frac{2}{q} \sqrt{m_c^2 - m^2} \quad (3.12)$$

e sobre o ponto crítico quântico do superfluido neutro $m^2 = 0$ há agora uma instabilidade

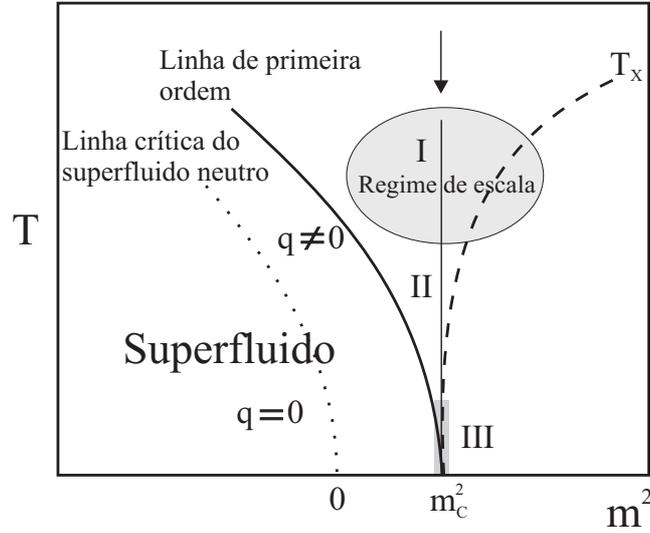


Figura 3.3: Diagrama de fases para um superfluido carregado acoplado com um campo eletromagnético. Mostramos além da linha de primeira ordem a linha crítica do superfluido neutro. Ao longo da trajetória $m^2 = m_c^2$ podemos distinguir regimes distintos explicados no texto.

supercondutora em temperatura finita

$$T_c(m^2 = 0) = \sqrt{\frac{3}{8\pi^2} q \langle \varphi \rangle}.$$

A origem física desta transição pode ser explicada pela energia adquirida pelo sistema na expulsão do campo eletromagnético quando o sistema se torna supercondutor.

Do potencial efetivo da Eq. (3.8) e do gráfico da função $I(y)$ na Figura 3.2 concluímos que há neste problema duas escalas relevantes na fase desordenada ($\varphi_c = 0$, $m^2 > m_c^2$). Analisamos cuidadosamente este resultado e a teoria de escala perto desta transição quântica de primeira ordem na seção seguinte.

3.2.2 Teoria de escala na transição quântica de primeira ordem

Vamos agora considerar o sistema sobre a trajetória vertical que termina em $T = 0$ no novo ponto onde ocorre a transição quântica de primeira ordem, isto é, consideramos o sistema na linha $m^2 = m_c^2$ (veja Figura 3.3). Vamos reduzir a temperatura e observar o comportamento dos observáveis físicos com a temperatura.

Na Figura 3.4 apresentamos o comportamento do calor específico. Nosso objetivo é mostrar que o comportamento de escala é válido em uma certa escala de temperatura antes de “quebrar” perto de $T = 0$ revelando a transição de primeira ordem. Lembramos ainda que para pontos

críticos quânticos usuais em sistemas metálicos a trajetória considerada aqui representa a trajetória onde observamos comportamento não líquido Fermi [2].

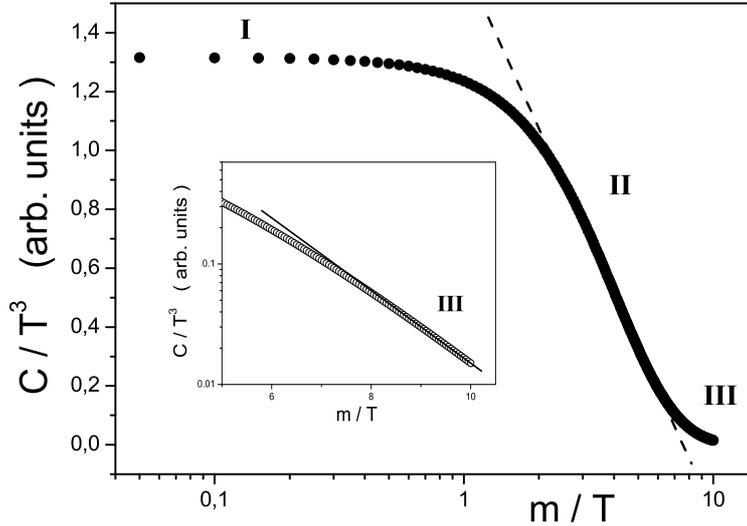


Figura 3.4: Calor específico em função da temperatura sobre a trajetória $m^2 = m_c^2$ correspondente a transição de primeira ordem em $T = 0$. Os diferentes regimes são discutidos no texto. Note que a linha pontilhada reta desenhada no gráfico indica o comportamento $\ln T$ do regime II.

Para altas temperaturas, $T \gg m_c$, o que corresponde ao regime I das Figuras 3.3 e 3.4, a função $I_3(y)$ satura, $I_3(y < 0.12) \approx -2.16$ (Veja Figura 3.2). Neste caso o potencial efetivo é

$$V_{eff}(T) \approx \frac{1}{4} m^2 \langle \varphi \rangle^2 |\delta| \left\{ 1 - \frac{4.32}{\pi^2 m^2 \langle \varphi \rangle^2} \frac{T^{d+1}}{|\delta|} \right\}$$

e pode ser colocado na forma de escala

$$V_{eff}(T) \propto |\delta|^{2-\alpha} F \left[\frac{T}{T_\times} \right]$$

com $F(0) = \text{constante}$. Esta forma de escala é o que obtemos perto de pontos críticos quânticos (transições contínuas). No caso atual, de uma transição descontínua, o valor do expoente crítico do calor específico é $\alpha = 1$ [31] e a temperatura característica é

$$T_\times \propto |\delta|^{\nu z} \propto |\delta|^{\frac{z}{d+z}} = |\delta|^{\frac{1}{d+1}} = |\delta|^{\frac{1}{4}}$$

com $\nu = 1/(d+z)$ [31]. Nesse regime I ou regime de escala, ao longo da linha $m^2 = m_c^2$ demonstrada na Figura 3.3, a densidade de energia livre tem portanto a forma de escala

$f(m = m_c, T) \propto T^{(d+z)/z}$ e o calor específico da Figura 3.4 é dado por

$$C/T|_{(m=m_c, T)} \propto T^{\frac{d-z}{z}}. \quad (3.13)$$

Logo o comportamento termodinâmico ao longo da linha $m^2 = m_c^2$ no regime I ($T \gg m_c$) é o mesmo que observamos quando nos aproximamos do ponto crítico quântico observado no superfluido neutro em $m^2 = 0$. Podemos imaginar que em altas temperaturas o sistema ainda não sente os efeitos da mudança na natureza da transição em temperatura nula e a carga neste regime é irrelevante.

Diminuindo mais a temperatura há um regime intermediário, não universal (regime II nas Figuras. 3.3 e 3.4). Na transição analisada, para $m_c < T$, o calor específico se comporta de acordo com $C/T^{d/z} \propto \ln T$ como podemos observar da linha reta pontilhada no gráfico semi-log na Figura 3.4.

Finalmente, em temperaturas muito baixas $T \ll m_c$ e $m^2 = m_c^2$ (regime III da Figura. 3.4), o calor específico vai a zero exponencialmente com a temperatura $C/T^{d/z} \propto \exp(-m_c/T)$. O *gap* para excitações térmicas é dado pelo deslocamento m_c do ponto de transição em $T = 0$. O comprimento de correlação, que cresce ao longo da linha enquanto diminuimos a temperatura, chega a um valor de saturação no regime III de $\xi_S \approx m_c^{-1}$. Portanto, podemos entender a dependência exponencial do calor específico como um resultado de excitações com *gap* dentro de regiões supercondutoras de tamanho finito $L \sim \xi$. O *gap* entre os estados dentro dessas regiões é $\Delta \sim L^{-z} \sim \xi^{-z} \sim m_c$ de acordo com o que encontramos anteriormente.

Embora os resultados anteriores tenham sido obtidos de um modelo particular, o comportamento de escala do regime I e III deve ser uma característica universal de qualquer transição de primeira ordem fraca². A teoria de escala aplicada no regime I é similar a de transições contínuas onde $T^* \propto |\delta|^{\nu z}$ [31, 37] mas com $\nu = 1/(d+z)$ confirmando a discussão da primeira seção deste capítulo. Note que no problema discutido, o próprio parâmetro de controle dado pela massa m (ou m^2), fornece o corte natural para temperaturas abaixo do qual a teoria de escala se torna inválida. As duas energias características T^* e m^2 são conceitos gerais que devem ter papel importante perto de qualquer transição quântica descontínua como a que estudamos aqui.

Ainda há um comentário interessante que podemos fazer. O problema de mecânica quântica de coexistência de fases em m_c , supercondutor e isolante, pode ser modelado por uma função de onda dupla $\psi = a\psi_1 + b\psi_2$. A correspondente densidade de probabilidade $|\psi|^2 = a^2|\psi_1|^2 + b^2|\psi_2|^2 + ab(\psi_1\psi_2^* + \psi_2\psi_1^*)$, determina através dos coeficientes a^2 e b^2 as relativas proporções

²Em vários pontos deste trabalho vamos nos referir a transições de primeira ordem fracas. A definição não é única mas as transições de primeira ordem são denominadas fracas em nosso contexto quando o calor latente (ou o *trabalho latente* em $T = 0$) é pequeno comparado a outra escala de energia do sistema (como por exemplo $k_B T$ para flutuações térmicas). A pequena descontinuidade na derivada da energia livre permite então a aplicação aproximada das teorias para transições contínuas que é o que mostramos aqui. Experimentalmente é difícil medir o pequeno calor latente e as transições de primeira ordem fracas podem ser muitas vezes confundidas com transições contínuas.

de cada fase. O termo de interferência pode ter significado experimental mesmo se lembrarmos que termos deste tipo vão a zero no limite termodinâmico. Isto porque na transição de primeira ordem o sistema é composto por domínios finitos nos quais termos como este podem desempenhar algum papel relevante.

Outros exemplos de transições quânticas de primeira ordem onde a teoria de escala pode ser aplicada e os resultados para os expoentes obtidos na primeira seção são confirmados (discutindo também os casos com desordem) são apresentados no nosso trabalho [31].

Podemos ainda discutir os mecanismos que levam a mudança na natureza da transição quântica. O mecanismo acima foi o acoplamento com um modo de Goldstone (não massivo) representado pelo campo eletromagnético. A influência destes modos é discutida de maneira bem geral no trabalho de Belitz *et al* [38]. Neste ponto nosso trabalho demonstra que não só o acoplamento com esses modos não massivos muda a natureza da transição mas também o acoplamento do parâmetro de ordem com o de outra fase competindo na mesma região do diagrama de fases, mesmo que as flutuações não sejam críticas, isto é, mesmo para flutuações massivas. Este resultado geral é desenvolvido em detalhe para o caso especial da competição entre ordem magnética e supercondutora no capítulo seguinte.

Capítulo 4

Flutuações quânticas em férmions pesados supercondutores

4.1 Introdução

Até recentemente, o estudo em baixas temperaturas de materiais de férmions pesados se baseou na competição entre ordem magnética de longo alcance e o efeito Kondo [6, 7]. Entretanto, novos experimentos nestes sistemas mostraram que em muitos casos existe uma fase supercondutora próxima ou em coexistência com a fase magnética perto do ponto crítico quântico (PCQ). Essa fase pode ser observada por dopagem ou aplicação de pressão nestes sistemas [12]. A fase supercondutora deve ser diferente da que ocorre nos supercondutores de alta temperatura (high- T_c), em especial porque nos férmions pesados entendemos melhor a natureza da fase normal perto do PCQ (veja Fig. 4.1). Abaixo da temperatura de coerência T_{coh} esses materiais são essencialmente metais (líquidos de Fermi) fortemente correlacionados próximos de uma fase magnética (em geral antiferromagnética). Acima desta temperatura, denotada pela linha pontilhada na Fig. 4.1, e em particular na linha crítica exatamente acima do PCQ, estes sistemas apresentam um comportamento não líquido de Fermi que é em geral bem entendido como um efeito da proximidade da instabilidade em $T = 0$ e os expoentes críticos associados [2].

Neste capítulo procuramos estudar os efeitos mútuos entre supercondutividade (SC) e antiferromagnetismo (AF) dando ênfase as transições quânticas e os efeitos das flutuações no diagrama de fases [44]. A fase metálica normal próxima do antiferromagnetismo é bem descrita pelos paramagnons introduzidos no Capítulo 2 e serve como base de nosso modelo. O método do potencial efetivo, também apresentado no Capítulo 2, é colocado em prática com a finalidade de calcular as correções quânticas geradas pelas flutuações de uma das fases, AF ou SC, sobre a fase oposta, levando a interessantes modificações no diagrama de fases e nas transições em $T = 0$. É interessante notar que, embora o modelo faça referência a efeitos

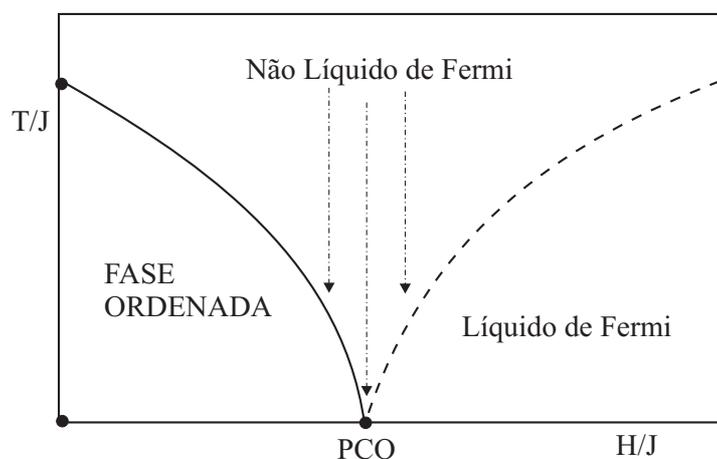


Figura 4.1: Diagrama de fases obtido pelo estudo do ponto crítico quântico (PCQ) em férmions pesados. Na fase desordenada a linha pontilhada representa a temperatura de coerência T_{coh} que separa duas regiões com diferentes comportamentos. A linha é discutida em mais detalhes no Capítulo 5.

quânticos entre as fases AF e SC especificamente, os resultados podem ser considerados mais gerais e se referindo a outras possíveis instabilidades, desde que a dinâmica seja similar. Por exemplo, instabilidades estruturais associadas a um fônon ótico têm a dinâmica similar a da descrita para a fase supercondutora. Discutimos mais a generalização dos resultados na última seção deste capítulo.

Ainda lembramos que modelos similares descrevendo a competição entre supercondutividade e antiferromagnetismo já foram propostos [45, 46, 47]. A ênfase entretanto é no estudo de supercondutores high- T_c e o tema tem sido bastante debatido [48, 49].

4.2 Modelo

Com a finalidade de estudar a competição entre as fases AF, SC e normal na proximidade de seus correspondentes pontos críticos, consideramos um funcional tipo Ginzburg-Landau que contém tanto o parâmetro de ordem supercondutor quanto o magnético. Usamos dois campos, ϕ_1 e ϕ_2 , para descrever o parâmetro de ordem supercondutor (que pode ser a função de onda do estado fundamental por exemplo). O outro campo escalar, ϕ_3 , representa o parâmetro de ordem antiferromagnético e está associado ao valor da magnetização em uma das direções. Os resultados podem ser generalizados para o caso de um parâmetro de ordem magnético de n componentes, e desde que o sistema possua simetria de rotação, ocorrem apenas mudanças em fatores numéricos no resultado para o potencial efetivo (comentamos mais este detalhe a

seguir, veja também a discussão no final da seção 2.2.2).

Como foi argumentado no Capítulo 2 começamos considerando a parte livre associada ao supercondutor dada pela direta generalização quântica do Ginzburg-Landau clássico. Neste caso o modelo é invariante de Lorentz (caracterizado por um expoente dinâmico $z = 1$) e descrito pelo propagador da Eq. (2.2)

$$G_0(k) = G_0(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{k^2 + m^2}. \quad (4.1)$$

No final do capítulo vamos comentar os resultados obtidos com uma ação livre dissipativa relacionada com outros casos de interesse. A parte livre associada ao campo ϕ_3 , também desenvolvida no Capítulo 2, é dada pelo funcional quadrático de paramagnons que possui o propagador dissipativo

$$D_0(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{|\omega|\tau + q^2 + m_p^2}. \quad (4.2)$$

Toda parte quadrática do funcional do modelo pode ser descrita pelos propagadores das Eq. (4.1) e Eq. (4.2) acima. Notamos ainda que o propagador magnético é suficientemente geral para descrever uma Hamiltoniana que preserva a invariância de rotação. Neste caso o campo ϕ_3 deve ser substituído por um campo vetorial $\boldsymbol{\phi}_3$ como comentamos no Capítulo 2.

A parte de interação do modelo é dada pelo potencial

$$\begin{aligned} V_d(\phi_1, \phi_2, \phi_3) &= \frac{1}{2}m^2(\phi_1^2 + \phi_2^2) + \frac{1}{2}m_p^2\phi_3^2 + \\ &+ V_s(\phi_1, \phi_2) + V_p(\phi_3) + V_i(\phi_1, \phi_2, \phi_3), \end{aligned} \quad (4.3)$$

onde, como discutido anteriormente, consideramos apenas interações mínimas entre os campos. Como o objetivo do método do potencial efetivo é alterar este potencial incluindo correções quânticas vamos chamar a Eq. (4.3) de potencial clássico. Além dos termos de *massa* quadráticos (m^2 e m_p^2), já incluídos nos propagadores, temos a autointeração dos campos supercondutores

$$V_s(\phi_1, \phi_2) = \frac{\lambda}{4!}(\phi_1^2 + \phi_2^2)^2 \quad (4.4)$$

e a autointeração dos campos de paramagnons antiferromagnéticos

$$V_p(\phi_3) = \frac{g}{4!}\phi_3^4. \quad (4.5)$$

Este acoplamento e a constante g estão relacionados com o termo de coeficiente v_4 da Eq. (2.34) com toda dependência em k ignorada. Finalmente o último termo é a interação mínima entre os campos magnético e supercondutores, dada por

$$V_i(\phi_1, \phi_2, \phi_3) = u(\phi_1^2 + \phi_2^2)\phi_3^2. \quad (4.6)$$

Consideramos $u > 0$, que é o caso em que classicamente o antiferromagnetismo e a supercondutividade estão em competição. Repare ainda que o acoplamento entre as fases é feito no funcional pela interação mais simples que não quebra a simetria das partes livres associadas com as fases SC e AF.

4.3 Mínimos clássicos

4.3.1 Extremos do potencial clássico

Antes de observar como se comportam os mínimos do potencial quando incluímos correções quânticas é interessante analisar o comportamento dos mínimos clássicos. Estes mínimos são extremos do potencial da Eq. (4.3) obtidos das relações

$$\frac{dV_{cl}}{d\phi_1} = m^2\phi_1 + \frac{\lambda}{3!}\phi_1^3 + \frac{\lambda}{3!}\phi_1\phi_2^2 + 2u\phi_1\phi_3^2 = 0 \quad (4.7)$$

$$\frac{dV_{cl}}{d\phi_2} = m^2\phi_2 + \frac{\lambda}{3!}\phi_2^3 + \frac{\lambda}{3!}\phi_1^2\phi_2 + 2u\phi_2\phi_3^2 = 0 \quad (4.8)$$

$$\frac{dV_{cl}}{d\phi_3} = m_p^2\phi_3 + \frac{g}{3!}\phi_3^3 + 2u\phi_3(\phi_1^2 + \phi_2^2) = 0. \quad (4.9)$$

As Eq. (4.7) e (4.8) são equivalentes visto que o potencial depende apenas do módulo do parâmetro supercondutor $\varphi_{sc}^2 = \phi_1^2 + \phi_2^2$. De qualquer uma delas tiramos que

$$\phi_{1c}[m^2 + \frac{\lambda}{6}(\phi_{1c}^2 + \phi_{2c}^2) + 2u\phi_{3c}^2] = 0 \Rightarrow \begin{cases} \phi_{1c} = \phi_{2c} = 0 \\ \phi_{1c}^2 + \phi_{2c}^2 = -\frac{6}{\lambda}(m^2 + 2u\phi_{3c}^2). \end{cases} \quad (4.10)$$

Isto é, ou os campos supercondutores que minimizam o potencial clássico assumem valores nulos (fase normal) ou estão sobre uma circunferência de raio

$$R^2 = -\frac{6}{\lambda}(m^2 + 2u\phi_{3c}^2).$$

Esta relação deixa explícito porque classicamente $u > 0$ descreve competição entre magnetismo e supercondutividade. Se retiramos o magnetismo do problema ($\phi_3 = 0$), encontramos valores não nulos para os campos supercondutores ($R^2 > 0$) se $m^2 < 0$ (transição supercondutora usual). Mas quando incluímos o magnetismo o termo com ϕ_3 e u positivo exige um valor negativo finito para a massa excluindo a supercondutividade de uma certa região do diagrama de fases. Nas seções seguintes vamos discutir como os efeitos quânticos adicionam muito mais riqueza a este resultado clássico trivial.

A Eq. (4.9) é semelhante e tem resultados

$$\phi_{3c}[m_p^2 + 2u(\phi_{1c}^2 + \phi_{2c}^2) + \frac{g}{6}\phi_{3c}^2] = 0 \Rightarrow \begin{cases} \phi_{3c} = 0 \\ \phi_{3c}^2 = -\frac{6}{g}[m_p^2 + 2u(\phi_{1c}^2 + \phi_{2c}^2)] \end{cases} \quad (4.11)$$

Também está obvio da equação acima que a supercondutividade “atrapalha” o aparecimento de uma fase antiferromagnética ($\phi_{3c} \neq 0$).

O potencial efetivo é uma expansão em torno do mínimo da ação obtido com esses valores para os campos $\{\phi_{1c}, \phi_{2c}, \phi_{3c}\}$. No caso de quebra de simetria para os campos supercondutores

temos então uma certa liberdade para escolha dos valores dos campos que fornecem o mínimo em torno do qual queremos expandir (podemos usar quaisquer valores na circunferência da Eq. (4.10)). Isso é consequência direta da dependência simplificada do potencial em função apenas do módulo $\varphi_{sc}^2 = \phi_1^2 + \phi_2^2$. Esta conclusão será importante para simplificar o potencial efetivo calculado na seção 4.4.

4.3.2 Condições de mínimo clássicas*

Encontramos acima os valores dos campos que fornecem extremos para o potencial clássico. Vamos agora analisar em detalhe as condições de mínimo, máximo e ponto de inflexão. Consideramos os valores das massas em seus quatro casos possíveis.

1. $m^2 > 0$ e $m_p^2 > 0$:

Neste primeiro caso o único extremo possível é obtido com

$$\phi_{1c} = \phi_{2c} = \phi_{3c} = 0.$$

Mostramos que este ponto é um mínimo do potencial através do discriminante

$$D(\varphi, \phi_3) = \frac{d^2V}{d\varphi^2} \frac{d^2V}{d\phi_3^2} - \left(\frac{d^2V}{d\varphi d\phi_3} \right)^2 \quad (4.12)$$

onde recordamos que

$$\varphi^2 = \phi_1^2 + \phi_2^2 \quad (4.13)$$

e o potencial depende apenas de φ e ϕ_3 . As derivadas são facilmente calculadas

$$\frac{d^2V}{d\varphi^2} = m^2 + \frac{\lambda}{2}\varphi^2 + 2u\phi_3^2 \quad (4.14)$$

$$\frac{d^2V}{d\phi_3^2} = m_p^2 + 2u\varphi^2 + \frac{g}{2}\phi_3^2 \quad (4.15)$$

$$\frac{d^2V}{d\varphi d\phi_3} = 4u\varphi\phi_3 \quad (4.16)$$

e em $\phi_{1c} = \phi_{2c} = \phi_{3c} = 0$ somos levados aos resultados

$$\left. \frac{d^2V}{d\varphi^2} \right|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} = m^2 \quad (4.17)$$

$$\left. \frac{d^2V}{d\phi_3^2} \right|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} = m_p^2 \quad (4.18)$$

$$\left. \frac{d^2V}{d\varphi d\phi_3} \right|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} = 0 \quad (4.19)$$

de maneira que o discriminante da Eq. (4.12) é positivo indicando que este ponto é um mínimo. Nestas condições o único mínimo possível é a origem e o sistema está portando na fase desordenada (fase metálica normal). Observaremos que após a inclusão de correções quânticas este resultado é modificado e é possível encontrar fases de simetria quebrada mesmo quando as duas massas são positivas.

2. $m^2 < 0$ e $m_p^2 > 0$:

Defino $\mu^2 = -m^2 > 0$ para tratar apenas constantes positivas. Como $m_p^2 > 0$ temos da Eq (4.11) o único resultado $\phi_{3c} = 0$. Para os campos supercondutores encontramos da Eq. (4.10)

$$\varphi_c = (\phi_{1c}, \phi_{2c}) = \begin{cases} 0 \\ \varphi_c^2 = \phi_{1c}^2 + \phi_{2c}^2 = \frac{6\mu^2}{\lambda}. \end{cases} \quad (4.20)$$

Há portanto dois pontos de interesse: um com $\varphi_c = \phi_{3c} = 0$ e outro com $\varphi_c \neq 0$ e $\phi_{3c} = 0$. Analisando o primeiro ponto (origem), temos

$$\left. \frac{d^2V}{d\varphi^2} \right|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} = m^2 < 0 \quad (4.21)$$

$$\left. \frac{d^2V}{d\phi_3^2} \right|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} = m_p^2 \quad (4.22)$$

$$\left. \frac{d^2V}{d\varphi d\phi_3} \right|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} = 0 \quad (4.23)$$

e portanto o discriminante da Eq. (4.12) é negativo de maneira que este ponto não é mais um mínimo. O novo mínimo do potencial deve se localizar então no ponto com $\varphi_c \neq 0$ de onde obtemos

$$\left. \frac{d^2V}{d\varphi^2} \right|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} = -\mu^2 + \frac{\lambda}{2}\varphi_c^2 = 2\mu^2 > 0 \quad (4.24)$$

$$\left. \frac{d^2V}{d\phi_3^2} \right|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} = m_p^2 + 2u\varphi_c^2 = m_p^2 + 12\mu^2 \frac{u}{\lambda} > 0 \quad (4.25)$$

$$\left. \frac{d^2V}{d\varphi d\phi_3} \right|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} = 0 \quad (4.26)$$

e logo $D(\varphi, \phi_3) > 0$ indicando um mínimo. Desta maneira, o mínimo do potencial clássico neste caso é obtido com qualquer valor de ϕ_1 e ϕ_2 sobre a circunferência da Eq. (4.10).

3. $m^2 > 0$ e $m_p^2 < 0$:

Assim como no caso anterior defino $\mu_p^2 = -m_p^2$ para trabalhar com constantes positivas. Da Eq. (4.10) tenho $\varphi_c^2 = \phi_{1c}^2 + \phi_{2c}^2 = 0$ desde que $m^2 > 0$. Para ϕ_{3c}^2 os resultados são

$$\phi_{3c} = \begin{cases} 0 \\ \phi_{3c}^2 = \frac{6\mu_p^2}{g} \end{cases} \quad (4.27)$$

Analisando o primeiro ponto $(\varphi, \phi_{3c}) = (0, 0)$ temos os valores das derivadas

$$\frac{d^2V}{d\varphi^2} = m^2 > 0 \quad (4.28)$$

$$\frac{d^2V}{d\phi_3^2} = -\mu_p^2 < 0 \quad (4.29)$$

$$\frac{d^2V}{d\varphi d\phi_3} = 0 \quad (4.30)$$

e por isso este é um ponto de inflexão. O mínimo é obtido em qualquer dos pontos $(\varphi, \phi_{3c}) = (0, \pm\sqrt{6\mu_p^2/g})$ que possuem discriminante positivo.

4. $m^2 < 0$ e $m_p^2 < 0$:

Este caso é o mais divertido pois podemos ter quebra de simetria nos dois campos ou em apenas um deles dependendo dos valores das constantes [47]. Usamos como nos dois casos anteriores $\mu^2 = -m^2$ e $\mu_p^2 = -m_p^2$.

A condição para $\varphi \neq 0$ é

$$\varphi^2 = \frac{6}{\lambda} (\mu^2 - 2u\phi_{3c}^2) \geq 0, \quad (4.31)$$

e usando a Eq. (4.11) temos

$$\varphi^2 = \frac{6}{\lambda} \left[\mu^2 - 2u\frac{6}{g}(\mu_p^2 - 2u\varphi_c^2) \right] \geq 0. \quad (4.32)$$

Para reduzir os cálculos é útil definir

$$\alpha = \mu^2/2 \quad (4.33)$$

$$\alpha_p = \mu_p^2/2 \quad (4.34)$$

$$\beta = \lambda/12 \quad (4.35)$$

$$\beta_p = g/12 \quad (4.36)$$

e neste caso reduzimos a condição (4.31) para

$$\varphi_c^2 = \frac{1}{\beta} (\alpha - u\phi_{3c}^2) \geq 0 \quad (4.37)$$

de maneira que usando a Eq. (4.11) com as mesmas substituições temos

$$\varphi_c^2 = \frac{\alpha\beta_p - u\alpha_p}{\beta\beta_p - u^2} \geq 0. \quad (4.38)$$

As condições para que possamos ter extremo em $\varphi \neq 0$ são então

$$\begin{cases} (\alpha\beta_p - u\alpha_p) > 0 \text{ e } (\beta\beta_p - u^2) > 0 \\ \text{ou } (\alpha\beta_p - u\alpha_p) < 0 \text{ e } (\beta\beta_p - u^2) < 0 \end{cases} \quad (4.39)$$

isto é, se definimos

$$u' = \frac{u}{\alpha\alpha_p} \quad (4.40)$$

$$\beta' = \frac{\beta}{\alpha^2} \quad (4.41)$$

$$\beta'_p = \frac{\beta_p}{\alpha_p^2} \quad (4.42)$$

temos finalmente as condições

$$\begin{cases} u' < \beta'_p \text{ e } (u')^2 < \beta'\beta'_p \\ \text{ou } u' > \beta'_p \text{ e } (u')^2 > \beta'\beta'_p \end{cases} \quad (4.43)$$

Portanto, para que seja possível obter um extremo com $\varphi \neq 0$ temos que satisfazer uma das duas condições em (4.43).

Fazendo o mesmo para encontrar as condições para $\phi_{3c} \neq 0$ temos

$$\begin{cases} u' < \beta' \text{ e } (u')^2 < \beta'\beta'_p \\ \text{ou } u' > \beta' \text{ e } (u')^2 > \beta'\beta'_p \end{cases} \quad (4.44)$$

e para quebra de simetria nos dois campos temos que satisfazer ao mesmo tempo uma das condições de (4.43) e uma em (4.44). Isso só é possível, se observarmos atentamente as equações, quando satisfazemos ao mesmo tempo as primeiras condições de (4.43) e (4.44) ou ao mesmo tempo as duas segundas condições destas relações. Portanto é condição necessária para encontrarmos mínimos do potencial clássico em pontos com φ e ϕ_3 não nulos um dos casos abaixo

$$\begin{cases} u' < \beta'_p, u' < \beta' \text{ e } (u')^2 < \beta'\beta'_p \\ \text{ou } u' > \beta'_p, u' > \beta' \text{ e } (u')^2 > \beta'\beta'_p \end{cases} \quad (4.45)$$

Estas condições não são ainda condições suficientes para mínimos visto que os extremos podem ser máximos ou pontos de inflexão. A seguir analisamos então o discriminante para obter todas as condições necessárias.

As condições de mínimo são

$$\frac{d^2V}{d\phi_3^2} > 0 \quad (4.46)$$

$$D(\varphi, \phi_3) > 0 \quad (4.47)$$

e de acordo com a definição do discriminante estas condições implicam $d^2V/d\varphi^2 > 0$. Nos pontos com $\varphi_c \neq 0$ e $\phi_{3c} \neq 0$ temos, derivando a Eq. (4.9),

$$\frac{d^2V}{d\phi_3^2} = m_p^2 + 2u\varphi^2 + \frac{g}{2}\phi_3^2 = 4(\alpha_p - u\varphi_c^2) \quad (4.48)$$

e colocando o valor de φ_c dado pela condição da Eq. (4.38)

$$\varphi_c^2 = \frac{\alpha\beta_p - u\alpha_p}{\beta\beta_p - u^2} \quad (4.49)$$

temos

$$\frac{d^2V}{d\phi_3^2} = 4\beta_p \left(\frac{\alpha_p\beta - u\alpha}{\beta\beta_p - u^2} \right) = 4\beta_p\phi_{3c}^2. \quad (4.50)$$

Por isso, nos extremos, $d^2V/d\phi_3^2 > 0$ se $\phi_{3c}^2 > 0$ o que é sempre satisfeito. Em consequência, todas novas condições de mínimo jazem no sinal do discriminante D :

$$D(\varphi, \phi_3) = \frac{d^2V}{d\varphi^2} \frac{d^2V}{d\phi_3^2} - \left(\frac{d^2V}{d\varphi d\phi_3} \right)^2. \quad (4.51)$$

Usando as Eqs. (4.7), (4.8) e (4.16) temos

$$D = 8(-\alpha + 3\beta\varphi_c^2 + u\phi_{3c}^2) \beta_p\phi_{3c}^2 - 16u^2\varphi_c^2\phi_{3c}^2 > 0. \quad (4.52)$$

E de acordo com as Eqs. (4.32) e (4.38) reduzimos a condição acima para

$$\alpha\beta_p - u\alpha_p > 0 \rightarrow u' < \beta'_p \quad (4.53)$$

onde usamos as definições nas Eqs. (4.40), (4.41) e (4.42). Esta condição é necessária para mínimos em valores não nulos dos três campos e descarta imediatamente a segunda possibilidade de (4.45). Juntando esses resultados temos então o conjunto de condições para quebra de simetria nos dois campos

$$\begin{aligned} m^2 &< 0 \\ m_p^2 &< 0 \\ u' &< \min\{\beta', \beta'_p\}. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Para finalizar a análise estudamos o que acontece quando $u' > \min\{\beta', \beta'_p\}$, isto é, não satisfazemos a última situação acima. Neste caso há quebra de simetria em um campo apenas e consideramos dois pontos

$$A = (\varphi_c^2 \neq 0, \phi_{3c}^2 = 0) \quad (4.55)$$

$$B = (\varphi_c^2 = 0, \phi_{3c}^2 \neq 0) \quad (4.56)$$

Os pontos do tipo A têm $\varphi_c^2 = 6\mu^2/\lambda = \alpha/\beta$ e $\phi_{3c}^2 = 0$ por isso

$$\frac{d^2V}{d\phi_3^2} = -2\alpha_p + 2u\frac{\alpha}{\beta} \quad (4.57)$$

que é positivo se $u\alpha > \beta\alpha_p \rightarrow u' > \beta'$. É fácil mostrar que neste caso temos também $D > 0$ e A é portanto um mínimo. Nos pontos do tipo B o cálculo é similar e temos mínimos se $u' > \beta'_p$. Note ainda que se $u' > \max\{\beta', \beta'_p\}$ tanto os pontos do tipo A como os do tipo B são mínimos e para descobrir qual representa o mínimo global temos que calcular o valor do potencial nos dois pontos:

$$V_A = -\frac{1}{2\beta'} \quad (4.58)$$

$$V_B = -\frac{1}{2\beta'_p}. \quad (4.59)$$

Logo o ponto A é o mínimo global se $\beta' < \beta'_p$ e vice-versa!

Resumimos todos resultados do caso $m^2 < 0$ e $m_p^2 < 0$ na Figura 4.2.

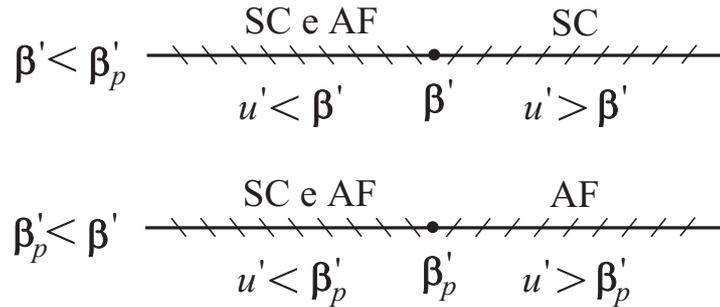


Figura 4.2: Resultado geral da análise de extremos do potencial clássico no caso em que $m^2 < 0$ e $m_p^2 < 0$. As fases supercondutoras (SC) possuem $\varphi_c \neq 0$ e as antiferromagnéticas (AF) possuem $\phi_{3c} \neq 0$.

4.4 Potencial efetivo paramagnon-supercondutor

Vamos agora usar os resultados gerais para a primeira correção quântica obtidos no Capítulo 2 para estudar o caso particular paramagnon-supercondutor. De acordo com a Eq. (2.82) definimos a matriz M de elementos

$$M = -G_0^{(l)}(k) \left. \frac{\partial^2 V(\{\phi_i\})}{\partial \phi_l(x_1) \partial \phi_m(x_2)} \right|_{\{\phi_i\}=\phi_c}. \quad (4.60)$$

A matriz é então obtida derivando o potencial em relação aos campos $\{\phi\}$ e tomando depois o resultado nos valores clássicos $\{\phi_{ic}\}$. Como todos cálculos a partir deste ponto são no espaço euclidiano não vamos mais usar o índice “ E ” nos propagadores e funcionais como foi feito no Capítulo 2.

No caso do potencial da Eq. (4.3) e dos propagadores das Eq. (4.1) e Eq. (4.2) temos

$$\left\{ \begin{array}{l} M_{11} = -\frac{(\lambda/2)\phi_{1c}^2 + (\lambda/6)\phi_{2c}^2 + 2u\phi_{3c}^2}{k^2 + m^2} \\ M_{12} = -\frac{(\lambda/3)\phi_{1c}\phi_{2c}}{k^2 + m^2} \\ M_{13} = -\frac{4u\phi_{1c}\phi_{3c}}{k^2 + m^2} \\ M_{21} = -\frac{(\lambda/3)\phi_{1c}\phi_{2c}}{k^2 + m^2} \\ M_{22} = -\frac{(\lambda/6)\phi_{1c}^2 + (\lambda/2)\phi_{2c}^2 + 2u\phi_{3c}^2}{k^2 + m^2} \\ M_{23} = -\frac{4u\phi_{3c}\phi_{2c}}{k^2 + m^2} \\ M_{31} = -\frac{4u\phi_{1c}\phi_{3c}}{\omega\tau + q^2 + m_p^2} \\ M_{32} = -\frac{4u\phi_{2c}\phi_{3c}}{i\omega\tau + q^2 + m_p^2} \\ M_{33} = -\frac{2u\phi_{1c}^2 + 2u\phi_{2c}^2 + (g/2)\phi_{3c}^2}{\omega\tau + q^2 + m_p^2} \end{array} \right. \quad (4.61)$$

Desde que, se há quebra de simetria no campo supercondutor, os valores de ϕ_{1c} e ϕ_{2c} jazem sobre a circunferência da Eq. (4.10), podemos sempre escolher o ponto em torno do qual expandimos tal que $\phi_{2c} = 0$ sem perda de generalidade (Veja a discussão da seção 4.3). Essa observação simplifica bastante a matriz acima. Usando o resultado da Eq. (2.81) para a primeira correção quântica

$$\Gamma_k^{(1)}[\phi_c] = \frac{1}{2} \hbar \int \frac{d^4 k}{(2\pi)^4} \ln \det [1 - M(k)] + \text{contratermos} \quad (4.62)$$

encontramos a correção para o potencial $\Gamma_k^{(1)}[\phi_c] = V^{(1)}(\phi_{1c}, \phi_{3c})$ onde

$$\begin{aligned}
 V^{(1)}(\phi_{1c}, \phi_{3c}) = & \frac{1}{2} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \left\{ \ln \left(1 + \frac{(\lambda/6)\phi_{1c}^2 + 2u\phi_{3c}^2}{k^2 + m^2} \right) + \right. \\
 & \ln \left[\left(1 + \frac{(\lambda/2)\phi_{1c}^2 + 2u\phi_{3c}^2}{k^2 + m^2} \right) \left(1 + \frac{2u\phi_{1c}^2 + (g/2)\phi_{3c}^2}{|\omega|\tau + q^2 + m_p^2} \right) + \right. \\
 & \left. \left. - \left(\frac{4u\phi_{1c}\phi_{3c}}{k^2 + m^2} \right) \left(\frac{4u\phi_{1c}\phi_{3c}}{|\omega|\tau + q^2 + m_p^2} \right) \right] \right\} + \text{contratermos.} \quad (4.63)
 \end{aligned}$$

Podemos chegar, é claro, no mesmo resultado usando a expansão em loops da Figura 4.3.

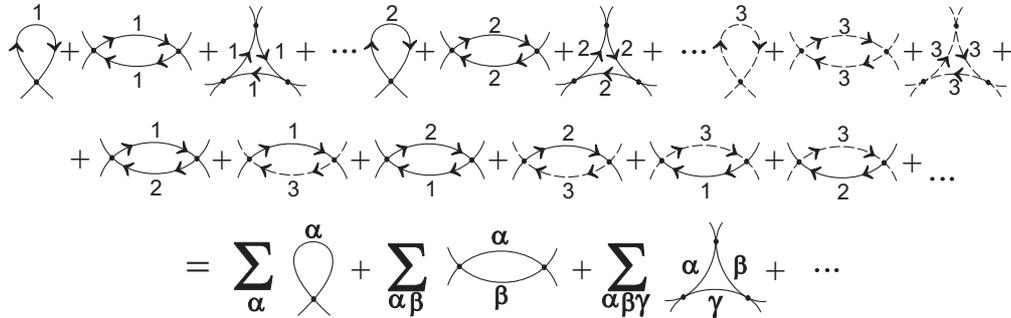


Figura 4.3: Diagramas de 1 loop. Os campos supercondutores são representados pelos índices α ou $\beta = 1, 2$. A linha pontilhada representa o propagador de paramagnons da Eq. (4.2).

Aplicamos o método geral proposto por Coleman [19] com pequenas modificações para incluir propagadores com dinâmicas diferentes. A soma sobre os índices dos campos é feita de maneira muito mais fácil se definimos uma matriz M para os vértices, dada por

$$[M]_{lm} = -G_0^l \frac{\partial^2 V_{cl}}{\partial \phi_l \partial \phi_m} \Big|_{\{\phi\}=\{\phi_c\}} \quad (4.64)$$

e depois tomamos o traço. Está é a mesma definição de M dada na Eq. (4.60). Na equação o propagator ($G_0^l = G_0$ ou D_0) é incorporado na definição da matriz. Desenhemos loops com setas e escolhemos incluir o propagador que sai do vértice no elemento de matriz correspondente. A soma dos diagramas com os corretos fatores de Wick pode ser feita formalmente no espaço dos momentos e usando a propriedade do traço

$$\text{Tr}[\ln(1 - M)] = \ln \det[(1 - M)], \quad (4.65)$$

chegamos ao resultado anterior,

$$V^{(1)}[\phi_c] = \frac{1}{2} \hbar \int d^4k \ln \det [1 - M(k)], \quad (4.66)$$

de maneira mais rápida do que usando a expansão analítica do Capítulo 2. Calcular o potencial efetivo pela expansão em loops é, de maneira similar, extremamente mais eficiente que expansões analíticas em ordens mais altas.

A correção do potencial, Eq. (4.63), poderá levar a modificações nas transições e no diagrama de fases. Antes de extrair conclusões do potencial corrigido discutimos as possibilidades para o diagrama de fases dos sistemas considerados.

4.5 Diagrama de fases

O método do potencial efetivo permite verificar como pequenas correções quânticas modificam o resultado clássico. Neste caso, partimos do princípio que o resultado clássico é consistente de maneira que sirva como solução base em torno da qual expandimos o potencial. Próximo de transições de fase essa hipótese é verdadeira desde que as frequências características ω_c tendem a zero na transição e as flutuações quânticas, proporcionais a ω_c , também (veja discussão do Capítulo 1). Sempre partimos então de uma solução clássica conhecida e por isso vamos analisar os possíveis diagramas de fase obtidos desta maneira.

O diagrama de fases do estado fundamental de um sistema de férmions pesados com fases AF e SC pode ser obtido da ação clássica variando as “massas” m e m_p . No estado normal paramagnético os valores destes parâmetros são $m_p^2 > 0$ e $m^2 > 0$ e a ação é minimizada com os valores dos parâmetros de ordem $\varphi_c = \phi_{3c} = 0$ (fase simétrica)¹. As fases AF e SC têm $m_p^2 < 0$ ($\phi_{3c} \neq 0$) e $m^2 < 0$ ($\varphi_c \neq 0$), respectivamente. Variando as massas as transições entre as diferentes fases em $T = 0$ são, a nível clássico, todas contínuas (segunda ordem). Os possíveis diagramas de fases clássicos [12, 45, 50] estão esboçados na Figura 4.4.

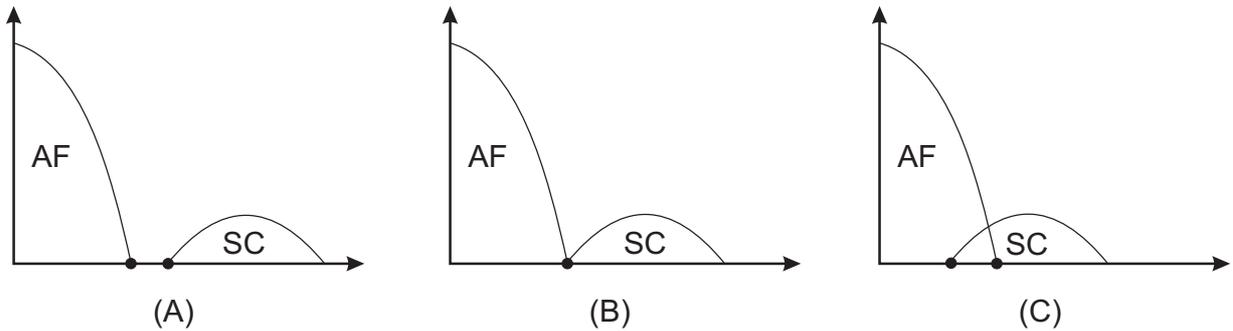


Figura 4.4: Esboço dos possíveis diagramas de fase para férmions pesados supercondutores.

É importante observar que estudos de Grupo de Renormalização na ação clássica [51] concluem que um ponto bicrítico como observamos na Figura 4.4B, mas em temperaturas

¹Lembre que definimos $\varphi_c^2 = \phi_{1c}^2 + \phi_{2c}^2$ na seção 4.3.

finitas, é estável apenas se o número de componentes do parâmetro de ordem supercondutor (n_S) e antiferromagnéticos (n_{AF}) forem tais que $n = n_S + n_{AF} \leq 4$. Para $n > 4$ o ponto bicrítico de simetria $SO(n)$ em $T \neq 0$ se torna instável e observamos um diagrama como o esboçado na Figura 4.4C. Repare que esta restrição leva, por exemplo, a conclusão de que em temperatura finita um férmion pesado antiferromagnético do tipo Ising ($n_{AF} = 1, n_S = 2 \Rightarrow n = 3 < 4$) não apresenta diagrama como o da Figura 4.4C, isto é, não há coexistência entre ordem magnética e supercondutividade. Neste caso, o estado de configuração $\varphi \neq 0$ e $\phi_3 \neq 0$ não é possível, pelo menos em $T \neq 0$. Notamos ainda que correções quânticas podem destruir a simetria $SO(n)$ associada com o ponto quântico bicrítico da Figura 4.4B devido a dinâmicas diferentes das flutuações magnéticas e supercondutoras. O problema em $T = 0$ é portanto mais complicado e pode levar a resultados distintos dos obtidos pelo Grupo de Renormalização clássico no limite em que $T \rightarrow 0$.

Nas próximas seções vamos estudar os efeitos quânticos em dois dos diagramas esboçados, em especial os casos da Figura 4.4A e 4.4B. Começamos considerando o caso (A) onde há uma fase normal separando as fases SC e AF e as transições ocorrem em diferentes PCQs. As correções quânticas se tornam importantes na região normal perto das fases SC e AF onde pode ocorrer quebra de simetria e transições de primeira ordem induzidas por essas flutuações. Vamos considerar que o estado normal entre as fases ocorre em uma região suficientemente grande do diagrama de fases de maneira que podemos separar o estudo do efeito de flutuações AF no PCQ supercondutor e o efeito das flutuações SC no ponto crítico magnético.

O caso (C) da Figura 4.4, com algumas hipóteses adicionais, pode também ser descrito pelo nosso modelo. A princípio, o propagador de paramagnons utilizado é válido apenas na fase normal próxima do AF. Dentro da fase AF esperamos um propagador diferente. Entretanto, se identificamos ϕ_3 como uma componente longitudinal da magnetização da sub-rede com uma dinâmica de relaxação dada pelo propagador da Eq. (4.2) e pudermos desprezar excitações de onda de spin que, em $T = 0$, podem ser consideradas congeladas se temos um *gap* anisotrópico suficientemente grande, é permitido acessar a fase AF. De qualquer maneira esse caso se revelou intratável analiticamente. Embora seja sempre possível expandir o termo logaritmo em potências da interação u isso seria incompatível com a expansão de loops que soma todas as potências desta quantidade para chegar ao resultado. Para os outros casos a integral completa pode ser calculada analiticamente e os resultados são discutidos nas seções a seguir.

4.6 Efeitos quânticos na fase normal entre as fases AF e SC

4.6.1 Efeitos de flutuação na fase normal perto da supercondutividade

Estamos interessados aqui na transição de fase quântica normal-supercondutor e portanto, perto do estado SC, procuramos por quebra parcial de simetria com $\phi_{1c} \neq 0$ mas com $\phi_{3c} = 0$ desde que estamos suficientemente afastados do PCQ magnético². Vamos calcular a primeira correção dada pela Eq. (4.63),

$$V^{(1)}(\phi_{1c}, \phi_{3c}) = \frac{1}{2} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \left\{ \ln \left(1 + \frac{A(\phi_{1c}, \phi_{3c})}{k^2 + m^2} \right) + \ln \left[\left(1 + \frac{B(\phi_{1c}, \phi_{3c})}{k^2 + m^2} \right) \left(1 + \frac{C(\phi_{1c}, \phi_{3c})}{|\omega|\tau + q^2 + m_p^2} \right) - \left(\frac{D^2(\phi_{1c}, \phi_{3c})}{(k^2 + m^2)(|\omega|\tau + q^2 + m_p^2)} \right) \right] \right\} \quad (4.67)$$

onde $d^4k = d^3q d\omega$ e

$$A(\phi_{1c}, \phi_{3c}) = (\lambda/6)\phi_{1c}^2 + 2u\phi_{3c}^2 \quad (4.68)$$

$$B(\phi_{1c}, \phi_{3c}) = (\lambda/2)\phi_{1c}^2 + 2u\phi_{3c}^2 \quad (4.69)$$

$$C(\phi_{1c}, \phi_{3c}) = 2u\phi_{1c}^2 + (g/2)\phi_{3c}^2 \quad (4.70)$$

$$D(\phi_{1c}, \phi_{3c}) = 4u\phi_{1c}\phi_{3c}. \quad (4.71)$$

Neste caso $D(\phi_{1c}, \phi_{3c}) = 0$ e a Eq. (4.67) se reduz a

$$V^{(1)}(\phi_{1c}) = \frac{1}{2} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \ln \left(1 + \frac{(\lambda/6)\phi_{1c}^2}{k^2 + m^2} \right) + \frac{1}{2} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \ln \left(1 + \frac{(\lambda/2)\phi_{1c}^2}{k^2 + m^2} \right) + \frac{1}{2} \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \ln \left(1 + \frac{2u\phi_{1c}^2}{|\omega|\tau + q^2 + m_p^2} \right) \quad (4.72)$$

As primeiras duas integrações dependem apenas do módulo do quadrivetor k e o tempo entra apenas como uma dimensão extra. Isso acontece pois o expoente crítico dinâmico associado a transição normal-supercondutor é nesse caso $z = 1$. Usamos portanto uma regularização por corte (*cut-off*) usual para essas integrações [18]. Entretanto na última integração temos anisotropia entre tempo e espaço ($z = 2$). Logo, se usamos um corte Λ para os momentos, o

²Lembre que escolhemos um ponto com $\phi_{2c} = 0$ sem perda de generalidade de acordo com a discussão da seção 4.4.

corte correspondente nas frequências deve ser $\Lambda^z = \Lambda^2$ [25]. Na realidade, podemos também usar o mesmo corte para momentos e frequências, mas é possível mostrar que os resultados são equivalentes e o “corte simplificado” (Λ^z) reduz em muito o trabalho de cálculo das integrais. Os procedimentos de regularização e cálculo das integrais são apresentados no Apêndice C. Também apresentamos a renormalização e os contratermos necessários para esse caso.

O potencial efetivo em um loop é dado por

$$V_{ef}(\phi_{1c}, \phi_{3c} = 0) = V_{cl}(\phi_{1c}, \phi_{3c} = 0) + V^{(1)}(\phi_{1c}) \quad (4.73)$$

onde V_{cl} é o potencial clássico da Eq. (4.3) e

$$V_{ef}(\phi_c) = \frac{1}{2}m^2\phi_c^2 + \frac{\lambda}{4!}\phi_c^4 + \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{15}(2u\phi_c^2 + m_p^2)^{5/2} - \frac{8}{15}m_p^5 - \frac{8}{3}m_p^3u\phi_c^2 \right]. \quad (4.74)$$

Os termos entre chaves têm ordem \hbar . Termos proporcionais a λ^2 e $m^2\lambda$ foram desprezados desde que eles devem ser bem menores que o termo clássico proporcional a λ no limite de acoplamentos pequenos. Podemos fazer uma expansão para massas pequenas e usar o valor de ϕ_c que minimiza o potencial, $\langle\phi\rangle$, para simplificar o resultado, obtendo

$$V_{ef}(\phi_c) \approx \frac{1}{2}m^2\phi_c^2 + \frac{\lambda}{4!}\phi_c^4 + \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{15}(2u)^{5/2}|\phi_c^5| + \right. \\ \left. - \frac{8}{3}(2u)^{5/2}\langle\phi\rangle\phi_c^4 + \frac{4}{3}(2u)^{3/2}m_p^2|\phi_c^3| - \frac{8}{3}m_p^3u\phi_c^2 \right]. \quad (4.75)$$

A equação para $\langle\phi\rangle$ pode também ser usada para eliminar λ em função deste parâmetro. Este fenômeno conhecido como *transmutação dimensional* está discutido no Apêndice B e em mais detalhes na referência [18].

Está claro que potências maiores de u não são desprezadas pois não temos termo clássico proporcional a u . É justamente o balanço do termo clássico proporcional a λ com os termos proporcionais a u da correção quântica que levam a efeitos interessantes. Para pequenas massas m_p , independente do valor de u (mas desde que $\lambda \sim u^{3/2}$ como vamos mostrar), encontramos mínimos fora da origem justificando a expansão anterior para massas m e m_p pequenas. É conveniente ainda introduzir a separação entre os PCQs clássicos de segunda ordem $\Delta^2 = m^2 + m_p^2 > 0$ (veja Fig. 4.5). Vamos estudar o diagrama de fases variando Δ^2 através do comportamento dos mínimos do potencial efetivo. Nossos resultados indicam que as correções quânticas levam a quebra de simetria na fase normal perto da supercondutividade e por consequência a região supercondutora no diagrama de fases é estendida. Há portanto deslocamento do PCQ na direção da fase normal. Na verdade, o que os resultados mostram é que o PCQ não é apenas deslocado mas a transição quântica se transforma em uma transição de primeira ordem, isto é, o novo ponto de transição não é nem mesmo crítico. A transição de primeira ordem resultante é no entanto fraca, segundo a definição apresentada no Capítulo 3, e os métodos de fenômenos críticos como teorias de escala podem ser usados aproximadamente. A

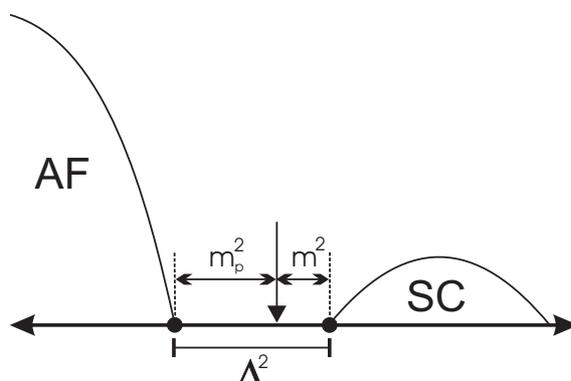


Figura 4.5: Definição do Δ^2 como a distância entre os PCQs das fases AF e SC. m_p^2 e m^2 são as distâncias do ponto onde o sistema está sendo medido as fases AF e SC respectivamente.

análise dos mínimos é trabalhosa mas podemos encontrar o novo ponto onde a transição ocorre e as posições das espinodais [52]. Entre as duas espinodais há um intervalo de coexistência da fase supercondutora com regiões de fortes flutuações antiferromagnéticas devidas a existência de um mínimo metaestável. Note que da mesma maneira como acontece no problema do supercondutor acoplado com o campo eletromagnético discutido no Capítulo 3 a transição ocorre em um valor finito da massa (enquanto a transição clássica ocorre em $m^2 = 0$) mostrando que uma região da fase normal tem a simetria quebrada. A Figura 4.6 resume os resultados desta seção.

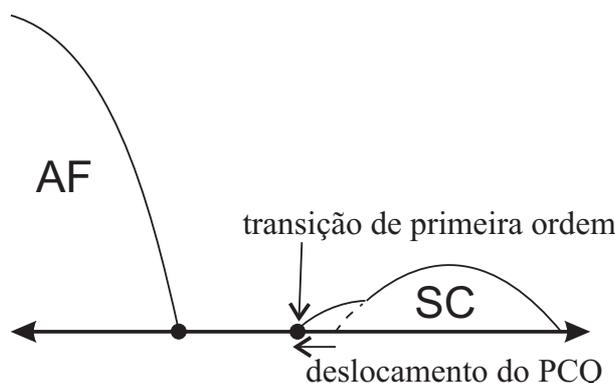


Figura 4.6: Diagrama esquematizado levando em conta termos quânticos. O ponto crítico quântico supercondutor é deslocado quando incluímos as flutuações quânticas. O novo ponto de transição é um ponto de primeira ordem em $T = 0$.

4.6.2 Efeitos das flutuações na fase normal perto do ponto crítico AF

Seguimos o mesmo procedimento da seção anterior. Agora estamos interessados na transição entre o estado normal e o AF. Por isso procuramos por quebra parcial de simetria com $\phi_{3c} \neq 0$ mas $\phi_{1c} = 0$. Temos novamente $D(\phi_{1c}, \phi_{3c}) = 0$ na correção quântica dada pela Eq. (4.67) e as três integrais resultantes têm a mesma forma funcional das integrais na Eq. (4.72) mas com diferente dependência nos ϕ 's. Integração e renormalização são feitas exatamente como antes começando pelo caso $m^2 = 0$ (veja Apêndice C). O potencial efetivo agora é dado por

$$V_{ef}(\phi_{1c} = 0, \phi_{3c}) = V_{cl}(\phi_{1c} = 0, \phi_{3c}) + V^{(1)}(\phi_{3c}) \quad (4.76)$$

similar ao anterior exceto por contratermos da renormalização e os termos da correção desprezados por serem muito menores que o equivalente clássico de ordem zero. Os termos proporcionais a u^2 e λ^2 não podem ser desprezados já que não há termos clássicos equivalentes. Por outro lado, desprezamos os termos de ordem maior em g visto que são muito menores que o termo clássico em g . Observamos ainda que se $m = 0$ o resultado é o mesmo para o caso desenvolvido no Capítulo 3 [2, 18] e dado por

$$V_{ef}(\psi_c, m = 0) \approx \frac{1}{2} \left(m_p^2 - \frac{m_p^3 g}{12\pi^2} \right) \phi_{3c}^2 + \frac{g}{4!} \phi_{3c}^4 + \frac{u^2}{8\pi^2} \phi_{3c}^4 \left[\ln \left(\frac{\phi_{3c}^2}{\langle \phi_3 \rangle^2} \right) - \frac{25}{6} \right]. \quad (4.77)$$

Portanto há uma transição quântica de primeira ordem quando variamos a massa m_p^2 para $g \sim u^2$. Entretanto, os resultados corretos no caso presente devem ser obtidos considerando $m^2 \neq 0$, isto é, as flutuações supercondutoras são importantes mas não críticas. A expansão do potencial efetivo em potências de m^2 é

$$\begin{aligned} V_{ef} \approx & \frac{1}{2} M_p^2 \phi_{3c}^2 + \frac{g}{4!} \phi_{3c}^4 + \frac{u^2}{8\pi^2} \phi_{3c}^4 \left[\ln \left(\frac{\phi_{3c}^2}{\langle \phi_3 \rangle^2} \right) - \frac{25}{6} \right] + \\ & + \frac{um^2}{16\pi^2} \left[\phi_{3c}^2 + 2\phi_{3c}^2 \ln \left(\frac{2u\phi_{3c}^2}{\Lambda^2} \right) \right] + \mathcal{O}(m^4) \end{aligned} \quad (4.78)$$

onde M_p^2 , o parâmetro magnético de massa renormalizado, é dado por

$$M_p^2 = m_p^2 - \frac{m_p^3 g}{12\pi^2}. \quad (4.79)$$

Temos que considerar agora na Eq. (4.78) um novo termo proporcional a um^2 . Este termo depende do corte Λ da regularização e por isso um novo contratermo é necessário. Desta maneira obtemos

$$\begin{aligned} V_{ef}(\phi_{3c}) \approx & \frac{1}{2} \left(M_p^2 + \frac{9u^2 \langle \phi_3 \rangle^2}{2\pi^2} - \frac{1}{2} g \langle \phi_{3c} \rangle^2 \right) \phi_{3c}^2 + \frac{g}{4!} \phi_{3c}^4 + \\ & + \frac{u^2}{8\pi^2} \phi_{3c}^4 \left[\ln \left(\frac{\phi_{3c}^2}{\langle \phi_3 \rangle^2} \right) - \frac{25}{6} \right] + \frac{um^2}{8\pi^2} \phi_{3c}^2 \left[\ln \left(\frac{\phi_{3c}^2}{\langle \phi_3 \rangle^2} \right) - 3 \right] \end{aligned} \quad (4.80)$$

e incluímos na massa renormalizada alguns outros termos quadráticos vindo da renormalização. O acoplamento com as flutuações massivas da supercondutividade muda dramaticamente o comportamento do potencial uma vez que sua derivada segunda em $\phi_{3c} = 0$ é sempre negativa, isto é, na origem sempre encontramos um máximo para todo $um^2 \neq 0$. Esse acoplamento também dá origem a novos mínimos perto de $\phi_{3c} = 0$ que se distanciam da origem a medida que um^2 aumenta (Figura 4.7). Observe então que, diminuindo M_p^2 (aproximando o sistema do

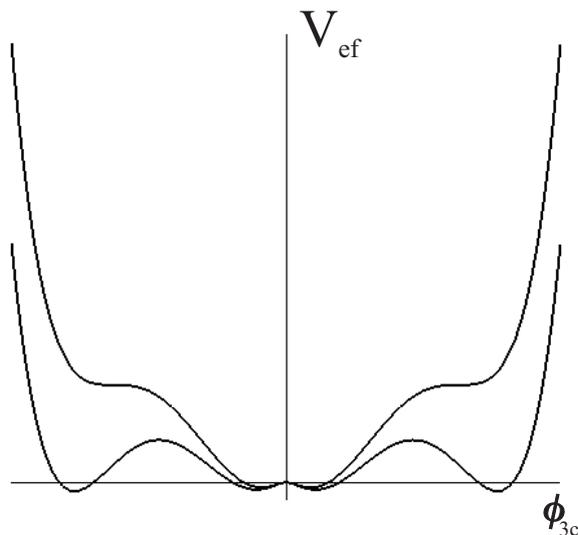


Figura 4.7: Novos mínimos aparecem no potencial para $um^2 \neq 0$. Na figura apresentamos o potencial em duas situações: para $M_p^2 = M_p^{c2}$ mostramos a coexistência de fases LMAF e SMAF na transição de primeira ordem (veja discussão no texto). Também mostramos o potencial no ponto de spinodal onde a fase LMAF se torna instável dentro da fase LMAF.

PCQ magnético) o sistema sofre uma transição de primeira ordem de uma fase com parâmetro de ordem pequeno para outra onde o valor do parâmetro de ordem é bem maior. Como o parâmetro de ordem está relacionado com a magnetização do sistema, observamos uma transição de um AF de momentos pequenos (Small Moment Anti-ferromagnetism – SMAF) para um AF de momentos grandes (Large Moment Anti-ferromagnetism – LMAF). Onde havia classicamente uma fase normal encontramos agora uma fase LMAF. Entretanto, é claro que quando nos afastamos do PCQ magnético na direção da fase SC, um^2 diminui e os mínimos responsáveis pela fase LMAF se aproximam rapidamente da origem. Os momentos se tornam tão pequenos que podemos dizer que em determinado ponto recuperamos a fase normal de momento nulo. Observamos os efeitos das correções quânticas nas Figuras 4.7 e 4.8.

Na Figura 4.9 mostramos um gráfico da razão R entre as magnetizações de sub-rede das fases SMAF e LMAF. O parâmetro relevante para o valor de R é u^2/g , exatamente a razão entre os acoplamentos que temos que balancear para gerar os mínimos fora da origem. Fases antiferromagnéticas de momento pequeno (SMAF) estão presentes em alguns materiais de

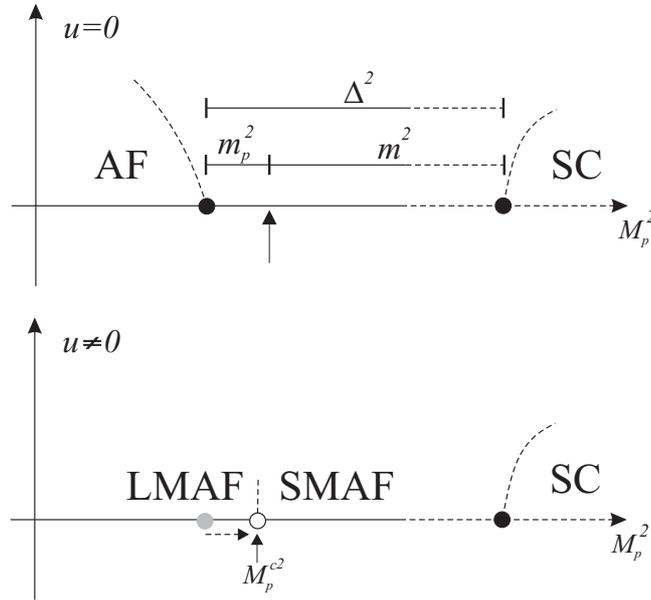


Figura 4.8: Diagrama de fases para $u = 0$ e $u \neq 0$. Δ^2 é a distância entre os PCQ's das fases AF e SC. m_p^2 e m^2 são as distâncias do ponto onde o sistema é medido para a fase AF e SC respectivamente. Quando $M_p^2 \approx m_p^2$ é reduzido, isto é, o ponto de medida se move na direção da fase AF, há uma transição de primeira ordem em M_p^{c2} entre duas fases AF com valores diferentes do parâmetro de ordem.

férmions pesados [53]. Os valores mais comuns observados experimentalmente para a razão R [53, 54] são de ordem 10^{-2} , 10^{-3} e correspondem a valores de $u^2/g \approx 1$. Neste trabalho vamos comentar o tratamento desses modelos usando Grupo de Renormalização discutindo porque podemos em geral considerar $u^2/g \approx 1$ sem perda de generalidade (Veja seção 4.8).

Há interessante similaridade entre nossos resultados teóricos e o diagrama de fases do sistema YbRh_2Si_2 , no qual ocorre a transição de uma fase AF de pequenos momentos para outra de momentos grandes com o aumento da pressão [54] (Figura 4.10). Nos férmions pesados baseados no Yb a pressão P atua na direção oposta do que nos sistemas de Ce diminuindo a razão J/W entre os parâmetros da rede de Kondo [10]. O YbRh_2Si_2 em $P = 0$ é um sistema SMAF com $T_N = 70\text{mK}$. A pressão aumenta T_N e em $P_c \approx 10$ GPa há uma transição de primeira ordem para um estado de momentos altos de $\mu_{\text{Yb}} \approx 1.9\mu_B$. Por outro lado a pressão negativa, isto é, expansão da rede, leva o sistema para um PCQ antiferromagnético [55]. Levantamos então a possibilidade que maior expansão da rede leva ao aparecimento de supercondutividade. Entretanto, lembramos que outras flutuações descritas por um propagador igual ao usado para representar a parte quadrática do supercondutor levam ao mesmo resultado qualitativo. Por isso também é interessante procurar no sistema outras instabilidades de dinâmica similar.

Quando a separação Δ^2 entre os PCQ's clássicos é reduzida o momento magnético da fase

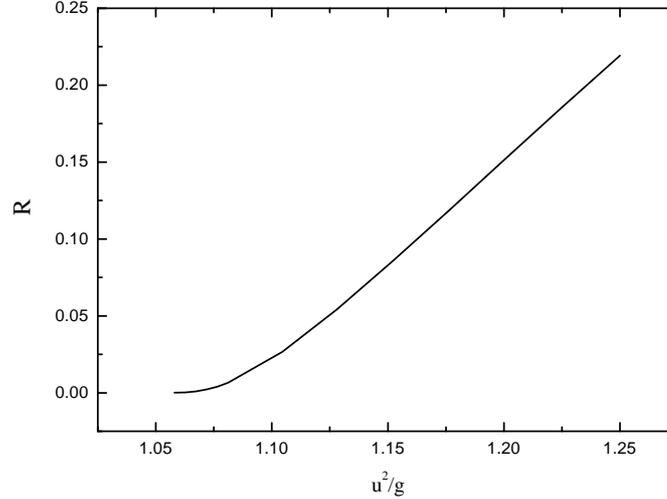


Figura 4.9: Razão $R = \langle \phi_c^{SM} \rangle / \langle \phi_c^{LM} \rangle$ entre as magnetizações de sub-rede dos estados fundamentais SMAF e LMAF em função do parâmetro relevante u^2/g .

SMAF vai continuamente para zero (pois reduzimos m^2). Na prática, quando a separação é suficientemente pequena ou estamos muito próximos do PCQ supercondutor, o momento de SMAF é tão pequeno que identificamos esta fase como a fase normal. Neste caso desprezamos o termo um^2 e todos cálculos são equivalentes aos desenvolvidos no Capítulo 3 onde também encontramos uma transição de primeira ordem. Neste caso a transição seria entre a fase AF e a normal e o potencial perto do ponto de primeira ordem pode ser escrito como

$$V_{eff}(\langle \phi_{3c} \rangle) \approx \frac{1}{4} M_p^2 \langle \phi_3 \rangle^2 \left[1 - \frac{m_c^2}{M_p^2} \right] \quad (4.81)$$

onde a massa crítica m_c^2 é

$$m_c^2 = \frac{3u^2}{12\pi^2} \langle \phi_3 \rangle^2. \quad (4.82)$$

Portanto o “calor latente” é dado pela expressão simples

$$L_h = \frac{1}{4} m_c^2 \langle \phi_3 \rangle^2. \quad (4.83)$$

Fenômeno similar ocorre na transição de primeira ordem SMAF-LMAF. Neste caso também há um calor latente associado e um ponto de espinodal correspondendo ao limite de estabilidade da fase de momentos grandes dentro da fase de momento pequeno (Figura 4.7).

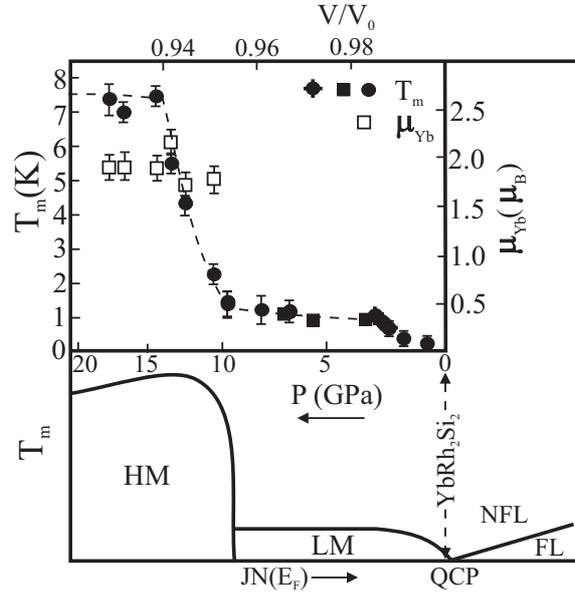


Figura 4.10: Diagrama de fases do sistema YbRh_2Si_2 retirado da referência [54]. Na parte superior apresentamos os dados para temperatura de ordenamento (T_m) determinados por Mossbauer (círculos escuros) e resistividade (quadrados escuros). Dados para o valor do momento μ_{Yb} em função da pressão também são apresentados (quadrados brancos). No diagrama esquemático a fase de momentos altos é representada por HM e a de momentos pequenos por LM.

4.7 Ponto quântico bicrítico

Analisamos agora a possibilidade de um ponto quântico bicrítico (PQB) como o apresentado na Figura 4.4B. A transição de fases ocorre diretamente entre AF e SC. As correções quânticas neste caso podem ser calculadas no lado paramagnético e envolvem sempre termos em u , λ e g de ordem mais alta do que os encontrados no potencial clássico. No limite em que esses acoplamentos são pequenos as correções portanto não desempenham contribuição significativa, especialmente para a transição, caso em que a parte clássica se torna muito importante. Entretanto, efeitos como renormalização da massa podem mudar algumas propriedades da fase supercondutora na proximidade do magnetismo. Por exemplo, renormalizando a massa mudamos a constante κ que determina quando o supercondutor é do tipo I ou tipo II [56, 52].

Por fim, a transição em que as duas fases desaparecem no mesmo ponto crítico é contínua exatamente como obtemos classicamente e a análise do ponto crítico quântico pode ser feita usando uma simples teoria de escala. O ponto bicrítico, de acordo com a análise clássica,

tem simetria $SO(n)$ [45], mas quando tomamos em conta o seu caráter quântico, como é o caso em $T = 0$, as diferentes dinâmicas relacionadas com as distintas fases em competição podem quebrar essa simetria. Não é difícil observar que o comportamento crítico predominante (baixas frequências e grandes comprimentos de onda) deve ser dado pela dinâmica de relaxação da componente magnética associada com o expoente $z = 2$. Para $d = 3$, assumindo que há apenas um comprimento de correlação característico que diverge quando T é reduzida na direção do PQB, obtemos que tanto a linha crítica em temperaturas finitas antiferromagnética (T_N) quanto a supercondutora (T_S) saem de $T = 0$ de acordo com

$$T_{N,S} \propto |\delta|^\psi, \quad (4.84)$$

isto é, as duas linhas possuem o mesmo expoente de *shift* ψ [2]. Podemos encontrar também o valor deste expoente usando que $\psi = \nu z$, onde ν e z são os expoentes do comprimento de correlação e dinâmico associados ao PQB. Visto que a dimensão efetiva é $d_{eff} = d + z = 5$, o expoente ν assume seu valor de campo médio $\nu = 1/2$ de forma que $\nu z = 1$. De maneira alternativa a linha crítica pode ser escrita como

$$\delta(T) = \delta(T = 0) + uT^{1/\psi}. \quad (4.85)$$

Para o comprimento de correlação ao longo da trajetória crítica ($\delta(T = 0) = 0$) a teoria de escala fornece

$$\xi \sim |\delta(T)|^{-\nu} \xrightarrow{\delta(0)=0} \xi \sim T^{-\nu/\psi} = T^{-1/2} \quad (4.86)$$

tal que no PQB o comprimento de correlação diverge com o decréscimo da temperatura de acordo com $1/\sqrt{T}$. O comportamento de escala de outras grandezas físicas pode ser previsto de forma similar, em especial, o calor específico ao longo desta trajetória apresenta um comportamento não líquido de Fermi dado por $C_P(T) \propto \sqrt{T}$ (veja a Figura 4.11).

4.8 Grupo de renormalização e considerações gerais

4.8.1 Mecanismos

Muitas conclusões gerais podem ser extraídas dos resultados deste capítulo e do Capítulo 3. Transições descontínuas em temperatura nula estão começando a atrair muito interesse pois além da teoria nova envolvida [31], há novos resultados experimentais mostrando que elas ocorrem em férmions pesados e metais de transição magnéticos [34, 38]. Nestes resultados, quando nos aproximamos muito do PCQ observamos que a natureza da transição contínua muda para uma transição de primeira ordem. Discutimos na seção 3.1 que muitos mecanismos podem ser responsáveis pela mudança [35, 36] mas em temperaturas baixas destacamos o acoplamento do parâmetro de ordem da transição com flutuações [57]. Esses efeitos parecem ser os responsáveis pelas transições de primeira ordem fracas que aparecem em baixas temperaturas.

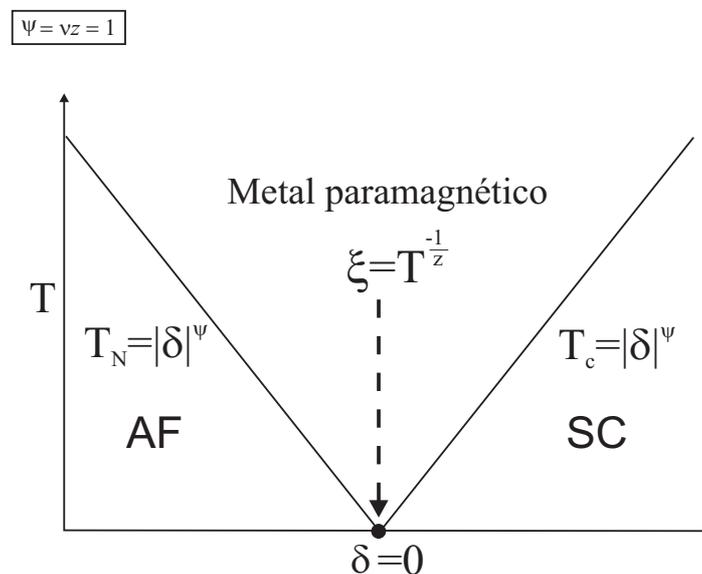


Figura 4.11: Um ponto quântico bicrítico separando uma fase antiferromagnética (AF) de uma supercondutora (SC). As duas linhas críticas em temperatura finita saem de $T = 0$ como o mesmo expoente ψ . Para $d=3$, $\psi = \nu z = 1$.

Neste trabalho apresentamos o mecanismo de acoplamento com dois tipos de flutuação: primeiro consideramos o acoplamento do parâmetro de ordem da transição com um modo não massivo (modo de Goldstone), no caso, o campo eletromagnético (Capítulo 3). Há muitas possibilidades para esses modos em $T = 0$ e discutimos na seção seguinte nossos resultados sob o ponto de vista do potencial efetivo e em comparação com os obtidos no recente artigo de revisão [38]. Além do acoplamento com esses modos, apresentamos novos resultados neste capítulo que indicam que o acoplamento do parâmetro de ordem com outras flutuações não críticas, como as de um parâmetro de ordem de outra fase em competição na mesma região do diagrama de fases, induzem efeitos semelhantes na transição quântica. Nesta linha, o objetivo das seções a seguir é discutir os resultados em termos gerais e em comparação com os obtidos por Belitz *et al* [38].

4.8.2 Acoplamento com modos de Goldstone e *Generic Scale invariance*

Atualmente é bem conhecida a importância do conceito de *generic scale invariance* em associação às transições de fase, principalmente em $T = 0$, onde parece haver muito mais modos não massivos que em temperatura finita. A idéia é simples: sabemos que na proximidade de uma transição contínua há divergência do comprimento de correlação o que implica a propi-

idade de invariância de escala [13]. Mas desde que $\xi \sim 1/m^2$, modos não massivos possuem sempre $\xi \rightarrow \infty$ e uma “invariância de escala geral” (generic scale invariance). Estes modos devem, por este argumento, influir nas propriedades das transições de fase. Essa observação leva a importantes conclusões. Por exemplo, é comum encontrar a afirmação que o problema de transições de fase quânticas em d dimensões é equivalente ao problema em temperaturas finitas com $d + z$ dimensões (dimensão efetiva). Fazemos este comentário no Capítulo 1 pois realçamos que a dinâmica deve ser levada em consideração no caso de transições em $T = 0$. A dimensão temporal oriunda da dinâmica faz com que o problema quântico tenha uma dimensão efetiva $d + z$ onde o expoente z é a contribuição temporal. Entretanto, sob o ponto de vista do acoplamento com os modos sem massa³, isso não deve ser verdade em muitos casos. Em $T = 0$ há mais modos deste tipo que em temperatura finita [38], conseqüentemente, a transição em $T = 0$ acoplada com os correspondentes modos de Goldstone é diferente da transição em temperatura finita em $d + z$ em que alguns desses modos são desconsiderados.

Outra conclusão, que enfatizamos aqui, é que esses modos podem mudar a natureza da transição em $T = 0$ de acordo com os resultados do Capítulo 3. Encontramos, para o supercondutor acoplado com um campo de calibre, o potencial efetivo em $T = 0$

$$V_{eff} = \frac{1}{2}m^2\varphi^2 + \frac{\lambda}{4!}\varphi^4 + \frac{3q^4}{64\pi^2}\varphi^4 \left[\ln \left(\frac{\varphi^2}{M^2} \right) - \frac{25}{6} \right] \quad (4.87)$$

onde o parâmetro M vem da renormalização (veja Apêndice B) e é completamente arbitrário [18]. Se consideramos M um mínimo do potencial efetivo é possível realizar a *transmutação dimensional* descrita no Apêndice B encontrando finalmente o potencial da Eq. (3.5). Desde que perto da transição $m \approx 0$, inferimos das condições encontradas no apêndice, Eqs. (B.3) e (B.4), que a condição para que ocorram mínimos fora da origem é

$$\lambda \sim q^4. \quad (4.88)$$

Também mostramos no Apêndice B que esta condição é equivalente a encontrada por Belitz *et al* [38] embora eles usem aproximação distinta para atacar o problema. Os autores argumentam nesse caso que se a condição não é satisfeita as flutuações do parâmetro de ordem podem desestabilizar o mecanismo e as transições resultantes podem continuar contínuas. O que estamos interessados em mostrar aqui é que, na verdade, se fizermos um tratamento correto por Grupo de Renormalização (GR), a condição da Eq. (4.88) na realidade não representa nenhuma restrição. Está claro que adicionamos alguma liberdade no sistema se lembrarmos que na renormalização inserimos o parâmetro arbitrário M . Quando escolhemos M escolhemos determinada escala de energia e as constantes λ e q são funções da escala escolhida. Por isso esses acoplamentos não são totalmente independentes desde que o modelo deve levar ao mesmo resultado independente do valor de M escolhido. O tratamento por GR leva em conta

³Quando nos referimos a modos “sem massa” estamos querendo dizer modos “sem *gap*” se usamos linguagem mais convencional entre os físicos de matéria condensada.

a dependência dos acoplamentos com a escala de energia e mostra que a condição da Eq. (4.88) pode ser sempre satisfeita.

De maneira simplificada, vamos agora mostrar através do potencial efetivo, que uma variação em M produz uma variação na constante de acoplamento λ , de maneira que é sempre possível satisfazer a condição da Eq. (4.88) escolhendo um valor adequado de M . Consideramos a Eq. (4.87). Queremos reescrevê-la com um valor M' , tal que,

$$V_{eff} = \frac{1}{2}m^2\varphi^2 + \frac{\lambda}{4!}\varphi^4 + \frac{3q^4}{64\pi^2}\varphi^4 \left[\ln \left(\frac{\varphi^2}{M'^2} \frac{M'^2}{M^2} \right) - \frac{25}{6} \right]$$

$$V_{eff} = \frac{1}{2}m^2\varphi^2 + \frac{\lambda'}{4!}\varphi^4 + \frac{3q^4}{64\pi^2}\varphi^4 \ln \frac{M'^2}{M^2} + \frac{3q^4}{64\pi^2}\varphi^4 \left[\ln \left(\frac{\varphi^2}{M'^2} \right) - \frac{25}{6} \right]$$

o que é equivalente a equação original com uma reparametrização

$$\frac{\lambda'}{4!} = \frac{\lambda}{4!} + \frac{3q^4}{64\pi^2} \ln \frac{M'^2}{M^2}. \quad (4.89)$$

Neste sentido o potencial efetivo é sempre dado pela mesma equação mas com a correspondente parametrização dos acoplamentos. Logo, uma mudança em M corresponde a uma mudança no acoplamento λ que mantenha a forma da equação para o potencial efetivo igual. Este argumento é formalmente estabelecido pela construção do Grupo de Renormalização para este problema. O tratamento completo pode ser encontrado em [18] e não será repetido aqui. Como resultado, a transição de primeira ordem fraca sempre ocorre para quaisquer valores pequenos dos acoplamentos se escolhermos o correto parâmetro de renormalização. A única restrição vem de fato da teoria de perturbação que exige valores pequenos para essas constantes.

4.8.3 Acoplamento entre parâmetros de ordem e a dimensão efetiva

Estudando o acoplamento do parâmetro de ordem da transição com flutuações de uma fase concorrente chegamos a resultados semelhantes aos apresentados na seção anterior para a mudança na natureza da transição quântica. Portanto está claro, pelos resultados deste capítulo, que esse acoplamento fornece um novo mecanismo para indução de transições de primeira ordem fracas, distinto do comentado na seção anterior e estudado com detalhe em [38]. Resumimos aqui os resultados do capítulo apresentando conclusões gerais [37] e, a partir dessas conclusões, mostramos que podemos chegar diretamente na forma do potencial efetivo para outra situação de interesse em que a dinâmica das flutuações supercondutoras está associada com $z = 2$ [20].

Vamos revisar primeiro a interface entre a fase normal dos férmions pesados e uma fase supercondutora acoplada com as flutuações de paramagnons. O potencial efetivo é dado, após

uma expansão para massas pequenas, por

$$V_{ef}(\phi_c) \approx \frac{1}{2}M^2\phi_{1c}^2 + am_p^2\phi_{1c}^2|\phi_{1c}| + \frac{\tilde{\lambda}}{4!}\phi_{1c}^4 + \mathcal{O}(\phi^5). \quad (4.90)$$

Na Eq. (4.90), $\tilde{\lambda}$ é uma constante renormalizada mas da mesma ordem que a original λ . A nova constante a introduzida pelas flutuações produz quebra de simetria na fase normal e transforma a transição em $T = 0$ em uma transição de primeira ordem com um pequeno “calor latente” [52]. Podemos fazer como no Apêndice B e mostrar que a condição para mínimos fora da origem é equivalente a $\lambda_L \ll \xi$ onde definimos

$$\xi = \sqrt{1/2|m^2|} \quad (4.91)$$

$$\lambda_L = \sqrt{1/u|\langle\phi\rangle^2|}. \quad (4.92)$$

Mas o que realmente pretendemos apontar aqui é que o termo cúbico, responsável pela grande mudança no potencial em relação ao potencial clássico, é proporcional a m_p . Isto é, as flutuações magnéticas que mais influem na transição estão próximas da criticalidade mas são massivas, caso diferente do apresentado na seção anterior. O termo sem massa é de quinta ordem, ordem maior que a considerada no potencial clássico original, e em geral é desprezado não contribuindo para mudanças na transição supercondutora⁴. Portanto, se as flutuações magnéticas fossem críticas os efeitos na transição quântica poderiam ser desprezados! Este resultado é equivalente ao resultado para o ponto bicrítico quântico (seção 4.7) onde argumentamos que o tratamento clássico se aplica.

A transição magnética é mais interessante. Vamos considerar primeiro o caso em que as flutuações supercondutoras têm o expoente associado $z = 1$ (caso invariante de Lorentz). Perto da transição obtemos o potencial efetivo

$$V_{ef}(\phi_{3c}) \approx \frac{1}{2}M_p^2\phi_{3c}^2 + \frac{\tilde{g}}{4!}\phi_{3c}^4 + \tilde{u}^2\phi_{3c}^4 \ln\left(\frac{\phi_{3c}^2}{\langle\phi_3\rangle^2}\right) + \tilde{u}m^2\phi_{3c}^2 \ln\left(\frac{\phi_{3c}^2}{\langle\phi_3\rangle^2}\right). \quad (4.93)$$

Note agora que se as flutuações supercondutoras fossem críticas ($m^2 = 0$) o resultado obtido seria equivalente ao do Capítulo 3 (potencial de Coleman-Weinberg, veja Apêndice B) onde o acoplamento é com o campo magnético, com algumas mudanças nas constantes. O aparecimento de fases de pequeno momento magnético e outros interessantes resultados estão logo diretamente ligados ao fato de considerarmos flutuações próximas da criticalidade mas não críticas! Outro ponto observado é que, apesar das flutuações consideradas no Capítulo 3 serem a princípio de origem totalmente diferente, as flutuações supercondutoras críticas levam ao mesmo resultado. Entendemos isso se lembramos que a dinâmica das flutuações é a mesma, e em especial, afirmamos que a forma do potencial efetivo está intimamente ligada a dimensão efetiva $d_{eff} = d + z_{din}$ onde z_{din} vem da dinâmica da flutuação considerada. Neste

⁴Lembre que na transição supercondutora $m^2 \rightarrow 0$ mas m_p^2 é positivo.

caso $d_{eff} = d + z_{din} = 3 + 1 = 4$ e o aparecimento de termos com logaritmo pode ser previsto se lembramos que este é o valor da dimensão crítica superior [13]. Consideramos esta afirmação completamente geral e esperamos que qualquer flutuação com a mesma dinâmica produza os *mesmos efeitos qualitativos* descritos neste trabalho para os casos especiais discutidos.

Agora, vamos a partir destas conclusões, discutir outro caso de interesse: o caso em que as flutuações supercondutoras estão associadas com um expoente dinâmico $z = 2$ [20, 21] e se acoplam à transição magnética. Esta situação leva em conta os casos em que temos interações de quebra de pares supercondutores produzidas por impurezas magnéticas [58, 59]. O interessante é que a dinâmica é similar a dos paramagnons da Eq. (4.2) e por isso, para a mesma dimensão efetiva $d_{eff} = d + z_{din} = 5$, obtemos um resultado para o potencial *com a mesma forma* da discutida na seção 4.6.1. Isto é, a flutuação supercondutora agora tem um propagador do tipo

$$G_0(\omega, \mathbf{q}) = \frac{1}{|\omega|\tau' + q^2 + m^2} \quad (4.94)$$

onde m^2 ainda está relacionada com a distância clássica para o ponto crítico quântico e temos um tempo de relaxação τ' . Em geral também temos um termo não dissipativo tipo $z = 1$ (como no caso discutido anteriormente) mas, no limite de baixas frequências, termos desse tipo são desprezados em função do termo com frequência linear considerado. O cálculo do potencial efetivo fornece o resultado esperado para $d_{eff} = 5$ dado por⁵

$$V_{eff} = \frac{1}{2}M_p^2\phi_3^2 + \frac{1}{4!}\tilde{g}\phi_3^4 + \frac{1}{15\pi^2}(2u\phi_3^2 + m^2)^{5/2} \quad (4.95)$$

onde a massa renormalizada é

$$M_p = m_p^2 - \frac{2}{3\pi^2}m^3u - \frac{1}{12\pi^2}m_p^3g \quad (4.96)$$

e o acoplamento renormalizado tem a forma

$$\tilde{g} = g - \frac{12}{\pi^2}mu^2 - \frac{3}{8\pi^2}m_p g^2. \quad (4.97)$$

Não precisamos nem estudar em detalhe o resultado pois os efeitos qualitativos são os mesmos discutidos na seção 4.6.1. Repare que para $z = 2$ e $d = 3$ não encontramos fases de SMAF na proximidade do magnetismo e afirmamos que esse efeito acontece apenas quando o acoplamento é com flutuações tal que $d_{eff} = 4$. Por esta mesma conclusão, as flutuações associadas com $z = 2$ podem ser responsáveis pelo aparecimento de fases SMAF em $d = 2$, pelo menos para $T = 0$, desde que este também é um caso de $d_{eff} = 4$.

⁵A forma é equivalente a da Eq. (C.29) e poderíamos tê-la obtido sem fazer nenhum cálculo desde que a dimensão efetiva é a mesma. Entretanto, para encontrar os corretos valores das constantes, calculamos o potencial da mesma maneira que nos casos anteriores.

Este capítulo encerra a primeira parte deste trabalho onde estudamos a competição entre fases a baixas temperaturas nos sistemas de férmions pesados utilizando o método do potencial efetivo. Nos capítulos seguintes atacamos outro problema de interesse, as transições volumétricas que ocorrem em alguns desses materiais. Tentamos então explicar porque essas transições bruscas ocorrem e sua analogia com transições líquido-sólido no ^3He o que abre possibilidades para aplicação prática destes materiais.

Capítulo 5

Transições volumétricas em sistemas de férmions pesados

5.1 Introdução

Neste capítulo estudamos as transições de primeira ordem com brusca variação do volume que ocorrem em redes de Kondo [60]. Em geral, em redes não magnéticas há um crossover suave ao longo de uma linha de coerência determinada pelo ponto crítico quântico e que separa uma região de líquido de Fermi de uma região de momentos locais. Investigamos aqui as condições que levam esta linha de *crossover* se transformar em uma transição abrupta onde as fases líquido de Fermi e de momentos locais coexistem. O sistema YbInCu₄ é um dos materiais onde encontramos esta transição. Damos ênfase a este sistema aqui pois ele apresenta similaridades com o sistema de ³He incluindo a existência de um efeito Pomeranchuk de estado sólido [61], discutido com detalhes no Capítulo 6, assim como a possível aplicação análoga para construção de refrigeradores [62].

5.2 A linha de *crossover*

A linha de *crossover* é a linha no diagrama de fases que marca a temperatura abaixo da qual os sistemas de férmions pesados apresentam comportamento líquido de Fermi. A proposta inicial foi que a linha devia ser associada à temperatura de Kondo

$$k_B T_K = W \exp[-1/(J/W)] \quad (5.1)$$

encontrada no problema de impurezas no sistema. Entretanto, essa definição não consegue incorporar os aspectos do problema envolvendo a competição entre as interações Kondo e RKKY. Agora, lembre que essa competição é a grande responsável pelo aparecimento de

um ponto crítico quântico (PCQ) nestes sistemas separando uma fase desordenada de uma magnética. Foi então que, com a intenção de incorporar corretamente a competição entre as interações relevantes, Continentino, Japiassu e Troper [9] propuseram que na vizinhança de um PCQ esta linha deve ser identificada com a linha que separa as duas escalas de energia do problema na fase desordenada,

$$T^* = T_{coh} = |\delta|^{\nu z}, \quad (5.2)$$

onde ν e z são expoentes associados ao PCQ. Esta identificação, que exhibe corretamente as escalas de energia na fase desordenada, permite também o estudo pela teoria de escala de grandezas termodinâmicas, a determinação de seu comportamento não líquido de Fermi e da região do diagrama de fases onde ele ocorre. Tudo isso é possível fazendo-se apenas a análise da transição em temperatura nula! O tratamento completo de férmions pesados por esta surpreendente idéia pode ser encontrado no Capítulo 6 de [2]. É claro que muitas vezes a situação se complica e o comportamento não líquido de Fermi deve ser explicado de outras maneiras [4, 63, 64]. Uma destas complicações ocorre quando a mudança de comportamento através da linha de crossover, supostamente suave, se transforma em uma transição abrupta. Este é o caso que estudamos nas seções seguintes.

5.3 Transições volumétricas

As transições isoestruturais $\gamma \rightarrow \alpha$ com variação de volume que ocorrem no cério (Ce) metálico representam um problema clássico dentro do estudo de materiais com elétrons de valência f [65, 66, 67]. A descoberta de que o YbInCu_4 e suas ligas apresentam transições similares [68, 69] renovou o interesse nesta área pois estende as possibilidades com a obtenção de resultados experimentais deste fenômeno em regiões mais acessíveis de pressão (P), temperatura (T) e campo magnético (H). Embora haja efeitos de carga envolvidos nestas transições, mudanças de valência não são tão importantes quanto se pensou inicialmente [66, 67, 70]. Os esforços experimentais agora têm se concentrado nos graus de liberdade de spin [66, 67, 70] com ênfase no efeito Kondo. O problema é que as técnicas utilizadas se baseiam no problema local, atribuído ao efeito Kondo [66] ou à entropia de momentos locais [70], e não há dúvida que a instabilidade é um efeito coletivo.

Atacamos o problema por outro ponto de vista. Sabemos que é essencial considerar interações entre os íons- f na rede, que em competição com o efeito Kondo, dão origem ao PCQ. Por isso o estudo do problema através de técnicas de fenômenos críticos perto deste ponto deve enfatizar o caráter coletivo do problema. Para fazer isso observamos, por exemplo, a susceptibilidade magnética dependente da temperatura [61, 69] na Figura 5.1. É difícil não pensar que a transição abrupta em T_V separando o comportamento tipo momentos locais do comportamento tipo líquido de Fermi é exatamente a versão radical do crossover contínuo que ocorre na linha de coerência na maioria dos sistemas de férmions pesados. Podemos então,

tomando como base um modelo simples próximo do PCQ, analisar as condições de estabilidade do crossover em virtude da variação de volume.

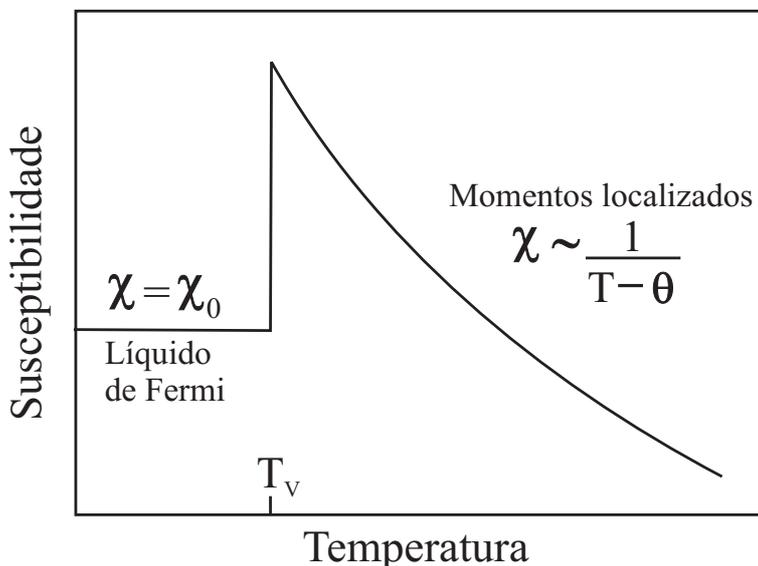


Figura 5.1: Gráfico esquematizado da forma da susceptibilidade de sistemas como o YbInCu_4 .

5.4 Modelo e análise das condições de estabilidade

Estamos interessados em materiais com condições de temperatura e pressão tais que os localizam no lado desordenado do diagrama de fase de uma rede de Kondo, mas na região próxima do PCQ. Vamos restringir o estudo à região crítica mas não muito próxima da instabilidade em $T = 0$ no lado desordenado. Esta é uma importante diferença para a aproximação usada em [67] que estuda a estabilidade volumétrica na proximidade e sobre o PCQ.

Consideramos a energia livre dependente do volume e escrita como a soma de uma parte regular (devido à energia elástica da rede) e uma parte associada às flutuações de spin próximas da criticalidade. No lugar de usar a energia livre completa associada com flutuações de spin de um sistema d -dimensional na proximidade de uma fase AF, consideramos, por simplicidade, sua expressão no *regime quântico local* [2, 71]. Matematicamente a condição para este regime é expressa como $q_c \xi < 1$ onde q_c é o corte (*cut-off*) nos momentos¹ e ξ é o comprimento de correlação. Essa hipótese torna os cálculos mais simples e a física relevante do problema mais transparente. Também reforçamos esse ponto de vista lembrando que os sistemas que

¹Essencialmente $q_c = 1/a$ onde a é a distância entre os íons f .

apresentam a instabilidade de volume, como Ce e YbInCu₄, nunca estão muito próximos do PCQ.

O YbInCu₄ a baixas temperaturas, na fase líquido de Fermi de volume maior, é um férmion pesado moderado com um calor específico linear de coeficiente [69] $\gamma = 50$ mJ/molK². O sistema está perto mas não muito perto do PCQ e a descrição em termos da criticalidade quântica local é apropriada. Enfatizamos ainda que esse regime está longe de representar uma descrição trivial do problema. Ela considera de fato estados coletivos e leva em conta a proximidade da transição quântica através da divergência do tempo de relaxação característico², $\tau_\xi = \xi^z = |\delta|^{-\nu z}$. A parte dependente do volume na energia livre é dada por

$$F_{REG}(V) = (1/2)B_N V_0 (v - 1)^2. \quad (5.3)$$

Na equação acima $v = V/V_0$, B_N é o módulo volumétrico (*bulk modulus*) do sistema e V_0 é o volume de equilíbrio na ausência de flutuações de spin [66, 67]. A parte associada às flutuações de spin no regime quântico local, ($q_c \xi < 1$), é dada por [2, 71]

$$F_{KL} = -\frac{3}{\pi} k_B T \int_0^\infty \frac{d\lambda}{e^\lambda - 1} \tan^{-1} \left(\frac{\lambda T}{T_{coh}} \right) \quad (5.4)$$

onde a temperatura de coerência foi escrita em termos do volume como

$$T_{coh} = T_c \left| \frac{V_c - V}{V_c} \right|^{\nu z} \equiv T_c |\delta_V|^{\nu z} \quad (5.5)$$

tal que $\nu z = 1$. Na equação acima V_c é o volume crítico da instabilidade magnética em que se localiza o PCQ³. A quantidade $\delta_V = (V_c - V)/V_c$ mede, neste caso, a distância para o PCQ. A energia livre total, dependente do volume,

$$F_T = F_{REG} + F_{KL} + PV, \quad (5.6)$$

pode ser minimizada para fornecer a equação de estado relacionando a pressão com o volume. Fazendo $\partial F_T / \partial V = 0$ obtemos

$$P(v) = -B_N (v - 1) + \frac{3}{2\pi} \frac{k_B T_c}{V_c} \left[\ln \left(\frac{T_{coh}}{2\pi T} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi T}{T_{coh}} \right) - \psi \left(\frac{T_{coh}}{2\pi T} \right) \right] \quad (5.7)$$

²Lembramos que δ mede a distância para o PCQ. Os expoentes ν e z são os definidos no Capítulo 1 que nesse caso têm os valores $\nu = 1/2$ e $z = 2$ [2].

³A mudança da expressão para a energia livre com o volume como parâmetro de controle para uma forma com o parâmetro de controle usual da rede de Kondo, $\delta = (J/W) - (J/W)_c$, é obtida através da dependência no volume da razão entre o acoplamento Kondo (J) e a largura de banda (W). Esta razão é dada por $(J/W) = (J/W)_0 \exp[-q(V - V_0)/V_c]$ onde V_0 é o volume a pressão ambiente [67]. Para pequenas variações encontramos $(J/W) - (J/W)_c \propto (V - V_c)/V_c$ onde V_c é o volume crítico no PCQ.

onde T_{coh} é dependente do volume de acordo com a Eq. (5.5) e $\psi(x)$ é a função digamma. Esta equação pode ser convenientemente normalizada pela *pressão da rede de Kondo* $P_{KL} = k_B T_c / V_c$ e escrita como

$$p(v) = -\frac{B_N}{P_{KL}}(v-1) + \frac{3}{2\pi} \left[\ln \left(\frac{T_{coh}}{2\pi T} \right) - \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi T}{T_{coh}} \right) - \psi \left(\frac{T_{coh}}{2\pi T} \right) \right] \quad (5.8)$$

onde $p(v) = P(v)/P_{KL}$. O parâmetro δ_V deve ser suficientemente grande tal que a condição para que o sistema esteja no regime quântico local $q_c \xi < 1$, com

$$\xi \propto \delta_V^{-\nu} \propto 1/\sqrt{\delta_V},$$

seja satisfeita. Note que o volume normalizado assume valores $v \leq 1$. Logo, a estabilidade de um dado ponto no diagrama de fases em relação a uma variação volumétrica é obtida pela derivada

$$p'(v) = \frac{\partial p}{\partial v} = -\frac{B_N}{P_{KL}} - \frac{3}{2\pi} \frac{1}{v_c - v} \left[1 + \frac{1}{2} \left(\frac{2\pi T}{T_{coh}} \right) - \frac{T_{coh}}{2\pi T} \psi' \left(\frac{T_{coh}}{2\pi T} \right) \right] \quad (5.9)$$

onde $v_c = V_c/V_0$ e T_{coh} é a temperatura de coerência no ponto V em que estamos “testando” a estabilidade do sistema. A função $\psi'(z)$ é a derivada da função digamma. Vamos considerar o sistema em equilíbrio a pressão ambiente na ausência de flutuações de spin (fazendo $V = V_0$ ou $v = 1$) para observar como a inclusão de flutuações pode levar à instabilidade. Neste caso $v_c - v$ na Eq. (5.9) pode ser reescrito como

$$v_c - v = \frac{\delta_{V_0}}{1 - \delta_{V_0}} \quad (5.10)$$

e investigamos o sistema variando a temperatura. Encontramos a instabilidade em uma temperatura T_S tal que a condição abaixo é satisfeita

$$\frac{2\pi\alpha}{3} \frac{\delta_{V_0}}{1 - \delta_{V_0}} = z\psi'(z) - \frac{1}{2z} - 1. \quad (5.11)$$

Na equação acima $\alpha = B_N/(k_B T_c / V_c)$ é a razão entre o módulo de volume e a pressão da rede de Kondo, $z = \delta_{V_0}/(2\pi t)$ e $t = T_S/T_c$. A instabilidade corresponde a temperatura T_S acima da qual a compressibilidade $\kappa = -(\partial P/\partial V)$ se torna negativa (veja Figura 5.2). A linha de instabilidade $T_S(\delta_{V_0}, \alpha)$ pode ser determinada numericamente como função da distância δ_{V_0} do PCQ. Na Figura 5.3 mostramos esta linha no diagrama de fases para três valores distintos de α . Para $T > T_S(\delta_{V_0}, \alpha)$ o sistema é instável. Valores típicos de α se encontram no intervalo 10 – 100 [66, 67] e para uma dada distância para o PCQ, a medida que α aumenta, T_S também aumenta.

Note que a linha $T_S(\delta_{V_0})$ não é exatamente a linha onde ocorre a transição de primeira ordem $T_V(\delta_{V_0})$. Esta é uma linha espinodal a partir da qual o sistema, em geral no regime de momentos locais, se torna instável e o volume tende a sofrer um colapso.

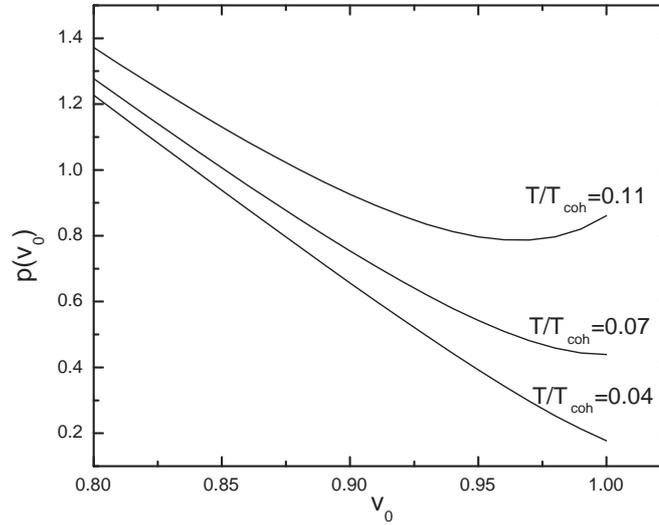


Figura 5.2: Pressão P como função do volume v_0 para uma distância fixa do PCQ, $\delta_V = 0.1$, e diversos valores de temperatura. Para $T/T_{coh} = 0.04$ o sistema está abaixo da linha espinodal apresentada na Figura 5.3 e é estável. Veja que a derivada da curva é sempre negativa conduzindo a valores positivos da compressibilidade. Para $T/T_{coh} \approx 0.07$ o sistema está sobre a espinodal e $v_0 = 1$ é o limite de estabilidade (neste ponto a derivada é zero). Para $T/T_{coh} = 0.11$ estamos acima da espinodal e o sinal da derivada da figura indica que o volume deve sofrer uma mudança brusca para um valor menor e estável (compressibilidade positiva), como indicado pela seta na Figura 5.3.

Para o valor $\alpha = 6$, correspondendo a linha T_{S_1} na Figura 5.3, este colapso acontece na região de momentos locais de maneira que leva o sistema ao regime de líquido de Fermi. Essa situação representa bem os casos dos sistemas de YbInCu_4 e Ce metálico⁴. O caso mais comum nos férmions pesados corresponde no entanto a valores de α muito grandes de maneira que a instabilidade está restrita a uma região em grande parte afastada da linha de crossover. Este caso é representado na Figura 5.3 pelas linhas T_{S_2} e T_{S_3} correspondentes a $\alpha = 20$ e 60 , respectivamente. A instabilidade aparece então em valores altos de temperatura nos quais a aproximação apresentada não deve ser eficiente. Notamos que apenas para redes suficientemente “moles” em relação a pressão da rede Kondo as instabilidades de volume devem ocorrer em regiões interessantes do diagrama de fases, como do caso da linha T_{S_1} , descrita

⁴Na verdade a situação estudada equivale ao que ocorre nos compostos de Ce . Nos compostos de Yb uma diferença fundamental é que a pressão atua no diagrama da rede de Kondo em sentido oposto.

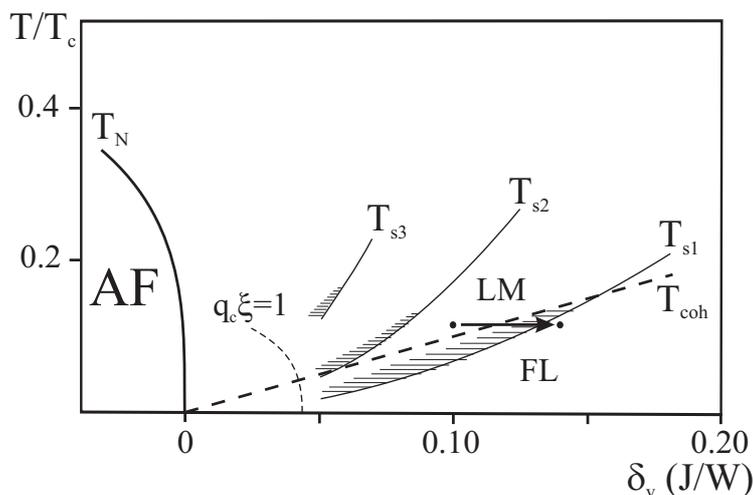


Figura 5.3: Diagrama de fases da rede de Kondo. O regime quântico local é válido à direita da linha $q_c \xi = 1$. A linha T_{coh} marca o crossover do comportamento tipo momentos locais (LM) para o comportamento tipo líquido de Fermi (FL). Acima das linhas espínodais $T_S(\alpha)$ o sistema é instável. A seta indica o colapso de volume do sistema localizado acima de T_{S1} . As linhas $T_S(\alpha)$ correspondem a $\alpha = 6, 20$ e 60 de baixo para cima.

corretamente pela nossa teoria.

Outra importante conclusão é que um simples parâmetro (α) é suficiente para caracterizar a estabilidade dos sistemas de férmions pesados na proximidade da linha de crossover. Encontramos que para um intervalo bem restrito dos valores desse parâmetro, em concordância com o observado nos sistemas puros de Ce e no YbInCu_4 , uma instabilidade volumétrica deve ocorrer e a mudança entre o regime de momentos locais e o de líquido de Fermi é acompanhada por uma mudança abrupta no volume. Se os valores de α se afastarem deste intervalo a instabilidade se move para regiões do diagrama de fases onde o modelo apresentado é ineficiente. Entretanto, desde que essas regiões estão afastadas da linha de crossover, não esperamos instabilidades volumétricas e a mudança de regimes deve ser suave. Esse resultado sugere que o fenômeno está associado a um ajuste fino entre a energia elástica e a energia da rede de Kondo.

No capítulo seguinte vamos estudar o caso especial do sistema de YbInCu_4 pois as suas propriedades próximas da transição volumétrica indicam a ocorrência de um efeito interessante que possibilita a aplicação prática destes materiais para construção de refrigeradores de baixa temperatura. Observamos isso porque na transição de primeira ordem que ocorre no lugar do crossover a coexistência entre as fases líquido de Fermi e momentos locais na linha de transição sugere analogia com a transição líquido-sólido em outro sistema fortemente correlacionado, o ^3He . Logo, como é possível usar o sistema de ^3He para produzir refrigeração, deve ser possível construir refrigeradores baseados em outros materiais que apresentem o mesmo efeito.

Capítulo 6

Efeito Pomeranchuk e o refrigerador de estado sólido

6.1 O efeito Pomeranchuk em sistemas de ^3He

Em 1950, o físico russo I. Pomeranchuk sugeriu que o ^3He podia ser resfriado sob o efeito de pressão [72]. Apesar da sugestão ter sido totalmente teórica, pois na época era difícil encontrar ^3He e não se conseguia nem ao menos liquefazê-lo, mais tarde o efeito se tornou importante para o resfriamento e obtenção das fases superfluidas de baixas temperatura deste sistema. Além disso, o efeito é simples e possibilita aplicação prática da equação de Clausius-Clapeyron.

O que Pomeranchuk observou foi que a termodinâmica do ^3He em baixas temperaturas era dominada por propriedades de spin em vez de fônons. Desta forma o líquido de ^3He obedeceria uma estatística de Fermi com uma entropia linear assim como elétrons livres em metais comuns. Por outro lado, no sólido a entropia seria dada pela coleção de spins nucleares fixos e fracamente interagentes. Por isso, em uma temperatura superior a temperatura em que estes spins se ordenam ($\approx 1\mu\text{K}$) e inferior a temperatura em que os fônons se tornam importantes (da ordem de 10K) a entropia do sólido deve saturar em $S = R \ln 2$ e ser independente da temperatura. Neste caso, como mostra a Figura 6.1, encontramos uma extensa região onde a entropia do sólido é maior que a do líquido. A equação de Clausius-Clapeyron permite o cálculo da linha de fusão do ^3He e mostra outra interessante característica que ocorre nesse sistema. Escrevemos

$$\left(\frac{dP}{dT}\right)_{s-l} = \frac{S_l - S_s}{V_l - V_s}, \quad (6.1)$$

onde os índices s e l denotam as fases sólida e líquida respectivamente e s-l a linha de fusão do hélio. Portanto, como o volume da fase líquida é maior que da sólida ($V_l > V_s$), na região em que a entropia do sólido é maior que a do líquido ($S_s > S_l$) a derivada (dP/dT) sobre a linha de fusão é negativa. Essa característica incomum realmente ocorre como mostramos

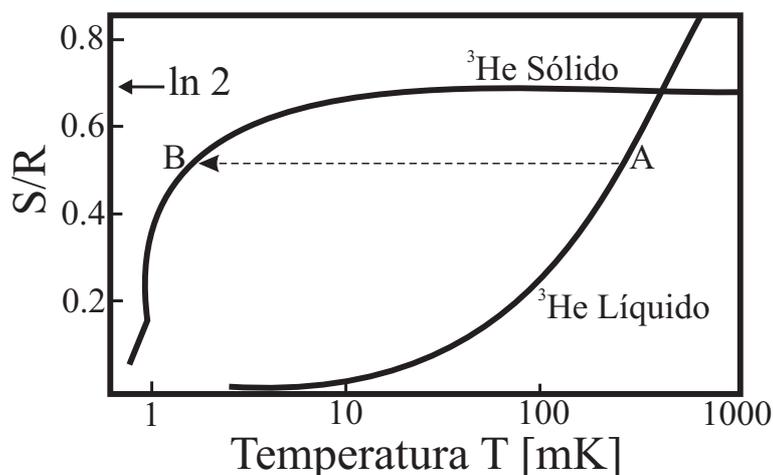


Figura 6.1: Entropia das fases sólida e líquida do sistema de ${}^3\text{He}$ a baixas temperaturas. A transformação adiabática AB demonstrada pela linha pontilhada na figura reduz a temperatura do sistema.

na Figura 6.2. A derivada obtida da Eq. (6.1), calculada na curva de fusão onde o sólido e o líquido coexistem, revela uma pressão em função da temperatura que passa por um mínimo em T_x , onde $S_s = S_l$ e apresenta (dP/dT) negativa para $T < T_x$, consistente com $S_s > S_l$ neste intervalo. O mais interessante é que, na região de derivadas negativas (região onde $S_s > S_l$) o sistema pode ser resfriado através de uma transformação adiabática que leve o líquido no sólido aplicando-se pressão (veja linha pontilhada da Figura 6.1). Apesar da enorme dúvida sobre a eficiência de um refrigerador que funcionasse por esta técnica diversas células de refrigeração se mostraram eficientes e contribuíram para descoberta das fases superfluidas do ${}^3\text{He}$ a baixas temperaturas [73, 74]. Hoje entretanto, a técnica não representa mais utilidade especial para obtenção de baixas temperaturas usando o ${}^3\text{He}$ e apontamos neste capítulo que outros sistemas podem apresentar o mesmo efeito renovando o interesse nesta área [61].

6.2 Efeito Pomeranchuk no YbInCu_4

Como discutimos na seção anterior, ao longo da linha de fusão do hélio, $T_f(P)$, encontramos coexistência entre um líquido de Fermi fortemente correlacionado e um comportamento de momentos localizados, dados pelas fases líquida e sólida respectivamente. A propriedade especial deste sistema é que, ao contrário do convencional, para $T < T_x \approx 0.32$ K, a entropia da fase líquida sobre a linha de primeira ordem é menor que a do sólido [72, 73, 74]. Isso pode ser visto diretamente da equação de Clausius-Clapeyron como demonstramos acima. Agora observamos as propriedades do sistema YbInCu_4 apresentadas na Tabela 6.1. A equação

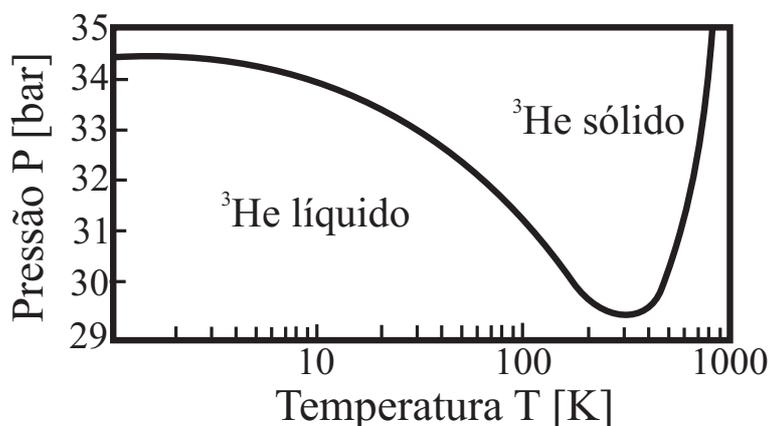


Figura 6.2: Pressão em função da temperatura sobre a linha de fusão do ^3He . Podemos observar que a derivada é negativa em uma extensa região de temperaturas.

de Clausius-Clapeyron, quando aplicada a linha de instabilidade volumétrica desse sistema é escrita como

$$\left(\frac{dP}{dT}\right)_V = \frac{S_{FL} - S_{LM}}{V_{FL} - V_{LM}} \quad (6.2)$$

onde os índices (FL) e (LM) se referem agora ao líquido de Fermi e a fase de momentos locais respectivamente. Além disso, através dos dados experimentais da referência [69], podemos ob-

Pressão ambiente	YbInCu ₄
Campo crítico em $T = 0\text{K}$ (H_{c0})	32.6T
Temperatura crítica a campo nulo (T_{V0})	42K
Temperatura de Curie-Weiss (θ_c)	-7.2K
Campo molecular H_{mol}	6.3T
Coefficiente γ do líquido de Fermi	50mJ/mol K ²
Mudança relativa de volume ($\Delta V/V$)	0.005
Susceptibilidade do líquido de Fermi (χ_0)	0.7×10^{-3} emu/FU

Tabela 6.1: Parâmetros termodinâmicos para o YbInCu₄ retirados da referência [69].

ter a Figura 6.3, que mostra a pressão sobre a curva de primeira ordem. A derivada da pressão em relação a temperatura ao longo da linha de instabilidade para $P > 1\text{bar}$ e $V_{FL} > V_{LM}$ é negativa ($dP/dT < 0$). Por isso, da equação de Clausius-Clapeyron, da determinação experimental do sinal de dP/dT em T_V , e do fato que o volume molar da fase líquido de Fermi do YbInCu₄ (V_{FL}) é maior que o volume da fase de momentos locais V_{LM} , concluímos que a entropia da fase líquido de Fermi (S_{FL}) na linha de coexistência é menor do que da fase

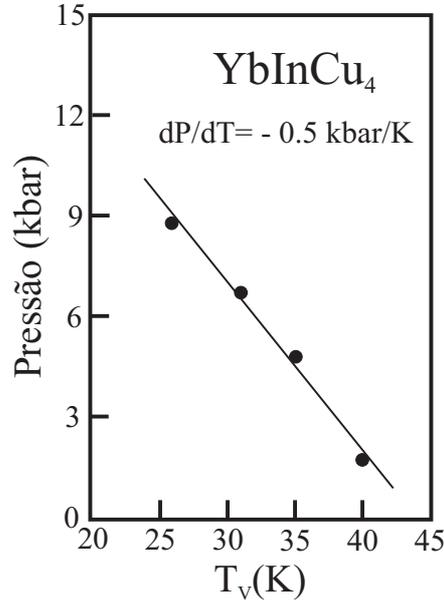


Figura 6.3: Pressão em função da temperatura sobre a linha de coexistência da transição volumétrica do YbInCu_4 . Os dados foram obtidos das medidas de resistividade na Ref. [69]

de momentos locais, exatamente como ocorre no ^3He para $T < T_\times$. Como realçamos antes, essas são as características responsáveis pelo efeito Pomeranchuk no sistema de hélio e portanto o mesmo efeito ocorre na rede Kondo do sistema de YbInCu_4 . Note ainda que, desde que as duas fases são sólidas e a mudança no volume é pequena (veja Tabela 6.2), a diferença ($S_{FL} - S_{LM}$) é em sua maioria devida aos graus de liberdade magnéticos. A Tabela 6.2 lista alguns parâmetros termodinâmicos do YbInCu_4 e do ^3He para comparação. Observe que no YbInCu_4 os valores T_\times e P_\times foram obtidos de uma extrapolação da entropia do líquido de Fermi [69], dada em baixas temperaturas por

$$S_{FL}/Nk_B = 6.0 \times 10^{-3}T, \quad (6.3)$$

até que seu valor encontre o valor da entropia de momentos locais $S_{LM}/Nk_B = \ln(2J + 1) = \ln 8$ [70].

No caso do ^3He o efeito Pomeranchuk serviu como base para construção de aparelhos para obtenção de baixas temperaturas o que culminou com o descobrimento das fases superfluidas deste material. Os resultados mostram então a possibilidade teórica de construção de aparelhos similares baseados na rede Kondo do sistema YbInCu_4 . Podemos estimar a eficiência de refrigeração desta máquina hipotética pela razão (W/Q), onde $W = P_V(V_{FL} - V_{LM})$ é o trabalho de compressão necessário para pressionar o líquido de Fermi até uma fase de momentos locais. A quantidade $Q = T(S_{LM} - S_{FL})$ é o calor latente que representa a quantidade máxima de calor que pode ser removida na transformação. A razão $W/Q = -(P_V/T)(dP_V/dT)^{-1}$

	${}^3\text{He}$	YbInCu_4
Fase de volume maior (V_L)	Líquido	Líquido de Fermi
Fase de volume menor (V_S)	Sólido	Momentos locais
$(V_L - V_S)/V_L$	0.05	0.005
(dP/dT) (kbar/K)	- 0.016	- 0.5
(W/Q)	> 13	0.08 ($T = 40\text{K}$)
(T_\times, P_\times) (K, kbar)	(0.32, 0.029)	(346, -151)

Tabela 6.2: Parâmetros termodinâmicos do ${}^3\text{He}$, Ref. [74] e YbInCu_4 , Ref. [69]. (T_\times, P_\times) para o YbInCu_4 foram obtidos extrapolando a entropia do líquido de Fermi até que a curva encontre o valor da entropia dos momentos locais não interagentes.

apresenta seu menor valor para o ${}^3\text{He}$, $(W/Q) = 13$, em $T = 0.14\text{K}$ [74]. Para o YbInCu_4 a razão pode ser muito menor, por exemplo, $(W/Q) = 0.08$ em $T = 40\text{K}$ usando o valor de (dP_V/dT) obtido diretamente da Figura 6.3 (veja Tabela 6.2).

Ainda há mais uma propriedade interessante que pode ser abordada neste sistema. A transição volumétrica nos compostos de Ce e YbInCu_4 é fortemente afetada pela presença de um campo magnético externo H [69, 70] (Veja Figura 6.4). Isto é, a temperatura de transição é uma função também do campo magnético $T_V = T_V(P, H)$, e por isso é interessante investigar como podemos refrigerar o sistema por meio do campo externo aplicado.

6.3 Efeito do campo magnético

O efeito do campo na transição pode ser observado expressando a linha de coexistência de fases em variáveis reduzidas $(H/H_{c0}, T/T_{V0})$. Podemos mostrar que sua forma está próxima de uma circunferência perfeita [69, 70, 75]

$$\left(\frac{T_V}{T_{V0}}\right)^2 + \left(\frac{H_c}{H_{c0}}\right)^2 \approx 1, \quad (6.4)$$

onde T_{V0} é a temperatura de transição a campo nulo e H_{c0} é o campo crítico tal que $T_V(H = H_{c0}) = 0$ (Veja o resultado para o Ce na Figura 6.4).

Essa aproximação pode ser derivada como se segue [62]. Começamos considerando um ciclo de Carnot infinitesimal como o da Figura 6.5 em que duas isotermas vizinhas associadas a campos H_V diferentes passam pela região de coexistência. A variação de A para B corresponde a transformação a campo constante de uma porção unitária do sistema da fase de líquido de Fermi para a fase de momentos locais a um custo de energia dado pelo calor latente L . A área do ciclo representa o trabalho realizado e é dada por δA . O calor absorvido em T é Q e o

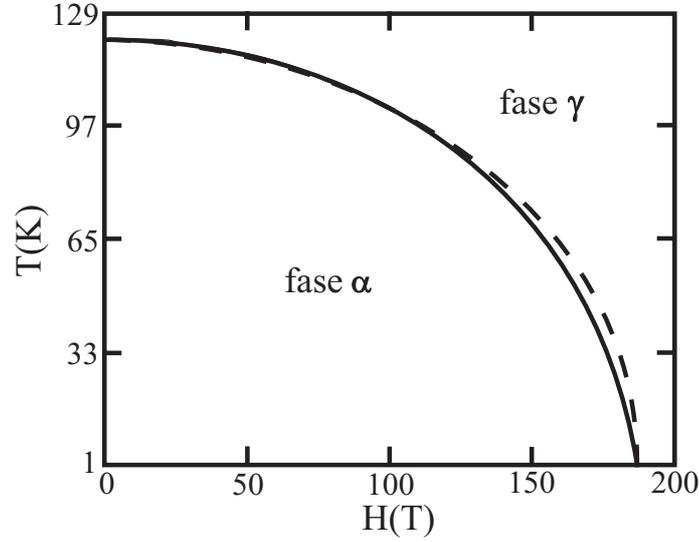


Figura 6.4: Linha de primeira ordem da transição volumétrica do Ce metálico no plano (H, T) (linha cheia). A linha pontilhada corresponde a aproximação circular discutida no texto. Figura obtida de [70].

rejeitado em $T - \delta T$ é $Q - \delta A$. Para o ciclo de Carnot lembramos a relação geral

$$\frac{\delta A}{Q} = \frac{\delta T}{T} \quad (6.5)$$

e a área δA é calculada pelo comprimento $AB = M_{LM} - M_{FL}$ multiplicado pela altura $-(dH/dT)\delta T$ onde as diferenças entre as inclinações das curvas AD e BC foram desprezadas no limite $\delta T \rightarrow 0$. Obtemos então

$$\frac{1}{L}(M_{LM} - M_{FL}) \left(-\frac{dH}{dT} \right) \delta T = \frac{\delta T}{T} \quad (6.6)$$

com o calor latente $L = T(S_{LM} - S_{FL})$. Assim mostramos que há para o sistema uma equação de Clausius-Clapeyron magnética

$$\left(\frac{dT}{dH} \right)_{H_c} = \frac{-(M_{LM} - M_{FL})_{H_c}}{(S_{LM} - S_{FL})_{H_c}}. \quad (6.7)$$

Na linha de coexistência a magnetização da fase de momentos locais é muito maior que a da fase líquido de Fermi ($M_{LM} \gg M_{FL}$) e assumindo o mesmo para as entropias ($S_{LM} \gg S_{FL}$), temos

$$\left(\frac{dT}{dH} \right)_{H_c} = \frac{-M_{LM}}{S_{LM}} \quad (6.8)$$

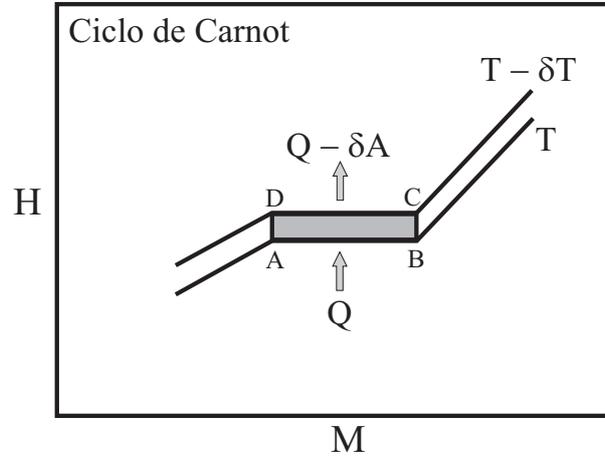


Figura 6.5: Ciclo de Carnot com duas isotermas longas AB e CD and duas adiabáticas curtas AD e BC para derivação da equação de Clausius-Clapeyron em função do campo crítico na transição de primeira ordem.

mas $M_{LM} = \chi H = (C/T)H$, onde C é a constante de Curie. Substituindo na equação acima encontramos

$$\frac{dT}{dH} = -\frac{H}{T} \frac{C}{S_{LM}} \quad (6.9)$$

ou

$$TdT = -\frac{C}{S_{LM}} HdH. \quad (6.10)$$

A integração fornece

$$H_c^2 = 2\frac{S_{LM}}{C}B - \frac{S_{LM}}{C}T_V^2 \quad (6.11)$$

mas para $T = 0$

$$H_c^2(T_V = 0) = 2\frac{S_{LM}}{C}B = H_{c0}^2 \quad (6.12)$$

tal que

$$\frac{H_c^2}{H_{c0}^2} = 1 - \frac{T_V^2}{T_{V0}^2}. \quad (6.13)$$

Esta é a forma circular observada nas referências [69, 70] em que $T_{V0} = \sqrt{C/S_{LM}}H_{c0}$. Desde que $C = g_J^2 J(J+1)\mu_B^2/3k_B$ e tomando $S_{LM} = k_B \ln(2J+1)$ por partícula [70], encontramos

$$k_B T_{V0} = g_J \mu_B H_{c0} \sqrt{\frac{J(J+1)}{3 \ln(2J+1)}}. \quad (6.14)$$

Este resultado fornece a razão

$$\frac{k_B T_{V0}}{\mu_B H_{c0}} = \frac{gJ\sqrt{J(J+1)}}{\sqrt{3\ln(2J+1)}} = \frac{4.5}{\sqrt{3\ln 8}} = 1.80 \quad (6.15)$$

onde usamos $J = 7/2$. Para o YbInCu_4 , temos $T_{V0} = 42\text{K}$ (veja Tabela 6.1), e encontramos para o campo crítico em temperatura zero $H_{c0} = 34.737\text{T}$ em concordância com o resultado de escala ajustado dos dados experimentais [69].

Logo, a aproximação em que desprezamos a magnetização e entropia da fase líquido de Fermi em relação as mesmas quantidades na fase de momentos locais é excelente, pelo menos até temperaturas $T/T_V(H=0) \approx 0.1$. Nesta região, a lei circular obtida se ajusta muito bem com os dados experimentais escalados. Além disso, o valor experimental da razão da Eq. (6.15) coincide exatamente com o valor experimental medido de aproximadamente 1.8 [69, 70].

6.4 Cálculo das entropias

Na Figura 6.6 apresentamos a entropia das fases de líquido de Fermi (FL) e momentos locais (LM) sobre a linha de coexistência $T_V(H)$ [60]. A entropia da fase FL é obtida do coeficiente do termo linear do calor específico $\gamma = 50 \text{ mJ/mol K}^2$ (veja Tabela 6.1). A entropia da fase LM é obtida desprezando a interação entre os íons de Yb [70, 75]. Nesse caso o cálculo é simples [74]: A função de partição total \mathcal{Z} pode ser expressa em termos da função de cada íon z

$$\ln \mathcal{Z} = N \ln z = N \ln \left\{ \sum_{m=-J}^J \exp \left(-m \frac{g\mu_B H}{k_B T} \right) \right\}. \quad (6.16)$$

A soma é simples e fornece

$$\ln \mathcal{Z} = N \left[\ln \sinh \left(\frac{2J+1}{2J} y \right) - \ln \sinh \left(\frac{y}{2J} \right) \right] \quad (6.17)$$

com

$$y = \frac{Jg\mu_B H}{k_B T}. \quad (6.18)$$

Desta função de partição podemos extrair todas propriedades termodinâmicas. A entropia é obtida de

$$\frac{S_{LM}(H, T)}{Nk_B} = T \frac{\partial \ln z}{\partial T} + \ln z \quad (6.19)$$

tal que

$$\begin{aligned} \frac{S_{LM}(H_c, T)}{Nk_B} = & -y \left[\left(\frac{2J+1}{2J} \right) \coth \left(\frac{2J+1}{2J} y \right) - \left(\frac{1}{2J} \right) \coth \left(\frac{1}{2J} y \right) \right] \\ & + \ln \sinh \left(\frac{2J+1}{2J} y \right) - \ln \sinh \left(\frac{y}{2J} \right). \end{aligned} \quad (6.20)$$

Calculando S_{LM} no campo crítico H_c temos

$$y = \frac{Jg\mu_B H_c}{k_B T} \quad (6.21)$$

e usando o formato circular universal, Eq. (6.13), ainda podemos escrever

$$y = \frac{Jg\mu_B}{k_B T} H_{c0} \left(1 - \frac{T_V^2}{T_{V0}^2}\right)^{1/2}. \quad (6.22)$$

Na Figura 6.6 podemos observar o gráfico da entropia do YbInCu_4 na presença do campo externo H_c . Também é apresentada na figura a entropia da fase FL e assumimos que esta não muda com a aplicação de campo. O campo pode ser usado para ajustar a temperatura do sistema para temperatura de transição e induzi-la, exatamente como a pressão, produzindo resfriamento. Vamos dizer que o sistema é resfriado de 1% do valor da temperatura de instabilidade a campo nulo T_{V0} ($T/T_0 = 0.99$). Então um campo externo ($H_c = 4.6\text{T}$) pode reduzir a temperatura de instabilidade T_V para este valor e produzir nova transição com resfriamento adicional do sistema. O resfriamento pode ser obtido pela transformação AB da Figura 6.6

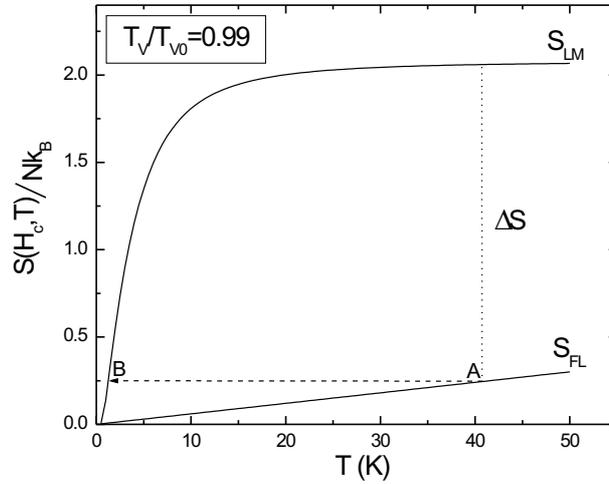


Figura 6.6: Entropia das fases de momento locais (LM) e líquido de Fermi (FL) do YbInCu_4 a pressão ambiente e campo de instabilidade H_c , tal que, $T_V(H_V)/T_V(0) = 0.99$ [62]. O processo adiabático AB reduz a temperatura do sistema. Compare com a Figura 6.1.

que leva a fase FL na fase LM. Observamos que a transformação é possível em uma larga faixa de temperaturas.

6.5 Trabalho magnético

No refrigerador de estado sólido apresentado aqui a redução da temperatura pode ser obtida tanto pela aplicação de pressão (em analogia com a Figura 6.1 para o ^3He) como de campo magnético (Figura 6.6). De qualquer maneira a variação de volume do sólido é pequena e o trabalho magnético representa a maior porção do trabalho total que deve ser realizado. Para calcular o trabalho magnético necessário para transformar a fase FL na fase LM, $W_S = H_c(M_{LM} - M_{FL})_{H_c} = H_c\Delta M$, consideramos a equação de Clausius-Clapeyron magnética, Eq. (6.7), escrita como,

$$\frac{H_c}{T} \left(\frac{dT}{dH} \right)_{H_c} = \frac{-(M_{LM} - M_{FL})_{H_c} H_c}{(S_{LM} - S_{FL})_{H_c} T} = \frac{-W_S}{Q_S} \quad (6.23)$$

onde $Q_S = T(S_{LM} - S_{FL})_{H_c} = 420\text{J/mol}$ é a capacidade de refrigeração ou calor latente associado com a transformação isotérmica completa a $T_V(H = 0)$. Consequentemente

$$\frac{W_S}{Q_S} = -\frac{H_c}{T} \left(\frac{dT}{dH} \right)_{H_c} = -\frac{d \ln T}{d \ln H}. \quad (6.24)$$

Usando a lei circular, Eq. (6.13), encontramos

$$\frac{W_S}{Q_S} = \frac{H^2}{H_{c0}^2 - H^2} = \frac{x}{1 - x} \quad (6.25)$$

com $x = (H^2/H_{c0}^2)$. Podemos substituir valores compatíveis com a medida experimental do efeito na seção seguinte, $H = 37\text{kOe}$ (terceira curva de cima para baixo na Figura 6.8), e encontramos $W_S/Q_S = 1.15 \times 10^{-2}$ e $W_S = 4.83\text{J/mol}$.

Os problemas encontrados para implementação experimental de um dispositivo de refrigeração a partir do efeito Pomeranchuk no YbInCu_4 são similares aos encontrados no sistema de ^3He e por isso esperamos que possam ser resolvidos minimizando o aquecimento produzido. A situação aqui é entretanto mais favorável desde que $W_S/Q_S = 1.15 \times 10^{-2}$, valor bem inferior ao mínimo obtido no sistema de hélio.

6.6 Tentativa experimental

Uma primeira tentativa experimental da medida do efeito para refrigeração foi feita na UNICAMP. O método experimental e os problemas encontrados na medida são apresentados na referência [76]. O processo adiabático necessário, com a devida otimização para obter resultados vantajosos, só pode ser realizado com a construção de um aparelho especial com

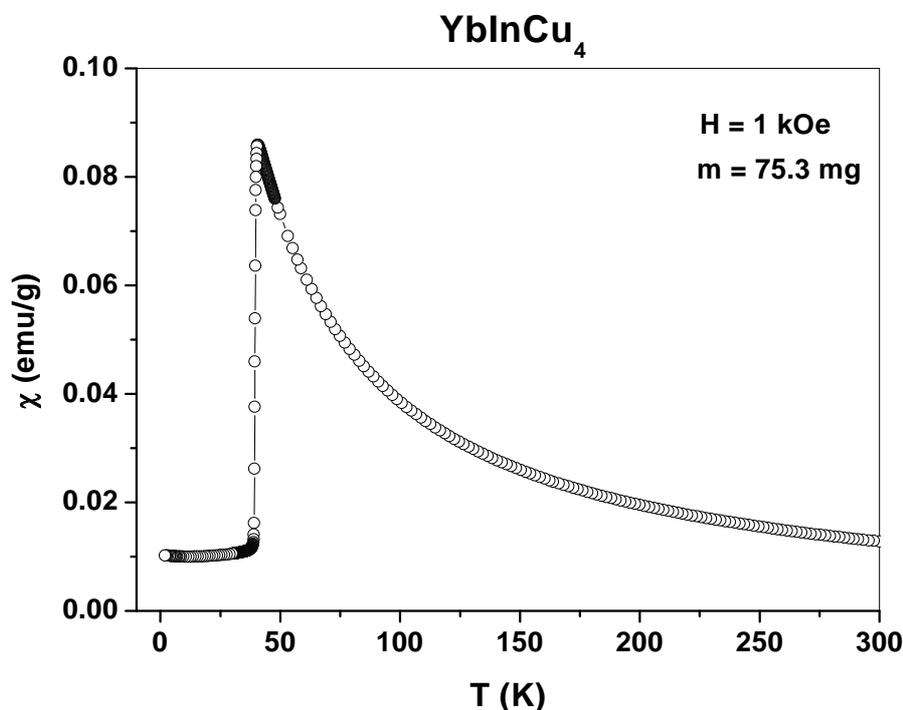


Figura 6.7: Medida da susceptibilidade magnética em uma amostra de YbInCu_4 . Compare com o esquema apresentado na Figura 5.1.

esse propósito. Na Figura 6.7 apresentamos a medida da susceptibilidade em uma amostra de YbInCu_4 que expõe claramente a transição de acordo com a Figura 5.1.

É difícil realizar com precisão o processo AB da Figura 6.6, mas a amostra foi colocada, em uma temperatura inicial menor do que T_{V0} (temperatura de transição a campo nulo), em condições para simular a transformação adiabática. O campo magnético foi então aumentado de zero a 9T. Quando o campo aplicado é suficiente para ajustar a nova temperatura de transição para a temperatura da amostra esperamos que o processo ocorra e a temperatura diminua. Na Figura 6.8 apresentamos resultados experimentais para três temperaturas abaixo de $T_V(H = 0) = 42\text{K}$. A aplicação do campo, como previsto, aquece o material, até que chegamos ao campo crítico. Neste ponto é possível observar a redução de temperatura indicando que uma determinada porção do material sofreu a transformação da fase de líquido de Fermi para momentos locais. A pequena redução de temperatura observada pode estar ligada as perdas no processo desde que o equipamento utilizado não é especialmente construído para esta finalidade. Também observamos pouca redução se apenas uma pequena porção do material mudou de fase. Sem a medida simultânea da susceptibilidade é difícil saber qual proporção do total da amostra sofreu a transformação. A medida entretanto deixa clara a existência do

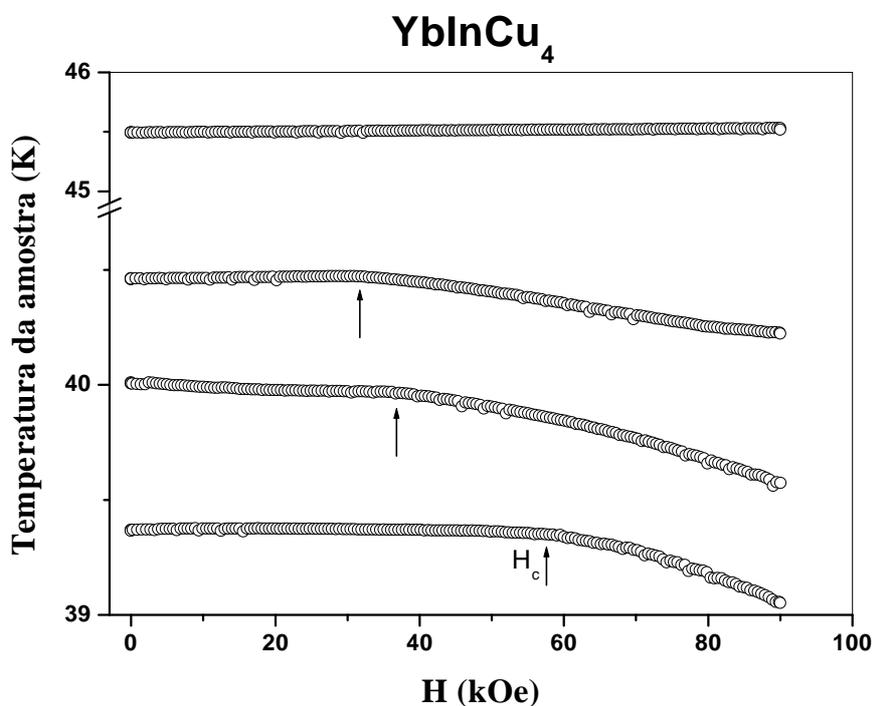


Figura 6.8: Medida da temperatura em função do campo no YbInCu_4 . A primeira curva de cima para baixo se encontra acima da temperatura de transição a campo nulo e por isso não observamos efeito nenhum. Nas três curvas abaixo observamos uma queda de temperatura assim que o campo atinge o valor crítico indicado pelas setas. Os valores de campo crítico estão de acordo com os calculados neste capítulo.

efeito e abre possibilidade para construção de aparelhos otimizados que produzam resultados vantajosos do ponto de vista prático. Enfatizamos ainda que campo e pressão podem ser usados em conjunto para induzir a transição e melhorar o rendimento observado. Do ponto de vista teórico a eficiência e a capacidade de refrigeração calculados nas seções anteriores levam a acreditar em resultados muito mais otimistas.

Ainda destacamos uma diferença fundamental deste processo de refrigeração para o conhecido processo de desmagnetização adiabática. Na desmagnetização adiabática a aplicação de campo realmente aumenta a temperatura do sistema enquanto um dispositivo corretamente preparado para a utilização do efeito Pomeranchuk apresenta o resultado contrário. Finalmente, aplicações similares do Ce metálico são discutidas em [62]. Esperamos que os resultados apresentados neste capítulo renovem o interesse na área de refrigeração de baixa temperatura utilizando o efeito Pomeranchuk.

Capítulo 7

Conclusão

7.1 Resultados

Estudamos os sistemas de férmions pesados procurando discutir alguns pontos atuais de destaque na literatura. Os efeitos mútuos entre fases magnéticas e supercondutoras foram analisados de maneira inédita através do método do potencial efetivo, as transições volumétricas que ocorrem nesses materiais foram estudadas por um modelo microscópico simples e em um caso especial, a comparação com outro sistema correlacionado conhecido, o sistema de ^3He , possibilitou sugestão direta para aplicações práticas. A seguir discutimos as conclusões gerais para cada um destes pontos.

Em relação ao caso especial de interface entre fases supercondutoras e magnéticas descobrimos que, quando há uma fase normal entre elas, mesmo partindo de uma ação clássica que descreve competição entre esses estados, a inclusão de flutuações quânticas leva a extensão da região no diagrama em podemos encontrá-las. As transições contínuas do caso clássico também são substituídas por transições de primeira ordem e resultados, como o calor latente (na verdade um trabalho em $T = 0$), podem ser extraídos do modelo [52]. Cada dia há mais evidência experimental indicando a existência de inomogeneidades intrínsecas perto da instabilidade antiferromagnética em $T = 0$ nos sistemas de férmions pesados [77, 40]. Coexistência de pequenos momentos ordenados com regiões paramagnéticas e coexistência entre supercondutividade e paramagnetismo foram observadas. Essas características aparecem naturalmente em nosso modelo como consequência da competição entre parâmetros de ordem diferentes na proximidade de uma transição descontínua e sua física associada com metaestabilidade, espinodais e coexistência de fases.

No caso de um ponto bicrítico em $T = 0$ mostramos que as flutuações quânticas têm pouca importância para a instabilidade e a transição deve ser contínua como previsto classicamente. Aproveitando que o ponto bicrítico quântico tem dimensão efetiva $d + z = 5$, maior que a dimensão crítica superior, uma simples teoria de escala fornece o comportamento das grandezas

termodinâmicas e a forma das linhas de transição em temperatura finita.

Discutimos a partir daí os mecanismos que transformam as transições contínuas em transições de primeira ordem a baixas temperaturas (medidas experimentalmente nas diversas referências de [34]) e ao aparecimento de fases de momento magnético pequeno na proximidade do antiferromagnetismo [53, 54]. As fases de momento magnético pequeno são explicadas em nosso modelo diretamente como efeito das flutuações quânticas em temperaturas baixas [44] ao contrário de modelos anteriores que apresentam diversos problemas, como a necessidade de um parâmetro de ordem “oculto” (veja [53] e as referências citadas). No entanto, mesmo no modelo apresentado aqui, onde fica clara a forma da flutuação que pode levar ao aparecimento de fases de momento pequeno, ainda poder permanecer oculta a origem destas flutuações e o problema deve ser analisado para cada material específico. Finalmente, com relação aos resultados gerais em transições de primeira ordem, percebemos que ainda não havia generalização dos métodos aproximados de escala para o caso de transições deste tipo em temperatura nula. Apresentamos então a extensão dos métodos de escala para transições de fase quânticas e, estudando um caso simples, apontamos sua utilidade e seus limites de validade [31, 37].

A ocorrência de transições de primeira ordem em $T = 0$ vem sendo também discutida em termos do acoplamento com modos de invariância genérica de escala (generic scale invariance) [38]. Destacamos neste trabalho que o acoplamento com modos desse tipo é apenas um dos mecanismos que pode levar à mudança na natureza da transição. Mostramos que o acoplamento do parâmetro de ordem com flutuações de outra fase em competição na mesma região do diagrama leva a resultados semelhantes, mesmo que estas flutuações não sejam críticas. Apontamos também que os resultados para os mecanismos apresentados são ainda mais gerais, dependendo principalmente da dimensão do problema e da dinâmica da flutuação acoplada [37]. Por isso, flutuações de origem completamente distinta podem gerar resultados qualitativos equivalentes. Outros tipos de acoplamento massivos (não críticos) também são sugeridos como responsáveis por alterações na transição quântica. Esta grande variedade de flutuações quânticas consideradas em $T = 0$ nos leva então a acreditar que, em d dimensões, as transições no estado fundamental são na verdade muito mais ricas do que as transições clássicas em $d + z$ dimensões, às quais elas costumam ser comparadas.

Logo, o estudo do estado fundamental por meio do potencial efetivo, além de representar uma nova modelagem para explicar fases de momento pequeno, inomogeneidades e coexistência de fases que aparecem em férmions pesados a baixas temperaturas, leva a importantes conclusões teóricas gerais sobre as transições quânticas e os mecanismos que induzem mudança de sua natureza.

Outro problema interessante, o de transições com mudança abrupta de volume em sistema de férmions pesados, foi abordado. Propusemos um modelo microscópico para explicar a instabilidade de volume como uma versão radical da mudança contínua de comportamento esperada na fase desordenada destes materiais [60]. Através do valor de um parâmetro, α , que mede a razão entre o módulo de volume e a pressão da rede Kondo, determinamos se a instabilidade pode ocorrer na região de interesse. A comparação com valores experimentais de α do Ce e YbInCu₄, materiais que apresentam a transição volumétrica, está em concordância

com o intervalo de valores previstos pelo modelo. No caso especial do YbInCu_4 ainda verificamos outra interessante característica. Sobre a linha de instabilidade volumétrica podemos mostrar que o sistema pode ser comparado com o ^3He sobre a linha de fusão, apresentando características similares, sendo a mais importante a ocorrência do efeito Pomeranchuk [61]. Assim como é feito para o sistema de ^3He o efeito pode ser usado para refrigeração com base na transformação de fases do YbInCu_4 . Além do uso da pressão também mostramos como o campo magnético pode ser usado para ajustar a temperatura de transição. A refrigeração por meio magnético foi proposta [62] e a medida experimental do efeito, embora ainda longe das condições necessárias para resultados práticos, foi observada [76]. Os cálculos teóricos de rendimento e a possibilidade de usar pressão e campo magnético em conjunto para conduzir a transição nos levam a crer em resultados muito mais otimistas.

7.2 Perspectivas

Os pontos principais discutidos aqui deixam diversas possibilidades abertas para trabalhos futuros.

O método do potencial efetivo também pode ser utilizado para estudar a competição entre estados em outros materiais. Destacamos os supercondutores de alta temperatura crítica, onde a proximidade entre fases supercondutoras e magnéticas [45, 78] também deve levar a efeitos interessantes. Nesse caso a fase normal é bastante diferente da encontrada nos férmions pesados e é melhor descrita em função de um modelo sigma não-linear. Já estamos trabalhando em um modelo desta espécie e esperamos obter resultados em breve. Além disso, tanto o modelo de competição entre parâmetros de ordem em férmions pesados quanto o em supercondutores de alta temperatura crítica podem ser estendidos para temperatura finita.

Outro ponto discutido girou em torno da condição sobre as constantes de acoplamento que fazem com que a transição seja de primeira ordem¹. Apontamos que a aplicação da teoria de Grupo de Renormalização pode eliminar as restrições impostas e formalizar vários resultados obtidos. Para o potencial de Coleman-Weinberg (Apêndice B) este tratamento é apresentado em [18] e no caso da competição entre magnetismo e supercondutividade o tratamento também seria essencial. O estudo da competição de fases quando há fortes flutuações nos parâmetros de ordem também merece atenção, mas o método aplicado aqui, que considera os valores dos parâmetros de ordem fixos nos seus valores clássicos dentro do potencial corrigido, deve ser ineficaz.

A desordem pode levar a outras interessantes mudanças nas características das transições quânticas [63]. Por isso, desde que as conclusões gerais sobre as transições quânticas obtidas aqui estão relacionadas com sistemas puros, também seria importante considerar efeitos de desordem nos trabalhos seguintes.

¹Veja discussão em torno da condição (4.88) da seção 4.8.

Na descrição microscópica das transições volumétricas nos sistemas de férmions pesados encontramos a linha de espinodal a partir do qual o sistema se torna instável explicando a mudança brusca de volume. Entretanto, a linha real de primeira ordem não foi encontrada desde que o modelo baseado na teoria local é ineficiente em temperaturas mais altas. A extensão do modelo com a finalidade de encontrar a linha real de primeira ordem também representa uma possibilidade para trabalho futuro. No caso da comparação com o ^3He para construção de refrigeradores, o sistema de Ce metálico também deve ser melhor considerado e a procura por materiais com características experimentais similares é digna de interesse. Ainda, é claro, enfatizamos a necessidade de um aparato para medir o efeito de refrigeração nesses sistemas em condições de otimização ideais, esperando resultados vantajosos do ponto de vista prático.

Apêndice A

Ação efetiva

A.1 Funcionais geradores e a ação efetiva

O cálculo de funções de Green é a principal ferramenta para solução teórica de diversos modelos de matéria condensada e física de partículas. Podemos mostrar que essas funções, que estão diretamente relacionadas com observáveis do modelo, podem ser geradas pelo funcional

$$Z[j] = \int \mathcal{D}\phi \exp \frac{i}{\hbar} \left[S[\phi] + \int j\phi \right]. \quad (\text{A.1})$$

Não é difícil mostrar que

$$\frac{1}{Z[0]} \frac{1}{i^{n-1}} \frac{\delta^n Z[j]}{\delta j(x_1) \dots \delta j(x_n)} \Big|_{j=0} = \langle 0 | T[\phi(x_1) \dots \phi(x_n)] | 0 \rangle = G(x_1, x_2 \dots x_n), \quad (\text{A.2})$$

Isto é, as derivadas em relação a fonte externa $j(x_i)$ geram as funções de Green de n pontos. Em problemas de matéria condensada $Z[j]$ está associado com a função de partição do problema. No entanto, o funcional contém informação em excesso. As grandezas físicas estão sempre relacionadas com as funções de Green conexas [26, 79] geradas pelo funcional alternativo

$$W[j] = -i\hbar \ln Z. \quad (\text{A.3})$$

Em matéria condensada é simples observar este fato desde que as grandezas se relacionam sempre com o logaritmo da função de partição. Através de derivadas em relação a $j(x_i)$ podemos da mesma maneira que na Eq. (A.2) gerar as funções de Green conexas e a partir delas encontrar os observáveis de interesse. O valor esperado do campo na presença da fonte externa, $\bar{\phi}(x, j)$, também pode ser calculado através da derivada

$$\bar{\phi}(x, j) = \frac{\delta W}{\delta j(x)}. \quad (\text{A.4})$$

Agora vamos supor que podemos inverter de forma unívoca a dependência funcional em $\bar{\phi}(x, j)$ escrevendo a fonte como $j = j(x, \bar{\phi})$. Se isso é possível podemos definir um funcional gerador que depende de $\bar{\phi}$ por uma transformada de Legendre

$$\Gamma[\bar{\phi}] = W[j] - \hbar \int dx \bar{\phi}(x) j(x, \bar{\phi}). \quad (\text{A.5})$$

Apesar do truque parecer simples (e ser análogo ao que é feito em termodinâmica para definir diversos potenciais com dependência em diferentes conjuntos de variáveis), encontrar o funcional de $\bar{\phi}$ pela de dependência implícita de j em $\bar{\phi}$ pode ser bastante complicado. O interessante é que como esse novo funcional depende dos $\bar{\phi}$'s ele pode ser expandido na forma

$$\Gamma[\bar{\phi}] = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \int dx_1 dx_2 \dots dx_m \bar{\phi}(x_1) \bar{\phi}(x_2) \dots \bar{\phi}(x_m) \Gamma_m(x_1, x_2 \dots x_m) \quad (\text{A.6})$$

onde cada Γ_m tem a representação diagramática da Figura A.1 justificando sua qualificação de *vértices próprios*.

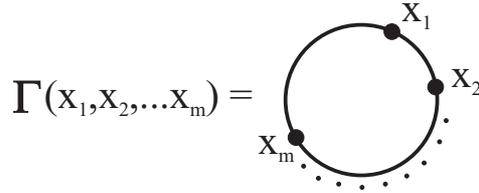


Figura A.1: Representação diagramática das funções de Green Γ_m .

Observamos agora que

$$\frac{\delta \Gamma[\bar{\phi}]}{\delta \bar{\phi}(x)} = -\hbar j(x) \quad (\text{A.7})$$

e no limite $\hbar \rightarrow 0$ encontramos

$$\frac{\delta \Gamma_0[\bar{\phi}]}{\delta \bar{\phi}(x)} = 0 \quad (\text{A.8})$$

que é a equação de mínimo satisfeita pela ação clássica quando $\phi = \phi_c$ e $j = 0$. Nestas condições $\bar{\phi} = \phi_c$ e por isso $\Gamma[\bar{\phi}]$ se reduz a ação clássica,

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \Gamma[\bar{\phi}] = \Gamma_0[\bar{\phi}] = S[\bar{\phi}]. \quad (\text{A.9})$$

A ação completa $\Gamma[\bar{\phi}]$ é então interpretada como a generalização quântica da ação clássica $S[\bar{\phi}]$. Por esse motivo costumamos chamar $\Gamma[\bar{\phi}]$ de ação efetiva da teoria. A interpretação é

reforçada pois conseguimos expandir a ação efetiva de uma maneira que se pareça com a ação clássica

$$\Gamma[\bar{\phi}] = \int dx \left[\frac{1}{2} Z \partial_\mu \bar{\phi} \partial^\mu \bar{\phi} - V(\bar{\phi}) + \mathcal{O}(\partial_\mu^4) \right]. \quad (\text{A.10})$$

Considerando soluções homogêneas $\bar{\phi} = cte$ tal que $\partial_\mu \bar{\phi} = 0$ temos

$$\Gamma[\bar{\phi}] = \int dx [-V(\bar{\phi})] \Rightarrow \Gamma[\bar{\phi}] = -\Omega V(\bar{\phi}). \quad (\text{A.11})$$

Ou seja, a ação nestas condições está ligada a um potencial efetivo quântico que no limite $\hbar \rightarrow 0$ deve se reduzir ao potencial clássico V_c . A expansão em \hbar da ação efetiva então deve representar poderosa ferramenta para incluir efeitos quânticos na teoria. Note ainda que se temos o potencial efetivo, inserindo na Eq. (A.7) encontramos

$$\Omega \frac{\delta V(\bar{\phi})}{\delta \bar{\phi}(x)} = -\hbar j. \quad (\text{A.12})$$

Mas como j é levado a zero na determinação do valor esperado de ϕ , encontrado por meio de equação similar a Eq. (A.2), chegamos a conclusão que

$$\frac{\delta V(\bar{\phi})}{\delta \bar{\phi}(x)} = 0, \quad (\text{A.13})$$

Isto é, o valor de esperado de ϕ da teoria completa minimiza o potencial efetivo. Esta é exatamente a generalização da teoria clássica em que soluções homogêneas para o campo minimizam o potencial clássico.

Apêndice B

Potencial de Coleman-Weinberg

B.1 Potencial efetivo

Partimos da Lagrangiana

$$\begin{aligned} L = & -\frac{1}{4}(F_{\mu\nu})^2 + \frac{1}{2}(\partial_\mu\varphi_1 + qA_\mu\varphi_2)^2 + \\ & + \frac{1}{2}(\partial_\mu\varphi_2 - qA_\mu\varphi_1)^2 + \\ & -\frac{1}{2}m^2(\varphi_1^2 + \varphi_2^2) - \frac{\lambda}{4!}(\varphi_1^2 + \varphi_2^2)^2. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

discutida no Capítulo 3. O potencial efetivo em um loop calculado diretamente pelos métodos desenvolvidos no Capítulo 2 é

$$V_{eff} = \frac{1}{2}m^2\varphi^2 + \frac{\lambda}{4!}\varphi^4 + \frac{3q^4}{64\pi^2}\varphi^4 \left[\ln\left(\frac{\varphi^2}{M^2}\right) - \frac{25}{6} \right] \quad (\text{B.2})$$

onde parâmetro M vem da renormalização do potencial¹ e é completamente arbitrário [18]. Podemos tomar o valor de M como o mínimo do potencial efetivo $\langle\varphi\rangle$. Neste caso temos a equação para $M = \langle\varphi\rangle$,

$$m^2 + \frac{\lambda}{6}\langle\varphi\rangle^2 - \frac{11q^4}{16\pi^2}\langle\varphi\rangle^2 = 0 \quad (\text{B.3})$$

que fornece

$$\langle\varphi\rangle^2 = \frac{m^2}{\left(\frac{\lambda}{6} - \frac{11q^4}{16\pi^2}\right)} \quad (\text{B.4})$$

¹Veja o capítulo 12 de [2].

ou alternativamente para λ

$$\lambda = -\frac{6m^2}{\langle\varphi\rangle^2} + \frac{33q^4}{8\pi^2}. \quad (\text{B.5})$$

Podemos usar a equação acima para remover λ do potencial efetivo da Eq. (B.2) introduzindo outro parâmetro livre dado pelo valor do mínimo não trivial do potencial efetivo $\langle\varphi\rangle$. Neste caso a Eq. (B.2) pode ser escrita como

$$V_{eff} = \frac{1}{2}m^2\varphi^2 - \frac{m^2}{4\langle\varphi\rangle^2}\varphi^4 + \frac{3q^4}{64\pi^2}\varphi^4 \left[\ln\left(\frac{\varphi^2}{\langle\varphi\rangle^2}\right) - \frac{1}{2} \right]. \quad (\text{B.6})$$

Que é o resultado obtido por Coleman e Weinberg no caso massivo [18]. A troca de parâmetros acima é conhecida por *transmutação dimensional*² e pode ser feita apenas se o potencial apresenta um mínimo fora da origem $\langle\varphi\rangle \neq 0$ como é claro pelas equações acima. Desde que perto da transição $m \approx 0$, inferimos das condições das Eqs. (B.3) e (B.4), que a condição para que ocorram mínimos fora da origem é

$$\lambda \sim q^4. \quad (\text{B.7})$$

Vamos mostrar aqui que esta condição é exatamente a mesma encontrada por Belitz *et al* [38], $\lambda_L \ll \xi$; onde

$$\xi = \sqrt{1/2|m^2|} \quad (\text{B.8})$$

é o comprimento de coerência e

$$\lambda_L = \sqrt{1/2q^2|\langle\varphi\rangle|^2} \quad (\text{B.9})$$

é o comprimento de penetração de London. A razão λ_L/ξ , de Eq. (B.8) e Eq. (B.9), é

$$\frac{\lambda_L}{\xi} = \sqrt{\frac{|m^2|}{q^2|\langle\varphi\rangle^2}}. \quad (\text{B.10})$$

Substituindo o resultado da Eq. (B.4) temos

$$\frac{\lambda_L}{\xi} = \sqrt{\frac{1}{q^2} \left| \frac{\lambda}{6} - \frac{11q^4}{16\pi^2} \right|}. \quad (\text{B.11})$$

Esta razão é independente de m^2 como esperado. Fica claro a partir deste resultado que se impusermos nossa condição $\lambda \sim q^4$ temos $(\lambda_L/\xi) \ll 1$ ou $\lambda_L \ll \xi$ de maneira que as condições são equivalentes. Entretanto, a condição encontrada pode ser contornada se aplicarmos no problema um tratamento de Grupo de Renormalização. Discutimos esta aproximação na seção 4.8.

²Discussão interessante sobre esse fenômeno também pode ser encontrada nos trabalhos de Coleman [18, 19].

Apêndice C

Regularização das integrais e renormalização

C.1 Integração

Para encontrar o resultado para o potencial efetivo devemos realizar a integração nos momentos da Eq. (4.72). O cálculo é um pouco complicado, em especial devido a forma do propagador dos paramagnons não depender apenas do módulo do vetor quadridimensional k . Portanto, a integral mais complicada é a do último termo

$$I_3 = \frac{1}{2} \int d^3q \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(2\pi)^4} \ln \left(1 + \frac{2u\phi_c^2}{|\omega|\tau + q^2 + m_p^2} \right) \quad (\text{C.1})$$

que será efetuada primeiro. O integrando é uma função par em ω de forma que podemos integrar no semi-eixo positivo $\omega > 0$ retirando o fator $1/2$. Esta integral, como as demais, também é divergente mas pode ser regularizada adicionando-se um corte (cut-off) no limite superior. As duas primeiras integrais têm no propagador tempo e espaço de forma equivalente (expoente $z = 1$), mas nesta terceira observamos anisotropia ($z = 2$) [25]. A anisotropia entre tempo e espaço na última integral deve se expressar no cut-off de forma que se o corte em q é Λ o corte em ω deve ser $\Lambda^z = \Lambda^2$ [25]¹. A integral I_3 é portanto

$$I_3 = \int_{|\mathbf{q}| < \Lambda} d^3q \int_0^{\Lambda^2} \frac{d\omega}{(2\pi)^4} \ln \left(1 + \frac{2u\phi_1^2}{\omega\tau + q^2 + m_p^2} \right). \quad (\text{C.2})$$

Podemos tornar o cálculo ainda mais simples limitando o intervalo de integração em ω da forma

$$0 < \omega + q^2 < \Lambda^2. \quad (\text{C.3})$$

¹Esse corte diferenciado não é necessário e podemos mostrar que o resultado independe desta escolha. No entanto usar cortes simplificados pode reduzir em muito o cálculo necessário para obtenção do potencial efetivo.

A integral com esse corte simplificado é

$$I_3 = \int_{|\mathbf{q}| < \Lambda} d^3q \int_0^{\Lambda^2 - q^2} \frac{d\omega}{(2\pi)^4} \ln \left(1 + \frac{a}{\omega + q^2 + m_p^2} \right) \quad (\text{C.4})$$

onde

$$a = 2u\phi_1^2 \quad (\text{C.5})$$

e fizemos para simplificar a notação $\tau = 1$. Integrando em $d\omega$ temos

$$I_3 = \int_{|\mathbf{q}| < \Lambda} \frac{d^3q}{(2\pi)^4} \left[(\Lambda^2 - q^2) \ln \left(\frac{\Lambda^2 + m_p^2 + a}{\Lambda^2 + m_p^2} \right) + (a + m_p^2 + q^2) \ln \left(\frac{\Lambda^2 + m_p^2 + a}{q^2 + m_p^2 + a} \right) + (q^2 + m_p^2) \ln \left(\frac{q^2 + m_p^2}{\Lambda^2 + m_p^2} \right) \right]$$

e a integral em $d^3q = 4\pi q^2 dq$ fornece

$$I_3 = \frac{4\pi}{(2\pi)^4} \left[\frac{2}{15} \Lambda^5 \ln \left(\frac{\Lambda^2 + m_p^2 + a}{\Lambda^2 + m_p^2} \right) + \frac{4}{45} \Lambda^3 a - \frac{4}{15} \Lambda a^2 - \frac{8}{15} \Lambda a m_p^2 + \frac{4}{15} (a + m_p^2)^{5/2} \arctan \left(\frac{\Lambda}{\sqrt{a + m_p^2}} \right) - \frac{4}{15} m_p^5 \arctan \left(\frac{\Lambda}{m_p} \right) \right]. \quad (\text{C.6})$$

Para cortes Λ muito grandes aproximamos

$$\begin{aligned} \arctan \left(\frac{\Lambda}{\sqrt{a + m_p^2}} \right) &\rightarrow \frac{\pi}{2} + \mathcal{O} \left(\frac{1}{\Lambda} \right) \\ \Lambda^5 \ln \left(\frac{\Lambda^2 + m_p^2 + a}{\Lambda^2 + m_p^2} \right) &\rightarrow \Lambda^3 a - \Lambda a m_p^2 - \frac{1}{2} \Lambda a^2 + \mathcal{O} \left(\frac{1}{\Lambda} \right) \end{aligned}$$

e encontramos

$$I_3 = \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{9\pi} \Lambda^3 a - \frac{4\Lambda}{3\pi} (a^2 + 2a m_p^2) + \frac{8}{15} (a + m_p^2)^{5/2} - \frac{8}{15} m_p^5 \right]. \quad (\text{C.7})$$

É interessante comentar neste ponto que a integral resolvida sem o corte simplificado (C.3) difere desta solução apenas nos termos que dependem de Λ . Estes termos, se corretamente renormalizados, não têm relevância física como veremos na próxima seção.

O resultado das primeiras integrais é bem conhecido [2]

$$I_{1,2} = \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{\Lambda^2 b_{1,2}}{2} + \frac{(b_{1,2} + m^2)^2}{4} \ln \left(\frac{b_{1,2} + m^2}{\Lambda^2} \right) - \frac{b_{1,2}^2}{8} - \frac{m^4}{2} \ln \left(\frac{m}{\Lambda} \right) \right] \quad (\text{C.8})$$

onde

$$b_1 = \frac{\lambda}{6}\phi_{1c}^2 \quad (\text{C.9})$$

$$b_2 = \frac{\lambda}{2}\phi_{1c}^2 \quad (\text{C.10})$$

para a primeira e a segunda integral respectivamente. A correção de 1 loop é portanto

$$V^{(1)}(\phi_{1c} = \phi_c) = I_1(\phi_c) + I_2(\phi_c) + I_3(\phi_c) \quad (\text{C.11})$$

onde

$$I_3 = \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{9\pi}\Lambda^3 a - \frac{4\Lambda}{3\pi}(a^2 + 2am_p^2) + \frac{8}{15}(a + m_p^2)^{5/2} - \frac{8}{15}m_p^5 \right] \quad (\text{C.12})$$

e

$$I_1 + I_2 = \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{\Lambda^2(b_1 + b_2)}{2} + \frac{(b_1 + m^2)^2}{4} \ln \left(\frac{b_1 + m^2}{\Lambda^2} \right) + \frac{(b_2 + m^2)^2}{4} \ln \left(\frac{b_2 + m^2}{\Lambda^2} \right) - \frac{(b_1^2 + b_2^2)}{8} - m^4 \ln \left(\frac{m}{\Lambda} \right) \right]. \quad (\text{C.13})$$

O potencial efetivo é, na aproximação da seção 4.6.1,

$$V_{ef}(\phi_c) = V_{cl}(\phi_1 = \phi_c, \phi_2 = \phi_3 = 0) + V^{(1)}(\phi_c) + \text{contratermos} \quad (\text{C.14})$$

onde, acordo com (4.3)

$$V_{cl}(\phi_1 = \phi_c, \phi_2 = \phi_3 = 0) = \frac{1}{2}m^2\phi_c^2 + \frac{\lambda}{4!}\phi_c^4. \quad (\text{C.15})$$

C.2 Renormalização

Renormalizamos aqui o potencial efetivo para o caso estudado na seção 4.6.1. A renormalização para os outros casos é feita de maneira totalmente equivalente. Usando contratermos do tipo $\frac{1}{2}B\phi_c^2$ e $\frac{1}{4!}C\phi_c^4$ podemos eliminar a dependência do cut-off Λ . Estamos interessados no limite em que m é pequeno, isto é, perto do ponto crítico quântico (PCQ) supercondutor, portanto usamos uma expansão em m do potencial dada por

$$V^{(1)} = I_3(\phi_c) + \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left\{ \left[\frac{\Lambda^2(b_1 + b_2)}{2} + \frac{b_1^2}{4} \ln \left(\frac{b_1}{\Lambda^2} \right) + \frac{b_2^2}{4} \ln \left(\frac{b_2}{\Lambda^2} \right) - \frac{(b_1^2 + b_2^2)}{8} \right] + m^2 \left[\frac{b_1 + b_2}{4} + \frac{b_1}{2} \ln \left(\frac{b_1}{\Lambda^2} \right) + \frac{b_2}{2} \ln \left(\frac{b_2}{\Lambda^2} \right) \right] \right\} + \frac{1}{2}B\phi_c^2 + \frac{1}{4!}C\phi_c^4. \quad (\text{C.16})$$

A maneira mais simples de renormalizar este potencial para valores de m muito pequenos é começar pelo caso com $m = 0$. Desta forma

$$V^{(1)}(m = 0) = \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{9\pi} \Lambda^3 a - \frac{4\Lambda}{3\pi} (a^2 + 2am_p^2) + \frac{8}{15} (a + m_p^2)^{5/2} - \frac{8}{15} m_p^5 + \frac{\Lambda^2(b_1 + b_2)}{2} + \frac{b_1^2}{4} \ln \left(\frac{b_1}{\Lambda^2} \right) + \frac{b_2^2}{4} \ln \left(\frac{b_2}{\Lambda^2} \right) - \frac{(b_1^2 + b_2^2)}{8} \right] + \text{contratermos.} \quad (\text{C.17})$$

Lembrando sempre que a , b_1 e b_2 são dados por

$$a = 2u\phi_c^2 \quad (\text{C.18})$$

$$b_1 = \frac{\lambda}{6}\phi_c^2 \quad (\text{C.19})$$

$$b_2 = \frac{\lambda}{2}\phi_c^2. \quad (\text{C.20})$$

A massa é definida como

$$\left. \frac{d^2 V_{ef}}{d\phi_c^2} \right|_{\phi_c=0} = m = 0 \quad (\text{C.21})$$

e portanto encontramos para a constante B do primeiro contratermo

$$B = -\frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[4u\Lambda^3 \left(\frac{8}{9\pi} \right) - 4u\Lambda \left(\frac{8m_p^2}{3\pi} \right) + \frac{16}{3} m_p^3 u + \frac{2\lambda}{3} \Lambda^2 \right] \quad (\text{C.22})$$

que substituída no potencial elimina a dependência em Λ dos termos em ϕ_c^2 tal que

$$V^{(1)}(m = 0) = \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[-\frac{4\Lambda}{3\pi} a^2 + \frac{8}{15} (a + m_p^2)^{5/2} - \frac{8}{15} m_p^5 - \frac{4}{3} m_p^3 a + \frac{b_1^2}{4} \ln \left(\frac{b_1}{\Lambda^2} \right) + \frac{b_2^2}{4} \ln \left(\frac{b_2}{\Lambda^2} \right) - \frac{(b_1^2 + b_2^2)}{8} \right] + \frac{1}{4!} C \phi_c^4. \quad (\text{C.23})$$

Repare também que a renormalização inseriu um termo de massa (isto é, um termo proporcional a ϕ^2) no potencial mesmo no limite $m = 0$.

A constante de acoplamento λ é definida de maneira semelhante por

$$\left. \frac{d^4 V_{ef}}{d\phi_c^4} \right|_{\phi_c=\langle\phi\rangle} = \lambda \quad (\text{C.24})$$

e note que a definição é feita em $\phi_c = \langle\phi\rangle$ pois em $\phi_c = 0$ temos divergência devido aos termos logarítmicos. O valor $\langle\phi\rangle$ pode ser arbitrariamente escolhido mas é interessante escolhê-lo como a posição do mínimo do potencial efetivo. Encontramos a partir de (C.24) o valor da

constante C e os demais termos com dependência do cut-off são eliminados. O potencial efetivo finalmente é dado por

$$\begin{aligned}
V_{ef}(m=0) = & \frac{\lambda}{4!}\phi_c^4 + \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{15}(2u\phi_c^2 + m_p^2)^{5/2} - \frac{8}{15}m_p^5 - \frac{8}{3}m_p^3u\phi_c^2 + \right. \\
& + \frac{16}{3} \frac{u^4\langle\phi\rangle^4\phi_c^4}{(2u\langle\phi\rangle^2 + m_p^2)^{3/2}} - 16 \frac{u^3\langle\phi\rangle^2\phi_c^4}{(2u\langle\phi\rangle^2 + m_p^2)^{1/2}} + \\
& \left. -4(2u\langle\phi\rangle^2 + m_p^2)^{1/2}u^2\phi_c^4 + \frac{5\lambda^2\phi_c^4}{72} \ln\left(\frac{\phi_c}{\langle\phi\rangle}\right) - \frac{125}{432}\lambda^2\phi_c^2 \right]. \quad (C.25)
\end{aligned}$$

As correções quânticas podem alterar os mínimos encontrados classicamente gerando situações interessantes como por exemplo a quebra de simetria de uma fase simétrica. Se escolhermos de fato o valor de $\langle\phi\rangle$ como o mínimo deste potencial a constante λ pode ser encontrada em função deste valor através da condição de mínimo

$$\left. \frac{dV_{ef}}{d\phi_c} \right|_{\phi_c=\langle\phi\rangle} = 0. \quad (C.26)$$

Esta é a conhecida *transmutação dimensional* discutida no Apêndice B, onde eliminamos um parâmetro adimensional de provável influência não trivial nas grandezas físicas pelo valor esperado no vácuo $\langle\phi\rangle$ [18]. A expansão é válida somente se as constantes de acoplamento são pequenas e por isso os termos de correção proporcionais a λ^2 podem ser desprezados visto que não são comparáveis ao termo clássico $\mathcal{O}(\lambda)$. Esperamos portanto gerar novos mínimos balanceando o termo em λ com as correções dependentes de u .

$$\begin{aligned}
V_{ef}(m=0) = & \frac{\lambda}{4!}\phi_c^4 + \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{15}(2u\phi_c^2 + m_p^2)^{5/2} - \frac{8}{15}m_p^5 - \frac{8}{3}m_p^3u\phi_c^2 + \right. \\
& + \frac{16}{3} \frac{u^4\langle\phi\rangle^4\phi_c^4}{(2u\langle\phi\rangle^2 + m_p^2)^{3/2}} - 16 \frac{u^3\langle\phi\rangle^2\phi_c^4}{(2u\langle\phi\rangle^2 + m_p^2)^{1/2}} + \\
& \left. -4(2u\langle\phi\rangle^2 + m_p^2)^{1/2}u^2\phi_c^4 \right]. \quad (C.27)
\end{aligned}$$

Ainda em ordem λ podemos mostrar que a generalização correta para o caso massivo com m pequeno é feita adicionando-se apenas o termo clássico de massa $(1/2)m^2\phi_c^2$. Os termos desprezados são de $\mathcal{O}(\lambda^2)$ e $\mathcal{O}(m^2\lambda)$. Portanto

$$\begin{aligned}
V_{ef}(\phi_c) = & \frac{1}{2}m^2\phi_c^2 + \frac{\lambda}{4!}\phi_c^4 + \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{15}(2u\phi_c^2 + m_p^2)^{5/2} - \frac{8}{15}m_p^5 - \frac{8}{3}m_p^3u\phi_c^2 + \right. \\
& + \frac{16}{3} \frac{u^4\langle\phi\rangle^4\phi_c^4}{(2u\langle\phi\rangle^2 + m_p^2)^{3/2}} - 16 \frac{u^3\langle\phi\rangle^2\phi_c^4}{(2u\langle\phi\rangle^2 + m_p^2)^{1/2}} + \\
& \left. -4(2u\langle\phi\rangle^2 + m_p^2)^{1/2}u^2\phi_c^4 \right] \quad (C.28)
\end{aligned}$$

O termo entre colchetes é a correção quântica de ordem $\mathcal{O}(\hbar)$.

Alguns desses termos (os três últimos) também são de ordem muito alta. Considerando apenas o termo mais relevante da expansão temos

$$V_{ef}(\phi_c) = \frac{1}{2}m^2\phi_c^2 + \frac{\lambda}{4!}\phi_c^4 + \frac{\pi^2}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{15}(2u\phi_c^2 + m_p^2)^{5/2} - \frac{8}{15}m_p^5 - \frac{8}{3}m_p^3u\phi_c^2 \right] \quad (\text{C.29})$$

que é o potencial efetivo em 1 loop considerado no limite de massas pequenas na seção 4.6.1².

²Preferimos usar a forma simplificada Eq. (C.29) embora a expansão para massas pequenas forneça, após desprezar termos de ordem mais alta, o mesmo resultado se usarmos a Eq. (C.28).

Bibliografia

- [1] Sondhi S.L., Girvin S.M., Carini J.P. *et al*, Rev. Mod. Phys. 69, 315-333 (1997); Continentino M.A., Phys. Rep. 239, 179-213 (1994); Sachdev S., Physics World 12, 33-38 (1999)
- [2] Continentino M. A., *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, Ed. World Scientific (2001)
- [3] Steglich F., Geibel C., Modler R. *et al*, J. Low Temp. Phys. 99, 267 (1995); Steglich F., Geibel C., Helfrich R. *et al*, J. Phys. Chem. Solids 59, 2190 (1998)
- [4] Stewart G.R., Rev. Mod. Phys. 73, 797-855 (2001)
- [5] Flouquet J., cond-mat/0501602 (2005)
- [6] Kondo J., em *Solid State Physics* 23, pag. 183, Academic New York (1969); Heeger A. J., *Solid State Physics* 23, 248 (1969)
- [7] Wilson K. G., Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975)
- [8] Ruderman M. A. e Kittel C. Phys. Rev. 96, 99-102 (1954); Kittel C., *Solid State Physics* 22, 1 (1968); Kittel C., *Introduction to Solid State Physics*, editora John Wiley & Sons, quinta edição (1976)
- [9] Continentino M. A., Japiassu G. e Troper A., Phys. Rev. B 39, 9734 (1989)
- [10] Continentino M. A., Phys. Rev. B 47, 11587 (1993)
- [11] Steglich F., Aarts J., Bredl C. D., Lieke W., Meschede D., Franz W. e Schafer H., Phys. Rev. Lett. 43, 1892 (1979); Raymond S. e Jaccard D., Phys. Rev. B 61, 8679 (2000)
- [12] Mathur N. D., Grosche F. M., Julian S. R., Walker I. R., Freye D. M., Haselwimmer R. K. W. e Lonzarich G. G., Nature 394, 39 (1998)
- [13] Fisher M. E., *Critical Phenomena*, Editora Springer-Verlag (1982); Ma S. e Ma S.-K., *Modern Theory of Critical Phenomena*, Perseus Books Group; 1a edição (2000); Cardy J. *et al*, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* (Cambridge Lecture Notes in

- Physics), Cambridge University Press (1996); Continentino M. A., *Quantum Scaling in Many-Body Systems*, Ed. World Scientific (2001); Sachdev S. *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press (2001)
- [14] Fisher M. P. A., Grinstein G., Girvin S. M., Phys. Rev. Lett. 64, 587 (1990)
- [15] Ferreira A. S. e Continentino M. A., Phys. Rev. B 67, 193103 (2003)
- [16] Green A. G. e Sondhi S. L., cond-mat 0501758 (2005)
- [17] Jona-Lasinio G., Nuovo Cimento 34, 1790 (1964).
- [18] Coleman S. e Weinberg E., Phys. Rev. D 7, 1888 (1973)
- [19] Coleman S., *Aspects of Symmetry*, Cambridge University Press (1985) capítulo 5
- [20] Ramazashvili R. e Coleman P., Phys. Rev. Lett. 79, 3752 (1997)
- [21] Kirkpatrick T. R. e Belitz D., Phys. Rev. Lett. 79, 3042 (1997)
- [22] Timusk T. e Statt B., Rep. Prog. Phys. 62, 61-122 (1999)
- [23] Ekino T., Takabatake T., Tanaka H. e Fujii H., Phys. Rev. Lett. 75, 4262 (1995); Donovan S., Schwartz A. e Grner G., Phys. Rev. Lett. 79, 1401-1404 (1997); Davydov D. N., Kambe S., Jansen A. G. M., Wyder P., Wilson N., Lapertot G. e Flouquet J., Phys. Rev. B 55, R7299-R7302 (1997); Dressel M., Kasper N., Petukhov K., Gorshunov B., Grner G., Huth M. e Adrian H., Phys. Rev. Lett. 88, 186404 (2002); Sidorov V. A., Nicklas M., Pagliuso P. G., Sarrao J. L., Bang Y., Balatsky A. V. e Thompson J. D., Phys. Rev. Lett. 89, 157004 (2002)
- [24] Micnas R., Ranninger J. e Robaszkiewicz S., Rev. Mod. Phys. 62, 113 (1990)
- [25] Hertz J. A., Phys. Rev. B 14, 1165 (1976)
- [26] Veja, por exemplo, Fetter A. L. e Walecka J. D., *Quantum Theory of Many Particle Systems*, Ed. McGraw-Hill (1971); Ziman J. M.; *Elements of Advanced Quantum Theory*, Cambridge University Press (1969)
- [27] Lyra M. L., Coutinho-filho M. D. e Nemirovsky A. M., Phys. Rev. B 48, 3755 (1993)
- [28] Lindhard J., Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 28 8 (1954)
- [29] Hertz J. A. e Klenin M. A., Phys. Rev. B 10, 1084 (1974)
- [30] Flouquet J. *et al*, cond-mat/0306157; Snafo W. *et al*, cond-mat/0302487
- [31] Continentino M. A. e Ferreira A. S., Physica A 339 , 461 (2004)

- [32] Nienhuis B. e Nauenberg N., Phys. Rev. Lett. 35, 477 (1975); Nienhuis B., Berker A. N., Riedel E. K. e Schick M., Phys. Rev. Lett. 43, 737 (1979); Sólyom J. e Pfeuty P., Phys. Rev. B 24, 218 (1981); Turban L. e Igloi F., Phys. Rev. B 66, 014440 (2002)
- [33] Fisher M. E. e Berker A. N., Phys. Rev. B 26, 2507 (1982)
- [34] Kawasaki S. *et al*, Phys. Rev. Lett. 91, 137001 (2003); Kitaoka Y., Kawasaki S., Mito T., Kawasaki Y., aceito pelo J. Phys. Soc. JPN 74, 1 (2005); Yu W. *et al* Phys. Rev. Lett. 92, 086403 (2004); Uhlarz M., Pfeiderer C. e Hayden S. M., Phys. Rev. Lett. 93, 256404 (2004); Pfeiderer C. e Huxley A. D., Phys. Rev. Lett. 89, 147005 (2002); Bianchi A., Movshovich R., Oeschler N., Gegenwart P., Steglich F., Thompson J. D., Pagliuso P. G. e Sarrao J. L., Phys. Rev. Lett. 89, 137002 (2002); Pfeiderer C. *et al*, Nature (London) 412, 58 (2001); Kimura N., Endo M., Isshiki T., Minagawa S., Ochiai A., Aoki H., Terashima T., Uji S., Matsumoto T. e Lonzarich G. G. Phys. Rev. Lett. 92, 197002 (2004)
- [35] Boccara N., *Symétries Brisées*, Hermann, Paris, (1979), p.120
- [36] Paglione J., Tanatar M. A., Hawthorn D. G., Boaknin E., Hill R. W., Ronning F., Sutherland M., Taillefer L., Petrovic C. e Canfield P. C., Phys. Rev. Lett. 91, 246405 (2003)
- [37] Ferreira A. S. e Continentino M. A., aceito para publicação no J. Stat. Mechanics
- [38] Belitz D., Kirkpatrick T. R. e Vojta T., cond-mat/0403182, a ser publicado na Rev. Mod. Phys.
- [39] Halperin B. I., Lubensky T. e Ma S. K., Phys. Rev. Lett. 32, 292 (1974)
- [40] veja Kitaoka Y. *et al* em Ref. [34]
- [41] Malbouisson A. P. C., Nogueira F. S. e Svaiter N. F., Mod. Phys. Letts. A 11, 749 (1996)
- [42] Jackiw R., Phys. Rev. D 9, 1686 (1973)
- [43] Fisher M. P. A., Weichman P. B., Grinstein G. e Fisher D. S., Phys. Rev. B 40, 546 (1989)
- [44] Ferreira A. S., Continentino M. A. e Marino E. C., Phys. Rev. B 70, 174507 (2004)
- [45] Zhang S. C., Science 275, 1089 (1997)
- [46] Sachdev S. e Zhang S. C., Science 295, 452 (2002); Demler E., Sachdev S. e Zhang Y., Phys. Rev. Lett. 87, 067202 (2001)
- [47] Kohno H., Fukuyama H. e Sigrist M., J. Phys. Soc. Jpn. 68 1500 (1999)
- [48] Baskaran G. e Anderson P. W., J. Phys. Chem. solids 59, 1780 (1998)

- [49] Hu X., Phys. Rev. Lett. 87, 057004 (2001); Aharony A., Phys. Rev. Lett. 88, 059703 (2002); Hu X., Phys. Rev. Lett. 88, 059704 (2002); Dorneich A. *et al*, cond-mat/0207528 (2002)
- [50] Sidorov V. A. , Nicklas M., Pagliuso P. G., Sarrao J. L., Bang Y., Balatsky A. V., Thompson J. D., Phys. Rev. Lett. 89, 157004 (2002); Pagliuso P. G., Moreno N. O., Curro N. J., Thompson J. D., Hundley M. F., Sarrao J. L., Fisk Z., Christianson A. D., Lacerda A. H., Light B. E. e Cornelius A. L., Phys. Rev. B 66, 054433 (2002); Nicklas M., Sidorov V. A., Borges H. A., Pagliuso P. G., Petrovic C., Fisk Z., Sarrao J. L. e Thompson J. D., Phys. Rev. B 67, 020506 (2003); Fisher R. A., Bouquet F., Phillips N. E., Hundley M. F., Pagliuso P. G., Sarrao J. L., Fisk Z. e Thompson J. D., Phys. Rev. B 65, 224509 (2002)
- [51] Kosterlitz J. M., Nelson D. R. e Fisher M. F., Phys. Rev. B 13, 412 (1976)
- [52] Ferreira A. S., Continentino M. A. e Marino E. C., Solid State Commun. 130, 321 (2004); Ferreira A. S., Continentino M. A. e Marino E. C., Physica C 408, 169 (2004)
- [53] Buyers W. J. L., Physica B 223&224, 9-14 (1996); Bourdarot F., Fak B. *et al*, cond-mat/0312206 (2003)
- [54] Plessel J., Abd-Elmeguid M. M. *et al*, Phys. Rev. B 67, 180403 (2003)
- [55] Custers J., Gegenwart P., Wilhelm H., Neumaier K., Tokiwa Y., Trovarelli O., Geibel C., Steglich F., Pepin C. e Coleman P., Nature 424, 524 (2003)
- [56] Para definição detalhada da constante κ e dos supercondutores tipo I e II veja por exemplo Tinkham M., *Introduction to Superconductivity*, Editora Dover (1996) segunda edição
- [57] Brazovskii S. A., Sov. Phys. JETP 41, 85 (1975); Brazovskii S. A. e Dmitriev S. G., Sov. Phys. JETP 42, 497 (1976); Dyugaev A. M., Sov. Phys. JETP 56, 567 (1983)
- [58] Mineev V. P. e Sigrist M., Phys. Rev. B 63, 172504 (2001)
- [59] Mineev V. P., JETP Lett. 66, 693 (1997)
- [60] Continentino M. A. e Ferreira A. S., Solid St. Comm. 131, 195 (2004)
- [61] Continentino M. A. e Ferreira A. S., Phys. Rev. B 69, 233104 (2004)
- [62] Continentino M. A. e Ferreira A. S., Cryogenics 45, 331 (2005)
- [63] Vojta T., Phys. Rev. Lett. 90, 107202 (2003); Dobrosavljevic V. e Miranda E., cond-mat/0408336 (2004)
- [64] Miranda E. *et al*, Phys. Rev. Lett. 78, 290 (1997)

- [65] Koskenmaki D. C. e Gschneider K. A., em *Handbook on the Physics and Chemistry of the Rare Earth*, editado por Gschneider K. A. e Eyring L. (North Holland, Amsterdam, 1978), p.340
- [66] Allen J. W. e Martin R. M., Phys. Rev. Lett. 49, 1106 (1982)
- [67] Lavagna M., Lacroix C. e Cyrot M., Phys. Lett. 90A, 210 (1982)
- [68] Felner I. e Nowik I., Phys. Rev. B33, 617 (1986)
- [69] Sarrao J. L., Physica B 259-261, 128 (1999) e referências citadas
- [70] Dzero M. O., Gorkov L. P. e Zvezdin A. K., J. Phys.-Cond.Mat. 12, L711 (2000)
- [71] Continentino M. A., Eur. Phys. Journal B 13, 31 (2000)
- [72] Pomeranchuk I., Zh. Eksp. i Teor. Fiz. (USSR) 20, 919 (1950);
- [73] Richardson R. C., Rev. Mod. Phys. 69, 683 (1997)
- [74] Betts D. S., *Refrigeration and Thermometry below One Kelvin*, Sussex University Press, 1976.
- [75] Dzero M. O., Gorkov L. P. e Zvezdin A. K., Physica B 312-313, 321 (2002)
- [76] Continentino M. A., Ferreira A. S., Pagliuso P., Rettori C. e Sarrao J., cond-mat/0408191 (a ser publicado no Physica B)
- [77] Flouquet J., Haga Y., Haen P., Braithwaite D., Knebel G., Raymond S. e Kambe S., cond-mat/0306157; Bernhoeft N., J. Phys.:Cond.Mat 13, R771 (2001)
- [78] Kastner M.A., Birgeneau R.J., Shirane G., Endoh Y., Rev. Mod. Phys. 70 (3): 897-928 (1998)
- [79] Rivers R. J., *Path Integral Methods in Quantum Field Theory*, Cambridge University Press (1988); Zee A., *Quantum Field Theory in a Nutshell*, Princeton University Press (2003)