



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**WEVERTON LUCAS DA SILVA ROSENDO**

**ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA DO MODELO DE HUBBARD COM ALCANCE  
INFINITO EM REDES HIPERCÚBICAS**

Recife  
2021

WEVERTON LUCAS DA SILVA ROSENDO

**ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA DO MODELO DE HUBBARD COM ALCANCE  
INFINITO EM REDES HIPERCÚBICAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

**Área de Concentração:** Física Teórica e Computacional.

**Orientador:** Prof. Dr. Maurício Domingues Coutinho Filho.

Recife

2021

Catálogo na fonte  
Bibliotecária: Mônica Uchôa, CRB4-1010

R813e Rosendo, Weverton Lucas da Silva.  
Estatística fracionária do modelo de Hubbard com alcance infinito em  
redes hipercúbicas / Weverton Lucas da Silva Rosendo. – 2021.  
57 f.: il., fig., tab.

Orientador: Maurício Domingues Coutinho Filho.  
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN.  
Programa de Pós-graduação em Física. Recife, 2021.  
Inclui referências e apêndice.

1. Modelo de Hubbard. 2. Estatística fracionária de exclusão. 3.  
Transição metal-isolante. 4. Redes hipercúbicas s. I. Coutinho Filho,  
Maurício Domingues. (Orientador). II. Título.

530 CDD (23. ed.) UFPE- CCEN 2021 - 176

**WEVERTON LUCAS DA SILVA ROSENDO**

**ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA DO MODELO DE HUBBARD COM  
ALCANCE INFINITO EM REDES HIPERCÚBICAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Física.

Aprovada em: 25/10/2021.

**BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho  
Orientador  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Renê Rodrigues Montenegro Filho  
Examinador Interno  
Universidade Federal de Pernambuco

---

Prof. Adauto José Ferreira de Souza  
Examinador Externo  
Universidade Federal Rural de Pernambuco

À Glória de Deus

## AGRADECIMENTOS

Ao Eterno e Soberano Deus, Rei de todo o universo, cujas misericórdias são a razão da conclusão deste trabalho.

Aos meus muito amados pais, Judite Maria e Ednaldo Antônio, pelo incentivo que me deram ao longo da minha vida acadêmica e por todos os ensinamentos, os quais transcendem os conhecimentos adquiridos na academia.

Às minhas queridas irmãs, Karina e Wéllida, pelos momentos compartilhados em família. Em especial a Wéllida, por sua disposição de ajudar-me nos momentos em que mais precisei.

Aos meus avós, Maria da Glória, José Antônio e Antônio Rosendo, pelo carinho, cuidado e por fazerem o possível para ajudar em todos os momentos.

À minha querida e amada namorada, Yhanka Kerollayne, por todo amor, apoio e carinho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Maurício Domingues Coutinho Filho, por sua paciência, disposição e seu incentivo inspirador na pesquisa; por contribuir com a minha formação de forma sem igual com sua vasta experiência e conhecimento.

Ao muito estimado professor, Dr. Renê Montenegro Filho, por seu incentivo desde o início desta etapa de minha formação; por sua amizade e por estar sempre pronto a ajudar de diversas formas nos momentos de dificuldade.

Aos queridos professores, Dr. Antônio Murilo e Dr. Leonardo Cabral, pelas disciplinas ministradas com nada menos que excelência, mesmo enfrentando as dificuldades da pandemia, e por serem tão solícitos comigo contribuindo de forma ímpar com a minha formação.

À minha querida amiga, Dra. Edite Consuêlo da Silva Santos, por sua constante disposição de ajudar-me nas dificuldades acadêmicas e extra-acadêmicas, inclusive na edição deste trabalho.

À minha querida amiga Kymberli Souza, por toda a sua disposição de ajudar-me e sua solicitude em momentos de necessidade.

Ao mais que estimado amigo Djair Batista, por seu empenho em ajudar-me sempre que precisei com questões de programação ou extra-acadêmicas.

Ao querido amigo e colega de pesquisa Gabriel Fernandes, pelas discussões mais que proveitosas sobre o tema deste trabalho; por estar disposto a me ajudar com as dificuldades acadêmicas enfrentadas no decorrer do Mestrado.

Aos queridos amigos do Departamento de Física da UFPE: Alisson Douglas, Arthur César, Felipe Assis, Jhenifer Gonsalves, Mateus Motta, Emanuel Vieira e Ériton Araújo; por estarem sempre dispostos a ajudar e por compartilharem das dificuldades enfrentadas na vida acadêmica.

A todos os amigos e familiares, de perto e de longe, que contribuíram das mais diversas formas para que eu concluísse mais esta etapa da minha formação.

À Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco (FACEPE) e ao Governo do Estado de Pernambuco pelo suporte financeiro.

## RESUMO

A Estatística fracionária de exclusão (EFE) tem chamado muita atenção ao longo dos anos, particularmente em fenômenos manifestados no domínio de sistemas com elétrons fortemente correlacionados, como supercondutividade de alta  $T_c$ , férmions pesados, transição metal-isolante (TMI) e efeito Hall quântico fracionário. Um modelo de destaque usado para descrever sistemas de elétrons correlacionados é o Modelo de Hubbard, que pode exibir uma transição de fase metal-isolante. Além disso, vários fenômenos físicos de interesse, como fases magnéticas, ocorrem para acoplamento coulombiano intermediário ou no limite de forte acoplamento. Recentemente, uma descrição bastante detalhada do modelo de Hubbard com interação de alcance infinito foi apresentada. Neste trabalho, foi mostrado que esse modelo é equivalente a um gás ideal de três espécies de partículas, as quais obedecem a uma EFE, e exibe uma TMI. A estatística fracionária se manifesta em várias quantidades termodinâmicas conforme nos aproximamos do ponto quântico crítico (PQC). Além disso, usando a densidade de estados na aproximação de *tight-binding* e a análise de escala próximo ao PQC, o comportamento da energia livre do Grande Potencial como uma função da dimensão da rede Hipercúbica  $d$  foi investigado em detalhes. Mais ainda, verificamos que, para valores pares da dimensão da rede, o Grande Potencial, geralmente expresso por uma série de potências em termos de funções Lerch, é agora reduzido a funções polinomiais simples, com convexidade e monotonicidade específicas.

**Palavras-chave:** modelo de Hubbard; estatística fracionária de exclusão; transição metal-isolante; redes hipercúbicas.

## ABSTRACT

Fractional exclusion statistics (FES) has driven much attention over the years, particularly in phenomena manifested in the realm of strongly correlated electron systems, such as high- $T_c$  superconductivity, heavy fermions, metal-insulator transition (MIT), and fractional quantum Hall effect. A most important model used to describe correlated electron systems is the Hubbard Model, which may display a metal-insulating phase transition. In addition, several physical phenomena of interest, such as magnetic phases, take place at intermediate or strong Coulomb Coupling limit. More recently, a quite detailed description of the Hubbard model with infinite-range interaction has been presented. In this work, it was shown that this model is equivalent to an ideal gas of three species of particles obeying FES and presenting a MIT. The fractional statistics manifests itself on several thermodynamic quantities as we get close to the Quantum Critical Point (QCP). Moreover, using the density of states in the tight-binding approximation, and following the scaling analysis near the QCP, we investigate, in quite detail, the Grand Potential free energy behavior as a function of the hypercubic lattice dimension  $d$ . Most importantly, we verify that, for even values of the lattice dimension, the Grand Potential generally expressed by a power series in terms of Lerch functions, is now reduced to simple polynomial functions, in which case we have studied their convexity and monotonicity.

**Keywords:** Hubbard model; fractional exclusion statistics; metal-insulator transition; hypercubic lattice.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – (A) Condutividade em função da temperatura e da pressão em $V_2O_3$ . (B) Diagrama de fase para óxido de vanádio. (C) Diagrama de fase global do sistema de óxido de vanádio. . . . .	13
Figura 2 – Transição de fase de Mott segundo o modelo Hubbard. . . . .	15
Figura 3 – Densidade de estados de $N(\omega)$ do Isolante de Mott-Hubbard em dimensão infinita com $U = 6$ . . . . .	16
Figura 4 – Diagrama de fase do modelo de Ising para um campo transversal com $d > 1$ . Nesse diagrama, o ponto fixo na temperatura zero está completamente instável. Em $ g  = 0$ , temos a trajetória quântica crítica enquanto QCP denota o ponto quântico crítico e SC, o acoplamento forte. . . . .	18
Figura 5 – Gráficos das distribuições de Boltzmann, Bose-Einstein, Fermi-Dirac e o caso de Quase-Partículas com $g = 1/2$ . . . . .	27
Figura 6 – (a) Diagrama de Fase para o estado fundamental de um sistema de elétrons interagentes unidimensional. (b) Diagrama de fase para qualquer dimensão $d$ . . . . .	37
Figura 7 – (a) Potencial químico em função de $\rho$ para $d = 1$ em uma temperatura de $T = 0$ . (b) Descontinuidade do potencial químico para $\rho = 1$ , denotando uma transição metal-isolante . . . . .	38
Figura 8 – Energia de Fermi unidimensional em função de $\rho$ . . . . .	39
Figura 9 – Diagrama de fase em função de $g$ e $T$ , onde o ponto $T = \mu = g = 0$ indica o PQC da transição metal-isolante. . . . .	41
Figura 10 – Parte singular da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para $d = 2$ . . . . .	46
Figura 11 – Parte singular da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para $d = 4$ . . . . .	47
Figura 12 – Função da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para $d = 6$ . . . . .	48
Figura 13 – Função da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para $d = 8$ . . . . .	49
Figura 14 – Função da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para $d = 10$ . . . . .	50

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>11</b>
1.1	Transição Metal-Isolante de Mott	13
1.2	O Modelo de Hubbard	14
1.3	Propriedades Quânticas na Criticalidade	16
1.4	Estatística Fracionária de Haldane	18
1.5	Nossa Pesquisa	21
<b>2</b>	<b>MECÂNICA ESTATÍSTICA DE PARTÍCULAS COM EXCLUSÃO FRACIONÁRIA</b>	<b>22</b>
2.1	A função de partição no limite $d \rightarrow \infty$	22
2.1.1	<i>Partícula Confinada em uma Caixa <math>D</math> Dimensional com Aresta de Comprimento <math>L</math></i>	23
2.1.2	<i>Sistema Harmonicamente Confinado a uma Frequência <math>\omega</math> em um Espaço <math>D</math> Dimensional</i>	24
2.2	Função de Distribuição para um Gás Ideal de FES	25
2.3	Propriedades de um Gás Homogêneo	27
2.4	Distribuição Estatística para o Gás Ideal Generalizado	29
<b>3</b>	<b>O MODELO DE HUBBARD COM INTERAÇÃO DE ALCANCE INFINITO</b>	<b>33</b>
3.1	O Modelo e a Representação de Exclusão	33
3.2	Propriedades do Estado Fundamental	36
3.3	Análise de Escala do Grande Potencial $\Omega$	39
<b>4</b>	<b>EXPANSÃO DA ENERGIA LIVRE GRANDE CANÔNICA NO REGIME QUÂNTICO</b>	<b>44</b>
4.1	Coefficientes da Energia Livre em Redes Hipercúbicas	44
4.2	Resultados e Discussão	46
4.2.1	<i>Análise da Dimensão <math>d = 2</math></i>	46
4.2.2	<i>Análise da Dimensão <math>d = 4</math></i>	47
4.2.3	<i>Análise da Dimensão <math>d = 6</math></i>	48
4.2.4	<i>Análise da Dimensão <math>d = 8</math></i>	49
4.2.5	<i>Análise da Dimensão <math>d = 10</math></i>	49
4.2.6	<i>Análise Qualitativa das Dimensões ímpares <math>d = 1</math> e <math>d = 3</math></i>	50
<b>5</b>	<b>CONCLUSÃO</b>	<b>52</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b>	<b>54</b>
	<b>APÊNDICE A - INTEGRAIS DOS COEFICIENTES DE EXPANSÃO</b>	<b>56</b>

# 1 INTRODUÇÃO

No início do século XX, houve um grande interesse pela compreensão dos fenômenos físicos em materiais. Paul Drude foi o primeiro físico a elaborar uma descrição teórica a respeito do comportamento dos elétrons em metais [1]. A teoria desenvolvida por Drude assume que os elétrons podem se mover livremente na banda de condução dos metais sem sentir os efeitos de outros elétrons.

Ao longo dos anos, a teoria de elétrons livres passou a ser mais explorada e aprimorada, mas apenas a partir das contribuições de Lev Landau, com a formulação da sua Teoria do Líquido de Fermi, as bases teóricas da teoria foram mais bem estabelecidas [2]. Grosso modo, a teoria desenvolvida por Landau mapeia excitações elementares de sistemas eletrônicos interagentes em excitações não interagentes, através da introdução do conceito de massa efetiva. Isso possibilitou a descrição do comportamento de vários materiais. No entanto, esta teoria apresenta falhas na descrição dos sistemas eletrônicos fortemente correlacionados, particularmente em baixa dimensionalidade ( $d < 3$ ). Uma descrição alternativa desses sistemas teve início com os trabalhos de N. F. Mott no contexto das transições de fase metal-isolante [3, 4]. Esta é uma transição de fase quântica, que vem acompanhada por uma mudança no estado fundamental do sistema. Mott argumentou que o vínculo, ou correlação eletrônica induzida pela interação coulombiana, é fundamental para precaver a condução elétrica nos materiais de banda muito estreita. Neste caso temos a competição entre a largura da banda, que mede o grau de itinerância dos elétrons, e a repulsão coulombiana que dificulta a dupla ocupação em um mesmo sítio da rede, como ocorre nos metais de Transição. Em 1d, entretanto, Lieb e Wu (1968) provaram um teorema, que se verifica em certas condições muito abrangentes: Na presença de uma interação eletrônica repulsiva de curto alcance, independente de sua magnitude (obviamente não nula), o sistema é sempre um isolante [5].

Por outro lado, P. W. Anderson percebeu que a transição metal-isolante poderia ocorrer também em sistemas desordenados [6]. Este tipo de sistema é caracterizado pela possibilidade de uma banda de energia ou uma parte dela ser composta por funções de onda que podem ser localizadas espacialmente. Anderson observou que, variando a "força" de desordem ou a densidade de estados, o sistema poderia transitar de um estado isolante para um estado metálico (e vice-versa). Assim, pode-se perceber que a transição Metal-Isolante pode ocorrer tanto pela presença significativa de desordem no sistema, quanto pelas interações eletrônicas suficientemente fortes.

Em 1963, com as contribuições de J. Hubbard, foi possível obter-se uma descrição da transição de Mott a partir do limite isolante, utilizando-se soluções aproximadas desta modelagem [7, 8, 9]. Esta abordagem baseou-se essencialmente no limite atômico, onde a interação elétron-elétron é bastante superior à energia cinética dos elétrons. Neste procedimento, o sistema é dito um isolante de Mott se o gap, que separa as bandas de Hubbard, for maior que um valor crítico da interação; caso contrário, o sistema se metaliza. Este fenômeno é conhecido como a transição metal-isolante de Mott ou Mott-Hubbard. Outra teoria bastante conhecida para descrever a transição de Mott foi proposta por Brinkman e Rice [10], a qual tem como base o método variacional proposto por Gutzwiller [11] e contém uma boa previsão para o estado metálico.

Entretanto, o modelo de Hubbard passou a ter uma presença vertiginosa na literatura após o advento da observação por Bednorz e Miller, em 1986, da supercondutividade em altas temperaturas no *BaLaCuO* [12], com mecanismo eletrônico subjacente ao emparelhamento dos pares de elétrons, contrariando previsões da teoria BCS [13], cujo mecanismo para a supercondutividade evoca a interação elétron-fônon (pares de Cooper) [14], com forte limitação imposta pela temperatura de Debye. O comportamento, aparentemente anômalo, foi também observado em outros lantanídeos dopados com óxido de cobre. Um ano depois, em seu artigo na *Science*, P. W. Anderson sugeriu que o modelo apropriado para descrever este novo comportamento dos supercondutores seria o modelo de Hubbard com forte repulsão coulombiana  $U$  [15]. De fato, esta modelagem, puramente eletrônica, propõe o modelo **t-J**, onde os estados com dupla ocupação eletrônica em sítios da rede, presentes no modelo usual de Hubbard, são excluídos. Este modelo vem tendo um papel de destaque na descrição das fases magnéticas e supercondutoras observadas em uma grande variedade de materiais.

No final do último século, houve um grande progresso na compreensão da transição metal-isolante. Gebhard e Ruckenstein [16] propuseram um modelo que consiste em uma cadeia de Hubbard com Hopping de longo alcance e exibe uma transição de fase metal-isolante quando o parâmetro de interação  $U$  torna-se igual à largura da banda  $\Delta$ . Além disso, no limite de dimensões infinitas, o trabalho de Metzner e Vollhardt [17] evidenciou, numa versão limite do modelo de Hubbard, que a solução de Brinkman e Rice é exata. Por outro lado, A. George *et al.* [18], usaram o modelo de Hubbard para dimensões infinitas e demonstraram que a fase metálica é um líquido de Fermi renormalizado. Todavia, este comportamento não foi encontrado em outros sistemas de elétrons fortemente correlacionados, especialmente os supercondutores de altas temperaturas, High- $T_c$ , e o *Fractional Quantum hall*. Tais sistemas apresentam propriedades singulares diante das teorias efetivas de baixas energias e têm sido chamados ao longo dos anos de *non-Fermi liquids*. Os *non-Fermi liquids* possuem excitações de quase-partículas com comportamento descrito por uma estatística fracionária que interpola os bósons e férmions. Em duas dimensões, essas quase-partículas podem ser descritas por uma estrutura de grupo associada à troca de partículas idênticas, denominadas *anyons*, e popularizadas na área de supercondutividade. [19].

Em 1991, um novo conceito de Estatística Fracionária desenvolvido por Haldane [20], propõe uma generalização do princípio de Pauli associada a um tipo de partícula denominada *exclusons*. Essa nova teoria tem descrito o comportamento de muitos sistemas classificados como *non-Fermi liquids* como: *Fractional Quantum Hall Effects* [21, 22], propriedades de baixa temperatura em *Luttinger Liquids* [23], modelos analiticamente solúveis em alta dimensão [24] e Isolantes de Mott [25].

Ao longo dos anos, tem ficado evidente a importância da estatística fracionária no tratamento dos sistemas fortemente correlacionados. De fato, diversas abordagens foram desenvolvidas em sistemas de muitos-corpos utilizando-se a estatística fracionária para descrever as propriedades termodinâmicas do modelo de Hubbard com interação repulsiva de alcance infinito, o qual exibe uma transição de fase metal-isolante [26]. Outra contribuição utilizando estatística fracionária, em parceria com a teoria de escala quântica, diz respeito às cadeias de Hubbard, inclusive para sistemas com interação tipo *Bond-Charge* e o estado de Spin-Incoerente no regime do líquido de Luttinger [27, 28].

Nosso trabalho tem por objetivo analisar os pontos críticos quânticos utilizando a teoria de escala quântica e o conceito de estatística fracionária no contexto do modelo de Hubbard com alcance infinito em redes hipercúbicas. No presente capítulo, vamos

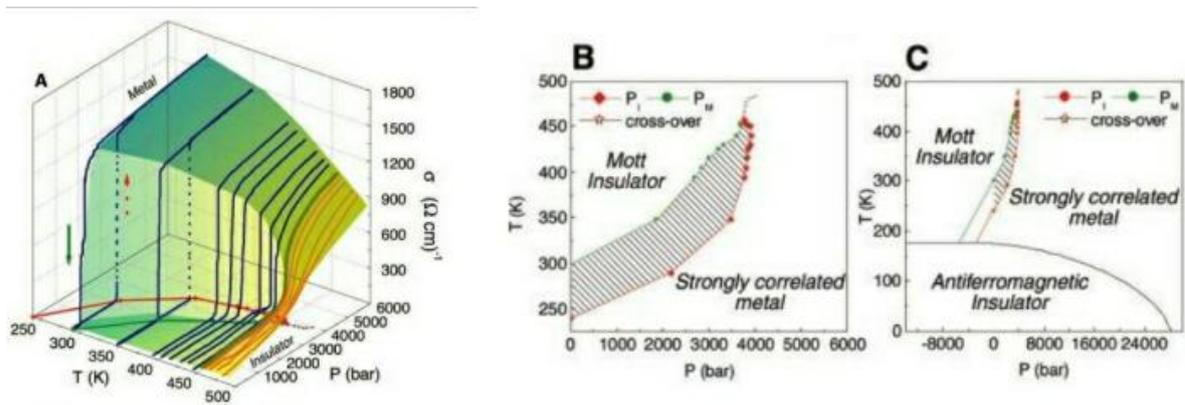
abordar alguns princípios teóricos para embasar nossa discussão.

## 1.1 Transição Metal-Isolante de Mott

Como já enfatizado, um sistema eletrônico é denominado um isolante de Mott, quando a lacuna que ocorre no espectro de energia de uma partícula é causado pela repulsão eletrônica. Neste caso, parâmetros físicos externos como campo magnético, temperatura e pressão podem ser variados e controlados de forma adequada [29].

Embora não exista uma teoria universal para uma transição metal-isolante, observa-se que a condutividade pode variar de forma descontínua ou contínua na transição. Esses fenômenos são observados com frequência em sistemas com desordem, causada por impurezas, defeitos e outros tipos de imperfeições. Os compostos  $V_2O_3$  e  $VO_2$  podem apresentar os dois tipos de transição mencionados, como mostrado na Fig.1 [30].

**Figura 1** – (A) Condutividade em função da temperatura e da pressão em  $V_2O_3$ . (B) Diagrama de fase para óxido de vanádio. (C) Diagrama de fase global do sistema de óxido de vanádio.



Fonte : Presente da Ref. [31]

Os gráficos explicitam como os expoentes críticos  $\delta$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  podem ser deduzidos a partir do comportamento da condutividade e também extraem informações de suas derivadas com respeito à pressão. Na figura (1A), abaixo da temperatura crítica  $T_c = 457.5$  K, observa-se um comportamento descontínuo com respeito à condutividade, o que mostra uma transição de fase de primeira ordem. No entanto, acima desta temperatura crítica, são observadas curvas contínuas, o que caracteriza uma transição de fase de segunda ordem. Com respeito às figuras (1B) e (1C), nota-se um intervalo de pressão entre  $P_M$  e  $P_I$  que separa o estado metálico e o estado isolante. A região que mostra a coexistência entre os estados fica entre o intervalo  $P_I < P < P_M$  e termina na pressão crítica  $P_c \cong 3738$  bar.

A região de coexistência exhibe o fenômeno de histerese; nessa região, as linhas mencionadas anteriormente são conhecidas como linhas espinodais ( $P_I(T)$  e  $P_M(T)$ ). O sistema pode ser iniciado com uma concentração  $x = 0.011$ ,  $T = 350$  K e  $P = 1$  atm, o que caracteriza um estado isolante; a pressão então vai sendo elevada até que atinja um valor crítico  $P_M(T)$ . Neste ponto, observa-se um aumento abrupto na condutividade, atingindo o estado metálico. Pode-se ainda observar a transição partindo do estado metálico caracterizado por  $x = 0.011$ ,  $T = 350$  K e  $P = 5000$  atm. Nesse caso, a pressão diminui até atingir um valor crítico  $P_I(T)$ , demonstrando uma redução abrupta na condutividade,

atingindo o estado isolante. A figura mostra ainda que, abaixo da temperatura crítica, o caminho percorrido na transição do estado metálico para o estado isolante é diferente do caminho percorrido do estado isolante para o estado metálico. Apenas um dos estados presentes na região de coexistência é o estado de equilíbrio térmico; o outro é metaestável.

Há ainda duas formas distintas de observarmos uma transição metal-isolante. A primeira é variando a pressão do sistema, como na Figura 1; a segunda se dá por meio da redução da razão entre a interação elétron-elétron e a energia cinética, variando-se a pressão do sistema, o que será melhor ilustrado na próxima seção através do modelo de Hubbard.

## 1.2 O Modelo de Hubbard

O modelo de Hubbard representa uma das maneiras mais simples de se obter informações a respeito da interação eletrônica, podendo explicar transições de fases isolantes, magnéticas ou novos efeitos supercondutores em sólidos. O modelo foi inicialmente desenvolvido para descrever o comportamento dos metais de transição ( $FeO$ ,  $NiO$ ,  $CoO$ ) e compostos antiferromagnéticos. Apesar de sua aparente simplicidade, o modelo de Hubbard possui aplicações em diversos sistemas como *heavy fermions* e supercondutores de alta temperatura crítica. O modelo consegue obter diversas informações relevantes, extraindo as propriedades mais peculiares da física do estado sólido exibida por esses sistemas.

Este modelo tem sido estudado por meio de uma grande variedade de técnicas analíticas, indo desde a aproximação de campo médio até métodos de teoria de campos que se utiliza de diagramas de Feynman e/ou integrais de trajetória. O modelo também tem sido bastante explorado através de métodos numéricos, como a diagonalização exata/Lanczos e o método de Monte Carlo quântico.

O modelo de Hubbard pode ser escrito em termos dos operadores de criação e aniquilação fermiônicos. Esses operadores são bastante distintos dos operadores usuais  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$  para o oscilador harmônico na mecânica quântica elementar. Os operadores do modelo de Hubbard não são descritos em termos dos operadores de posição e momento, como é o caso do oscilador harmônico. Em oposição ao conceito de ter-se apenas um operador de criação e aniquilação, o modelo traz um conjunto de operadores que são discriminados pelos índices de sítio  $\mathbf{j}$  e  $\mathbf{i}$  e pelo índice de *spin*  $\sigma$ . Dessa maneira, escrevemos  $\hat{c}_{j\sigma}^\dagger$  e  $\hat{c}_{j\sigma}$ , onde o índice  $j$  rotula os sítios a serem ocupados, enquanto o índice  $\sigma$  descreve se o elétron possui *spin up* ou *spin down*. Como esses operadores têm por propósito descrever férmions, eles possuem algumas relações de anticomutação como consequência imediata do Princípio de Pauli.

$$\{\hat{c}_{j\sigma}^\dagger, \hat{c}_{i\sigma'}\} = \delta_{j,i}\delta_{\sigma,\sigma'} \quad (1.1)$$

$$\{\hat{c}_{j\sigma}^\dagger, \hat{c}_{i\sigma'}^\dagger\} = 0 \quad (1.2)$$

$$\{\hat{c}_{j\sigma}, \hat{c}_{i\sigma'}\} = 0 \quad (1.3)$$

Em um sólido, os elétrons estão relacionados por uma interação de Coulomb. No modelo de Hubbard de uma banda, a interação mais relevante é aquela entre dois elétrons

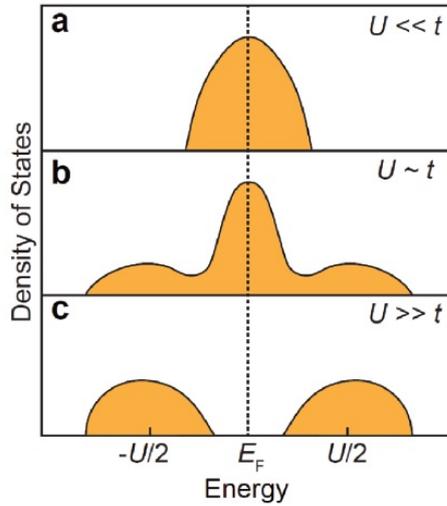
ocupando o mesmo sítio da rede. Então, a interação é descrita por um termo que é zero se não houver elétrons no átomo ou se o átomo possui apenas um elétron, e valor  $U$  se o átomo possui dois elétrons. A energia cinética compõe-se de uma expressão que permite que elétrons se movam de um sítio para outro sítio vizinho não ocupado. A escala de energia que governa o *hopping* de elétrons é  $t$  e será determinada pelo *overlap* das funções de onda de Wannier. Como as funções de onda decaem exponencialmente, só serão relevantes os *hoppings* entre os vizinhos mais próximos.

De maneira mais formal, a construção descreve  $\hat{c}_{j\sigma}^\dagger$  como o operador que cria elétrons com spin  $\sigma$ , localizado no sítio  $j$ . Por outro lado, o operador  $\hat{c}_{j\sigma}$  é o operador de aniquilação. Assim, podemos escrever o hamiltoniano de Hubbard com interação de repulsão como:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - \mu(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (1.4)$$

A descrição teórica de hamiltonianos como esse tem possibilitado uma compreensão do ponto de vista analítico com respeito à transição de fase de Mott, discutida na seção anterior. Nessa abordagem teórica da transição metal-isolante, podemos observar um gap de energia que caracteriza essa transição separando as bandas de excitações de Hubbard.

**Figura 2** – Transição de fase de Mott segundo o modelo Hubbard.

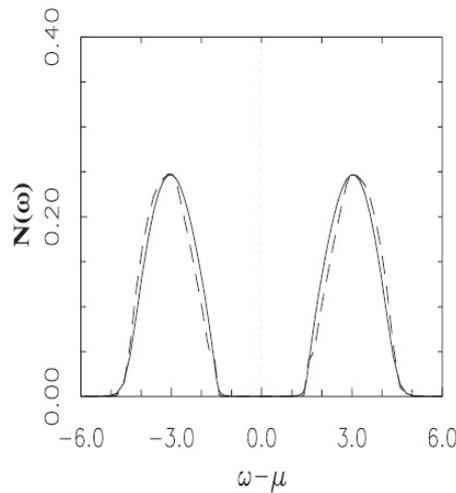


**Fonte :** Presente na Ref.[32]

A parte **a** da Figura 2 mostra o caso em que interação  $U$  é muito menor do que a energia cinética  $t$  gerada devido ao salto entre os elétrons. Na parte **b**, quando  $U$  é aproximadamente da ordem de  $t$ , a densidade de estado aumenta sua banda de energia, até ocorrer um *gap*, que caracteriza a fase isolante de Mott, para  $U$  muito maior que  $t$  exibida na parte **c**.

Além do ponto vista de soluções analíticas, essas transições têm sido estudadas para dimensão infinita através de metodologia numérica. Neste contexto, métodos como o Monte Carlo quântico têm se mostrado bastante efetivos nas descrições das propriedades quânticas desses sistemas.

**Figura 3** – Densidade de estados de  $N(\omega)$  do Isolante de Mott-Hubbard em dimensão infinita com  $U = 6$ .



**Fonte :** Presente na Ref.[33]

A Figura 3 representa a fase isolante do sistema, como na parte **c** da figura 2. Este gráfico é resultante da descrição do modelo de Hubbard via o método de Monte Carlo quântico, que não é solúvel analiticamente; o Modelo tem sido explorado para dimensões infinitas considerando fortes interações.

Assim, pode-se observar que, tanto do ponto de vista analítico quanto numérico, o modelo de Hubbard tem sido amplamente explorado. Isso devido à sua importância de aplicação em diversos fenômenos da matéria condensada.

### 1.3 Propriedades Quânticas na Criticalidade

As propriedades quânticas de um sistema emergem em complemento aos fenômenos críticos impulsionados pela temperatura, devido a uma competição entre os parâmetros fundamentais que governam o estado fundamental do sistema. Desta forma, por meio do princípio da incerteza, podemos inferir que energia e tempo estão acoplados juntamente com as flutuações do sistema. [34]

Os efeitos causados por pontos quânticos críticos (PQC) têm se tornado uma parte das mais relevante no estudo das propriedades quânticas de um sistema. A importância desses efeitos é observada nos PQC de diagramas de fase de sistemas com temperatura finita e até mesmo longe do PQC [35]. O diagrama é composto por uma *trajetória quântica crítica* que demonstra uma dependência da temperatura tanto na termodinâmica do sistema quanto nas propriedades de transporte governadas pelos expoentes quânticos críticos associados ao PQC. Essas propriedades - juntamente com os efeitos de *crossover* induzidos pela temperatura na região de criticalidade do diagrama de fase de um material, contém informações que podem ser adquiridas da descrição do PQC - o que explicita sua relevância no estudo de uma transição de fase quântica.

Nas transições de fase de segunda ordem, tanto em sistemas de temperatura finita quanto de temperatura nula, os expoentes críticos são descritos por leis de potências com comportamento singular (zeros ou divergências) no ponto crítico. Se denotamos  $g$  como a distância ao ponto crítico, as grandezas físicas tais como: a parte singular da energia

livre  $\Omega_s$ , o tempo crítico de relaxamento  $\tau$ , o comprimento de correlação  $\xi$ , o parâmetro de ordem de susceptibilidade  $\chi$  do sistema e o parâmetro de ordem  $m$ , onde  $H$  é o campo conjugado ao parâmetro de ordem, apresentam o seguinte comportamento quando  $g \rightarrow 0$  [36]:

$$\begin{aligned}\Omega_s &\propto |g|^{2-\alpha}, \\ \xi &\propto |g|^{-\nu}, \\ m &\propto |g|^\beta, \\ \chi &\propto |g|^{-\gamma}, \\ \tau &\propto |g|^{-\nu z} \\ \text{e } m(H, g = 0) &\propto H^{\frac{1}{\delta}}\end{aligned}\tag{1.5}$$

Essas equações definem os expoentes críticos  $\alpha$ ,  $\nu$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  e o expoente dinâmico  $z$ . Quando  $g = 0$ , o comprimento de correlação torna-se infinito; nesse regime, a função de correlação  $G(r)$  decai com uma lei de potência. Para o caso de uma transição de fase quântica, a definição de um expoente  $\eta$  presente na lei de potência da função de correlação envolve o expoente dinâmico  $z$  e a dimensão  $d$  do sistema, conforme abaixo:

$$G(r) \propto \frac{1}{r^{d+z-2+\eta}}\tag{1.6}$$

Esses expoentes não são independentes e possuem relações de escalas relevantes:

$$\begin{aligned}\alpha + 2\beta + \gamma &= 2, \\ \beta + \gamma &= \beta\delta, \\ \nu(2 - \eta) &= \gamma \\ \text{e } 2 - \alpha &= \nu d\end{aligned}\tag{1.7}$$

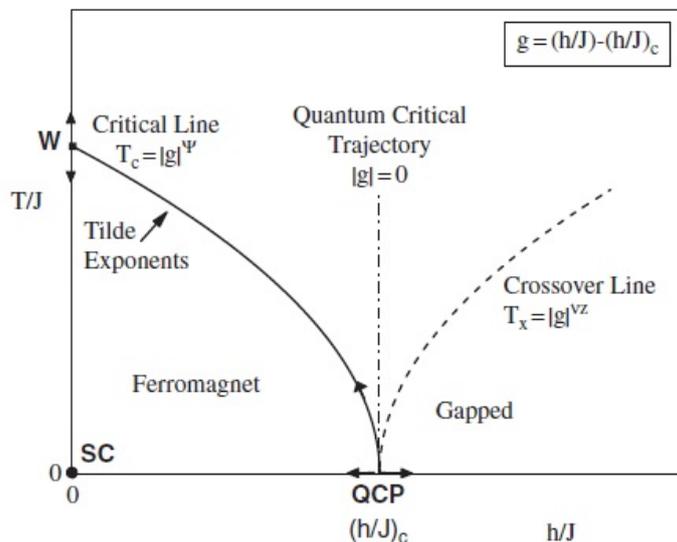
A análise desses expoentes tem sido fundamental para o entendimento de propriedades físicas subjacentes aos fenômenos críticos de sistemas quânticos. Assim, torna-se necessário acompanharmos a variação desses expoentes em função de parâmetros físicos relevantes próximos ao ponto crítico, tais como: campo magnético, magnetização, interações, etc.

A Figura 4 denota o comportamento dos expoentes críticos analisados por meio do uso da teoria de grupo de renormalização, a qual é comumente utilizada para resolver o Modelo de Ising de Campo Transverso. Esse Modelo, por sua vez, é descrito por três termos:  $J > 0$ , o qual representa o acoplamento de spin dos vizinhos próximos;  $h$ , que denota o campo transversal e  $H$ , que descreve o campo magnético uniforme conjugado na direção  $z$ .

O diagrama de fase para o Modelo de Ising com campo transversal mostra a existência de linha de *crossover* em  $T_x = |g|^{\nu z}$  que faz separação entre dois regimes do sistema. É ainda observada uma linha crítica definida pela temperatura  $T_c = |g|^\psi$ , onde  $\psi$  é chamado de expoente de desvio. A linha crítica é governada pelo ponto fixo semi-estável  $W$ , enquanto as setas na linha crítica indicam as flutuações das equações do grupo de renormalização.

Essas flutuações estão constantemente longe do PQC em  $g(T = 0) = 0$ , denotando a natureza instável do ponto fixo associado ao ponto quântico crítico em  $g = 0$  e  $T = 0$ .

**Figura 4** – Diagrama de fase do modelo de Ising para um campo transversal com  $d > 1$ . Nesse diagrama, o ponto fixo na temperatura zero está completamente instável. Em  $|g| = 0$ , temos a trajetória quântica crítica enquanto QCP denota o ponto quântico crítico e SC, o acoplamento forte.



Fonte : Presente na Ref. [37]

Outra característica em volta da linha crítica de temperatura de transição de fase finita  $T_c(g)$  é que as flutuações dessa linha estão longe do PQC, o que implica dizer que o comportamento crítico nessa linha é controlado por outro ponto fixo que exerce domínio sobre a temperatura finita do comportamento crítico. Dessa forma, os expoentes críticos associados ao ponto fixo diferem dos expoentes associados ao PQC, visto que pertencem a outra classe de universalidade.

No entanto, há ainda algumas situações em que a linha crítica é governada pelo mesmo expoente da linha de *crossover*, o que significa dizer que  $\psi = \nu z$ , como é o caso do modelo de Ising com campo transversal em duas dimensões. Essas propriedades quânticas podem ser investigadas por outras abordagens teóricas combinadas com essa teoria de escala para sistemas quânticos, que podem revelar aspectos interessantes sobre sistemas de multicorpos, como veremos na próxima seção.

## 1.4 Estatística Fracionária de Haldane

Sistemas de muitas partículas, como é caso de sistemas representados pelo modelo de Hubbard, são, em sua essência, governados pela mecânica quântica. Assim, para que se possa obter propriedades macroscópicas desses materiais, necessita-se fazer uso da estatística quântica, que fornece uma modelagem da mecânica estatística das partículas desses sistemas. A estatística das partículas observáveis são governadas pelas estatísticas de Bose-Einstein (EBE) e de Fermi-Dirac (EFD). As partículas que obedecem a essas estatísticas são chamadas de bósons e férmions, respectivamente.

Recentemente, tem havido bastante interesse pela física de partículas que são associadas a excitações elementares e que apenas podem existir no interior de sistemas interagentes de muitas partículas. As partículas que emergem da física desses materiais

são chamadas de *quasi-partículas* e obedecem a uma estatística fracionária. Um trabalho realizado pelos físicos Leinaas e Myrheim mostrou que, em duas dimensões, é possível obter partículas que interpolam a estatística de Férmions e Bósons [38]. Essas partículas desempenham um papel importante no estudo da supercondutividade e foram chamadas mais tarde de *anyons* por Wilczek [39, 40, 41].

Os *anyons* possuem suas funções de onda descritas por uma fase do tipo  $e^{i\alpha\pi}$ , que resulta da simetria existente na troca entre duas partículas. O caso em que  $\alpha = 0$  (1) descreve bósons (férmions); neste sentido,  $\alpha = 1$  representa funções de onda anti-simétricas, o que implica no princípio de exclusão de Pauli, enquanto, para partículas com  $\alpha = 0$ , obtemos funções de onda simétricas. Isso pode ser verificado facilmente se considerarmos um sistema de duas partículas indistinguíveis, com a partícula 1 no estado  $|\psi_1\rangle$  e a partícula 2 no estado  $|\psi_2\rangle$ , com o estado do sistema escrito por  $|\psi_1\psi_2\rangle$ . Supondo a troca dos estados destas duas partículas, o estado do sistema se torna  $|\psi_2\psi_1\rangle$ . Esses dois estados do sistema não podem apresentar medidas distintas, devendo ser distinguidas apenas por uma fase, indicada abaixo, que mostra como os férmions obedecem ao princípio de Pauli:

$$|\psi_1\psi_2\rangle = e^{i\alpha\pi} |\psi_2\psi_1\rangle \quad (1.8)$$

No entanto, a estatística que descreveria essas partículas não estabelece uma relação direta com princípio de exclusão de Pauli. Em 1991, uma generalização do princípio de Pauli proposta por Haldane [20] estabeleceu uma correspondência entre a estatística das partículas que interpolavam os bósons e férmions. A definição proposta por Haldane foi motivada por sistemas tipo *Quantum Hall* fracionário e excitações de *spinons* em cadeias antiferromagnéticas unidimensionais.

Haldane supôs um sistema de  $N$  partículas idênticas com função de onda dada por  $\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$  em um espaço dimensional arbitrário. A função de onda de muitas partículas é expandida na base da função de onda da  $i$ -ésima partícula.

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_{\nu} A_{\nu}(\{r_j; j \neq i\}) \phi_{\nu}(r_i; \{r_j; j \neq i\}) \quad (1.9)$$

Observe que  $\phi_{\nu}$  denota um espaço de Hilbert de dimensão  $d_N$  que irá variar de acordo com o número de partículas. Nesse caso, também observamos que o índice  $i$  dependerá das condições de contorno e do tamanho do sistema ao qual está confinado, visto que a função de onda descreve um sistema de partículas idênticas. Assim, ao considerarmos partículas em uma rede de dimensão  $d$ , se esse conjunto de partículas for formado por  $N$  férmions idênticos, um único férmion pode ocupar  $d - (N - 1)$  estados, devido ao princípio de Pauli. Assim,  $d_N^F = d - (N - 1)$  corresponde à quantidade de estados disponíveis para serem ocupados. No entanto, se as partículas são bósons, não há restrição de ocupação dos estados, logo  $d_N^B = d$ . A relação generalizada do princípio de Pauli pode ser descrita por:

$$d_N^g = d - g(N - 1) \quad (1.10)$$

Desse modo,  $d_N^g$  descreve o número de estados a serem ocupados na presença de outras  $N - 1$  partículas. Então, para  $g = 0$ , obtemos bósons e para  $g = 1$ , férmions, o que mostra que a equação (1.10) representa uma generalização do princípio de Pauli na qual

o valor  $g$  é o parâmetro que determina a estatística que governa o sistema. Devido a essa definição, o limite termodinâmico só existe se esse parâmetro for independente do número de partículas e apenas algumas interações o tornam assim: estas são denominadas por interações estatísticas o que tornam  $g$  um parâmetro estatístico. Esse tipo de estatística é conhecida como *Fractional Exclusion Statistics* (FES). As partículas que obedecem a esse tipo de estatística são chamadas de *exclusion*.

O número de estados quânticos de  $N$  partículas idênticas ocupando  $d$  estados para bósons no espaço de Hilbert é descrito por:

$$D_N^B = \frac{(d + N - 1)!}{N!(d - 1)!} = \frac{(d_N^B + N - 1)!}{N!(d_N^B - 1)!} \quad (1.11)$$

e para férmions é:

$$D_N^F = \frac{d!}{N!(d - N)!} = \frac{(d_N^F + N - 1)!}{N!(d_N^F - 1)!} \quad (1.12)$$

assim, de forma geral, podemos obter o número de estados ocupados para um número  $N$  de partículas usando a FES.

$$D_N(g) = \frac{(d_N^g + N - 1)!}{N!(d_N^g - 1)!} = \frac{(d + (1 - g)(N - 1))!}{N!(d - gN - (1 - g))!} \quad (1.13)$$

Logo, na condição em que  $g = 0, 1$ , obtemos o número de estados ocupados para bósons e férmions, respectivamente. A estatística fracionária pode surgir em um modelo interagente; considerando partículas em um potencial harmônico unidimensional, teremos:

$$E = \hbar\omega \left[ \sum_i n_i + \frac{N}{2} \right] \quad (1.14)$$

onde  $\hbar$  é a constante de Planck,  $\omega$ , a frequência e  $n_i$  o número de ocupação definido por inteiros positivos. Se considerarmos uma interação do tipo  $gN(N - 1)/2$ , a qual modifica o espectro de energia, na forma:

$$E = \hbar\omega \left[ \sum_i n_i + \frac{gN(N - 1)}{2} + \frac{N}{2} \right] \quad (1.15)$$

este tipo de mudança de energia ocorre em modelos analiticamente solúveis, onde a energia pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$E = \hbar\omega \left[ \sum_i \bar{n}_i + \frac{N}{2} \right] \quad (1.16)$$

onde  $\bar{n}_i$  é o número de ocupação modificado:

$$\bar{n}_i = n_i + g(i - 1) \quad (1.17)$$

Portanto, a equação (1.16) demonstra que um sistema de férmions ou bósons interagentes pode se comportar como um sistema de *quase-partículas* não interagentes. Nesse caso, o espectro de energia é modificado de tal forma que os níveis de energia ficam separados a uma distância mínima de  $g$  entre si, lembrando o espectro de um sistema dado pela equação (1.14). Assim, exemplificamos a importância que a FES possui e suas eventuais implicações nas propriedades quânticas dos sistemas de muitas partículas.

## 1.5 Nossa Pesquisa

A primeira formulação geral de uma estatística quântica de um gás ideal - na qual a estatística do sistema poderia interpolar entre a estatística de bósons e férmions com respeito ao princípio da estatística fracionária de Haldane - foi proposta por Yong-Shi Wu [42]. O termo de interpolação entre bósons e férmions é descrito na função do *peso estatístico*, que descreve o número de estados ocupados no sistema. De acordo com os princípios fundamentais da estatística quântica, o peso estatístico é inserido na grande função de partição para descrever as propriedades macroscópicas ou termodinâmicas do sistema quântico de multicorpos.

A descrição desse gás ideal propõe a definição de uma matriz  $\alpha_{ij}$  que descreve a exclusão das partículas. Dessa forma,  $\alpha_{ij} = \alpha\delta_{ij}$ , onde  $\alpha = 0$  representa partículas bosônicas e  $\alpha = 1$ , partículas fermiônicas, recuperando, assim, as conhecidas distribuições de Fermi-Dirac e Bose-Einstein.

No entanto, posteriormente foi mostrado que a matriz dos *exclusons* proposta por Y. S. Wu e sua interpretação estão imprecisas [26]. O artigo publicado na *Physical Review B* mostra - utilizando-se do modelo de Hubbard com repulsão coulombiana e alcance infinito para descrição da estatística fracionária - que a origem correta das propriedades termodinâmicas do sistema são obtidas por meio da matriz  $\tilde{g}_{kk';\alpha\alpha'}$ . Essa matriz descreve duas outras que estão presentes na formulação matemática da estatística fracionária do problema. Dessa maneira, sem ela não é possível descrever as propriedades macroscópicas do modelo, que é equivalente a um gás ideal de três espécies.

Essa descrição mostrou uma extensão do formalismo estatístico fracionário, que possibilitou o mapeamento de um sistema interagente de elétrons de duas espécies de partículas em um gás ideal de três espécies de *exclusons*. Foi possível obter, ainda, uma descrição do comportamento de algumas propriedades termodinâmicas próximo ao ponto quântico crítico. Partindo dos resultados obtidos nesse artigo no PQC, esta dissertação mostrará uma análise do comportamento de uma dessas propriedades com respeito à dimensão da rede.

A dissertação segue a seguinte estrutura: No Capítulo 2, apresentamos uma descrição do gás ideal similar à proposta inicialmente por Y. S. Wu [42], descrevendo de forma simples todo o tratamento mecânico estatístico do problema. No Capítulo 3, apresentamos a formulação do problema do modelo de Hubbard com repulsão coulombiana e alcance infinito, discutindo o formalismo que descreve a estatística de exclusão do modelo e seu comportamento próximo ao ponto crítico. No Capítulo 4, apresentamos os resultados obtidos com respeito ao comportamento do Grande Potencial próximo ao ponto crítico conforme variamos a dimensão da rede. Finalmente, no Capítulo 5, apresentamos as conclusões e perspectivas do nosso trabalho.

## 2 MECÂNICA ESTATÍSTICA DE PARTÍCULAS COM EXCLUSÃO FRA- CIONÁRIA

Neste Capítulo, examinaremos como a definição de Haldane [20] para uma estatística fracionária se comporta no limite de infinitas dimensões e, em seguida, apresentaremos a distribuição de um gás ideal de partículas que obedece a esta estatística fracionária de exclusão. O uso do peso estatístico  $D_N(g)$  expresso na equação (1.13) será o nosso ponto de partida para determinarmos o número médio de ocupação do sistema, que se reduz aos resultados das distribuições de Bose-Einstein para  $g = 0$  e de Fermi-Dirac para  $g = 1$ . Na sequência, discutiremos as propriedades termodinâmicas do gás como proposto por Murthy e Shankar [43]. Ao final do capítulo, apresentaremos uma discussão utilizando o formalismo matemático proposto por Wu [42] para descrever um gás ideal generalizado.

### 2.1 A função de partição no limite $d \rightarrow \infty$

Anteriormente, mencionamos que o número de estados de um sistema de  $N$  partículas idênticas com  $d$  estados de ocupação é descrito por  $D_N(g)$ . Usando o número de estados como ponto de partida, é possível descrevermos uma generalização da definição de Haldane para FES [44], feita para o caso em que o espaço de Hilbert para as partículas possui dimensão infinita.

Considerando que as partículas estão espalhadas em uma rede, podemos definir a dimensão  $d$  como  $d = L/a$ , onde  $L$  é o tamanho da rede e  $a$  é o espaçamento. No limite em que  $d \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow 0$  e  $L \rightarrow \infty$ . Como a densidade da rede é dada por  $\rho = N/L^D$ , onde  $D$  é a dimensão espacial e  $N$  é o número de partículas, então  $\rho \rightarrow 0$ . Isto é,  $\rho$  é finito quando  $a \rightarrow 0$ , logo, tomar o limite  $d \rightarrow \infty$  é semelhante a tomar o limite do contínuo.

Usando agora a equação (1.13) podemos obter a expansão do número de estados  $D_N(g)$  em potências de  $d$ , na forma:

$$D_N(g) = \frac{1}{N!} [d^N + N(N-1)(\frac{1}{2} - g)d^{N-1} + \dots] \quad (2.1)$$

Tomando o limite  $d \rightarrow \infty$  e fazendo uso da equação  $S_n = \frac{n(a_0+a_n)}{2}$  para a soma dos  $n$  primeiros termos de uma progressão aritmética, obtemos:

$$\frac{1}{2} - g = \lim_{d \rightarrow \infty} \frac{d}{N(N-1)} \left[ \frac{N! D_N(g)}{d^N} - 1 \right] \quad (2.2)$$

A relação acima é útil para determinarmos  $g$ ; no entanto, a quantidade  $D_N(g)$  não descreve o limite contínuo. Assim, é necessário utilizarmos a definição da dimensão do espaço de Hilbert em termos da função de partição para  $N$  partículas:

$$D_N = \lim_{\beta \rightarrow 0} Z_N = \lim_{\beta \rightarrow 0} Tr(e^{-\beta H_N}) \quad (2.3)$$

onde  $\beta = 1/kT$  e  $H_N$  é o hamiltoniano das  $N$  partículas. Dessa maneira, podemos reescrever a equação da seguinte forma:

$$\frac{1}{2} - g = C \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{Z_1}{N(N-1)} \left[ \frac{N! Z_N}{Z_1^N} - 1 \right] \quad (2.4)$$

Nesta formulação, o limite  $\beta \rightarrow 0$  de altas temperaturas implica em tomar o limite do contínuo. A constante  $C$  apenas concede consistência à equação para determinar  $g$ . É possível determinar  $Z_N$  para bósons e férmions como uma expansão da função canônica de partição para uma única partícula [43]:

$$Z_N^{B,F}(\beta) = \frac{1}{N!} \left[ Z_1^N(\beta) \pm Z_1(2\beta) Z_1^{N-2}(\beta) \frac{N(N-1)}{2} + \dots \right] \quad (2.5)$$

Note que a expressão acima define bósons e férmions de maneira distinta, visto que o sinal (+) indica férmions e o (-) indica bósons. Portanto, para bósons e férmions vamos tomar, respectivamente,  $g = \mp 1$ . Então,  $C$  é determinada para bósons e férmions usando a expansão para  $Z_N^{B,F}$ :

$$\pm \frac{1}{2} = C \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{Z_1}{N(N-1)} \left[ \frac{N! Z_N^{B,F}}{Z_1^N} - 1 \right] \quad (2.6)$$

onde  $C$  é escrita da forma:

$$C = \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{Z_1(\beta)}{Z_1(2\beta)} \quad (2.7)$$

### 2.1.1 Partícula Confinada em uma Caixa $D$ Dimensional com Aresta de Comprimento $L$

Um exemplo simples em que podemos tomar o limite de altas temperaturas é o caso de uma partícula confinada em uma caixa  $D$  dimensional e aresta de comprimento  $L$ . No caso unidimensional, este sistema possui um espectro de energia muito simples dado por  $E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$ . Assim, podemos escrever a função de partição para uma partícula em uma caixa unidimensional na forma:

$$Z_1(\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} \quad (2.8)$$

No limite  $\beta \rightarrow 0$ , o argumento da exponencial torna-se bastante pequeno, de forma que podemos substituir a soma por uma integral em  $n$ :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} Z_1(\beta) = \int_0^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}} dn \quad (2.9)$$

A integral é calculada facilmente fazendo  $\eta = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$ :

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} Z_1(\beta) = \int_0^\infty e^{-\eta^2} d\eta = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\eta}} = \frac{L}{\lambda} \quad (2.10)$$

onde  $\lambda = \frac{2\beta\hbar^2\pi}{m}$  é conhecido como comprimento de onda térmico. Assim, para  $D$  dimensões,  $Z_1^D(\beta) = \left(\frac{L}{\lambda}\right)^D$ . Portanto, a constante de proporcionalidade  $C$  para esse sistema é dada por

$$C = \left(\frac{L}{\sqrt{2\lambda}}\right)^D = 2^{D/2} \quad (2.11)$$

### 2.1.2 Sistema Harmonicamente Confinado a uma Frequência $\omega$ em um Espaço $D$ Dimensional

Considere que o sistema é constituído por  $N$  partículas com massa  $m$  e está confinado a um potencial de frequência  $\omega$  dado por

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2} m \omega^2 \sum_{i=1}^N r_i^2 \quad (2.12)$$

onde  $\vec{r}_i$  descreve as coordenadas da partícula. O espectro de energia para esse sistema é da forma:

$$E_{n,l} = \hbar\omega(2n + |l| + 1) \quad (2.13)$$

onde  $n$  é o número quântico radial e  $l$  é o momento angular em duas dimensões.

Neste exemplo, seguiremos o mesmo procedimento usado para uma partícula em uma caixa com  $D$  dimensões. Em primeiro lugar, lembramos que o espectro de energia de um sistema harmonicamente confinado em uma única dimensão é dado por  $E = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ . Dessa maneira, podemos facilmente escrever a função de partição para uma partícula em uma dimensão:

$$Z_1(\beta) = \sum_n e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)} = \frac{e^{-\beta\frac{\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \quad (2.14)$$

Logo, para  $D$  dimensões, a função de partição se escreve  $Z_1^D(\beta) = \frac{e^{-D\beta\frac{\hbar\omega}{2}}}{(1 - e^{-\beta\hbar\omega})^D}$ .

Fazendo uso da equação (2.7) e fazendo a substituição de variável  $x = \beta\hbar\omega$ , encontramos

$$C = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{e^{-\frac{x}{2}}}{(1 - e^{-x})^D} \frac{(1 - e^{-2x})^D}{e^{-xD}} = \lim_{x \rightarrow 0} e^{\frac{x}{2}} \frac{(1 - e^{-2x})^D}{(1 - e^{-x})^D} \quad (2.15)$$

Usando agora a propriedade que afirma que o limite do produto é igual ao produto dos limites, obtemos

$$C = \lim_{x \rightarrow 0} \left( \frac{(1 - e^{-2x})}{1 - e^x} \right)^D = \lim_{x \rightarrow 0} \left( \frac{e^x + 1}{e^x} \right)^D \quad (2.16)$$

Logo,  $C$  é escrito da forma:

$$C = 2^D \quad (2.17)$$

Pelo o exposto acima, notamos que a constante  $C$  não é universal e se altera para cada sistema. Assim, pode ser possível mapear um sistema de bósons ou férmions interagentes utilizando a FES com um  $g$  determinado pela equação (2.4).

## 2.2 Função de Distribuição para um Gás Ideal de FES

O gás ideal é constituído por partículas indistinguíveis não interagentes encerradas em um grande volume  $V$ , possuindo energia total  $E$ . Consideramos que o sistema possui um grande número de partículas de maneira que podemos dividir o espectro de energia em células e cada célula possui um número qualquer de níveis de energia para uma partícula única com  $d_i \gg 1$ . Dessa forma,  $d_i$  representará a dimensão da  $i$ -ésima célula com energia média  $\epsilon_i$  e número de partículas  $N_i$ . As equações que definem um gás ideal são:

$$\begin{aligned} E &= \sum_i N_i \epsilon_i \\ N &= \sum_i N_i \end{aligned} \quad (2.18)$$

assim, podemos observar que a energia do sistema é uma soma sobre as energias de uma única partícula. Desse modo, podemos considerar o procedimento padrão da mecânica estatística, partindo do Ensemble Grande Canônico com temperatura  $T$  e potencial químico  $\mu$ :

$$Z = \sum_{\{N_i\}} D(\{N_i\}) \exp \left[ \sum_i N_i \beta (\mu - \epsilon_i) \right] \quad (2.19)$$

onde  $\beta = 1/kT$  e  $k$  é a constante de Boltzmann. A função de partição é descrita por  $D(\{N_i\})$ , que é o número de microestados distintos associados à distribuição do conjunto  $\{N_i\}$ .

$$D(\{N_i\}) = \prod_i \frac{(d_i + (1 - g)(N_i - 1))!}{N_i! (d_i - gN_i - (1 - g))!} \quad (2.20)$$

Tomando o logaritmo da equação (2.19) e definindo o número médio de ocupação na  $i$ -ésima célula como  $n_i = N_i/d_i$ , obtemos

$$\begin{aligned} \log D(\{N_i\}) &\approx \sum_i d_i [-n_i \log n_i - (1 - gn_i) \log(1 - gn_i)] + \\ &\quad \sum_i d_i [1 + (1 - g)n_i] \log [1 + (1 - g)n_i] \end{aligned} \quad (2.21)$$

Minimizando a equação para determinar a distribuição mais provável de ocupação:

$$\frac{\partial}{\partial n_i} \left[ \log D(\{N_i\}) + \sum_i d_i n_i \beta(\mu - \epsilon_i) \right] = 0 \quad (2.22)$$

chegamos à relação:

$$n_i \exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] = [1 + (1 - g)n_i]^{1-g} [1 - gn_i]^g \quad (2.23)$$

Agora, precisamos definir uma função similar àquela proposta por Wu [42]:

$$w = \frac{1}{n_i} - g \quad (2.24)$$

de forma que a equação (2.23) é escrita na forma:

$$w(x)^g (1 + w(x))^{1-g} = \exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] \quad (2.25)$$

Perceba que a equação (2.25) apresenta não linearidade devido ao fator arbitrário  $g$ . Nota-se, ainda, que no limite  $T = 0$  o potencial químico torna-se a energia de Fermi  $\epsilon_F$ ; logo, se  $\epsilon_i > \epsilon_F$ , a exponencial tenderá a infinito, assim como  $w$ . Então, Examinando cuidadosamente o efeito da presença de  $g$ , verificamos que em  $T = 0$ :

$$\begin{aligned} n_i &= 0, \text{ se } \epsilon_i > \epsilon_F \\ n_i &= 1/g, \text{ se } \epsilon_i < \epsilon_F \end{aligned} \quad (2.26)$$

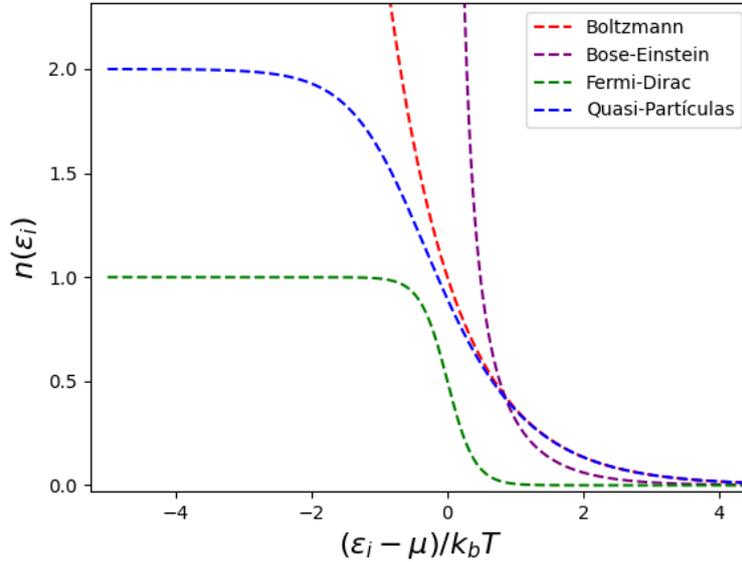
Podemos utilizar a equação (2.25) para recuperar os resultados das distribuições de Bose-Einstein e Fermi-Dirac, o que ocorre para  $g = -1$  e  $g = 1$ , respectivamente. A distribuição clássica de Boltzmann é resgatada quando a  $\exp[\beta(\epsilon_i - \mu)]$  torna-se muito grande, de maneira que  $w(x) = \exp[\beta(\epsilon_i - \mu)]$ , independente de  $g$  no limite clássico, como esperado. De modo geral, o número médio de ocupação se escreve:

$$n_i = \frac{1}{w(e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}) + g} \quad (2.27)$$

Resumindo, os casos particulares que apresentam distribuições interessantes são: Fermi-Dirac  $g = 1$ , Bose-Einstein  $g = -1$ , Boltzmann como mencionada acima e o caso em que podemos obter quase-partículas para  $g = \frac{1}{2}$ , respectivamente:

$$\begin{aligned} n_i &= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1}, \\ n_i &= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1}, \\ n_i &= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}} \\ \text{e } n_i &= \frac{1}{\sqrt{e^{[2\beta(\epsilon_i - \mu)]} + \frac{1}{4}}} \end{aligned} \quad (2.28)$$

**Figura 5** – Gráficos das distribuições de Boltzmann, Bose-Einstein, Fermi-Dirac e o caso de Quase-Partículas com  $g = 1/2$ .



**Fonte :** O autor (2021).

Da Figura 5 notamos que o sistema não condensa para um valor de  $g$  pequeno, como  $g = 1/2$  [45]. Mais ainda, Aoyama [46] obteve uma solução exata em termos de uma função hipergeométrica para valores de  $g = 1/m$ , para o caso em que  $m$  é inteiro positivo, com  $w$  escrito na forma:

$$w(g, x) = \left(1 - \frac{1}{m}\right) \left[ {}_{m-1}F_{m-2} \left( \frac{1}{m}, \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, \frac{m-2}{m}; \frac{1}{m-1}, \frac{2}{m-1}, \dots, \frac{m-2}{m-1}; \frac{-mx^m}{(m-1)^{m-1}} \right) - 1 \right] \quad (2.29)$$

## 2.3 Propriedades de um Gás Homogêneo

O formalismo da estatística quântica nos fornece todas as ferramentas necessárias para obtermos as propriedades macroscópicas de grande pluralidade de sistemas físicos. No entanto, a maioria desses sistemas pode trazer uma grande dificuldade matemática em sua descrição, o que tem como consequência a busca de modelos simplificados, mas não triviais, e que contenha os mecanismos subjacentes aos fenômenos que desejamos descrever. Muitas dessas descrições matemáticas são levadas a representações aproximadas do modelo real, porém mesmo essas representações são construídas por estágios, acrescentando-se os termos matematicamente mais complexos passo a passo.

Iniciaremos com um sistema idealizado, cujo exemplo mais simple é o gás ideal. Como veremos, esse sistema permite uma facilidade no procedimento matemático e nos mostrará, com clareza, o seu comportamento no contexto da estatística fracionária. É o primeiro passo em nossa busca para o tratamento adequado de sistemas reais.

Como exposto acima, vamos descrever as propriedades termodinâmicas de um gás ideal de partículas livres com dispersão quadrática,  $\epsilon = p^2/2m$ , e governadas pela estatística

fracionária. O gás está confinado em um volume macroscópico  $V$ ,  $D$ -dimensional, cujo elemento de volume  $dV$  satisfaz:

$$d^D \rho = \rho(\epsilon) d\epsilon \quad (2.30)$$

onde a densidade de estados obedece à seguinte equação:

$$\rho(\epsilon) = \frac{(2m\pi)^{D/2}}{\Gamma(\frac{D}{2})} \epsilon^{D/2-1} \quad (2.31)$$

A  $T = 0$ , o número de partículas e a energia do estado fundamental são dados, respectivamente por

$$\begin{aligned} N &= \frac{V}{g} \int_0^{\epsilon_g} \rho(\epsilon) d\epsilon = \frac{V}{g} \frac{(2m\pi)^{D/2}}{\Gamma(D/2 + 1)} \epsilon_g^{D/2} \\ E &= \frac{V}{g} \int_0^{\epsilon_g} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon = \frac{V}{g} \frac{(2m\pi)^{D/2}}{\Gamma(D/2 + 2)} \frac{D}{2} \epsilon_g^{D/2+1} \end{aligned} \quad (2.32)$$

As equações mostram que, a  $T = 0$ ,  $\epsilon_g$  faz o papel da energia de Fermi, embora a presença do parâmetro  $g$  no denominador dessas equações, seja um "ponto fora da curva" nesta interpretação desprezível, o que sugere que a natureza fracionária do sistema tem diferenças marcantes com relação ao gás de Fermi. De fato, em uma perspectiva mais geral, a consistência da teoria fracionária deve ser verificada intrinsecamente, e paralelos com outras teorias limite devem ser evocadas com cautela [43].

De forma semelhante podemos escrever a energia e o número de partículas para o sistema usando a função de distribuição de Wu, discutida na subseção anterior:

$$N = \int_0^\infty \frac{\rho(\epsilon)}{(w+g)} d\epsilon, E = \int_0^\infty \frac{\epsilon \rho(\epsilon)}{(w+g)} d\epsilon \quad (2.33)$$

Fazendo uma mudança de variável, que relaciona  $\epsilon$  e  $w$ :

$$d\epsilon = \frac{1}{\beta} \frac{w+g}{w(1+w)} dw \quad (2.34)$$

e usando a equação (2.25), obtemos a seguinte identidade:

$$\frac{D}{2} \left( \frac{1}{\beta \epsilon_F} \right)^{D/2} \int_{w_0}^\infty \frac{w+g}{w(1+w)} dw \left[ \ln \left( \frac{w}{w_0} \right)^g \left( \frac{1+w}{1+w_0} \right)^{1-g} \right]^{D/2-1} = 1 \quad (2.35)$$

Então, após algumas manipulações matemáticas, podemos encontrar a relação da energia por partícula e a energia de Fermi:

$$\frac{E}{N \epsilon_F} = \frac{D}{2} \left( \frac{1}{\beta \epsilon_F} \right)^{D/2+1} \int_{w_0}^\infty \frac{w+g}{w(1+w)} dw \left[ \ln \left( \frac{w}{w_0} \right)^g \left( \frac{1+w}{1+w_0} \right)^{1-g} \right]^{D/2} \quad (2.36)$$

onde  $w_0$  é o valor de  $w$  quando  $\epsilon = 0$ . O potencial químico  $\mu$  a uma temperatura  $T$  também poder ser obtido da equação (2.25):

$$\mu = -\frac{1}{\beta} [g \ln w_0 + (1 - g) \ln (1 + w_0)] \quad (2.37)$$

A grande função de partição para o gás ideal fracionário pode ser escrita na forma usual, usando a fugacidade do sistema:

$$Z_G = \sum_0^{\infty} e^{\beta\mu N} Z_N \quad (2.38)$$

onde  $z = e^{\beta\mu}$  e a função de partição canônica é escrita na forma:

$$Z_N = \sum_{\{n_k\}} g(\{n_k\}) e^{-\beta E(\{n_k\})} \quad (2.39)$$

de maneira que  $N = \sum_k n_k$ . No entanto, para o caso de um sistema que obedece à estatística fracionária de exclusão, fatorar a grande função de partição não é algo imediato. Mas, podemos utilizar o *ansatz* escrito abaixo para o caso da FES e mostrar que é consistente:

$$Z_G = \prod_{k=1}^{\infty} (1 + w_k^{-1}) \quad (2.40)$$

Com a hipótese acima, o grande potencial termodinâmico resulta:

$$\Omega(\mu, T) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_G = \sum_{k=1}^{\infty} \ln \left(1 + \frac{1}{w}\right) \quad (2.41)$$

O caso contínuo é obtido substituindo-se a soma por uma integral em  $\epsilon$ , na forma usual:  $\sum_k = V \int d\epsilon \rho(\epsilon)$  - onde não é necessário fixarmos a dimensão do espaço:

$$\Omega(\mu, T) = -\frac{1}{\beta} V \int_0^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \ln \left(1 + \frac{1}{w}\right) \quad (2.42)$$

Essa construção é bastante útil para analisarmos sistemas que diferem do gás ideal. Neste contexto, na próxima subseção discutiremos o gás ideal generalizado.

## 2.4 Distribuição Estatística para o Gás Ideal Generalizado

Visto que a maior parte do estudo da estatística fracionária foi desenvolvida no contexto de sistemas quânticos de muitas partículas, nesta subseção apresentamos um gás ideal de  $i$  espécies confinado a uma região, que não troca energia ou partícula com o meio exterior. Consideramos  $G_i$  o número de estados independentes para uma partícula única de espécie  $i$ . Assim, fixando o número de funções de onda para  $N$  partículas, bem como

as coordenadas de  $N - 1$  partículas e suas espécies, podemos representar as funções de onda na base da partícula restante.

No entanto, o número de partículas  $d_i$  de estados acessíveis a uma partícula única, em geral, não é constante na base das partículas de espécie  $i$ , como é o caso do número de estados independentes  $G_i$ . Um caso em que isso pode ocorrer é quando estados de partículas localizadas são não ortonormais. Nesse tipo de situação, o número de estados acessíveis  $d_i$  é alterado conforme partículas são adicionadas ao sistema [42].

Haldane percebeu que, mantendo-se fixadas as condições de contorno e o tamanho da região em que a matéria condensada está confinada, a interação estatística  $\alpha_{ij}$  é dada por uma relação diferencial [20]:

$$\Delta d_i = - \sum_j \alpha_{ij} \Delta N_j \quad (2.43)$$

onde  $N_j$  representa um conjunto de troca de partículas permitidas. Dessa forma, em razão de desejarmos descrever a estatística do problema, vamos contar o número de estados para o sistema de muitas partículas em um conjunto  $N_i$  fixado.

Definindo  $W$  como sendo o peso estatístico que na seção anterior foi representado por  $D_N(g)$ , o número de estados para o sistema de multipartículas se escreve na forma:

$$W = \prod_i \frac{[G_i + N_i - 1 - \sum_j \alpha_{ij}(N_j - \delta_{ij})]!}{(N_i)! [G_i - 1 - \sum_j \alpha_{ij}(N_j - \delta_{ij})]!} \quad (2.44)$$

Note que, assim como na subseção anterior, o peso estatístico interpola entre bósons e férmions, visto que  $\alpha_{ij} = \alpha \delta_{ij}$  ( $\alpha = 0, 1$ ).

Seguindo o procedimento prescrito pela mecânica estatística quântica e considerando as condições ideais em que os autovalores de energia são dados por uma soma simples, temos

$$E = \sum_i N_i \epsilon_i \quad (2.45)$$

Então, considerando um ensemble Grande Canônico a uma temperatura  $T$  e potencial químico  $\mu_i$  para as espécies  $i$ , onde cada partícula de espécie  $i$  é identificada pela energia  $\epsilon_i$ , a grande função de partição resulta:

$$Z = \sum_{\{N_i\}} W(\{N_i\}) \exp \left\{ \sum_i N_i (\mu_i - \epsilon_i) / kT \right\} \quad (2.46)$$

onde  $k$  é a constante de Boltzmann.

Perceba que o limite termodinâmico ocorre para  $N_i$  e  $G_i$  grandes. Logo, para determinarmos o conjunto do número médio de partículas, tiramos o logaritmo da equação (2.46) e usamos a fórmula de Stirling  $\ln N! = N \ln(N/e)$  para obtermos as propriedades macroscópicas do sistema.

O conjunto do número médio de partículas é definido por  $n_i = N_i/G_i$ . Portanto, ao tomarmos o logaritmo de (2.46), podemos expressar  $\ln W$ , como:

$$\sum_i G_i \left\{ -n_i \ln n_i - \left( 1 - \sum_j \beta_{ij} n_j \right) \ln \left( 1 - \sum_j \beta_{ij} n_j \right) \right\} + \quad (2.47)$$

$$\sum_i G_i \left[ 1 + \sum_j (\delta_{ij} - \beta_{ij}) n_j \right] \ln \left[ 1 + \sum_j (\delta_{ij} - \beta_{ij}) n_j \right]$$

onde  $\beta_{ij} \equiv \alpha_{ij} G_j / G_i$ . Podemos, então, obter a distribuição mais provável de  $n_i$  através do processo de minimização:

$$\frac{\partial}{\partial n_i} \left[ \ln W + \sum_i G_i n_i (\mu_i - \epsilon_i) / kT \right] = 0 \quad (2.48)$$

o que resulta na seguinte equação:

$$n_i e^{(\epsilon_i - \mu_i) / kT} = \left[ 1 + \sum_k (\delta_{ik} - \beta_{ik}) n_k \right] \prod_j \left[ \frac{1 - \sum_j \beta_{jk} n_k}{1 + \sum_k (\delta_{jk} - \beta_{jk}) n_k} \right]^{\alpha_{ji}} \quad (2.49)$$

Agora, definindo  $w_i = n_i^{-1} - \sum_k \beta_{ik} n_k / n_i$ , temos

$$(1 + w_i) \prod_j \left( \frac{w_j}{(1 + w_j)} \right)^{\alpha_{ji}} = e^{(\epsilon_i - \mu_i) / kT} \quad (2.50)$$

A determinação de  $w_i$  através da equação acima nos permite obter o potencial termodinâmico  $\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z$ :

$$\Omega = -PV = -kT \sum_i G_i \ln \frac{1 + n_i - \sum_j \beta_{ij} n_j}{1 - \sum_j \beta_{ij} n_j} \quad (2.51)$$

e a entropia do gás generalizado pode ser determinada através da relação  $S = (E - \sum_i \mu_i N_i - \Omega) / T$ :

$$\frac{S}{k} = \sum_i G_i \left\{ n_i \frac{\epsilon_i - \mu_i}{kT} + \ln \frac{1 + n_i - \sum_j \beta_{ij} n_j}{1 - \sum_j \beta_{ij} n_j} \right\} \quad (2.52)$$

Note que a distribuição mais provável do número de ocupação médio é obtida através da solução da seguinte expressão:

$$\sum_j (\delta_{ij} + \beta_{ij}) n_j = 1 \quad (2.53)$$

Como teste do formalismo, vamos recuperar os resultados apresentados na subseção anterior para o gás ideal, ou seja, o caso de partículas idênticas sem estatística, isto é,  $\alpha_{ij} = \alpha \delta_{ij}$  e  $\mu_i = \mu$ . Desta forma, a equação (2.50) é reduzida a:

$$n_i e^{[\beta(\epsilon_i - \mu)]} = [1 + (1 - \alpha) n_i]^{1 - \alpha} [1 - \alpha_i n_i]^\alpha \quad (2.54)$$

e o conjunto do número médio de ocupação dado por

$$n_i = \frac{1}{w(e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}) + \alpha} \quad (2.55)$$

Nota-se que o resultado para o conjunto de número médio de ocupação é idêntico ao do gás ideal desenvolvido na subseção anterior: para o caso de  $\alpha = 0, 1, 1/2$ , obtemos as distribuições de Bose-Einstein, Fermi-Dirac e o caso de Quase-partículas, respectivamente, conforme esperado. No limite em que a exponencial da equação (2.55) cresce rapidamente, obtemos a distribuição de Boltzmann, como já comentado. Logo, nesse contexto mais geral, vemos que não só podemos obter os resultados para o gás ideal, como também uma percepção mais acurada do tratamento estatístico para sistemas quânticos de multipartículas.

### 3 O MODELO DE HUBBARD COM INTERAÇÃO DE ALCANCE INFINITO

Neste capítulo, apresentamos um mapeamento para o modelo de Hubbard com repulsão coulombiana de alcance infinito [26]. Este mapeamento permite interpretações pertinentes das propriedades de sistemas tipo *Non-Fermi Liquid*. O mapa transforma o modelo de Hubbard em um gás ideal de três espécies de partículas, denominada *exclusons*, com comportamento governado pela estatística fracionária de exclusão e manifesta nas propriedades macroscópicas do sistema. De fato, o diagrama de fase do estado fundamental do sistema revela regiões de criticalidade analisadas por conceitos subjacentes à FES. Em particular, a Transição Metal-Isolante ocorre em consequência do que se denomina por interação estatística entre *exclusons*.

Apresentamos, ainda, o cálculo dos expoentes críticos e uma análise de escala pertinente. Destacamos que o PQC do modelo de Hubbard, quando mapeado em um gás ideal de três espécies, pertence à mesma classe de universalidade de um gás de Fermi sem spin  $d$ -dimensional. Ao final do capítulo, mostramos uma descrição geral do comportamento da energia livre do grande potencial próximo ao ponto crítico para o modelo de Hubbard em redes hipercúbicas.

#### 3.1 O Modelo e a Representação de Exclusão

O hamiltoniano do modelo de Hubbard com Alcance Infinito, possui seu primeiro termo descrevendo o caminhar dos elétrons através de saltos entre vizinhos mais próximos em uma rede  $d$ -dimensional com  $N$  sítios; o segundo termo descreve o acoplamento a um reservatório de partículas e o terceiro e último termo, descreve a conservação da massa das partículas no processo de espalhamento entre todos os pares de partículas, com uma normalização que garante a extensividade da energia total do sistema:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} - (\mu + U/2) \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{j_1 j_2 j_3 j_4} \delta_{j_1+j_3, j_2+j_4} c_{j_1\uparrow}^\dagger c_{j_2\uparrow}^\dagger c_{j_3\downarrow}^\dagger c_{j_4\downarrow} \quad (3.1)$$

onde  $\langle i, j \rangle$  é a notação para vizinhos mais próximos.  $N$  identifica o número de sítios e  $\delta_{j_1+j_3, j_2+j_4}$  denota que a soma é feita sobre todos os sítios que satisfazem a condição  $\mathbf{r}_{j_1} + \mathbf{r}_{j_3} = \mathbf{r}_{j_2} + \mathbf{r}_{j_4}$ , isto é, o centro de massa entre duas partículas que satisfazem esta condição é conservado no processo de espalhamento. Este modelo traz consigo uma forma eficiente e simples de se analisar o comportamento de um *Non-Fermi Liquid*.

A fim de evitar manipulações matemáticas no espaço direto, introduzimos a transformada de Fourier, o que permitirá a obtenção de um hamiltoniano diagonal no espaço  $\mathbf{k}$ :

$$c_{j\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j}, \quad c_{j\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} \quad (3.2)$$

De fato, o hamiltoniano é reescrito na forma diagonal abaixo:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2) n_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}\downarrow} \quad (3.3)$$

O número de elétrons com momento  $\mathbf{k}$  e spin  $\sigma$  é dado por  $n_{\mathbf{k}\sigma} = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$  e sua dispersão é dada por  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t \sum_{\langle 0,j \rangle} e^{ik \cdot r_j}$ . Deste modo, o sistema de elétrons interagentes descrito pela equação (3.1) pode ser mapeado em um gás ideal de três espécies de partículas, com comportamento governando pela estatística fracionária de Haldane [20].

A abordagem de um gás ideal que obedece ao princípio de exclusão de Pauli generalizado foi primordialmente discutida por Wu [42]. Esta abordagem foi apresentada e detalhadamente discutida no Capítulo anterior, expondo algumas das propriedades macroscópicas que podemos obter neste tipo de sistema. No formalismo de Wu, a energia é aditiva, seguindo o procedimento padrão da mecânica estatística.

$$E = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} n_{\mathbf{k}\alpha} \quad (3.4)$$

onde  $\mathbf{k}$  é um número quântico e  $\alpha$  representa as espécies de *exclusons*. Assim, pode-se escrever o peso estatístico  $W$ :

$$W = \prod_{\mathbf{k}\alpha} \frac{(D_{\mathbf{k}\alpha} - N_{\mathbf{k}\alpha} - 1)!}{(D_{\mathbf{k}\alpha} - 1)! N_{\mathbf{k}\alpha}!} \quad (3.5)$$

com  $D_{\mathbf{k}\alpha}$  escrito na forma:

$$D_{\mathbf{k}\alpha} = G_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'\alpha'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} N_{\mathbf{k}'\alpha'} \quad (3.6)$$

onde  $G_{\mathbf{k}}$  representa o número de estados acessíveis quando há apenas uma partícula no sistema. Considera-se que  $G_{\mathbf{k}} = G_0$ , isto é, o número de estados para partícula única independe de  $\mathbf{k}$ . Por fim, o número de partículas é expresso por  $N_{\mathbf{k}\alpha}$  e  $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'}$  é a matriz que define a interação estatística no sistema.

Em adição, ao considerar-se um Ensemble Grande Canônico a uma temperatura  $T$ , a minimização da grande função de partição para obter-se o conjunto do número médio de ocupação (definido por  $n_{\mathbf{k}\alpha} = N_{\mathbf{k}\alpha}/G_0$ ), obtém-se a relação:

$$(1 + w_{\mathbf{k}\alpha}) \prod_{\mathbf{k}'\alpha'} \left( \frac{w_{\mathbf{k}'\alpha'}}{1 + w_{\mathbf{k}'\alpha'}} \right)^{g_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha}} = e^{\beta \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}} \quad (3.7)$$

onde  $w_{\mathbf{k}\alpha} = D_{\mathbf{k}\alpha}/N_{\mathbf{k}\alpha}$  e  $\beta = 1/T$ . Assim, pode-se determinar o potencial termodinâmico usando  $\Omega = \frac{1}{\beta} \ln Z$ , onde  $Z$  representa a grande função de partição usada para se obter a equação acima:

$$\beta \Omega_{frac} = \beta \frac{\Omega_0}{G_0} = - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \ln(1 + w_{\mathbf{k}\alpha}^{-1}) \quad (3.8)$$

Note que a energia média do sistema é consistente com (3.1) e (3.4):

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} n_{\mathbf{k}\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, 3 \quad (3.9)$$

de maneira que  $\varepsilon_{\mathbf{k}1} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2 = \varepsilon_{\mathbf{k}2}$ ,  $\varepsilon_{\mathbf{k}3} = U$  representam a energia de cada espécie de partícula. No entanto, se  $n_{\mathbf{k}1} = \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ ,  $n_{\mathbf{k}2} = \langle n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle$  e  $n_{\mathbf{k}3} = \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle$  forem interpretadas como as espécies dos *exclusons*, torna-se impossível obter, de forma consistente, a matriz de interação estatística de forma correta e consistente com o formalismo.

De fato, torna-se necessário definir uma matriz  $\Lambda$  que transforma as variáveis  $N_{\mathbf{k}\alpha}$  do hamiltoniano do sistema nas autênticas espécies de *exclusons*, segundo a prescrição abaixo:

$$\tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha} = - \sum_{\mathbf{k}'\alpha'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} N_{\mathbf{k}'\alpha'} \quad (3.10)$$

com peso estatístico:

$$W = \prod_{\mathbf{k}\alpha} \frac{(\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} - \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha} - 1)!}{(\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} - 1)! \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha}!} \quad (3.11)$$

onde  $\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha}$  é definido por

$$\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} = \tilde{G}_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'\alpha'} \tilde{g}_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} \tilde{N}_{\mathbf{k}'\alpha'} \quad (3.12)$$

O mesmo procedimento pode ser usado para encontrar o conjunto do número médio de ocupação, agora definido por  $\tilde{n}_{\mathbf{k}\alpha} = \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha} / \tilde{G}_0$ . Usando o novo peso estatístico dado pela equação (3.11), a energia livre do sistema se escreve em termos das novas matrizes:

$$\Omega = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} N_{\mathbf{k}\alpha} - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\alpha} (\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} + \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha}) \ln(\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} + \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha}) + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} \ln \tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha} \ln \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha} \quad (3.13)$$

No equilíbrio, determinado pela condição  $\partial\Omega/\partial N_{\mathbf{k}\alpha} = 0$ , podemos obter uma relação semelhante à equação (3.7) para a lei de ação de massa:

$$\prod_{\mathbf{k}'\alpha'} \frac{\tilde{w}_{\mathbf{k}'\alpha'}^{g_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha}}}{(1 + \tilde{w}_{\mathbf{k}'\alpha'})^{g_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha} + \Lambda_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha}}} = e^{\beta \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}} \quad (3.14)$$

onde  $g_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha} = - \sum_{\mathbf{k}''\alpha''} \tilde{g}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'';\alpha\alpha''} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'';\alpha\alpha''}$  e  $\tilde{w}_{\mathbf{k}'\alpha'} = \tilde{D}_{\mathbf{k}'\alpha'} / \tilde{N}_{\mathbf{k}'\alpha'}$ . A energia livre fracionária é então obtida substituindo a equação (3.14) em (3.15):

$$\beta \Omega_{frac} = - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \ln(1 + \tilde{w}_{\mathbf{k}\alpha}^{-1}) \quad (3.15)$$

Note que no caso em que  $n_{\mathbf{k}\alpha}$  representa corretamente as espécies de *exclusons*, a matriz  $\Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'}$  é reduzida a  $\Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} = -\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\alpha\alpha'}$ . Neste caso, volta-se a usar a equação (3.8) para se obter o conjunto do número médio de ocupação.

Contudo, para o caso mais geral em discussão, são obtidas as seguintes matrizes para  $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'}$  e  $\Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'}$ , onde  $\Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'}$  corrige a matriz de interação estatística dada por Wu [42]:

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \text{e } \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} &= -\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.16)$$

note que as matrizes satisfazem todas as condições desejadas. A interpretação correta da matriz estatística foi dada por Vitoriano *et al.* [26], que identificaram a verdadeira matriz de interação estatística dada por:

$$\tilde{g}_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

Em consequência, a real energia do sistema é escrita de maneira mais apropriada na forma:

$$E = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha} \tilde{n}_{\mathbf{k}\alpha} \quad (3.18)$$

onde

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha} \equiv - \sum_{\mathbf{k}'\alpha'} \varepsilon_{\mathbf{k}'\alpha'} (\Lambda)_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha}^{-1} \quad (3.19)$$

Usando a equação (3.16), podemos determinar as energias corretas de cada espécie dos *exclusons*.

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}1} &= \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2 = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}2} \\ \text{e } \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}3} &= 2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \end{aligned} \quad (3.20)$$

Nesta formulação adequada,  $\tilde{n}_{\mathbf{k}1}$  e  $\tilde{n}_{\mathbf{k}2}$  constituem o número médio de ocupação dos  $\mathbf{k}$  estados singularmente ocupados, enquanto que  $\tilde{n}_{\mathbf{k}3}$  representa o número médio de ocupação dos estados duplamente ocupados.

## 3.2 Propriedades do Estado Fundamental

O estado fundamental de um sistema quântico de elétrons, a uma temperatura de  $T = 0$ , contém informações sobre suas propriedades termodinâmicas. A densidade de estados (do inglês *Density of States - DOS*) é uma quantidade fundamental, que desempenha um papel crucial na descrição dos estados que podem ser ocupados pelas partículas em uma dada energia do sistema.

Em semicondutores, a densidade de estados é uma função descontínua para um determinado intervalo de energia, pois nenhum estado pode ser ocupado na região de *band gap* do material. De forma semelhante, considerando um sistema de elétrons interagentes unidimensional, definimos duas linhas  $\rho_{min}$  e  $\rho_{max}$ , onde observa-se descontinuidade na densidade de estados. Essas linhas definem o diagrama de fase para o estado fundamental do sistema.

$$\rho_{min} = \frac{1}{2} \int_{-\Delta/2}^{U-\Delta/2} \tilde{\sigma}(x) dx = \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{U/\Delta} \quad (3.21)$$

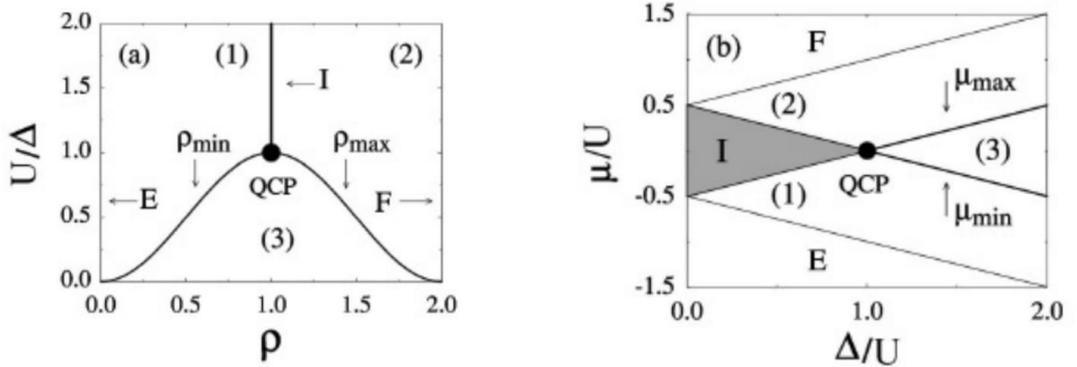
$$\rho_{max} = \left( \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2-U} + \frac{1}{2} \int_{\Delta/2-U}^{-\Delta/2} \right) \tilde{\sigma}(x) dx = 2 - \frac{2}{\pi} \arcsin \sqrt{U/\Delta} \quad (3.22)$$

onde  $\Delta$  é a largura da banda de energia, definida por  $\Delta = 4t$ ; a densidade de estados  $\sigma(x)$ , por sua vez, é definida por:

$$\sigma(x) \equiv \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(x - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \tilde{\sigma}(x) \theta(x + \Delta/2) \theta(\Delta/2 - x) \quad (3.23)$$

e  $\theta(x)$  representa a função de *Heaviside*. As linhas  $\rho_{min}$  e  $\rho_{max}$  indicam dois estados metálicos, onde os conceitos da estatística fracionária se manifestam. Nas figuras abaixo, verificamos essas propriedades.

**Figura 6** – (a) Diagrama de Fase para o estado fundamental de um sistema de elétrons interagentes unidimensional. (b) Diagrama de fase para qualquer dimensão  $d$ .



**Fonte :** Presente na Ref. [26]

As Figuras (6.a) e (6.b) mostram a presença de um PQC tanto para dimensão  $d = 1$  quanto para um valor de  $d$  arbitrário. A letra  $E$  nas figuras (6.a) e (6.b) representa uma região em que a banda está vazia, enquanto a letra  $F$  representa uma região em que a banda está completamente preenchida. É possível notar que, na Figura (6.b), a letra  $I$  denota uma fase de isolante de Mott.

As Figuras (6.a) e (6.b) indicam três regiões. A região (1) representa apenas estados não ocupados (buracos) e estados singularmente ocupados rotulados pelo vetor de onda  $\mathbf{k}$ . Alternativamente, a região (2) descreve estados duplamente ocupados rotulados pelo

vetor de onda  $\mathbf{k}$  e, na região (3), encontramos uma superposição das regiões (1) e (2), contendo buracos, estados singularmente ocupados rotulados pelo vetor de onda  $\mathbf{k}$  e estados duplamente ocupados rotulados pelo vetor de onda  $\mathbf{k}$ . Além disso, embora o formato da curvatura das linhas  $\rho_{min}$  e  $\rho_{max}$  dependa da dimensão do sistema, o ponto no qual se encontra  $U = \Delta$  é o mesmo em qualquer dimensão.

O potencial químico e a energia de Fermi a  $T = 0$  podem ser obtidos usando a função densidade de estados já definida, o que também permite identificar características da fase isolante do sistema. Em nossa análise, é conveniente definir a função de preenchimento da banda, dada por

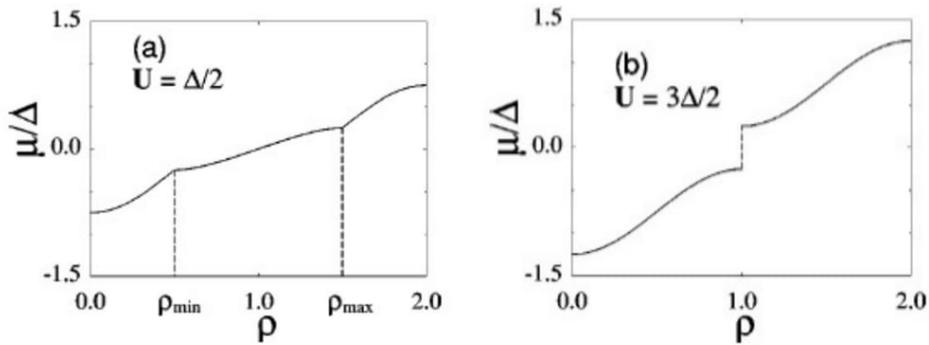
$$\rho = \int_{-\infty}^{\mu-U/2} \sigma(x) dx + \frac{1}{2} \int_{\mu-U/2}^{\mu+U/2} \sigma(x) dx \quad (3.24)$$

da qual se identifica o potencial químico para as três regiões da banda:

$$\begin{aligned} \mu &= -\frac{\Delta}{2} \cos(\rho\pi) - U/2, \text{ região (1) ;} \\ \mu &= \frac{\Delta}{2} \cos(\rho\pi) + U/2, \text{ região (2)} \\ \text{e } \mu &= \pm \sqrt{\left(\Delta \cos \frac{\rho\pi}{2}\right)^2 - \left(U \cot \frac{\rho\pi}{2}\right)^2}, \text{ região (3)} \end{aligned} \quad (3.25)$$

como mostram as figuras abaixo.

**Figura 7** – (a) Potencial químico em função de  $\rho$  para  $d = 1$  em uma temperatura de  $T = 0$ . (b) Descontinuidade do potencial químico para  $\rho = 1$ , denotando uma transição metal-isolante



Fonte : Presente na Ref. [26]

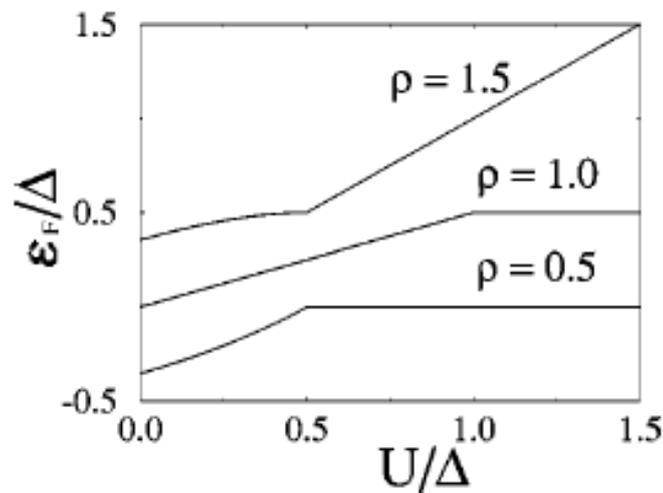
As figuras descrevem o comportamento do potencial químico como uma função de  $\rho$ . Na Figura (7.a), o potencial químico mostra um comportamento contínuo, apresentando cúspides em  $\rho = \rho_{min}$  e  $\rho = \rho_{max}$ . Em particular, na Figura (7.b) observa-se uma descontinuidade para  $\rho = 1$ , o que denota uma transição de fase metal-isolante.

Além disso, pode-se obter a energia de Fermi através de uma simples relação com potencial químico,  $\varepsilon_F = \mu + U/2$ :

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= -\frac{\Delta}{2} \cos(\rho\pi) , \text{ região (1);} \\ \varepsilon_F &= \frac{\Delta}{2} \cos(\rho\pi) + U , \text{ região (2)} \\ \text{e } \varepsilon_F &= \frac{U}{2} \pm \sqrt{\left(\Delta \cos \frac{\rho\pi}{2}\right)^2 - \left(U \cot \frac{\rho\pi}{2}\right)^2} , \text{ região (3)} \end{aligned} \quad (3.26)$$

O comportamento da energia de Fermi nas três regiões de interesse é exibido na Figura 8.

**Figura 8** – Energia de Fermi unidimensional em função de  $\rho$ .



**Fonte :** Presente na Ref. [26]

A energia de Fermi é uma função que varia com a interação  $U$  e a largura de banda  $\Delta$  para as três regiões, demonstrando picos em  $\rho = 0.5$ ,  $\rho = 1.0$  e  $\rho = 1.5$ . A função da energia de Fermi para  $\rho = 0.5$  varia até que o número médio de estados  $\mathbf{k}$  duplamente ocupados desapareça em  $\rho = \rho_{min}$ . No entanto, em  $\rho = 1.0$ , a função cresce linearmente com  $U$  passando pelo ponto crítico até se tornar independente de  $U$ . Conforme o número médio de buracos desaparece para o pico  $\rho = 1.5$ , a função da energia de Fermi também cresce linearmente com  $U$ . Conforme foi possível observar, em nenhuma das regiões há descontinuidade na função energia de Fermi. Da maneira exposta, foram obtidas as informações mais relevantes sobre o estado fundamental do sistema

### 3.3 Análise de Escala do Grande Potencial $\Omega$

Conforme um sistema de muitas partículas se encontra na vizinhança de um ponto crítico ou transição de fase, flutuações das suas quantidades características se intensificam. Neste regime, a análise de escala torna-se uma ferramenta teórica muito útil. Há, na literatura, diversas formulações da teoria de escala em temperatura finita ou nula [37, 34, 36]. Em nossa análise, nos atentaremos à forma de escala para a parte singular da energia livre (grande potencial)  $\Omega(T, \mu; g)$ , válida na vizinhança do PQC ( $T = \mu = g = 0$ ).

A parte singular da energia livre do Grande Potencial pode ser escrita na forma:

$$\Omega_s(T, \mu; g) = \lambda \Omega_0(\lambda^b T, \lambda^c \mu; \lambda^a g) \quad (3.27)$$

Fazendo  $\lambda^a g = 1$  e denotando  $g = (\Delta - U)/2$  a variável que governa a transição a temperatura nula, obtemos

$$\Omega_s(T, \mu; g) = g^{-1/a} \Omega_0(\lambda^b T, \lambda^c \mu) = g^{-1/a} \Omega_0\left(\frac{T}{g^{-b/a}}, \frac{\mu}{g^{-c/a}}\right) \quad (3.28)$$

Para se expressar a parte singular da energia livre em termos de expoentes críticos é necessário prosseguir em nossa análise.

Como estamos trabalhando no ensemble grande canônico, temos

$$N = \frac{\partial \Omega_s}{\partial \mu} = g^{-1/a} \Omega'_0 \frac{1}{g^{-c/a}} = g^{-1/a+c/a} \Omega'_0 \quad (3.29)$$

Logo, usando a hipótese

$$N \sim g^\beta = g^{-1/a+c/a} \quad (3.30)$$

obtemos a seguinte relação:

$$\beta = -\frac{1}{a} + \frac{c}{a} \quad (3.31)$$

Agora, examinando a susceptibilidade na vizinhança do PQC, temos

$$\chi = \frac{\partial^2 \Omega_s}{\partial \mu^2} = g^{-1/a+2c/a} \quad (3.32)$$

e usando  $\chi \sim g^{-\gamma}$ , obtemos outra relação:

$$\gamma = \frac{1}{a} - \frac{2c}{a} \quad (3.33)$$

Combinando as equações (3.33) e (3.31) e usando a relação dada por (1.7), obtém-se que

$$-c/a = \beta \delta \quad (3.34)$$

Por fim, fazendo uso de (1.5) e da linha de *crossover* existente na transição, obtém-se a parte singular da energia livre em termos dos expoentes críticos:

$$\Omega_s = \xi^{-(d+z)} \Omega_0\left(\frac{T}{g^\phi}, \frac{\mu}{g^{\beta\delta}}\right) \quad (3.35)$$

Note que  $\phi$ ,  $\beta\delta$  são expoentes que descrevem linhas de *crossover* da transição. Supondo que essa transição seja caracterizada por um único comprimento de correlação  $\xi$ , a parte

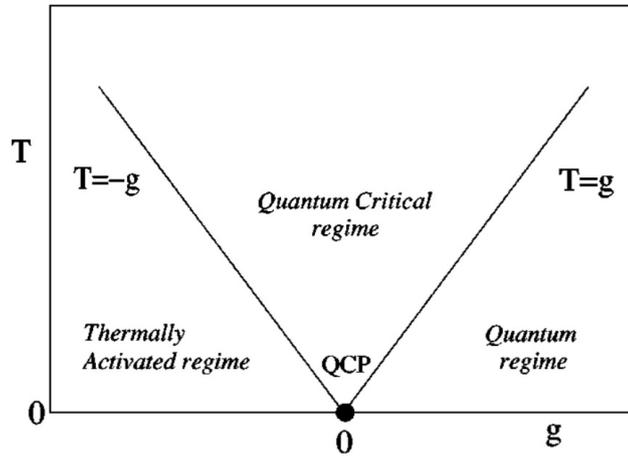
singular do grande potencial é ainda descrita pela dimensão euclidiana  $d$  do sistema e o expoente dinâmico  $z$ , o qual governa as propriedades de escala a  $T = 0$ .

O comprimento de correção  $\xi$  pode ainda ser descrito em diversas formas assintóticas:

$$\begin{aligned} \xi_g &\sim g^{-\nu_g}, \quad T = 0, \quad g \rightarrow 0^+ \\ \text{e } \xi_T &\sim T^{-\nu_T}, \quad g = 0, \quad T \sim 0 \end{aligned} \quad (3.36)$$

Analisando os valores da razão  $T/g^\phi$  e o sinal de  $g$  podemos determinar três regimes nas proximidades do ponto crítico, como indicado na Figura 9.

**Figura 9** – Diagrama de fase em função de  $g$  e  $T$ , onde o ponto  $T = \mu = g = 0$  indica o PQC da transição metal-isolante.



**Fonte :** Presente na Ref. [26]

O diagrama indica duas linhas de *crossover* separando o sistema em um regime termicamente ativado, abaixo da linha  $T = -g$ , um regime quântico crítico entre as duas linhas que se cruzam no PQC e um regime quântico abaixo da linha  $T = g$ . Nosso foco principal é o estudo da energia livre, ou grande potencial, nos regimes quântico e crítico quântico.

Próximo ao PQC ( $T = 0, U = \Delta$ ), usando as equações (3.14) e (3.15) e considerando baixas temperaturas, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \Omega(T, \mu; g) &= \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2) - NT \ln 2 \\ &- T \sum_{\mathbf{k}} \ln \left\{ 1 + \frac{1}{2} e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2)} \right\} + \mathcal{O}(e^{-\beta U/2}) \end{aligned} \quad (3.37)$$

Negligenciando o primeiro e o segundo termos, pois são funções regulares que não são úteis do ponto de vista da teoria de escala, o terceiro termo pode ser convenientemente escrito usando a densidade de estados  $\sigma(\varepsilon)$  e assumindo  $\mu = 0$ :

$$\Omega_s(T, 0; g) = -T \int_0^{\Delta/2} d\varepsilon \sigma(\varepsilon) \ln \left\{ 1 + e^{\beta(\varepsilon_k - U/2)} \right\} \quad (3.38)$$

Usando a aproximação *tight-binding* para a densidade de estados [47], pode-se escrever  $\sigma(\varepsilon)$  na forma:

$$\sigma(\varepsilon) = A_d \left(1 - \frac{2\varepsilon}{\Delta}\right)^{d/2-1} \left\{1 + \mathcal{O}\left(1 - \frac{2\varepsilon}{\Delta}\right)\right\}, \quad \frac{2\varepsilon}{\Delta} \rightarrow 1^- \quad (3.39)$$

onde  $A_d$  é uma constante que depende da dimensão e é escrita em termos da função Gamma:

$$A_d = \frac{4}{\Delta \Gamma(d/2)} \left(\frac{d}{2\pi}\right)^{d/2} \quad (3.40)$$

Em virtude do interesse na parte singular da energia livre, vamos considerar a seguinte substituição de variável:  $\tau = \beta(\varepsilon - U/2)$ , a qual transforma a equação (3.38) em

$$\Omega_s = -A_d T^2 \int_{-\beta U/2}^{-\beta g} \left(\frac{2g}{\Delta} - \frac{2T}{\Delta} \tau\right)^{d/2-1} \ln\left(1 + \frac{1}{f} e^\tau\right) d\tau \quad (3.41)$$

Integrando por partes duas vezes e desprezando os termos de ordem  $\mathcal{O}(e^{-\beta U})$ , obtemos

$$\Omega_s = -A_d \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \frac{4}{d(d+2)} \int_{-\beta U}^{\beta g} \left(\frac{2g}{\Delta} - \frac{2T}{\Delta} \tau\right)^{d/2-1} \frac{f e^\tau}{(e^\tau + f)^2} d\tau \quad (3.42)$$

Inicialmente, vamos considerar ( $g > T$ ), que descreve o regime quântico. Fazendo uma expansão binomial na equação acima e expandindo os limites da integral para  $-\infty$  e  $\infty$ , pode-se obter os primeiros coeficientes da expansão nesse regime:

$$\begin{aligned} a_0^Q &= \frac{4}{d(d+2)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f e^\tau}{(e^\tau + f)^2} d\tau = \frac{4}{d(d+2)}, \\ a_1^Q &= \frac{2}{d} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tau f e^\tau}{(e^\tau + f)^2} d\tau = \frac{2 \ln f}{d} \\ e a_2^Q &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tau^2 f e^\tau}{(e^\tau + f)^2} d\tau = \frac{1}{2} \left[ \frac{\pi^2}{3} + (\ln f)^2 \right] \end{aligned} \quad (3.43)$$

No caso do regime quântico crítico ( $T > g$ ), após uma expansão similar e estender os limites de integração para  $-\infty$  e 0, também podemos obter a forma geral dos coeficientes para a expansão nesse regime:

$$a_m^{QM} = \frac{1}{f m!} \left[ \left( \frac{d}{2} - m + 1 \right) \right] \int_0^\infty \frac{\tau^{d/2-m}}{e^\tau + 1/f} d\tau \quad (3.44)$$

Considerando as funções de Lerch definidas por

$$\Phi(z, v, u) = \frac{1}{\Gamma(v)} \int_0^\infty \frac{t^{v-1} e^{-(u-1)t}}{e^t - z} dt, \quad (3.45)$$

$$[Re v > 0, \text{ ou } |z|, z \neq 1, Re v > 0, \text{ ou } z = 1, Re v > 0] \quad (3.46)$$

e após algumas manipulações e integração por partes, obtivemos uma forma geral para os coeficientes  $a_m^{QM}$  em termos dessas funções:

$$a_m^{QM} = \frac{1}{fm!} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \Phi\left(-\frac{1}{f}, \frac{d}{2} - m + 1, 1\right), f = 2 \quad (3.47)$$

Pode-se sintetizar ambos os regimes em uma expansão da forma:

$$\Omega_s(x, y)/N = -A_d \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \left(\frac{2x}{\Delta}\right)^{(d+2)/2} (a_0 + a_1y + a_2y^2 + \dots) \quad (3.48)$$

onde denota-se  $x = \max\{g, T\}$  e  $y = \min\{g, T\}/x$  para definir o regime de interesse, com  $f$  definindo um índice que conta a degenerescência do estado fundamental. Na representação de *exclusons*,  $1/f$  é igual ao número médio de ocupação dos  $\mathbf{k}$  - estados, para o caso de exclusão total a  $T = 0$  ( $n_{\mathbf{k}1} = n_{\mathbf{k}2} = 1/f, n_{\mathbf{k}3} = 0$ ). Nota-se que, para o caso de  $f = 1$ , recupera-se o resultado do gás de Fermi sem spin com  $U = 0$ , levando em conta os termos negligenciados de ordem  $\mathcal{O}(e^{-\beta U/2})$ . Com esses resultados descreve-se o grande potencial próximo ao PQC nos regimes quântico e quântico crítico.

## 4 EXPANSÃO DA ENERGIA LIVRE GRANDE CANÔNICA NO REGIME QUÂNTICO

No Capítulo anterior, discutimos propriedades fundamentais de um sistema de elétrons interagentes representado pelo modelo de Hubbard de alcance infinito. Através dos conceitos de FES, foi possível obtermos o comportamento da energia livre do sistema  $\Phi(\mu, T)$  nas proximidades de um PQC. Foi observado, nessa descrição, que a energia se divide em dois regimes: o quântico e o quântico crítico. Neste último, foi calculada uma expressão geral para determinar qualquer coeficiente para a expansão da energia livre em termos da função de Lerch. Contudo, apenas três coeficientes da expansão foram calculados no caso do regime quântico.

No presente capítulo, calculamos novos coeficientes para o regime quântico da energia livre, que, assim como no regime quântico crítico, apresenta comportamento dependente da dimensão do sistema. Desta forma, é possível identificar os efeitos da dimensão  $d$  nesta propriedade termodinâmica perto do PQC no regime quântico.

### 4.1 Coeficientes da Energia Livre em Redes Hipercúbicas

Usando a equação (3.42) e tomando a expansão em série de Taylor ao redor da variável  $y$ , temos:

$$\begin{aligned} \Omega_s(\mu, T) = & -A_d \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \frac{1}{0!} \frac{4}{d(d+2)} \left(\frac{2g}{\Delta}\right)^{\frac{d}{2}+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f}{(f+e^\tau)^2} d\tau \quad (4.1) \\ & + A_d \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \frac{1}{1!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{(d+2)T}{2} \frac{(2g)}{g} \left(\frac{2g}{\Delta}\right)^{\frac{d}{2}+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f\tau}{(f+e^\tau)^2} d\tau \\ & - A_d \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \frac{1}{2!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{d(d+2)}{2} \frac{(T)^2}{2} \left(\frac{2g}{\Delta}\right)^{\frac{d}{2}+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f\tau^2}{(f+e^\tau)^2} d\tau \\ & + A_d \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \frac{1}{3!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{d(d-2)}{2} \frac{(d+2)}{2} \frac{(T)^3}{2} \left(\frac{2g}{\Delta}\right)^{\frac{d}{2}+1} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f\tau^3}{(f+e^\tau)^2} d\tau + \dots \end{aligned}$$

Assim, observamos um padrão na expansão que nos permite obter uma expressão geral para os coeficientes da equação (3.48) no regime quântico, na forma:

$$a_n^Q = (-1)^n \frac{4}{d(d+2)} \frac{d^n z(0)}{d\tau^n} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f\tau^n}{(f+e^\tau)^2} d\tau \quad (4.2)$$

onde  $n = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$  e  $z(\tau) = \left(\frac{2g}{\Delta} - \frac{2T}{\Delta}\tau\right)^{\frac{d}{2}+1}$ .

Nosso estudo também possibilitou obter os coeficientes para qualquer valor de  $n$  em qualquer dimensão  $d$  do sistema. Neste trabalho, foram calculados precisamente 12 coeficientes. Para cada  $n \geq 3$ , os coeficientes seguem um padrão semelhante. Como podemos observar:

$$\begin{aligned}
a_0^Q &= \frac{1}{0!} \frac{4}{d(d+2)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f}{(f+e^\tau)^2} d\tau, \\
a_1^Q &= -\frac{1}{1!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{(d+2)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f \tau}{(f+e^\tau)^2} d\tau, \\
a_2^Q &= \frac{1}{2!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{d}{2} \frac{(d+2)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f \tau^2}{(f+e^\tau)^2} d\tau, \\
a_3^Q &= -\frac{1}{3!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{d}{2} \frac{(d+2)}{2} \frac{(d-2)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f \tau^3}{(f+e^\tau)^2} d\tau, \\
a_4^Q &= \frac{1}{4!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{d}{2} \frac{(d+2)}{2} \frac{(d-2)}{2} \frac{(d-4)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f \tau^4}{(f+e^\tau)^2} d\tau, \\
a_5^Q &= \frac{1}{5!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{d}{2} \frac{(d+2)}{2} \frac{(d-2)}{2} \frac{(d-4)}{2} \frac{(d-6)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f \tau^5}{(f+e^\tau)^2} d\tau, \\
a_6^Q &= \frac{1}{6!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{d}{2} \frac{(d+2)}{2} \frac{(d-2)}{2} \frac{(d-4)}{2} \frac{(d-6)}{2} \frac{(d-8)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f \tau^6}{(f+e^\tau)^2} d\tau, \\
a_7^Q &= \frac{1}{7!} \frac{4}{d(d+2)} \frac{d}{2} \frac{(d+2)}{2} \frac{(d-2)}{2} \frac{(d-4)}{2} \frac{(d-6)}{2} \frac{(d-8)}{2} \frac{(d-10)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f \tau^7}{(f+e^\tau)^2} d\tau, \\
&\dots
\end{aligned} \tag{4.3}$$

As integrais que aparecem na equação (4.3) são solúveis analiticamente, conforme mostrado no Apêndice. Note que  $a_0^Q$ ,  $a_1^Q$  e  $a_2^Q$  recuperam os resultados de (3.43) e, para  $n \geq 3$ , os termos multiplicativos do tipo  $\frac{4}{d(d+2)} \frac{d}{2} \frac{(d+2)}{2}$  se reduzem a 1. É possível perceber, ainda, que a partir de  $n = 4$  os coeficientes passam a ser acrescidos apenas de um termo multiplicativo do tipo  $\frac{(d-b-2)}{2}$ , onde  $b$  representa o número do último termo multiplicativo do coeficiente anterior, no mesmo formato. Por exemplo, do coeficiente  $a_3^Q$  para o coeficiente  $a_4^Q$ ,  $b = 2$ . Semelhantemente, o termo multiplicativo do coeficiente  $a_4^Q$  será:  $\frac{(d-2-2)}{2} = \frac{(d-4)}{2}$ . Portanto, do coeficiente  $a_4^Q$  para o coeficiente  $a_5^Q$ ,  $b = 4$ . E assim se segue para os demais, como podemos observar na equação (4.3).

Consequentemente, é fácil perceber que o coeficiente  $a_{12}^Q$  é da forma:

$$\begin{aligned}
a_{12}^Q &= \frac{1}{12!} \frac{(d-2)}{2} \frac{(d-4)}{2} \frac{(d-6)}{2} \frac{(d-8)}{2} \frac{(d-10)}{2} \frac{(d-12)}{2} \\
&\quad \frac{(d-14)}{2} \frac{(d-16)}{2} \frac{(d-18)}{2} \frac{(d-20)}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^\tau f \tau^{12}}{(f+e^\tau)^2} d\tau
\end{aligned} \tag{4.4}$$

Ressaltamos ainda que, para valores de  $d$  pares, os coeficientes serão não nulos apenas até um determinado termo, o que implica na característica polinomial da energia livre. Por exemplo, para um sistema com  $d = 2$ , todos os coeficientes a partir de  $a_3^Q$  se anulam; isto quer dizer que a parte singular da energia livre será um polinômio de segunda ordem, enquanto que, para  $d = 4$ , todos os coeficientes se anulam a partir de  $a_4^Q$  e a energia livre torna-se um polinômio de ordem três, e assim por diante.

De fato, na próxima seção apresentaremos uma descrição físico-matemática do comportamento da parte singular da energia livre no regime quântico próximo ao PQC para as seguintes dimensões pares:  $d = 2, 4, 6, 8$  e  $10$ . Destaques qualitativos e quantitativos, que decorrem do nosso conhecimento adquirido sobre a intrínseca física-matemática subjacente, serão discutidos em termos das funções ou polinômios de Lerch.

## 4.2 Resultados e Discussão

Conforme já mencionamos, vamos apresentar o comportamento da parte singular da energia livre do Potencial Grande Canônico no regime quântico para dimensões pares até  $d = 10$ , com  $\Delta = 2$ . Em cada dimensão, observaremos a influência da temperatura e a convexidade da curva, em particular a monotonicidade das mesmas através da identificação dos intervalos nos quais as curvas são crescentes ou decrescentes.

### 4.2.1 Análise da Dimensão $d = 2$

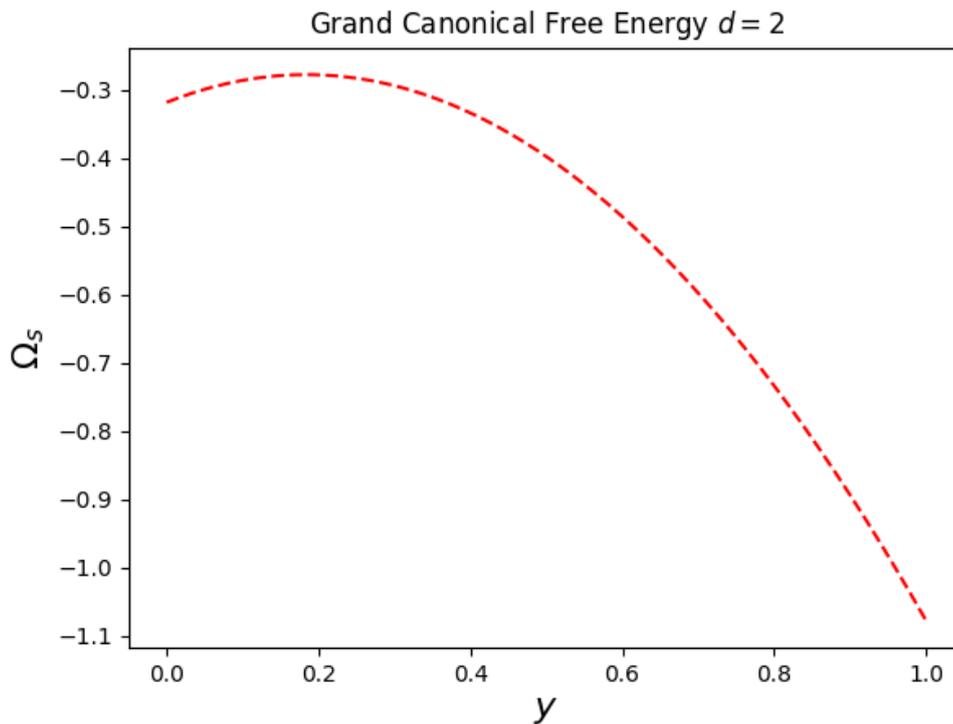
Neste item, analisaremos o comportamento da energia livre para  $d = 2$ . Neste caso, todos os coeficientes a partir de  $a_3^Q$  se anulam, tornando a energia livre um polinômio de segunda ordem. A constante  $A_d$  é obtida da expressão (3.40), para  $d = 2$ :

$$A_2 = \frac{4}{\Delta\pi} \quad (4.5)$$

e a função energia livre se escreve na forma:

$$\Omega_s/N = -A_2(a_0^Q + a_1^Q y + a_2^Q y^2) \quad (4.6)$$

**Figura 10** – Parte singular da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para  $d = 2$ .



Fonte : O autor (2021).

Como do conhecimento de aspectos fundamentais de análise matemática, o comportamento de uma função côncava ou convexa é identificado ao considerarmos a reta tangente à curva em um ponto escolhido no intervalo de interesse. Uma característica marcante e visual é o fato de que uma função é convexa se esta fica acima de qualquer reta tangente. Por outro lado, a função é dita côncava se toda a curva fica abaixo de qualquer reta tangente.

De fato, do gráfico na Fig. 10 para a energia livre em  $d = 2$  podemos concluir que a função é côncava e monotonicamente crescente até o máximo em  $(0.18, -0.277)$ , o que pode identificar uma instabilidade da energia livre; em seguida, a função passa ser monotonicamente decrescente.

#### 4.2.2 Análise da Dimensão $d = 4$

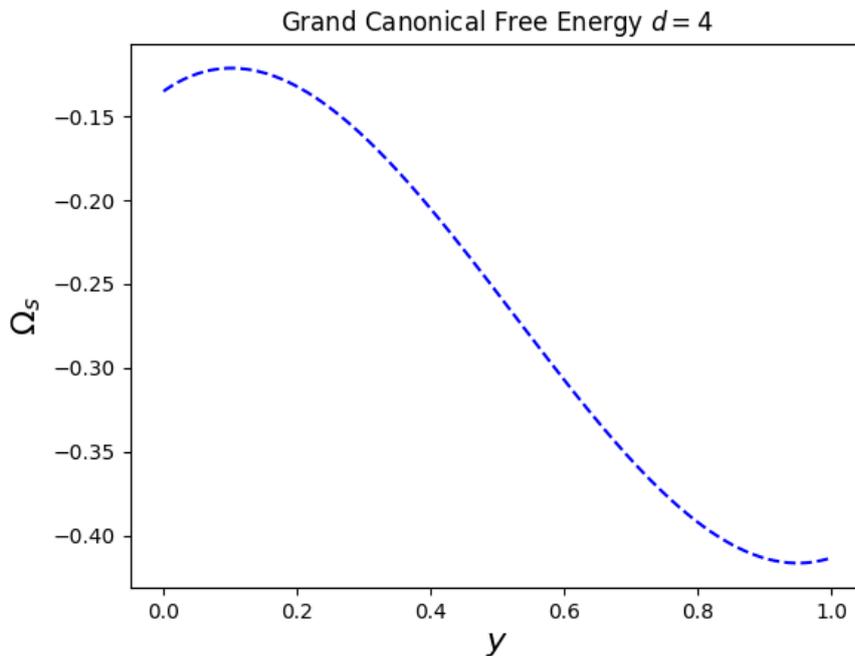
No caso em que  $d = 4$ , a energia livre apresenta coeficientes não nulos apenas até  $a_3^Q$ , como podemos observar em (4.3). Portanto, a energia livre se comportará como um polinômio de terceira ordem. A constante  $A_d$  para  $d = 4$  é:

$$A_4 = \frac{16}{\Delta\pi^2} \quad (4.7)$$

Logo, a função da energia livre passa a ser :

$$\Omega_s/N = -A_2(a_0^Q + a_1^Q y + a_2^Q y^2 + a_3^Q y^3) \quad (4.8)$$

**Figura 11** – Parte singular da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para  $d = 4$ .



Fonte : O autor (2021).

Como pode ser observado na Figura 11, o gráfico da parte singular do Grande Potencial no regime quântico é uma função côncava, monotonicamente crescente até seu ponto de máximo em  $(0.10, -0.12)$ , o que também pode identificar uma instabilidade na energia livre assim como em  $d = 2$ ; em seguida, passa a ser monotonicamente decrescente.

### 4.2.3 Análise da Dimensão $d = 6$

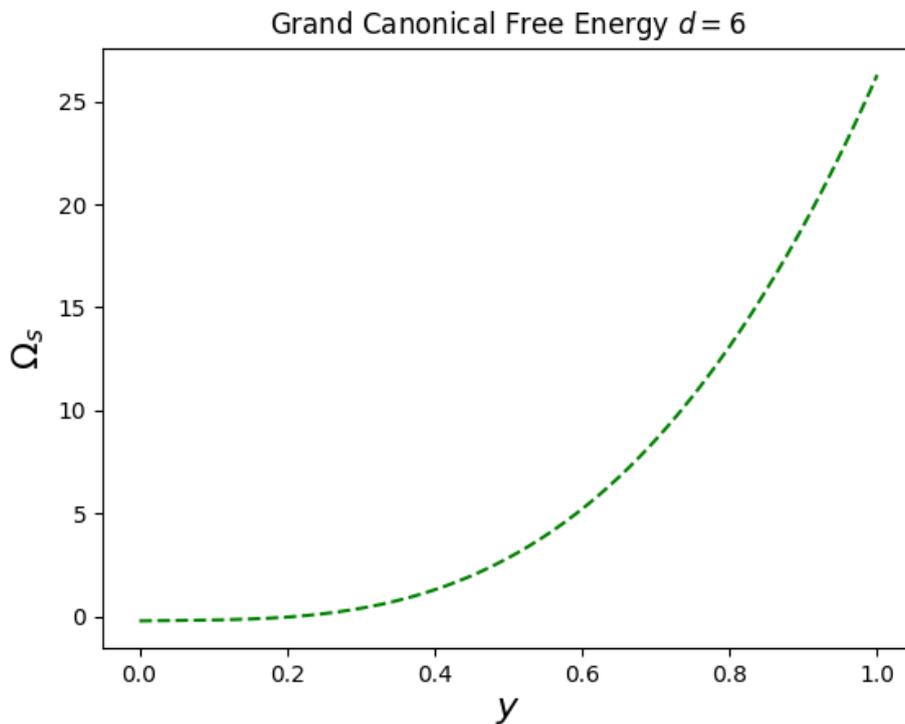
Ao examinarmos a expansão da energia livre para  $d = 6$ , podemos perceber que os coeficientes se anulam a partir de  $a_5^Q$ . Dessa forma, a energia livre passa a se comportar no formato de um polinômio de quarta ordem, onde a constante  $A_d$  para  $d = 6$  se escreve:

$$A_6 = \frac{2}{\Delta} \left( \frac{3}{\pi} \right)^3 \quad (4.9)$$

Neste caso, a parte singular da energia é escrita abaixo:

$$\Omega_s/N = A_6(a_0^Q + a_1^Q y + a_2^Q y^2 + a_3^Q y^3 + a_4^Q y^4) \quad (4.10)$$

**Figura 12** – Função da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para  $d = 6$ .



**Fonte :** O autor (2021).

O gráfico denota uma função convexa, sendo monotonicamente crescente.

#### 4.2.4 Análise da Dimensão $d = 8$

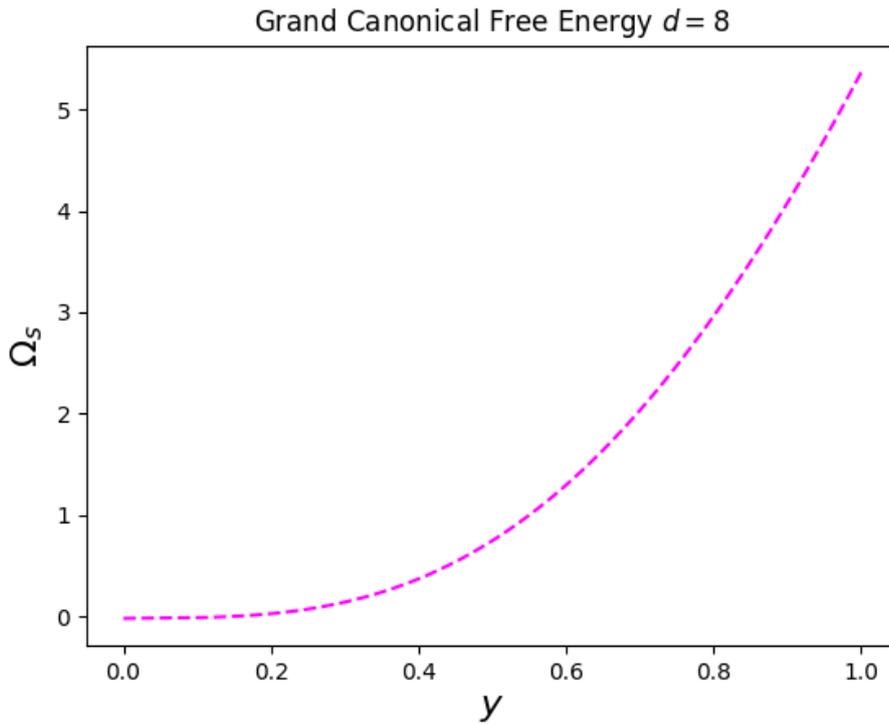
O estudo da energia livre para  $d = 8$  apresenta coeficientes não nulos até  $a_5^Q$ . Portanto, a energia livre se torna um polinômio de quinta ordem. A constante  $A_d$ , para  $d = 8$  se escreve:

$$A_8 = \frac{4}{6\Delta} \left(\frac{4}{\pi}\right)^4 \quad (4.11)$$

e a energia livre é escrita na forma:

$$\Omega_s/N = A_8(a_0 + a_1y + a_2y^2 + a_3y^3 + a_4y^4 + a_5y^5) \quad (4.12)$$

**Figura 13** – Função da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para  $d = 8$ .



**Fonte :** O autor (2021).

Nota-se que, para  $d = 8$ , a energia livre é, assim como em  $d = 6$ , uma função convexa, sendo monotonicamente crescente.

#### 4.2.5 Análise da Dimensão $d = 10$

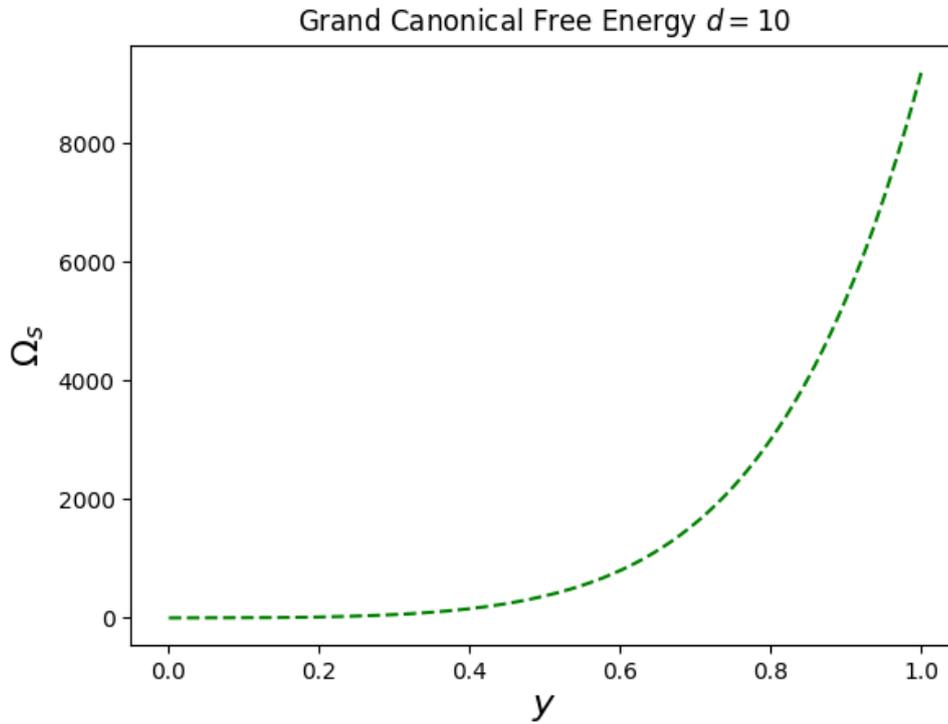
De forma semelhante, pode ser encontrado uma função para energia livre no caso em que  $d = 10$ . Desta vez, os coeficientes da expansão passam a ser nulos a partir de  $a_7^Q$ . A constante  $A_d$ , para  $d = 10$ , é expressa da seguinte forma:

$$A_{10} = \frac{4}{4!\Delta} \left(\frac{5}{\pi}\right)^5 \quad (4.13)$$

assim, a energia livre torna-se:

$$\Omega_s/N = A_{10}(a_0 + a_1y + a_2y^2 + a_3y^3 + a_4y^4 + a_5y^5 + a_6y^6) \quad (4.14)$$

**Figura 14** – Função da energia livre do grande potencial no regime quântico ( $y = T/g$ ), para  $d = 10$ .



**Fonte :** O autor (2021).

O gráfico abaixo para  $d = 10$  mostra a energia livre do Grande Potencial se comportando como uma função convexa, sendo monotonicamente crescente.

#### 4.2.6 Análise Qualitativa das Dimensões ímpares $d = 1$ e $d = 3$

Ao estudarmos as dimensões ímpares, pode-se perceber, da equação (4.3), que os coeficientes não se anulam para nenhum valor de  $d$  ímpar. Desta forma,  $\Omega_s$  passa a ser uma série com todos os coeficientes do tipo  $a_n^Q$  diferentes de zero.

Podemos comparar os coeficientes de cada dimensão par - apresentados acima - com os valores de cada coeficiente das dimensões ímpares de  $d = 1$  e  $d = 3$ , em detrimento de comentarmos a convergência da série. Visto que as dimensões pares não possuem coeficientes nulos, vamos calcular seus coeficientes até  $n = 12$ .

**Tabela 4.1** – Tabela dos Coeficientes com dependência da Dimensão  $d$ 

$d$	$a_0$	$a_1$	$a_2$	$a_3$	$a_4$	$a_5$	$a_6$	$a_7$	$a_8$
1	1.333	-1.386	1.885	-3.154	0.307	-2.635	16.026	43.517	403.529
2	0.5	-0.693	1.885	0	0	0	0	0	0
3	0.267	-0.462	1.885	-3.154	0.102	-0.527	-16.517	-43.517	403.529
4	0.167	-0.346	1.885	-1.196	0	0	0	0	0
6	0.083	-0.231	1.885	-12.616	0.818	0	0	0	0
8	0.05	-0.173	1.885	-18.924	2.456	-1.406	0	0	0
10	0.033	-0.277	1.885	-25.231	4.911	-33.732	-58.610	0	0

$d$	$a_9$	$a_{10}$	$a_{11}$	$a_{12}$
1	22238.66	14908.6	94135.90	1597805.77
2	0	0	0	0
3	22238.66	14908.59	94135.90	1597805.77
4	0	0	0	0
6	0	0	0	0
8	0	0	0	0
10	0	0	0	0

**Fonte :** O autor (2021).

A tabela mostra que os coeficientes para  $d = 1$  e  $d = 3$ , embora tenham valores muito próximos de 0 no coeficiente  $a_4^Q$ , apresentam valores que, mesmo quando interagem com os valores da variável  $y$ , não apresentam nenhum padrão de convergência. Plots da energia livre que podem ser feitos para essas dimensões mudam conforme se acrescenta mais e mais coeficientes, o que aparenta demonstrar um padrão de convergência. Logo, observamos que, para dimensões ímpares, a energia livre apresenta padrão que deve ser analisado caso a caso, a depender da necessidade do seu uso em fins específicos.

## 5 CONCLUSÃO

Nesta dissertação, conduzimos uma descrição detalhada a respeito de sistemas de muitas partículas fortemente correlacionados e que exibem uma transição de fase metal-isolante através da abordagem da estatística fracionária de exclusão proposta por Haldane [20]. Esse procedimento teórico mostrou sua relevância na descrição de sistemas de *Non Fermi Liquid*, como é o caso de supercondutores de altas temperaturas -*high- $T_c$*  e do *Fractional Quantum hall effect*.

Esses sistemas são governados pela mecânica estatística quântica. Destacamos que usamos um dos modelos mais importantes no tratamento teórico desses fenômenos, o modelo de Hubbard. Este, por sua vez, nos fornece uma das maneiras mais simples e efetivas, porém não triviais do ponto de vista físico-matemático, de se obter informações com respeito à interação entre os elétrons, e novos fenômenos subjacentes a transições de fase eletrônicas, magnéticas ou supercondutoras.

Descrevemos, ao longo do capítulo 2, como a abordagem da estatística fracionária de exclusão é efetivada através de uma generalização do Princípio de Exclusão de Pauli [42] e adequado na descrição das propriedades macroscópicas dos referidos sistemas.

No Capítulo 3, apresentamos uma aplicação desta metodologia a um sistema descrito pelo modelo de Hubbard com alcance infinito em redes hipercúbicas, como inicialmente proposta por Vitoriano e Coutinho-Filho *et al* [26]. Através da abordagem conduzida pela estatística fracionária, é realizado um mapeamento do sistema em um problema de um gás ideal de três espécies de partículas que obedecem à estatística fracionária de exclusão.

Esta abordagem nos permite caracterizar as fases metálica e isolante do sistema através da obtenção da estrutura de bandas eletrônicas e da densidade de estados do sistema. A estatística fracionária se manifesta em algumas propriedades termodinâmicas, como é o caso da energia livre do Grande Potencial. De fato, próxima do ponto quântico crítico da transição, a energia livre do Grande Potencial é descrita em dois regimes: regime quântico e regime quântico crítico. Embora todos os coeficientes tenham sido descritos para o regime quântico crítico em termos de funções de Lerch, para o regime quântico apenas três coeficientes foram calculados.

No Capítulo 4, mostramos como outros coeficientes podem ser calculados no regime quântico para este problema e como eles dependem da dimensão do sistema. Foi observado que, para valores de dimensões pares, o Grande Potencial, que é expresso por uma série de potências, é reduzido a funções polinomiais, o que nos possibilitou estudarmos a monotonicidade e convexidade dos mesmos.

Apresentamos a representação gráfica da parte singular de energia livre do Grande Potencial no regime quântico para várias dimensões pares:  $d = 2, 4, 6, 8$  e  $10$ . A convexidade das funções é notória para todas as dimensões. O Grande Potencial mostra ser uma função côncava para  $d = 2$  e  $d = 4$  com máximos em  $(0.18, -0.277)$  e  $(0.10, -0.12)$ , respectivamente. Enquanto que, para as dimensões  $d = 6, 8$  e  $d = 10$ , o Grande Potencial torna-se uma função convexa.

Por fim, fizemos um breve comentário a respeito das dimensões ímpares  $d = 1$  e  $d = 3$ . De fato, mostramos que a série para as dimensões ímpares possui todos os seus coeficientes diferentes de zero. Calculamos seus coeficientes até a décima segunda ordem, os quais apresentam valores bastante elevados, o que torna o caráter de convergência dessas séries

motivo de estudios futuros.

## REFERÊNCIAS

- [1] P.Drude *Annalen der Physik*, vol. 37, p. 566, 1900.
- [2] L. Landau and E.M.Lifshitz, *Statistical Physics*. Addison-Wesley, 1969.
- [3] N.F.Mott, *Metal-Insulator Transitions*. CRC Press, 1990.
- [4] N.F.Mott *Proc. Phys. Soc.*, vol. 62, p. 416, 1949.
- [5] E. H. Lieb and F. Y. Wu *Phys.Rev.Lett.*, vol. 20, p. 1445, 1968.
- [6] P.W.Anderson *Phys. Rev.*, vol. 109, p. 1492, 1958.
- [7] J. Hubbard *Proc. Roy. Soc.*, vol. 276, p. 238, 1963.
- [8] J. Hubbard *Proc. Roy. Soc.*, vol. 277, p. 237, 1964.
- [9] J. Hubbard *Proc. Roy. Soc.*, vol. 281, p. 401, 1964.
- [10] W.F.Brinkman and K. Rice *Phys. Rev. B*, vol. 2, p. 4302, 1970.
- [11] M.C.Gutzwiller *Phys.Rev*, vol. 137, p. A1726, 1965.
- [12] J.G.Bednorz and K.A.Miller *Z. Phys.B*, vol. 64, p. 189, 1986.
- [13] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer *Phys. Rev*, vol. 108, p. 1175, 1957.
- [14] L. N. Cooper *Phys. Rev*, vol. 104, p. 1189, 1956.
- [15] P.W.Anderson, *The theory of Superconductivity in the High- $T_c$  Cuprates*. Princeton University Press, 1997.
- [16] F. Gebhard and A.E.Ruckenstein *Phys.Rev.Lett.*, vol. 68, p. 244, 1992.
- [17] W.Metzner and D. Vollhardt *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, p. 244, 1992.
- [18] A.Georges, G. Kotliar, W.Krauth, and M.J.Rozenberg *Rev. Mod. Phys*, vol. 68, p. 13, 1996.
- [19] F. Wilczek, *Fractional Statistics and Anyon Superconductivity*. World Scientific, 1990.
- [20] F. Haldane *Phys. Rev. Lett.*, vol. 67, p. 937, 1991.
- [21] M.D.Johnson and G. Canright *Phys. Rev. B*, vol. 49, p. 2947, 1994.
- [22] J. Shiraishi, M. khomoto, and Y.S.Wu *Europhys. Lett.*, vol. 41, p. 541, 1998.
- [23] Y.S.Wu and Y. Yu *Phys. Rev. Lett.*, vol. 75, p. 890, 1995.
- [24] Y.Hatsugai, M.Kohmoto, T. Koma, and Y.S.Wu *Phys. Rev. B*, vol. 54, p. 5358, 1996.
- [25] C. Nayak and F. Wilczek *Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, p. 2740, 1994.

- [26] C. Vitoriano, L. B. Bejan, A. M. S. Macêdo, and M. D. Coutinho-Filho *Phys. Rev. B*, vol. 61, p. 7941, 2000.
- [27] C. Vitoriano and M. D. Coutinho-Filho *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 146404, 2009.
- [28] C. Vitoriano, R. R. Montenegro-Filho, and M. D. Coutinho-Filho *Phys. B*, vol. 98, p. 085130, 2018.
- [29] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura *Rev. Mod. Phys.*, vol. 70, p. 1039, 1998.
- [30] D. Adler *Rev. Mod. Phys.*, vol. 40, p. 714, 1968.
- [31] P. Limelette, A. Georges, P. W. D. J'erome, and J. P. Metcalf *Science*, vol. 302, p. 89, 2003.
- [32] S. Y. Kim, M. C. Lee, G. Han, M. Kratochvilova, S. Yun, S. J. Moon, C. Sohn, J. G. Park, C. Kim, and T. W. Noh *Adv. Mater.*, vol. 44, p. 1704777, 2018.
- [33] F. Gebhard, *The Mott Metal Isolator Transitions*. Springer, 2010.
- [34] S. Sachdev, *Quantum Phase Transition*. Cambridge University Press, 1999.
- [35] D. Freitas, P. Rodière, M. Núñez, G. Garbarino, A. Sulpice, J. Marcus, F. Gay, M. A. Continentino, and M. Núñez-Regueiro *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 205123, 2015.
- [36] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 1971.
- [37] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*. Cambridge University Press, 2017.
- [38] J. M. Leinaas and J. Myrheim *Nuovo Cim*, vol. 370, p. 1, 1977.
- [39] F. Wilczek *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, p. 957, 1982.
- [40] F. Wilczek and A. Zee *Phys. Rev. Lett.*, vol. 51, p. 2250, 1983.
- [41] R. McKenzie and F. Wilczek *Int. J. Mod. Phys.*, vol. A3, p. 2827, 1988.
- [42] Y. Wu *Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, p. 922, 1994.
- [43] M. V. N. Murthy and R. Shankar *The IMSc Report No. 120*, pp. 1–104, 2009.
- [44] M. V. N. Murthy and R. Shankar *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, p. 3629, 1994.
- [45] R. Bhaduri and D. Sen *Phys. Rev. Lett.*, vol. 74, p. 3912, 1995.
- [46] T. Aoyama *Eur. Phys. B.*, vol. 20, p. 123, 2001.
- [47] E. N. Economou, *Green's Function in Quantum Physics*. Springer, 1990.

## APÊNDICE A - INTEGRAIS DOS COEFICIENTES DE EXPANSÃO

Neste apêndice, apresentaremos os resultados das integrais que compõem em cada coeficiente na expansão da parte singular da energia livre do Grande Potencial. Como podemos observar na Tabela 4.1, os coeficientes dependem da dimensão  $d$  do sistema, embora as integrais que os compõem sejam independentes de  $d$ .

Portanto, de modo geral, as integrais para qualquer  $n$  são expressas na forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^n}{(f + e^{\tau})^2} d\tau \quad (\text{A.1})$$

Logo, para cada valor de  $n$ , obtemos o resultado da integral que está relacionado ao seu respectivo coeficiente. Para os valores de  $n = 0, 1$  e  $2$ , recuperamos os resultados apresentados por Vitoriano e colaboradores *et al* [26], como mostrado em (3.43). Os resultados para  $n \geq 3$  até  $n = 12$  são da forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^3}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = [(\ln f)^3 + \pi^2 \ln(f)] \quad (\text{A.2})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^4}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = \left[ \frac{15(\ln f)^4 + 30\pi^2(\ln f)^2 + 7\pi^4}{15} \right] \quad (\text{A.3})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^5}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = \left[ \frac{3(\ln f)^5 + 10\pi^2(\ln f)^3 + 7\pi^4 \ln f}{3} \right] \quad (\text{A.4})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^6}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = \left[ \frac{21(\ln f)^6 + 105\pi^2(\ln f)^4 + 147\pi^4(\ln f)^2 + 31\pi^6}{21} \right] \quad (\text{A.5})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^7}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = \left[ \frac{3(\ln f)^7 + 21\pi^2(\ln f)^5 + 49\pi^4(\ln f)^3 + 31\pi^6 \ln f}{3} \right] \quad (\text{A.6})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^8}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = \left[ \frac{15(\ln f)^8 + 140\pi^2(\ln f)^6}{15} \right] + \left[ \frac{490\pi^4(\ln f)^4 + 620\pi^6(\ln f)^2 + 127\pi^8}{15} \right] \quad (\text{A.7})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^9}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = \left[ \frac{5(\ln f)^9 + 60\pi^2(\ln f)^7 + 294\pi^4(\ln f)^5}{5} \right] + \left[ \frac{620\pi^6(\ln f)^3 + 381\pi^8 \ln f}{5} \right] \quad (\text{A.8})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^{10}}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = \left[ \frac{33(\ln f)^{10} + 495\pi^2(\ln f)^8 + 3234\pi^4(\ln f)^6}{33} \right] + \left[ \frac{10230\pi^6(\ln f)^4 + 12573\pi^8(\ln f)^2 + 2555\pi^{10}}{33} \right] \quad (\text{A.9})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^{11}}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = \left[ \frac{3(\ln f)^{11} + 55\pi^2(\ln f)^9 + 462\pi^4(\ln f)^7}{3} \right] + \left[ \frac{2046\pi^6(\ln f)^5 + 4191\pi^8(\ln f)^3 + 2555\pi^{10} \ln f}{3} \right] \quad (\text{A.10})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{\tau} f \tau^{12}}{(f + e^{\tau})^2} d\tau = \left[ \frac{1365(\ln f)^{12} + 30030\pi^2(\ln f)^{10} + 315315\pi^4(\ln f)^8}{1365} \right] + \left[ \frac{1861860\pi^6(\ln f)^6 + 5720715\pi^8(\ln f)^4 + 6975150\pi^{10}(\ln f)^2 + 1414477\pi^{12}}{1365} \right] \quad (\text{A.11})$$