

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

Vanuildo Silva de CARVALHO*; Hermann Freire Ferreira Lima e SILVA†

*Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás,
C.P.131, 74.001-970, Goiânia (GO), Brasil*

Palavras-chave: supercondutividade, pnictídeos, grupo de renormalização

I. INTRODUÇÃO

A descoberta em 2008 de supercondutividade em pnictídeos (compostos binários dos elementos do quinto grupo da tabela periódica: N, P, As, Sb, Bi) baseados em ferro com temperatura crítica T_c na faixa entre 26 e 52K foi uma das grandes descobertas em física do estado sólido da última década^{1,2}. O antagonismo existente entre supercondutividade e magnetismo levou os pesquisadores a evitar o uso de materiais magnéticos como blocos primários de novos materiais supercondutores, uma vez que os campos magnéticos formados no interior deles poderiam destruir os pares de Cooper, elemento essencial para o surgimento da supercondutividade em supercondutores descritos pela teoria BCS³. Como demonstrado em um trabalho de Boeri *et al.*⁴, publicado no mesmo ano dessa descoberta, a interação elétron-fônon é insuficiente para explicar os valores de T_c encontrados nos pnictídeos, o que os coloca na classe dos supercondutores conhecidos como não convencionais⁵ – cupratos, férmions pesados, condutores moleculares, etc. –, uma vez que não se conhece até o presente momento o mecanismo responsável pelo fenômeno da supercondutividade em tais materiais.

Para estudos feitos através de grupo de renormalização (GR)⁶, seja ele funcional ou analítico, duas questões apresentadas pelos pnictídeos baseados em ferro ainda permanecem em aberto. A primeira diz respeito ao tipo ou tipos de interação que causam magnetismo e supercondutividade. A segunda refere-se ao fato de magnetismo e supercondutividade serem, ou não, ordens competidoras nesses materiais. Chubukov *et al.*⁷, utilizando um modelo efetivo de duas bandas – considerando apenas a e-

* E-mail: vanuildo@gmail.com; † E-mail: hermann@if.ufg.br

xistência de um pocket de buracos no ponto $\Gamma = (0, 0)$ e um pocket de elétrons no ponto $\mathbf{M} = (\pi, \pi)$ na ZB – para um regime de acoplamento fraco, chegou à conclusão de que magnetismo e supercondutividade aparecem em tais sistemas devido à ação combinada de uma interação interbanda e uma interbanda de par de troca. Quanto à segunda pergunta, a resposta obtida é que esse modelo apresenta uma fase anti-ferromagnética que compete com uma supercondutora do tipo onda- s estendida (s^\pm). Para dopagem nula, a fase antiferromagnética domina e, em caso contrário, a fase supercondutora aparece como a ordem relevante.

Neste trabalho, reavaliamos o modelo efetivo de duas bandas para baixas energias, discutido por Chubukov *et al.* por meio do método de GR de um loop. Entre os resultados, reportamos aqui, para este modelo, um cálculo completo de GR até dois loops de todas correções ao vértice, auto-energia e das diversas susceptibilidades com a finalidade de avaliar a robustez dos resultados do GR de um loop com respeito a incluir flutuações quânticas de ordens mais elevadas⁸.

II. METODOLOGIA

O modelo de duas bandas para o estudo dos pnictídeos leva em consideração a existência de dois pequenos pockets circulares conectados por um vetor de nesting $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ na ZB e inclui interações do tipo intraorbital e interorbital. Esse modelo, para temperatura $T = 0$ e potencial químico constante $\mu = E_F$, é descrito pela ação $S = S_0 + S_{int}$, onde S_0 é o termo quadrático e S_{int} é o termo de interação dado por:

$$\begin{aligned}
S_{int} = & U_1^{(0)} \sum \bar{c}_{\mathbf{p}_3\sigma} \bar{f}_{\mathbf{p}_4\sigma'} f_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + U_2^{(0)} \sum \bar{f}_{\mathbf{p}_3\sigma} \bar{c}_{\mathbf{p}_4\sigma'} f_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma} \\
& + \frac{U_3^{(0)}}{2} \sum [\bar{f}_{\mathbf{p}_3\sigma} \bar{f}_{\mathbf{p}_4\sigma'} c_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma} + \bar{c}_{\mathbf{p}_1\sigma'} \bar{c}_{\mathbf{p}_2\sigma} f_{\mathbf{p}_4\sigma} f_{\mathbf{p}_3\sigma'}] \\
& + \frac{U_4^{(0)}}{2} \sum [\bar{f}_{\mathbf{p}_3\sigma} \bar{f}_{\mathbf{p}_4\sigma'} f_{\mathbf{p}_2\sigma'} f_{\mathbf{p}_1\sigma} + \bar{c}_{\mathbf{p}_3\sigma} \bar{c}_{\mathbf{p}_4\sigma'} c_{\mathbf{p}_2\sigma'} c_{\mathbf{p}_1\sigma}].
\end{aligned} \tag{1}$$

Na expressão acima, os operadores $\bar{c}_{\mathbf{p}\sigma}$ e $c_{\mathbf{p}\sigma}$ são, respectivamente, os campos de Grassmann de criação e aniquilação para férmions (buracos) com spin σ e momento próximo a $\mathbf{k} = (0, 0)$; $\bar{f}_{\mathbf{p}\sigma}$ e $f_{\mathbf{p}\sigma}$ são os campos de Grassmann de criação e aniquilação de férmions (elétrons) com spin σ e momento próximo ao vetor de nesting \mathbf{Q} e $U_i^{(0)}$ ($i = 1, \dots, 4$) são as constantes de acoplamento *bare* do modelo. A ação S acima define a nossa teoria quântica de campos bare que deve ser regularizada, restringindo

as energias para $|\omega| \leq \Lambda_0$.

Como o raio dos pockets de buracos e elétrons são pequenos quando comparados com a largura de banda W ($= 2\Lambda_0$), de acordo com as medidas efetuadas por ARPES, podemos nos concentrar aqui apenas com o regime físico do modelo de duas bandas onde as energias são maiores que a energia de Fermi E_F . Desta maneira, a contribuição não analítica da auto-energia até dois loops é dada por $\Sigma(k = k_F, i\omega) = (1/4)[N(\epsilon)U_3^{(0)}]^2 i\omega \ln [W/(2E_F + i\omega)]$, onde k_F é o raio de Fermi dos pockets de buracos e elétrons e $N(\epsilon) = m/2\pi$ é a densidade de estados de um gás de Fermi bidimensional.

Para contornar o problema das divergências logarítmicas e não analiticidades que estão presentes no limite de baixa energia do presente modelo, a estratégia do método de GR da teoria quântica de campos consiste em reescrever as quantidades bare não observadas do modelo microscópico, definidas pela Eq. (1), em termos de parâmetros renormalizados, observados experimentalmente, mais contra-termos apropriados. Devemos, ainda, reescrever os campos fermiônicos em termos de campos também renormalizados⁹⁻¹¹. Sendo assim, utilizamos as seguintes definições: $c_{\mathbf{p}\sigma} = Z^{1/2}c_{\mathbf{p}\sigma}^R$, $f_{\mathbf{p}\sigma} = Z^{1/2}f_{\mathbf{p}\sigma}^R$ e $U_i^{(0)} = N^{-1}(\epsilon)Z^{-2}(u_i + \Delta u_i)$, onde $Z = (1 - \partial\Sigma(i\omega)/\partial(i\omega)|_{\omega=0})^{-1}$ é o peso da quasi-partícula, $c_{\mathbf{p}\sigma}^R$ e $f_{\mathbf{p}\sigma}^R$ representam os campos fermiônicos renormalizados, u_i ($i = 1, \dots, 4$) são as correspondentes constantes de acoplamento renormalizadas adimensionais do modelo e Δu_i correspondem aos contra-termos que devem ser calculados ordem por ordem na teoria de perturbação.

III. RESULTADOS

Podemos ajustar agora os contra-termos Δu_i de tal forma que todas as divergências nas expansões em série são canceladas. O método de GR nos permite obter as seguintes equações até dois loops para os parâmetros renormalizados:

$$\dot{u}_1 = u_1^2 + u_3^2 + (u_1 - u_2 - u_4)u_3^2 - 2u_4(u_1^2 - u_1u_2 + u_2^2), \quad (2)$$

$$\dot{u}_2 = 2(u_1 - u_2)(u_2 + u_2u_4) - 2u_2u_3^2, \quad (3)$$

$$\dot{u}_3 = 2u_3(2u_1 - u_2 - u_4) - u_3^3, \quad (4)$$

$$\dot{u}_4 = -u_3^2 - u_4^2 - 2u_1(u_1^2 - u_1u_2 + u_2^2) - 2u_3u_2^2 + (2u_1 + 3u_2 - 2u_3 - u_4)u_3^2, \quad (5)$$

$$\dot{Z} = -\frac{u_3^2}{2}Z, \quad (6)$$

onde as derivadas são tomadas com respeito a $\xi = (1/2) \ln(W/\omega)$ e a obtenção das equações acima envolve o cálculo de 92 diagramas de Feynman.

Como primeiro passo analisamos a solução numérica das equações para os acoplamentos renormalizados mostradas acima como uma função de ω . Isso foi feito através do método de Runge-Kutta de quarta ordem. Verificamos que no caso do cálculo de GR de dois loops apresentado neste trabalho, há apenas um único ponto fixo definido por $(u_2/u_1) \rightarrow 0$, $(u_3/u_1) \rightarrow 0$ e $u_4 = -u_1$. Aqui o acoplamento u_3 ainda diverge no limite de baixa energia, mas isso acontece a uma taxa muito mais lenta que no cálculo de um loop. Como consequência, os processos de interação definidos pelos acoplamentos u_1 e u_4 (interações interbanda e intrabanda, respectivamente) superam em algum momento a interação interbanda de par de troca u_3 . Um outro resultado interessante é que o peso de quasi-partícula Z renormaliza muito fracamente neste regime, permanecendo próximo do valor inicial e, portanto, indicando um comportamento do tipo líquido de Fermi para o modelo.

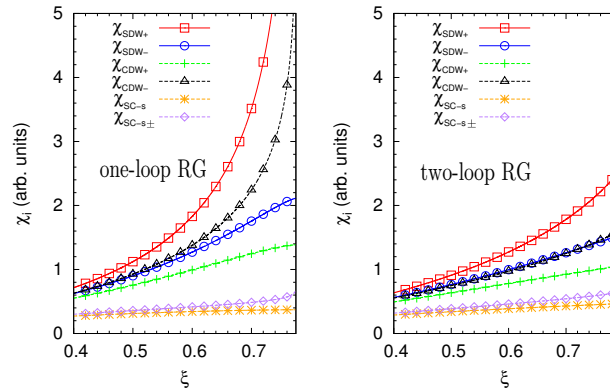


Figura 1: Susceptibilidades para o modelo de duas bandas usado para descrever supercondutores baseados em ferro obtidas pelo método de GR de um loop (figura à esquerda) e dois loops (figura à direita). Em ambos os casos, utilizamos as condições iniciais $u_1^{(0)} = u_4^{(0)} = 1$ e $u_2^{(0)} = u_3^{(0)} = 0.1$.

Para verificar se as interações interbanda u_1 e intrabanda u_4 são capazes de induzir instabilidades supercondutoras ($SC - s^\pm$ e $SC - s$) e ondas de densidade em carga ($CDW\pm$) e spin ($SDW\pm$) no modelo, é importante calcular as susceptibilidades $\chi_i(\xi)$ ($i = SC - s^\pm, SC - s, CDW\pm$ e $SDW\pm$) correspondentes¹². Na Figura 1, mostramos, simultaneamente, os resultados obtidos pelo método de GR de um e dois loops para essas susceptibilidades. Como é possível notar, os seus valores, em função da variável de renormalização ξ , não mudam muito entre esses dois esquemas,

embora quantitativamente observa-se que os resultados encontrados pelo método de GR de dois loops divergem mais lentamente pelo menos para a maioria das susceptibilidades.

IV. CONCLUSÃO

Mostramos que a inclusão de flutuações quânticas de dois loops (auto-energia e diagramas de terceira ordem para as funções de correlação $\Gamma^{(4)}$) tem como principal efeito mudar a estrutura do ponto fixo do modelo de duas bandas daquele encontrado na literatura. Um outro resultado importante obtido aqui é que as interações mais importantes nesse modelo são uma intrabanda atrativa e uma interbanda repulsiva, o que aponta em uma outra direção para o mecanismo responsável pelo surgimento da fase magnética e supercondutora nos pnictídeos baseados em ferro. Por último, efetuamos o cálculo das susceptibilidades correspondentes às diversas ordens presentes nesses materiais. Verificamos que essas susceptibilidades mantêm a mesma ordem quando comparados os resultados dos métodos de GR de um e dois loops, embora nesse último esquema os valores para as mesmas divergem mais lentamente.

-
- ¹ Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, and H. Hosono, *J. Am. Chem. Soc.* **130**, 3296 (2008).
 - ² H. Takahashi, K. Igawa, K. Arii, Y. Kamihara, M. Hirano, and H. Hosono, *Nature* **453**, 376 (2008).
 - ³ J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev. B* **108** 1175 (1957).
 - ⁴ L. Boeri, O. V. Dolgov, and A. A. Golubov, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 026402 (2008).
 - ⁵ D. N. Basov and A. V. Chubukov, *Nature Physics* **7**, 271 (2011).
 - ⁶ R. Shankar, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 129 (1994).
 - ⁷ A. V. Chubukov, D. V. Efremov and I. Eremin, *Phys. Rev. B* **78**, 134512 (2008).
 - ⁸ Vanuildo S. de Carvalho and Hermann Freire, arXiv:1105.4897 (2011).
 - ⁹ H. Freire, E. Corrêa, and A. Ferraz, *Phys. Rev. B* **71**, 165113 (2005).
 - ¹⁰ H. Freire, E. Corrêa, and A. Ferraz, *Phys. Rev. B* **78**, 125114 (2008).
 - ¹¹ E. Corrêa, H. Freire, and A. Ferraz, *Phys. Rev. B* **78**, 195108 (2008).
 - ¹² A. T. Zheleznyak, V. M. Yakovenko, and I. E. Dzyaloshinskii, *Phys. Rev. B* **55**, 3200 (1997).