



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

GABRIEL FERNANDES DE OLIVEIRA RAMOS

**ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA E A TERMODINÂMICA DO MODELO DE
HUBBARD COM ALCANCE INFINITO NO REGIME DE SPIN INCOERENTE**

Recife
2023

GABRIEL FERNANDES DE OLIVEIRA RAMOS

**ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA E A TERMODINÂMICA DO MODELO DE
HUBBARD COM ALCANCE INFINITO NO REGIME DE SPIN INCOERENTE**

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

2023

Catálogo na fonte
Bibliotecária Nataly Soares Leite Moro, CRB4-1722

R175e Ramos, Gabriel Fernandes de Oliveira
Estatística fracionária e a termodinâmica do modelo de Hubbard com alcance infinito no regime de spin incoerente / Gabriel Fernandes de Oliveira Ramos. – 2023.
60 f.: il., fig., tab.

Orientador: Maurício Domingues Coutinho Filho.
Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN, Física, Recife, 2023.
Inclui referências.

1. Física teórica e computacional. 2. Modelo de Hubbard de alcance infinito. 3. Estatística fracionária de exclusão. 4. Termodinâmica. 5. Spin incoerente I. Coutinho Filho, Maurício Domingues (orientador). II. Título.

530.1 CDD (23. ed.) UFPE- CCEN 2023 - 47

GABRIEL FERNANDES DE OLIVEIRA RAMOS

**ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA E A TERMODINÂMICA DO MODELO DE
HUBBARD COM ALCANCE INFINITO NO REGIME DE SPIN INCOERENTE**

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: 09/03/2023.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Maurício Domingues Coutinho Filho
Orientador
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo
Examinador Interno
Universidade Federal de Pernambuco

Prof. Francisco Castilho Alcaraz
Examinador Externo
Universidade de São Paulo

Prof. Silvio Roberto de Azevedo Salinas
Examinador Externo
Universidade de São Paulo

AGRADECIMENTOS

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

Agradeço também o apoio de sempre dos meus familiares e amigos: minha mãe Edja; meu pai Rosilvado; minha avó Sônia; meus tios Evandro, Everton e Aercio; minhas tias Ana e Neide; meu primo João Pedro; meus primos(as) Felipe e Fernanda e suas famílias; minha namorada Brendha e família; meu orientador Maurício Coutinho e a professora Sandra Sampaio; e meus amigos(as) Cintia, Lucas, Duda e Karina.

RESUMO

Nos dois capítulos iniciais, abordamos a motivação e os fundamentos da estatística fracionária de exclusão (EFE) de Haldane. Esta proposta foi formulada por F. D. M. Haldane em 1991, e concerne uma generalização do princípio de Pauli para sistemas de muitas partículas. Essa estatística é baseada na contagem de estados quânticos e é válida em qualquer dimensão espacial. Além disso, verificamos que a EFE se mostra efetiva para mapear sistemas de bósons ou férmions interagentes em um sistema de quasipartículas com estatística governada por uma matriz g , com aspectos físico-matemáticos bem definidos. Em seguida, descrevemos o exemplo de Wu, isto é, o gás ideal composto dessas quasipartículas ou espécies, denominadas *exclusons*, permitindo a derivação de propriedades como número de ocupação e energia total. Ressaltamos, nesse contexto, a nossa proposta de uma demonstração alternativa do teorema abaixo: "Em duas dimensões, o calor específico a volume constante é independente de g ". Após a introdução dos métodos de estatística fracionária, nós os utilizamos para tratar o modelo de Hubbard de alcance infinito. De fato, este modelo interagente pode ser mapeado em um gás ideal de três espécies de *exclusons* obedecendo à uma EFE de Haldane-Wu com uma matriz estatística g bem definida. Esta formulação foi utilizada, com sucesso, na descrição de outras variações do modelo de Hubbard. Assim, foi determinada a energia livre grã-canônica do sistema e, em seguida, usando a parte singular da energia livre, exploramos o sistema na região próxima ao ponto crítico: $T = 0$, $\mu = 0$ e $U = \Delta$. Nessa região, a energia livre é representada por uma série de potências, permitindo o cálculo dos expoentes críticos associados aos regimes quântico e quântico crítico. Salientamos que, no regime quântico crítico, os coeficientes da série são dados em termos das funções de Lerch. Por fim, derivamos resultados no contexto do modelo de Hubbard de alcance infinito no regime de spin incoerente. Em particular, derivamos a energia livre grã-canônica no limite de acoplamento forte, permitindo o cálculo da entropia e do calor específico. Mostramos que essas quantidades são descritas por séries de potências, cujos coeficientes são resumidos em duas tabelas, das quais podemos obter gráficos para várias dimensões (até dez), e no limite $d \rightarrow \infty$. Para dimensões pares, as séries são finitas e definidas por funções polinomiais com ordem crescente com a dimensionalidade. Destacamos, ainda, o uso de técnicas de soma de Borel para contornar a divergência da série para dimensões ímpares.

Palavras-chave: modelo de Hubbard de alcance infinito; estatística fracionária de exclusão; termodinâmica; spin incoerente.

ABSTRACT

The first two chapters address the motivation and foundations of Haldane's Fractional Exclusion Statistics (FES). This proposal was formulated by F. D. M. Haldane in 1991, and concerns a generalization of Pauli's principle to many-particle systems. This statistics is based on counting quantum states and is valid in any spatial dimension. Furthermore, we verify that the FES is effective for mapping systems of interacting bosons or fermions in quasi-particle systems with statistics governed by a g matrix, with well-defined physico-mathematical aspects. Next, we describe Wu's example, i. e., the ideal gas composed of these quasiparticles or species, called *exclusons*, allowing the derivation of properties such as the occupation number and the total energy. In this context, we highlight our proposal for an alternative proof of the following theorem: "In two dimensions, the specific heat at constant volume is independent of g ". After the introduction of fractional statistics methods, we used them to treat the infinite-range Hubbard model. In fact, this interacting model can be mapped onto an ideal gas of three species of *exclusons* governed by a FES of Haldane-Wu with a well-defined g statistical matrix. This formulation was successfully used to describe other variations of the Hubbard model. Thus, grand-canonical free energy of the system was determined, whose singular part was explored in the region close to the critical point: $T = 0$, $\mu = 0$ and $U = \Delta$. In fact, the free energy is represented by adequate power series, allowing the calculation of the critical exponents associated with both the quantum and quantum critical regimes. We point out that, in the quantum critical regime, the coefficients of the series are given in terms of the Lerch functions. Finally, we derive results in the context of the infinite-range Hubbard model in the spin-incoherent regime. In particular, we derive the grand-canonical free energy in the strong coupling limit, allowing the calculation of entropy and specific heat. We show that these quantities are described by power series, whose coefficients are summarized in two tables, from which we can obtain graphs for several dimensions (up to ten), and in the limit $d \rightarrow \infty$. For even dimensions, the series are finite and defined by polynomial functions with increasing order of dimensionality. We also highlight the use of Borel summation techniques to circumvent the divergence of the series for odd dimensions.

Keywords: infinite-range Hubbard model; fractional exclusion statistics; grand-canonical free energy; spin-incoherent.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 -	Curvas dos números de ocupação para $g = 1$	20
Figura 2 -	Curvas dos números de ocupação $g = 1/2$	20
Figura 3 -	Curvas dos números de ocupação para $g = 2$	21
Figura 4 -	Diagrama de fase em função de g e T , com linhas de <i>crossover</i>	41
Figura 5 -	Entropia por sítio, S , como função da temperatura adimensional, T/t , para várias dimensões.	51
Figura 6 -	Calor específico por sítio, C , em função da temperatura adimensional, T/t , para várias dimensões.	53

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO À ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA	9
2	MECÂNICA ESTATÍSTICA DE UM SISTEMA GOVERNADO POR UMA ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA	13
2.1	A função de partição no limite $d \rightarrow \infty$	13
2.1.1	<i>Partícula de massa m confinada em uma Caixa de tamanho L em D dimensões</i>	15
2.1.2	<i>Sistema harmonicamente confinado com frequência ω e dimensão D</i>	16
2.2	Mecânica estatística do gás ideal governado por uma FES	16
2.3	Propriedades de um Gás Homogêneo	21
2.4	Gás homogêneo em bidimensional	25
2.5	Problema de Wu: Gás Ideal Generalizado	28
3	MAPEAMENTO DO MODELO DE HUBBARD DE ALCANCE INFINITO	32
3.1	O Modelo e suas Propriedades	32
3.2	Representação de Exclusão	34
3.3	Análise de Escala do Grande Potencial Ω	38
4	TERMODINÂMICA DO MODELO DE HUBBARD DE ALCANCE INFINITO NO REGIME DE SPIN INCOERENTE	46
4.1	Energia livre grã-canônica no regime de spin incoerente	46
4.2	Propriedades Termodinâmicas: Entropia e Calor Específico	49
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	55
5.1	Conclusões	55
5.2	Motivações para pesquisas futuras	56
	REFERÊNCIAS	57

1 INTRODUÇÃO À ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA

Os bósons e férmions são partículas caracterizadas pela forma como suas funções de onda respondem à troca das posições de duas partículas idênticas. Baseando-se no princípio de Pauli, bósons apresentam simetria com relação a essa troca, de tal forma que, $\phi_1(\beta)\phi_2(\gamma) = \phi_1(\gamma)\phi_2(\beta)$. Isso permite que vários bósons possam ocupar um mesmo estado quântico; logo, constrói-se a estatística de Bose-Einstein para descrevê-los. Os férmions, no entanto, apresentam uma resposta antissimétrica com relação à troca de posições: $\phi_1(\beta)\phi_2(\gamma) = -\phi_1(\gamma)\phi_2(\beta)$. Então, apenas um férmion poderá ocupar determinado estado quântico e assim constrói-se a estatística de Fermi-Dirac, que teve sua origem associada ao modelo de Thomas-Fermi para o átomo [1]. No final do século XX, foram descobertas, no contexto do efeito Hall quântico fracionário [2], quase-partículas ou excitações elementares com carga fracionária, que não se encaixam, estritamente, em nenhuma das situações descritas. Essas quase-partículas, denominadas *anyons* [3, 4], correspondem a excitações elementares no interior de um grande sistema de partículas interagentes. Os anyons satisfazem uma estatística fracionária, intermediária às de Fermi-Dirac e Bose-Einstein. Neste contexto, pode-se generalizar o princípio de Pauli, para também incluir os anyons, onde para a troca de posição entre duas partículas do sistema, temos que

$$\phi_1(\beta)\phi_2(\gamma) = e^{i\alpha\pi}\phi_1(\gamma)\phi_2(\beta). \quad (1.1)$$

Na equação acima, $\alpha \in [0, 1]$ é um parâmetro estatístico, tal que para $\alpha = 0$ ($\alpha = 1$) temos um sistema de bósons (férmions). Os anyons são governados pela estatística fracionária de troca (em inglês: *fractional exchange statistics*), com propriedades mais identificadas em sistemas bidimensionais. Recentemente, dados experimentais indicaram uma observação direta que comprova a existência de anyons na natureza [5].

Em 1991, Haldane deu uma contribuição fundamental ao propor uma estatística fracionária baseada na contagem de estados quânticos: estatística fracionária de exclusão (em inglês, FES, *fractional exclusion statistics*), válida em qualquer dimensão. Para exemplificar, podemos considerar um sistema de N partículas inseridas num sistema quântico representado por um espaço de Hilbert d -dimensional. A função de onda total do sistema é dada por

$$\psi_N(r_1, r_2, \dots, r_N) = \sum_{\nu} A_{\nu}(\{r_j; j \neq i\})\phi_{\nu}(r_i; \{r_j; j \neq i\}), \quad (1.2)$$

onde os $\phi_{\nu}(r_i)$ geram um espaço de Hilbert d_N -dimensional, e os $A_{\nu}(r_j)$ são os respectivos coeficientes. Definindo d_N^g como o número de estados disponíveis para se acrescentar uma partícula quando no sistema já estão inseridas $(N - 1)$ partículas. Para um sistema de bósons, por exemplo, não há qualquer restrição com relação à ocupação dos estados, logo $d_N^B = d$. Os férmions, no entanto, apresentam restrições de ocupação, isto é, $d_N^F = d - (N - 1)$, de tal forma que só poderá haver uma partícula em cada estado. Tendo em vista os casos de férmions ou bósons, é possível inferir uma generalização para o d_N^g :

$$d_N^g = d - g(N - 1), \quad (1.3)$$

onde $g = 0$ ($g = 1$) para bósons (férmions). Na definição original de Haldane, foi proposta a seguinte equação:

$$\Delta d_N^g = -g\Delta N. \quad (1.4)$$

A equação acima é a generalização para sistemas com várias espécies de partículas, neste trabalho denominadas *exclusons*, governadas por uma matriz g . Esta definição é consistente pois, à medida que novas partículas são inseridas no sistema, o número de estados disponíveis deve diminuir ou permanecer o mesmo (bósons), a depender da matriz g . Note que, partindo da equação (1.4), é simples inferir a equação (1.3).

Em adição, podemos definir D_N^g como o número total de configurações possíveis para as N partículas fracionárias no espaço de Hilbert d -dimensional e, assim, encontrar uma forma explícita para esta quantidade por comparação com os casos bosônico e fermiônico. Lembrando que, para um sistema de férmions, em cada um dos d estados só pode haver a ausência ou a presença de 1 partícula, o número total de configurações D_N^F é dado pela combinatória simples de d em N :

$$D_N^F = \frac{d!}{(d-N)!N!}. \quad (1.5)$$

Para bósons, cada estado pode comportar um número qualquer de partículas, o que dificulta a estatística do problema. Neste caso, o número de configurações D_N^B pode ser obtido resolvendo um problema semelhante, isto é, a disposição de N "bolas" e $(d-1)$ "varetas" [6], onde temos que

$$D_N^B = \frac{(d+N-1)!}{(d-1)!N!}. \quad (1.6)$$

Agora, usando a equação (1.3) podemos reescrever as equações acima em função do d_N^g : para bósons ($g=0$), $D_N^B = \frac{(d_N^B + N - 1)!}{N!(d_N^B - 1)!}$; e para férmions ($g=1$), $D_N^F = \frac{(d_N^F + N - 1)!}{N!(d_N^F - 1)!}$. Percebe-se que essas equações apresentam o mesmo formato, o que nos leva a escrever a forma geral de D_N^g em função de d_N^g para um g arbitrário:

$$D_N^g = \frac{(d_N^g + N - 1)!}{N!(d_N^g - 1)!}, \quad (1.7)$$

onde d_N^g ratifica a equação (1.3), o que implica:

$$D_N^g = \frac{[d + (1-g)(N-1)]!}{N![d - gN - (1-g)]!}. \quad (1.8)$$

O aspecto inovador é a introdução de um parâmetro estatístico g , que generaliza as possibilidades para sistemas interagentes na física da matéria condensada, como veremos adiante.

Em geral, tratamos sistemas interagentes a partir do cálculo dos coeficientes do virial, mas a interação não altera a estatística a ser utilizada, seja de Fermi-Dirac ou Bose-Einstein. Mas sabemos que a presença de uma interação altera sensivelmente o espaço de configurações do sistema, alterando, assim, D_N^g . Diante disso, podemos pensar: E se tratássemos o sistema como não-interagente e para compensar mudássemos a estatística do sistema, ou seja, tratar as interações como se fossem meramente estatísticas. De fato, a FES se mostrou efetiva em alguns modelos físicos interagentes, dentre eles o efeito hall quântico fracionário [7, 8] e os modelos de Luttinger [9] e Hubbard [10]. Esses resultados são muito importantes, pois nos levam a concluir que um sistema de bósons ou férmions interagentes pode ser mapeado em um sistema de quase-partículas, ou excitações elementares, não interagentes com determinado parâmetro "g". Isso se torna bastante

interessante pois, dependendo do problema, ele pode se tornar mais tratável ou também ter uma interpretação física mais clara, se mapeado em uma FES de Haldane [11]. A seguir, vamos mostrar um exemplo simples que ilustra esse mapeamento [12].

Considere um sistema de N partículas idênticas (bosóns ou férmions) confinadas harmonicamente em 1 dimensão espacial (1D), com frequência ω . Nesse caso, a energia do sistema, como já é bem conhecida na literatura [13], é dada por

$$E_N = \hbar\omega \sum_i \left(n_i + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left[\sum_i n_i + \frac{N}{2} \right], \quad (1.9)$$

onde $n_i \in N$ (números naturais incluindo o 0) representa o número de ocupação do estado i . Se as partículas interagem entre pares com magnitude de interação g , teremos um acréscimo de um termo da forma:

$$E_g = g \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N n_i n_j = \frac{gN(N-1)}{2}, \quad (1.10)$$

e a energia total do sistema é dada por

$$E = E_N + E_g = \hbar\omega \left[\sum_i n_i + \frac{gN(N-1)}{2} + \frac{N}{2} \right]. \quad (1.11)$$

Agora, podemos reescrever a expressão acima de uma forma idêntica a (1.9):

$$E = \hbar\omega \left(\sum_i \bar{n}_i + \frac{N}{2} \right), \quad (1.12)$$

onde $\bar{n}_i$ é um número de ocupação efetivo:

$$\bar{n}_i = n_i + g(i-1). \quad (1.13)$$

Assim, o termo de interação foi totalmente absorvido pelo $\bar{n}_i$, provocando apenas alterações nos quantas de excitação. Calculando agora a diferença de ocupação entre estados energéticos efetivos vizinhos, temos que

$$\bar{n}_{i+1} - \bar{n}_i = n_{i+1} - n_i + g. \quad (1.14)$$

Percebemos, assim, que o preço a pagar pela introdução do $\bar{n}_i$ é que a diferença de energia entre os quantas de excitação passa a ter um acréscimo de g . Agora, se compararmos (1.13) e (1.3), podemos relacionar imediatamente o número efetivo de ocupação com a distribuição estatística do sistema. Dessa forma, com esse exemplo simples, identificamos a possibilidade de usar a estatística fracionária para absorver as interações físicas do sistema.

Neste estágio, temos uma intuição de como funciona o mapeamento de um sistema interagente utilizando a FES e de suas possíveis utilidades. No próximo capítulo, iremos obter propriedades estatística dos sistemas com estatística fracionária. Inicialmente, exploraremos os limites físicos das expressões obtidas acima, calculando diretamente a função de partição do sistema sob FES. Em seguida, descreveremos o mapeamento em uma FES de alguns sistemas simples: oscilador harmônico e poço infinito, para ganhar intuição sobre os métodos a serem utilizados. Adicionalmente, abordaremos o problema de Wu [14], que trata da solução do gás ideal sob uma FES. E, por fim, faremos uma

aplicação dos resultados obtidos ao gás homogêneo, onde relatamos alguns resultados originais para sistemas bidimensionais.

No capítulo 3, descreveremos as propriedades do modelo de Hubbard com interação de alcance infinito em redes hipercúbicas via FES [10]. Inicialmente, vamos demonstrar que esse sistema pode ser mapeado em um gás ideal de 3 espécies, obedecendo a uma FES. A partir disso, vamos aplicar o formalismo de Wu ao problema para derivar a energia livre grã-canônica. Finalmente, estudaremos as propriedades deste sistema na criticalidade; em especial, mostraremos que, no regime quântico crítico, as funções de Lerch aparecerão como uma assinatura da estatística fracionária.

No capítulo 4, utilizaremos os resultados do capítulo anterior para examinar o regime de spin incoerente [15] do modelo de Hubbard com interação de alcance infinito. Esse capítulo relata nossos resultados originais que foram compilados em um artigo [16]. Inicialmente, focaremos na derivação da energia livre grã-canônica. Em seguida, examinaremos algumas propriedades termodinâmicas: entropia e o calor específico. Mostraremos que essas grandezas são descritas por séries de potências, cujos coeficientes são resumidos em duas tabelas; assim, podemos obter gráficos para várias dimensões (até dez), e no limite $d \rightarrow \infty$. Para dimensões pares as séries são finitas e dadas por funções polinomiais com ordem crescente com a dimensionalidade. Destacamos, também, o uso de técnicas de soma de Borel para contornar a divergência das séries para dimensões ímpares. Por fim, as conclusões são resumidas no capítulo 5.

2 MECÂNICA ESTATÍSTICA DE UM SISTEMA GOVERNADO POR UMA ESTATÍSTICA FRACIONÁRIA

No capítulo anterior, concluímos que é possível mapear um sistema de partículas interagentes em um sistema de *exclusons* governado por uma estatística fracionária com um g bem definido. A partir desses resultados, neste capítulo derivaremos propriedades estatísticas de alguns sistemas governados por uma FES. Como ilustração, calcularemos a função de partição do sistema e sua relação com o parâmetro g . Neste esquema, g é completamente determinado a menos de uma constante multiplicativa C , que depende apenas da geometria do sistema. Determinaremos essa constante para dois sistemas simples: a partícula na caixa e o oscilador harmônico.

Em seguida, abordaremos uma versão simplificada [12] do problema de Wu para o gás ideal governado por uma FES [14]. Para tal, uma generalização do D_N foi identificada e relacionada com a função de partição do sistema. Assim, é possível obter uma equação transcendental, envolvendo o número de ocupação médio n_i , que é relacionada com a função de Wu [14], o que nos permite derivar diversas propriedades do gás ideal. Como exemplo, tem-se o fato de que o gás não se condensa em um único estado de energia para $g \neq 0$, e, também que há formação de uma superfície de Fermi limitada em $1/g$. Para ilustrar melhor, foram feitos gráficos da distribuição de partículas para distintos valores de g . Além disso, detalhamos as equações que descrevem o número de partículas N e a energia total E de um gás homogêneo, culminando na solução do problema do gás homogêneo bidimensional. Para este problema, foi feita uma derivação original da energia total do sistema em termos das energias para bósons e para férmions e do parâmetro g , e provamos que sua consistência em qualquer temperatura. No caso da energia E , aparece a função dilogaritmo (caso especial da função zeta de Lerch), uma assinatura de um sistema governado por uma FES. Com isso, obtemos uma derivação alternativa (original) de um resultado crucial: Em duas dimensões espaciais (2D), o calor específico é independente da estatística do sistema. Por fim, abordamos o gás generalizado de Wu e suas propriedades.

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

No capítulo anterior, obtemos a equação (1.8) que nos dá o número total de configurações possíveis D_N^g para um sistema de N partículas em um espaço de Hilbert de tamanho d , governado por uma FES. Para melhor entendimento do que foi obtido, nossa tarefa inicial foi a de buscar informações do comportamento da variável D_N^g em alguns limites físicos. Iniciamos com o limite em que o espaço de Hilbert associado às partículas é infinito, $d \rightarrow \infty$, o que equivale a tomar o limite do contínuo. Para tal, primeiro expandimos os fatoriais do D_N^g , explicitando as potências de d^N e d^{N-1} :

$$D_N^g = \frac{1}{N!} [d^N + \left\{ \sum_{i=0}^{N-1} [(N-1)(1-g) - i] \right\} d^{N-1} + \dots]. \quad (2.1)$$

Note que aparece um somatório como coeficiente de d^{N-1} . Este somatório é resolvido por progressão aritmética, $S_{N-1} = (a_0 + a_{N-1}) \frac{N}{2}$, onde a_0 é o primeiro termo e a_{N-1} é o

último termo. Por fim, obtemos que

$$D_N^g = \frac{1}{N!} [d^N + N(N-1)\left(\frac{1}{2} - g\right)d^{N-1} + \dots]. \quad (2.2)$$

Agora, podemos isolar o coeficiente $(1/2 - g)$ que multiplica d^{N-1} na equação (2.2), de forma a obter a relação: $1/2 - g = \frac{d}{N(N-1)} \left[\frac{N! D_N^g}{d^N} - 1 - \dots \right]$. No limite $d \rightarrow \infty$ os termos representados pelas reticências têm potências negativas de d , e tenderão a zero; então,

$$\frac{1}{2} - g = \lim_{d \rightarrow \infty} \frac{d}{N(N-1)} \left[\frac{N! D_N^g}{d^N} - 1 \right]. \quad (2.3)$$

A equação acima determina g em função do D_N^g . Mas essa quantidade não é simples de se obter em sistemas físicos reais. Por outro lado, podemos associar D_N^g com a função de partição Z_N da seguinte forma:

$$D_N^g = \lim_{\beta \rightarrow 0} Z_N = \lim_{\beta \rightarrow 0} \text{Tr}(e^{-\beta H_N}), \quad (2.4)$$

onde $\beta = 1/kT$ e H_N é o hamiltoniano das N partículas. De fato, no limite de altas temperaturas, $T \rightarrow \infty$, as partículas tenderão a ocupar o maior número de estados possíveis e a função de partição se mostrará na sua forma mais simples, pois a interação entre as partículas se torna desprezível com relação a energia térmica do sistema. Identificamos também que, tomando $N = 1$ na equação (2.2), a dimensão do espaço de Hilbert d pode ser escrita em termos da função de partição de uma partícula Z_1 :

$$d = \lim_{\beta \rightarrow 0} Z_1. \quad (2.5)$$

Além disso, no limite $\beta \rightarrow 0$, o espaço de Hilbert dos estados do sistema é muito grande; logo, o limite $d \rightarrow \infty$ é também satisfeito. Então, substituindo (2.4) em (2.3), temos:

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

O preço a pagar por trabalhar com essa relação é encontrar a constante de proporcionalidade C , que mantém a consistência da definição de g . De fato, essa constante surge da transição de $\lim_{d \rightarrow \infty}$ para $\lim_{\beta \rightarrow 0}$ e depende essencialmente da geometria do espaço de Hilbert e da dimensão do sistema.

Agora, vamos iniciar um procedimento para encontrar a constante de proporcionalidade C . Um resultado conhecido na mecânica estatística é a expansão da função de partição canônica para N partículas idênticas (bósons e férmions), em série de potências da função de partição canônica para uma partícula, Z_1 , demonstrado na referência [17]:

$$Z_N^{B,F}(\beta) = \frac{1}{N!} \left[Z_1^N(\beta) \pm Z_1(2\beta) Z_1^{N-2}(\beta) \frac{N(N-1)}{2} + \dots \right], \quad (2.7)$$

onde o sinal $+$ ($-$) indica bósons (férmions). Substituindo esse resultado em (2.6), temos (para $g = 0$ ou 1),

$$\pm \frac{1}{2} = C \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{Z_1(\beta)}{N(N-1)} \left[\left(1 \pm Z_1(2\beta) Z_1^{-2}(\beta) \frac{N(N-1)}{2} + \dots \right) - 1 \right]. \quad (2.8)$$

No limite $\beta \rightarrow 0$, Z_1 cresce bastante, pois a dimensão do espaço de Hilbert também cresce, logo os termos representados pelas reticências podem ser desprezados. Assim, por uma álgebra simples, obtemos que

$$C = \lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{Z_1(\beta)}{Z_1(2\beta)}. \quad (2.9)$$

Diante da consistência do método, para os casos de férmions e bósons, é natural supor que a constante C seja a mesma para qualquer g e é dada por (2.9). Nas subseções a seguir, calcularemos essa constante para dois sistemas físicos, a partícula na caixa e o oscilador harmônico.

2.1.1 Partícula de massa m confinada em uma Caixa de tamanho L em D dimensões

Começamos trabalhando o sistema da maneira unidimensional. A energia dos níveis quânticos já é bem conhecida na literatura [18]:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}. \quad (2.10)$$

Temos também que a definição da função de partição canônica para uma partícula é dada por

$$Z_1(\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n}. \quad (2.11)$$

Substituindo (2.11) em (2.10), temos que

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} Z_1(\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}}. \quad (2.12)$$

A série acima é difícil de calcular, mas, para o nosso propósito, só precisamos de $Z_1(\beta)$ no limite em que $\beta \rightarrow 0$. Nesse limite, os argumentos das exponenciais se tornam muito pequenos e podemos aproximar a série por uma integral dada por

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} Z_1(\beta) = \int_0^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}} dn. \quad (2.13)$$

Fazendo as substituições $\alpha = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$, teremos simplesmente a integral gaussiana que já é bem conhecida:

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} Z_1(\beta) = \int_0^{\infty} e^{-\alpha n^2} dn = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{L}{\lambda}, \quad (2.14)$$

onde $\lambda = \frac{2\beta\hbar^2\pi}{m}$ é o comprimento de onda térmico. Cada dimensão é independente, logo para um sistema D -dimensional, temos $\lim_{\beta \rightarrow 0} Z_1^D = \left(\frac{L}{\lambda}\right)^D$, e fica simples para determinar C usando $Z_1(\beta)$, isto é,

$$C = \left(\frac{\frac{L}{\lambda}}{\frac{L}{\sqrt{2}\lambda}}\right)^D = 2^{D/2}. \quad (2.15)$$

2.1.2 Sistema harmonicamente confinado com frequência ω e dimensão D

Considere que o sistema é constituído por N partículas de massa m que estão confinadas em um potencial harmônico de frequência ω dado por:

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \frac{1}{2}m\omega^2 \sum_{i=1}^N r_i^2, \quad (2.16)$$

onde $\vec{r}_i$ descreve as coordenadas da partícula i .

Por simplicidade, faremos o mesmo procedimento adotado para a partícula em uma caixa, considerando inicialmente em uma dimensão e depois generalizando para D dimensões. A energia do oscilador unidimensional é dada por

$$E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2}), \quad (2.17)$$

onde n é um inteiro não negativo que representa o estado quântico energético. Substituindo na equação (2.11), temos que

$$Z_1(\beta) = \sum_n e^{-\beta\hbar\omega(\frac{1}{2}+n)}. \quad (2.18)$$

Isso é uma progressão geométrica infinita de razão $q = e^{-\beta\hbar\omega} < 1$ e primeiro termo $a_0 = e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}$; logo, sua soma será $S_N = a_0/(1 - q)$. Então,

$$Z_1(\beta) = \frac{e^{-\beta\hbar\omega\frac{1}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad (2.19)$$

e para D dimensões: $Z_1^D(\beta) = [Z_1(\beta)]^D = \left[\frac{e^{-\beta\hbar\omega\frac{1}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \right]^D$. Agora, vamos usar a equação (2.9) para determinar C tomando o limite $\beta \rightarrow 0$ na função de partição $Z_1^D(\beta)$. Nesse limite, podemos expandir a exponencial no denominador em série de potências de β , isto é,

$$(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) = 1 - (1 - \beta\hbar\omega + \dots) \approx -\beta\hbar\omega. \quad (2.20)$$

Usando este resultado, obtemos

$$C = \lim_{\beta \rightarrow 0} \left[\frac{\frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{\beta\hbar\omega}}{\frac{e^{-\beta\hbar\omega}}{2\beta\hbar\omega}} \right]^D = 2^D \quad (2.21)$$

Assim, mostramos ser possível o mapeamento de um sistema de bósons ou férmions interagentes em um sistema de FES com g bem determinado.

2.2 Mecânica estatística do gás ideal governado por uma FES

Um gás ideal é um sistema de N partículas indistinguíveis e que não interagem entre si, confinadas em um volume V muito grande e energia total E . Nessa seção, derivaremos propriedades estatístico-mecânicas do gás ideal de *exclusons*. Para isso, seguiremos uma versão simplificada da solução de Wu para esse problema [14]. A versão generalizada deste tratamento será demonstrada na última seção deste capítulo.

Inicialmente, vamos subdividir as partículas do gás em grupos de N_i partículas que têm à disposição d_i células de ocupação, com energia média ϵ_i por célula. Supondo que cada subdivisão é independente da outra, temos que é possível generalizar a equação (1.8) da seguinte forma:

$$D(\{N_i\}) = \prod_i \frac{(d_i + (1 - g)(N_i - 1))!}{N_i!(d_i - gN_i - (1 - g))!}, \quad (2.22)$$

onde simplesmente multiplicamos todas as configurações possíveis para cada subdivisão. O gás pode se encontrar em várias configurações distintas de N_i , onde cada grupo $\{N_i\}$ deve satisfazer as equações de vínculo, referentes à conservação do número total de partículas e a energia total correspondente:

$$\begin{aligned} N &= \sum_i N_i; \\ E &= \sum_i \epsilon_i N_i. \end{aligned} \quad (2.23)$$

A partir disso, generalizamos a função de partição grã-canônica do sistema na forma:

$$Z = \sum_{\{N_i\}} D(\{N_i\}) \exp \left[\sum_i N_i \beta (\mu - \epsilon_i) \right], \quad (2.24)$$

onde $\beta = 1/kT$, k é a constante de Boltzmann, μ é o potencial químico, e o somatório é feito sobre todos os grupos N_i que satisfazem as equações de vínculo (2.23). Definindo,

$$n_i = \frac{N_i}{d_i}, \quad (2.25)$$

como o número de ocupação médio da i -ésima célula, nosso objetivo é encontrar a equação que descreva o n_i mais provável para o sistema. Isso representa justamente o n_i que maximiza nossa função de partição e minimiza a energia livre do sistema:

$$\frac{\partial Z}{\partial n_i} = 0. \quad (2.26)$$

Ressaltamos que, sob a condição acima, o sistema se encontrará em um grupo $\{N_i\}$ mais provável para a distribuição d_i dada, logo não haverá necessidade da somatória na equação (2.24). Estamos trabalhando com números grandes, visando facilitar nossa avaliação (garantir uma convergência mais rápida), vamos tomar o logaritmo dos dois lados da equação (2.24) (isolando apenas o termo mais provável) e usar a condição (2.26):

$$\frac{\partial}{\partial n_i} \left[\log D(\{N_i\}) + \sum_i d_i n_i \beta (\mu - \epsilon_i) \right] = 0. \quad (2.27)$$

Para obter a equação para o n_i , devemos trabalhar com o logaritmo do $D(\{N_i\})$. Tomando o limite termodinâmico, onde d_i e N_i são grandes, podemos aplicar a fórmula de Stirling para o logaritmo de um fatorial:

$$\log(n!) \approx n \log(n) - n, \quad (2.28)$$

válida quando o argumento n do logaritmo é grande. Desta forma temos que

$$\log D(\{N_i\}) \approx \sum_i d_i [-n_i \log n_i - (1 - gn_i) \log(1 - gn_i)] + \sum_i d_i [1 + (1 - g)n_i] \log [1 + (1 - g)n_i]. \quad (2.29)$$

Esse resultado é muito interessante e pode ser identificado, a menos de uma constante multiplicativa, como uma entropia topológica no contexto de Haldane [11, 19]. Substituindo (2.29) na condição de maximização (2.26), juntando os somatórios e derivando, obtemos a seguinte expressão:

$$\sum_i [d_i \{-\log[n_i] - 1 + g \log[(1 - gn_i) + g + (1 - g) \log[1 + (1 - g)n_i] + 1 - g + d_i \beta(\mu - \epsilon_i)\}] = 0. \quad (2.30)$$

Exponencializando esta expressão, temos que

$$n_i e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} = [1 + (1 - g)n_i]^{1-g} (1 - gn_i)^g. \quad (2.31)$$

Essa equação é transcendental, e devemos examiná-la com cautela para um g arbitrário. Entretanto, nos baseando nos casos de férmions ($g = 1$) e bósons ($g = 0$):

$$\begin{aligned} n_i^F &= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1}, & g = 1; \\ n_i^B &= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} - 1}, & g = 0, \end{aligned} \quad (2.32)$$

sugerimos que, para um g arbitrário, a hipótese abaixo se verifica:

$$n_i = \frac{1}{w[e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}] + g}. \quad (2.33)$$

O w acima é denominado função de Wu e é uma função arbitrária da exponencial entre colchetes. Podemos testar nossa hipótese na equação (2.31). Para tal, definimos $x = e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}$; consequentemente, a função de Wu deve satisfazer a equação abaixo:

$$w(x)^g (1 + w(x))^{1-g} = \exp[\beta(\epsilon_i - \mu)] = x. \quad (2.34)$$

Para g positivamente definido, a expressão acima indica que w é uma função crescente de x . Por outro lado, no limite $T = 0$, o potencial químico assume a seguinte forma:

$$\mu = \epsilon_g, \quad (2.35)$$

onde ϵ_g é o análogo da energia de Fermi para um sistema com parâmetro estatístico g . Então, se $\epsilon_i > \epsilon_g$, x e w tenderão a infinito, implicando $n_i = 0$; por outro lado, se $\epsilon_i < \epsilon_g$, x e w tenderão a 0, o que implica $n_i = 1/g$. Resumindo, em $T = 0K$:

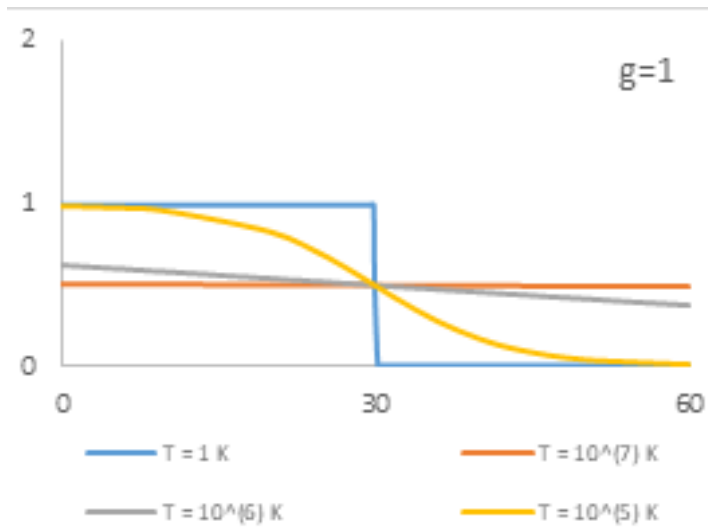
$$\begin{aligned} n_i &= 0, & \text{se } \epsilon_i > \epsilon_g; \\ n_i &= 1/g, & \text{se } \epsilon_i < \epsilon_g. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Como ilustração, resolvendo a equação (2.31) para os casos $g = 1$, $g = 1/2$ e $g = 2$, obtivemos

$$\begin{aligned} n_i(g = 1) &= \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 1}; \\ n_i(g = 1/2) &= \frac{1}{\sqrt{e^{[2\beta(\epsilon_i - \mu)]} + \frac{1}{4}}}; \\ n_i(g = 2) &= \frac{1}{2} \left[1 - \sqrt{\frac{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}}{e^{\beta(\epsilon_i - \mu)} + 4}} \right]. \end{aligned} \tag{2.37}$$

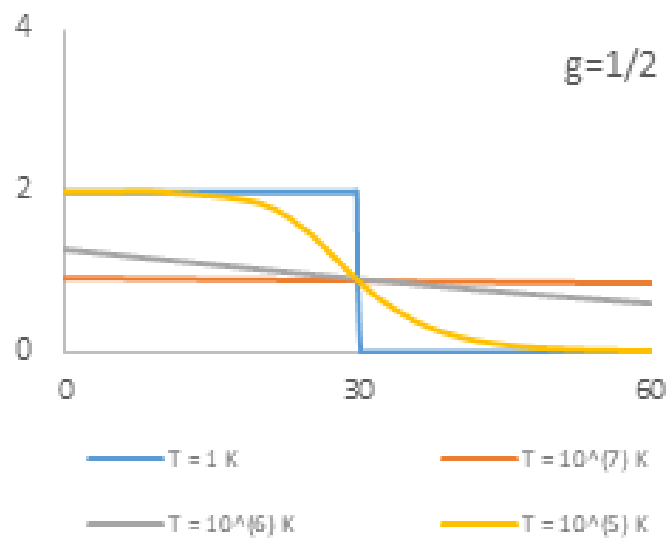
Nas figuras 1, 2 e 3 abaixo, exibimos gráficos para o número de ocupação médio n_i (eixo vertical) em função da energia (eixo horizontal) em MeV, para diferentes temperaturas, onde escolhemos arbitrariamente $\epsilon_g = 30 MeV$.

Figura 1 – Curvas dos números de ocupação para $g = 1$.

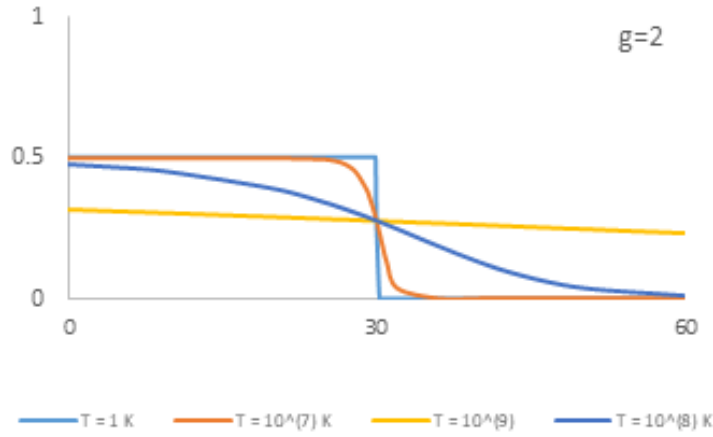


Fonte : O autor (2022).

Figura 2 – Curvas dos números de ocupação $g = 1/2$.



Fonte : O autor (2022).

Figura 3 – Curvas dos números de ocupação para $g = 2$.**Fonte :** O autor (2022).

Nas figuras 1-3, o valor de n_i indica o preenchimento dos níveis. Na figura 1, temos o caso fermiônico, $g = 1$, onde cada nível pode comportar, no máximo, uma partícula. Na figura 2, fixamos $g = 1/2$, onde os níveis podem conter até duas partículas; por outro lado, na figura 3, $g = 2$, os níveis só podem ficar, no máximo, semipreenchidos. Em geral, verificou-se a presença de uma superfície de Fermi bem definida, localizada em $1/g$.

Por fim, destacamos a solução exata de Aoyama [20] em termos de uma função hipergeométrica para valores de $g = 1/m$, m inteiro positivo e w escrito na forma:

$$w(g, x) = \left(1 - \frac{1}{m}\right) [{}_{m-1}F_{m-2}\left(\frac{1}{m}, \frac{1}{m}, \frac{2}{m}, \dots, \frac{m-2}{m}; \frac{1}{m-1}, \frac{2}{m-1}, \dots, \frac{m-2}{m-1}; \frac{-mx^m}{(m-1)^{m-1}}\right) - 1]. \quad (2.38)$$

2.3 Propriedades de um Gás Homogêneo

Com os resultados da seção anterior, temos uma melhor intuição do comportamento estatístico de um sistema governado por uma FES. Agora, obteremos algumas propriedades físicas fundamentais de um gás homogêneo sem spin governado por uma FES.

Iniciaremos analisando o número de partículas N e a energia total E , a $T = 0$ e $V \rightarrow \infty$. Assim, temos

$$\begin{aligned} N &= \frac{V}{g} \int_0^{\epsilon_g} \rho(\epsilon) d\epsilon; \\ E &= \frac{V}{g} \int_0^{\epsilon_g} \epsilon \rho(\epsilon) d\epsilon, \end{aligned} \quad (2.39)$$

onde $\rho(\epsilon)$ é a densidade de estados, enquanto o fator $1/g$ surge da degenerescência do estado fundamental e ocorre devido ao caráter fracionário da estatística do sistema. Para um gás homogêneo de partículas sem spin D -dimensional e com massa m , a densidade de estados é dada pela seguinte expressão:

$$\rho(\epsilon) = \frac{(2m\pi/h^2)^{D/2}}{\Gamma(\frac{D}{2})} \epsilon^{D/2-1}, \quad (2.40)$$

onde h é a constante de Planck e o elemento de volume no espaço de momentos satisfaz

$$d^D \mathbf{k} = \rho(\epsilon) d\epsilon. \quad (2.41)$$

Além disso, em um sistema de partículas livres as energias são puramente cinéticas, então,

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 |\mathbf{k}|^2}{2m}, \quad (2.42)$$

e $\hbar = h/2\pi$.

$$N = \frac{V (2m\pi/h^2)^{D/2}}{g \Gamma(D/2 + 1)} \epsilon_g^{D/2}; \quad (2.43)$$

$$E = \frac{V (2m\pi/h^2)^{D/2}}{g \Gamma(D/2 + 2)} \frac{D}{2} \epsilon_g^{D/2+1}. \quad (2.44)$$

Para manter a consistência da equação para N , esta não deveria depender explicitamente de g , apenas da energia de Fermi ϵ_F , definida na equação (2.35). Para tal, ϵ_g deve ser uma função de ϵ_F e de g , de tal forma a cancelar o g no denominador:

$$\epsilon_g = g^{2/D} \epsilon_F. \quad (2.45)$$

Em seguida, calculando a energia adimensional por partícula a $T = 0K$, $\frac{E}{N\epsilon_F}$, encontramos

$$\frac{E}{N\epsilon_F} = \frac{\epsilon_g}{\epsilon_F} \frac{D}{D+2} = g^{2/D} \frac{D}{D+2}. \quad (2.46)$$

Para generalizar o resultado acima, vamos usar a distribuição de Wu para calcular a energia e o número de partículas do sistema para qualquer temperatura. Dessa forma, a integral é considerada sobre todo espectro de energia:

$$N = \int_0^\infty \frac{\rho(\epsilon)}{(w+g)} d\epsilon; \quad (2.47)$$

$$E = \int_0^\infty \frac{\epsilon \rho(\epsilon)}{(w+g)} d\epsilon. \quad (2.48)$$

Na equação acima, a distribuição de Wu, n_i , é usada como ponderamento, pois indica a degenerescência do estado de energia em uma determinada temperatura. Para resolver essas integrais vamos voltar à equação (2.34) e isolar o ϵ em função de w :

$$\begin{aligned} \epsilon &= \frac{1}{\beta} \log [w^g (1+w)^{1-g}] + \mu; \\ d\epsilon &= \frac{1}{\beta} \frac{w+g}{w(1+w)} dw. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Analisando o caso $\epsilon = 0$, encontramos

$$\mu = -\frac{1}{\beta} \log [w_0^g (1+w_0)^{1-g}], \quad (2.50)$$

onde w_0 é o valor de w quando $\epsilon = 0$. substituindo as equações (2.49) e (2.50) em (2.47) e (2.48) temos que

$$N = \frac{(2m\pi/h^2)^{D/2}}{\Gamma(\frac{D}{2})} \left(\frac{1}{\beta}\right)^{D/2} \int_{w_0}^\infty \frac{1}{w(1+w)} dw \left\{ \log \left[\left(\frac{w}{w_0}\right)^g \left(\frac{1+w}{1+w_0}\right)^{1-g} \right] \right\}^{D/2-1}; \quad (2.51)$$

$$E = \frac{(2m\pi/h^2)^{D/2}}{\Gamma(\frac{D}{2})} \left(\frac{1}{\beta}\right)^{D/2+1} \int_{w_0}^\infty \frac{1}{w(1+w)} dw \left\{ \log \left[\left(\frac{w}{w_0}\right)^g \left(\frac{1+w}{1+w_0}\right)^{1-g} \right] \right\}^{D/2}. \quad (2.52)$$

Notando que N independe da temperatura (conservação do número de partículas), podemos dividir as equações (2.51) e (2.52) por (2.43), encontrando, assim, o conjunto de equações acopladas abaixo:

$$\frac{D}{2} \left(\frac{1}{\beta \epsilon_F} \right)^{D/2} \int_{w_0}^{\infty} \frac{1}{w(1+w)} dw \left\{ \log \left[\left(\frac{w}{w_0} \right)^g \left(\frac{1+w}{1+w_0} \right)^{1-g} \right] \right\}^{D/2-1} = 1; \quad (2.53)$$

$$\frac{E}{N \epsilon_F} = \frac{D}{2} \left(\frac{1}{\beta \epsilon_F} \right)^{D/2+1} \int_{w_0}^{\infty} dw \frac{1}{w(1+w)} \left\{ \log \left[\left(\frac{w}{w_0} \right)^g \left(\frac{1+w}{1+w_0} \right)^{1-g} \right] \right\}^{D/2}. \quad (2.54)$$

Ressaltamos que a energia acima foi normalizada pela energia de Fermi ϵ_F .

A seguir, vamos fazer uma análise da grã função de partição para o gás ideal fracionário. Esta pode ser escrita na forma:

$$Z_G = \sum_0^{\infty} e^{\beta \mu N} Z_N \quad (2.55)$$

onde $z = e^{\beta \mu}$ é a fugacidade e a função de partição canônica é dada por:

$$Z_N = \sum_{\{n_k\}} g(\{n_k\}) e^{-\beta E(\{n_k\})} \quad (2.56)$$

de modo que cada grupo $\{n_k\}$ satisfaz o vínculo do número total de partículas $N = \sum_k n_k$, $g(\{n_k\})$ é a degenerescência dos estados a uma dada energia E . Obter a grã função de partição para um g qualquer não é uma tarefa simples, entretanto, por comparação com os casos bosônico e fermiônico:

$$Z_F = \prod_{k=1}^{\infty} (1 + z e^{\beta \epsilon_k}), \quad Z_B = \prod_{k=1}^{\infty} (1 - z e^{\beta \epsilon_k})^{-1}; \quad (2.57)$$

podemos intuir a seguinte forma para Z_G :

$$Z_G = \prod_{k=1}^{\infty} (1 + w_k^{-1}), \quad (2.58)$$

onde $w_k = w_k(\epsilon_k, g)$ satisfaz a equação transcendental

$$w_k^g (1 + w_k)^{1-g} = e^{\beta(\epsilon_k - \mu)}. \quad (2.59)$$

Devemos verificar se a equação (2.58) é consistente com a definição do número de ocupação médio:

$$\bar{n}_i = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z_G}{\partial \epsilon_k} = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z_G}{\partial w_k} \frac{\partial w_k}{\partial \epsilon_k}. \quad (2.60)$$

Para tal, derivamos os dois lados da equação (2.59) para w_k , em relação a ϵ_k , obtendo, assim,

$$\frac{\partial w_k}{\partial \epsilon_k} = \beta \frac{w_k(1 + w_k)}{w_k + g} \quad (2.61)$$

Em seguida, derivando os dois lados da equação (2.58) em relação a w_k , temos que

$$\frac{\partial \log Z_G}{\partial w_k} = -\frac{1}{w_k(1 + w_k)}. \quad (2.62)$$

Desta forma, substituindo as equações (2.62) e (2.61) em (2.60), o número de ocupação médio será consistente com o obtido anteriormente:

$$\bar{n}_i = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + g}. \quad (2.63)$$

Dada o sucesso do nosso *ansatz* para a função de partição, podemos agora calcular o potencial termodinâmico:

$$\Omega_G(\mu, T) = -\frac{1}{\beta} \log Z_G = \sum_{k=1}^{\infty} \log \left(1 + \frac{1}{w}\right) \quad (2.64)$$

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

$$\Omega_G(\mu, T) = -\frac{1}{\beta} V \int_0^{\infty} d\epsilon \rho(\epsilon) \log \left(1 + \frac{1}{w}\right). \quad (2.65)$$

Realizando uma substituição de variáveis de forma semelhante a (2.61):

$$\beta d\epsilon = \left(\frac{g}{w} + \frac{1-g}{1+w} \right) dw, \quad (2.66)$$

podemos reescrever o potencial termodinâmico como:

$$\begin{aligned} \Omega_G(\mu, T) = & -\frac{V}{\beta} \left\{ g \int_{w(0)}^{\infty} dw \frac{1}{\beta w} \log [1 + w(\epsilon, g)^{-1}] + \right. \\ & \left. (1-g) \int_{w(0)}^{\infty} dw \frac{1}{\beta(w+1)} \log [1 + w(\epsilon, g)^{-1}] \right\}. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Pela equação acima, o potencial termodinâmico é separável e pode ser obtido resolvendo duas integrais, denominadas I_1 e I_2 . Mais explicitamente:

$$\Omega_G(\mu, T) = -V[gI_1 + (1-g)I_2]. \quad (2.68)$$

Considerando inicialmente I_1 , faremos a mudança de varável:

$$w = e^{\beta(x - \mu_F)}, \quad \frac{dw}{w} = \beta dx, \quad (2.69)$$

onde tomamos $w(0) = e^{-\beta\mu_F}$. Dessa forma, a integral se torna

$$I_1 = \int_0^{\infty} dx \log [1 + e^{-\beta(x - \mu_F)}]. \quad (2.70)$$

Agora, para resolver I_2 realizamos a seguinte substituição:

$$1 + w = e^{\beta(x - \mu_B)}, \quad \frac{dw}{w+1} = \beta dx, \quad (2.71)$$

e, agora, assumimos $w(0) = e^{-\beta\mu_B}$. Assim, temos que

$$I_2 = - \int_0^{\infty} dx \log [1 - e^{-\beta(x - \mu_B)}]. \quad (2.72)$$

Substituindo estes resultados em (2.67), obtemos a seguinte expressão:

$$\Omega_G(\mu, T) = -V \left\{ g \int_0^\infty dx \log [1 + e^{-\beta(x-\mu_F)}] - (1-g) \int_0^\infty dx \log [1 - e^{-\beta(x-\mu_B)}] \right\} \quad (2.73)$$

É imediato perceber que cada uma dessas integrais, I_1 e I_2 , correspondem aos casos fermiônico e bosônico do potencial termodinâmico, $\Omega_F(\mu, T)$ e $\Omega_B(\mu, T)$, respectivamente. Por fim, temos que

$$\Omega_G(\mu, T) = g\Omega_F(\mu, T) + (1-g)\Omega_B(\mu, T). \quad (2.74)$$

A equação acima implica que a função de partição também será separável na forma:

$$Z_G = Z_F^g Z_B^{1-g}. \quad (2.75)$$

2.4 Gás homogêneo em bidimensional

Vamos agora tratar um caso especial do gás homogêneo da seção anterior, o bidimensional, $D = 2$. Nessa situação, obtivemos resultados originais, no que concerne a energia adimensional por partícula, E_G , do sistema. Em duas dimensões, as equações (2.53) e (2.54) adquirem a forma abaixo:

$$\left(\frac{1}{\beta\epsilon_F} \right)^{D/2} \int_{w_0}^\infty \frac{1}{w(1+w)} dw = 1; \quad (2.76)$$

$$E_G = \frac{E}{N\epsilon_F} = \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F} \right)^2 \int_{w_0}^\infty dw \frac{1}{w(1+w)} \log \left[\left(\frac{w}{w_0} \right)^g \left(\frac{1+w}{1+w_0} \right)^{1-g} \right]. \quad (2.77)$$

Resolvendo a integral simples da equação (2.76), usamos que

$$\int_{w_0}^\infty \frac{1}{w(1+w)} dw = \log \left(\frac{w_0}{w_0+1} \right), \quad (2.78)$$

e, assim, é possível encontrar o valor de w_0 :

$$w_0 = \frac{1}{e^{\beta\epsilon_F} - 1}. \quad (2.79)$$

A integral da energia adimensional por partícula, E_G , é não trivial. Vamos atacar o problema observando casos específicos de g e depois generalizando. Primeiramente, vamos tomar as partículas como sendo férmions, $g = 1$. Nesse caso, temos que

$$E_F = \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F} \right)^2 \int_{w_0}^\infty dw \frac{1}{w(w+1)} \log \left(\frac{w}{w_0} \right). \quad (2.80)$$

A integral acima pode ser separada:

$$\begin{aligned} E_F &= \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F} \right)^2 \left[\int_{w_0}^\infty dw \frac{1}{w} \log w - \int_{w_0}^\infty dw \frac{1}{w+1} \log w - \log w_0 \int_{w_0}^\infty dw \frac{1}{w(w+1)} \right] \\ &= I_1 + I_2 + I_3. \end{aligned} \quad (2.81)$$

A terceira integral, I_3 é resolvida trivialmente usando (2.78), resultando em

$$I_3 = \log(w_0) \log\left(\frac{w_0}{w_0 + 1}\right). \quad (2.82)$$

A primeira integral, I_1 , é resolvida com a substituição $u = \log w$. Assim, obtemos

$$\int dw \frac{1}{w} \log w = \int u = \frac{u^2}{2}. \quad (2.83)$$

Dessa forma, I_1 resulta em

$$I_1 = \frac{1}{2} \lim_{w \rightarrow \infty} [\log w]^2 - \frac{1}{2} [\log w_0]^2. \quad (2.84)$$

A integral I_2 é não trivial; para resolvê-la, devemos somar e subtrair $\frac{\log(w+1)}{w}$ e obter

$$\begin{aligned} I_2 &= - \int_{w_0}^{\infty} dw \frac{1}{w+1} \log w = \int_{w_0}^{\infty} dw \frac{1}{w} \log(w+1) - \\ &\int_{w_0}^{\infty} dw \left[\frac{1}{w} \log(w+1) + \frac{1}{w+1} \log w \right] = I_4 + I_5. \end{aligned} \quad (2.85)$$

Na equação acima, a segunda integral resulta em

$$\begin{aligned} I_5 &= - \int_{w_0}^{\infty} dw \left[\frac{1}{w} \log(w+1) - \frac{1}{w+1} \log w \right] \\ &= - \lim_{w \rightarrow \infty} \log w \log(w+1) + \log w_0 \log(w_0+1) \end{aligned} \quad (2.86)$$

No entanto, para resolver I_4 se faz necessária uma substituição da seguinte forma:

$$\log(w+1) = \int_0^1 dt \frac{w}{wt+1}, \quad (2.87)$$

que resulta em

$$I_4 = \frac{1}{w} \int_0^1 dt \int_{w_0}^{\infty} \frac{1}{wt+1}. \quad (2.88)$$

Resolvendo a integral em w , obtemos

$$I_4 = \left[\int_0^1 dt \frac{\log(wt+1)}{t} \right]_{w_0}^{\infty}. \quad (2.89)$$

Em seguida, realizando a substituição $x = -wt$, a equação acima adquire a forma abaixo:

$$I_4 = \left[\int_0^{-w} dx \frac{\log(1-x)}{x} \right]_{w_0}^{\infty}. \quad (2.90)$$

Agora, comparando com a representação integral do dilogaritmo (função de Spence) [21]:

$$Li_2(w) = - \int_0^w dx \frac{\log(1-x)}{x}, \quad (2.91)$$

definido sobre um corte do plano complexo $C - [1, \infty)$. Dessa forma, temos que

$$I_4 = [-Li_2(-w)]_{w_0}^{\infty}. \quad (2.92)$$

Para analisar o comportamento em $w \rightarrow \infty$, usaremos a transformação de Landen [21]:

$$Li_2(w) + Li_2\left(\frac{w}{w-1}\right) = -\frac{1}{2}[\log(1-w)]^2, \quad (2.93)$$

para obter

$$\lim_{w \rightarrow \infty} Li_2(-w) = -\lim_{w \rightarrow \infty} \frac{1}{2}[\log w]^2. \quad (2.94)$$

Então,

$$I_4 = \lim_{w \rightarrow \infty} \frac{1}{2}[\log w]^2 + Li_2(-w_0) \quad (2.95)$$

Por fim, substituindo os resultados das equações (2.82), (2.84), (2.85), (2.86) e (2.94), em (2.81), obtemos, para a energia normalizada no caso fermiônico, a seguinte expressão:

$$E_F = \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F}\right)^2 \left[Li_2(-w_0) + \frac{1}{2}[\log w_0]^2 \right] \quad (2.96)$$

Agora, analisaremos o caso bosônico ($g = 0$), onde a energia adimensional por partícula será dada por

$$E_B = \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F}\right)^2 \int_{w_0}^{\infty} dw \frac{1}{w(1+w)} \log\left(\frac{1+w}{1+w_0}\right). \quad (2.97)$$

Separando a integral, obtemos

$$E_B = \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F}\right)^2 \left[\int_{w_0}^{\infty} dw \frac{1}{w} \log(1+w) - \int_{w_0}^{\infty} dw \frac{1}{w+1} \log(w+1) - \log(1+w_0) \int_{w_0}^{\infty} dw \frac{1}{w(w+1)} \right]. \quad (2.98)$$

Todos os tipos de integrais, na equação acima, já foram resolvidos em detalhe no caso fermiônico. Diante disso, temos que

$$E_B = \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F}\right)^2 \left[Li_2(-w_0) - \frac{1}{2}[\log(w_0+1)]^2 + \log w_0 \log(w_0+1) \right]. \quad (2.99)$$

Agora, vamos analisar o caso para um g qualquer. Podemos separar a equação (2.77) na forma:

$$E_G = g \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F}\right)^2 \int_{w_0}^{\infty} dw \frac{1}{w(w+1)} \log\left(\frac{w}{w_0}\right) + (1-g) \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F}\right)^2 \int_{w_0}^{\infty} dw \frac{1}{w(1+w)} \log\left(\frac{1+w}{1+w_0}\right). \quad (2.100)$$

Comparando com as equações (2.80) e (2.97), temos que

$$E_G = gE_F + (1-g)E_B. \quad (2.101)$$

A expressão acima revela um resultado muito importante: a energia adimensional por partícula para um sistema governado por uma FES, é separável em uma parte fermiônica

e bosônica, ponderadas por g e $(1 - g)$, respectivamente. Mais explicitamente, a equação (2.101) se torna

$$E_G = \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F} \right)^2 \{ Li_2(-w_0) + g \frac{1}{2} [\log w_0]^2 + (1 - g) \frac{1}{2} [\log(w_0 + 1)]^2 + (1 - g) \log[w_0(w_0 + 1)] \}. \quad (2.102)$$

Vamos agora analisar o limite $T \rightarrow 0$. Nesse caso, por (2.79), temos que $w_0 \approx e^{-\beta\epsilon_F}$. Além disso, sabemos que $Li_2(0) = 0$ [21]. Assim, o único termo relevante será o $\frac{g}{2} [\log w_0]^2$, portanto temos que:

$$E_G(T \rightarrow 0) = \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F} \right)^2 \frac{g}{2} (-\beta\epsilon_F)^2 = \frac{g}{2}. \quad (2.103)$$

Como vimos, na equação acima, a aparente singularidade no denominador se cancela e o resultado é finito e idêntico ao da equação (2.46) para $D = 2$.

Em uma análise final, vamos determinar o calor específico a volume constante do sistema, $C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N}$. Da equação (2.101), obtemos

$$C_V^G = gC_V^F + (1 - g)C_V^B. \quad (2.104)$$

Pela linearidade da derivada, o calor específico herda a propriedade de separabilidade da energia adimensional por partícula. Em seguida, vamos calcular a quantidade $(E_F - E_B)$:

$$E_F - E_B = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F} \right)^2 [[\log w_0 - \log(w_0 + 1)]^2] = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\beta\epsilon_F} \right)^2 (\beta\epsilon_F)^2 = 1/2. \quad (2.105)$$

Ressaltamos que a diferença de entre as duas energias é uma constante. Agora, aplicando a definição do calor específico na expressão acima, obtemos que $C_V^F = C_V^B$. Assim, pela expressão (2.104), concluímos que é válida a seguinte igualdade:

$$C_V^G = C_V^F = C_V^B. \quad (2.106)$$

Acima, foi demonstrado um teorema fundamental: o calor específico em duas dimensões independe da estatística utilizada para descrever o sistema, Esse teorema foi provado inicialmente por Robert May [22], mas aqui, demonstramos de uma forma alternativa, pelo cálculo explícito da energia. Podemos ressaltar, também, que a energia aparece sendo descrita pela função dilogaritmo. Essa função é muito importante no contexto da estatística fracionária, visto que é um caso especial das funções de Lerch, $\Phi(z, s, \nu)$, esta representará uma assinatura de um sistema governado por uma FES, como veremos adiante. Por mera ilustração, essas funções estão relacionadas da seguinte forma [23]:

$$Li_2(z) = z\Phi(z, 2, 1). \quad (2.107)$$

2.5 Problema de Wu: Gás Ideal Generalizado

Nesta última seção, vamos generalizar os resultados obtidos anteriormente, considerando, agora, um sistema composto por várias espécies de partículas. Nessa abordagem, nos

aproximamos mais de sistema físicos reais e ampliamos as possibilidades de mapeamento de sistema na matéria condensada. Inicialmente, temos a definição proposta por Haldane para a matriz estatística [11]:

$$\Delta d_i = - \sum_j \alpha_{ij} \Delta N_j. \quad (2.108)$$

A equação acima representa a variação dos estados disponíveis, Δd_i , para a espécie i , considerando que o número de partículas da espécie j variou de ΔN_j , cuja constante de proporcionalidade é α_{ij} . Além disso, entendemos $\{\Delta N_j\}$ como um conjunto de mudanças permitidas no número de partículas do sistema. Ressaltamos também, que o sinal negativo surge do fato que, ao adicionar partículas de qualquer espécie no sistema, o número de estados disponíveis deve diminuir ou permanecer o mesmo. A equação (2.108) representa uma generalização matricial de (1.4), para o caso de muitas espécies de partículas. Em seguida, nos baseando na definição acima (2.108), podemos generalizar também a equação (1.8), que determina o número total de configurações do sistema. Assim, temos que

$$W(N_i) = \prod_i \frac{[G_i + N_i - 1 - \sum_j \alpha_{ij}(N_j - \delta_{ij})]!}{(N_i)! [G_i - 1 - \sum_j \alpha_{ij}(N_j - \delta_{ij})]!}, \quad (2.109)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker (matriz identidade), e G_i é o número de estados disponíveis para a espécie i , quando não há nenhuma partícula no sistema, ou seja, a dimensão do espaço de Fock-Hilbert para a espécie. A generalização acima foi feita realizando a identificação:

$$\begin{aligned} d &\rightarrow G_i; \\ g(N_i - 1) &\rightarrow \sum_j \alpha_{ij}(N_j - \delta_{ij}). \end{aligned} \quad (2.110)$$

Por consistência, recuperamos os casos fermiônico e bosônico, tomando $\alpha_{ij} = \delta_{ij}$ e $\alpha_{ij} = 0$, respectivamente. Ressaltamos que a matriz estatística α_{ij} deve ser formada por números racionais, com o objetivo de alcançar o limite termodinâmico com uma sequência de sistemas de tamanho finito de vários tamanhos.

Agora, vamos tratar o caso de um gás ideal generalizado governado por uma FES. Nesta dissertação, será exposto o tratamento original feito por Wu [14] em 1994.

Vamos considerar um sistema confinado em uma certa região e isolado (não há trocas de energia com o exterior), no qual existem N_i partículas com G_i estados independentes disponíveis, para a partícula i . Além disso, vamos considerar que todo estado de partícula única da espécie i tem a mesma energia ϵ_i . Para o gás ideal a energia total é uma soma simples:

$$E = \sum_i N_i \epsilon_i. \quad (2.111)$$

Considerando, agora, o ensemble grã-canônico a uma temperatura T e potencial químico μ_i para a espécie i . Nessas condições, a função de partição grã-canônica resulta:

$$Z = \sum_{\{N_i\}} W(\{N_i\}) \exp \left\{ \sum_i N_i (\mu_i - \epsilon_i) / kT \right\}. \quad (2.112)$$

Vamos definir o número de ocupação da espécie i como $n_i = \frac{N_i}{G_i}$. Para calcular o número de ocupação médio (mais provável) para cada espécie, devemos minimiza a função de

partição, sob a condição $\frac{\partial Z}{\partial n_i} = 0$. Nós queremos extrair propriedades macroscópicas do sistema. No limite termodinâmico, N_i e G_i são grandes. Assim, a soma tem um pico nítido no conjunto N_i de partículas mais provável. Para facilitar a convergência do método tomamos o logaritmo da expressão para a função de partição (2.112). Dessa forma, a distribuição mais provável de n_i satisfaz a seguinte condição de maximização:

$$\frac{\partial}{\partial n_i} \left[\log W + \sum_i G_i n_i (\mu_i - \epsilon_i) / kT \right] = 0 \quad (2.113)$$

Agora, para aplicar na expressão acima, vamos expressar o $\log W$:

$$\begin{aligned} \log W = \sum_i G_i \left\{ -n_i \log n_i - \left(1 - \sum_j \beta_{ij} n_j \right) \log \left(1 - \sum_j \beta_{ij} n_j \right) \right\} + \\ \sum_i G_i \left[1 + \sum_j (\delta_{ij} - \beta_{ij}) n_j \right] \log \left[1 + \sum_j (\delta_{ij} - \beta_{ij}) n_j \right], \end{aligned} \quad (2.114)$$

onde $\beta_{ij} \equiv \alpha_{ij} G_j / G_i$. Para obter a expressão acima, usamos demasiadamente a fórmula de Stirling $\log N! = N \log(N/e)$. Assim, substituindo (2.114) em (2.113), temos:

$$n_i e^{(\epsilon_i - \mu_i)/kT} = \left[1 + \sum_k (\delta_{ik} - \beta_{ik}) n_k \right] \prod_j \left[\frac{1 - \sum_j \beta_{jk} n_k}{1 + \sum_k (\delta_{jk} - \beta_{jk}) n_k} \right]^{\alpha_{ji}}. \quad (2.115)$$

Na dedução da equação acima, foi utilizado bastante o fato que $\frac{\partial n_k}{\partial n_i} = \delta_{ik}$. Agora, definindo a função de Wu,

$$w_i = n_i^{-1} - \sum_k \beta_{ik} n_k / n_i, \quad (2.116)$$

temos

$$(1 + w_i) \prod_j \left(\frac{w_j}{1 + w_j} \right)^{\alpha_{ji}} = e^{(\epsilon_i - \mu_i)/kT}. \quad (2.117)$$

A expressão acima representa a equação fundamental de Wu. A determinação de w_i através desta equação nos permite obter, também, o n_i mais provável, apenas invertendo a equação (2.116):

$$\sum_j (\delta_{ij} w_j + \beta_{ij}) n_j = 1. \quad (2.118)$$

Para essa inversão foi utilizada uma propriedade de troca de índices do delta de Kronecker: $n_j = \sum_k n_k \delta_{kj}$. Podemos calcular, também, o potencial termodinâmico, $\Omega = -\frac{1}{\beta} \log Z$, e assim obtemos:

$$\Omega = -PV = -kT \sum_i G_i \log \left(\frac{1 + n_i - \sum_j \beta_{ij} n_j}{1 - \sum_j \beta_{ij} n_j} \right) \quad (2.119)$$

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

$$\frac{S}{k} = \sum_i G_i \left[n_i \frac{\epsilon_i - \mu_i}{kT} + \log \left(\frac{1 + n_i - \sum_j \beta_{ij} n_j}{1 - \sum_j \beta_{ij} n_j} \right) \right] \quad (2.120)$$

Com essas equações em mãos, podemos determinar muitas outras propriedades termodinâmicas do sistema. Para verificar a consistência do nosso formalismo, vamos tentar recuperar os resultados da seção (2.3), em que o gás ideal só possuía uma espécie. Assim, vamos particularizar $\alpha_{ij} = g\delta_{ij}$ e $\mu_i = \mu$, para obter a equação para o número de ocupação médio:

$$n_i e^{[\beta(\epsilon_i - \mu)]} = [1 + (1 - g)n_i]^{1-g} [1 - gn_i]^g, \quad (2.121)$$

cujas soluções já obtivemos anteriormente, e é dada por:

$$n_i = \frac{1}{w(e^{\beta(\epsilon_i - \mu)}) + g} \quad (2.122)$$

Assim recuperamos a equação (2.33). O formalismo desenvolvido nessa seção nos fornece uma ferramenta mais poderosa para tratar sistemas físicos reais, pois permite mais possibilidades de mapeamento de sistemas de matéria condensada. Na próxima seção usaremos esse formalismo generalizado para mapear o modelo de Hubbard de alcance infinito.

3 MAPEAMENTO DO MODELO DE HUBBARD DE ALCANCE INFINITO

O campo de sistemas de elétrons fortemente correlacionados [24] tem, ao longo dos anos, sido objeto de intensa atividade. Sua gama de aplicação inclui supercondutividade de alto T_C [25], férmions pesados, transição metal-isolante de Mott [26, 27, 28] e efeito Hall quântico fracionário [8]. Focando mais na transição metal-isolante de Mott, esta pode estar relacionada à presença de alta repulsão entre os elétrons, ou também a um alto grau de desordem no sistema [29], que fazem com que um material que seria condutor pela teoria de bandas tradicional sofra, sob certas condições, uma transição de fase metal-isolante. O modelo mais simples que apresenta esse tipo de transição de fase é o modelo de Hubbard [30, 31, 32], que trata microscopicamente o comportamento de elétrons interagentes em uma rede. Neste modelo, a transição de Mott apresenta, na fase isolante, ordem antiferromagnética (spins em sentidos opostos).

Em alguns limites o modelo de Hubbard é exatamente solúvel. Como exemplo, temos o limite de infinitas dimensões [33], onde a fase metálica é solúvel e representa um líquido de Fermi renormalizado. Em dimensões menores temos um comportamento do tipo *Non-Fermi Liquid* (NFL); nesses casos, a estatística fracionária terá um papel fundamental para interpretar as propriedades. Para fins de clareza, um líquido de Fermi é um estado quântico da matéria que, em baixas temperaturas, é uma boa aproximação para a maioria dos metais encontrados na natureza. Diferentemente do gás de Fermi (não-interagente), o líquido de Fermi introduz perturbativamente interações no sistema. Uma segunda versão, também solúvel, do modelo de Hubbard é o de interação de curto alcance, que foi resolvido exatamente no caso unidimensional [34]; entretanto, não apresenta transição metal-isolante no estado fundamental. Outro caso solúvel do modelo de Hubbard, é o de interação com alcance infinito [35], que é o objeto de estudo deste capítulo. Neste caso, a transição metal-isolante de Mott ocorre em um ponto crítico bem definido, no qual a interação se iguala a largura da banda de energia: $U = \Delta$ [35].

Neste capítulo, iremos aplicar o formalismo desenvolvido no capítulo anterior ao modelo Hubbard em uma rede hipercúbica com interação coulombiana de alcance infinito. Mostraremos que esse modelo pode ser mapeado em um gás ideal de três espécies não-interagentes, denominadas *exclusons*, obedecendo a uma estatística fracionária de exclusão [10]. Assim, poderemos interpretar algumas propriedades do tipo *Non-Fermi Liquid*. Inclusive, mostraremos que o MIT surge naturalmente das interações estatísticas dos *exclusons*. Em seguida, trataremos uma análise do comportamento do sistema nas proximidades do ponto crítico, e, assim, determinaremos os expoentes críticos associados a uma transição de fase de segunda ordem.

3.1 O Modelo e suas Propriedades

Nosso modelo é do tipo Hubbard, que descreve elétrons que saltam entre os sítios de uma rede e que possuem repulsão Coulombiana entre si. De fato, a magnitude da interação sentida por um elétron no sítio i , na sua forma mais geral, é dada por $U_i = \sum_j \langle i | \frac{1}{r_{ij}} | j \rangle$, onde r_{ij} é a distância entre os sítios i e j . No que segue, tomaremos a aproximação de interação de alcance infinito, impondo que todos os elétrons sentem uma única interação

de magnitude U ; logo, $U_i = U$ para todo i . Dessa forma, nosso hamiltoniano assume a seguinte forma [10, 35]:

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

O primeiro termo do hamiltoniano representa o *hopping* do eletr n entre primeiros vizinhos da rede hiperc bica d -dimensional de N s tios, ao custo de uma energia de amplitude t . Salientamos que, em redes hiperc bicas, o *hopping* est  relacionado com a largura da banda de energia pela rela  o $\Delta = 4td$. A not  o $\langle i, j \rangle$ indica soma sobre os primeiros vizinhos, $c_{i,\sigma}^\dagger(c_{i,\sigma})$   o operador de cria  o (aniquila  o), σ   o  ndice de spin. O segundo termo do hamiltoniano est  relacionado ao acoplamento a um reservat rio de part culas de potencial qu mico μ . No  ltimo termo a fun  o delta significa que a soma   tomada sobre os s tios que satisfazem $\mathbf{r}_{j_1} + \mathbf{r}_{j_3} = \mathbf{r}_{j_2} + \mathbf{r}_{j_4}$, ou seja, o centro de massa entre as part culas   conservado no processo de espalhamento, e o fator $\left(\frac{1}{N}\right)$ garante a extensividade. Esse hamiltoniano n o   simples de trabalhar no espa o direto pois   m o diagonal. Assim, introduzindo a transformada de Fourier na rede:

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

e utilizando a rela  o de completeza do espa o,

$$\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \sum_j e^{i\mathbf{r}_j(\mathbf{k}-\mathbf{k}')} \quad (3.3)$$

n s obtemos um hamiltoniano diagonal no espa o rec proco:

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2) n_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}\downarrow}, \quad (3.4)$$

onde $n_{\mathbf{k}\sigma} = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$   o operador n mero. cuja aplica  o em um dado autoestado, nos fornece o n mero de el tr ns com momento $\mathbf{k}$ e spin σ , e

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -t \sum_{\langle 0,j \rangle} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j}, \quad (3.5)$$

  a rela  o de dispers o de energia para esse dado estado. O espa o de Hilbert do hamiltoniano (3.4)   gerado pelo produto tensorial dos espa os de cada $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}$:

$$|\Psi\rangle = \bigotimes_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}, \quad (3.6)$$

e os $\phi_{\mathbf{k}}$ s o gerados pelos seguintes quatro estados:

$$|0\rangle, \quad c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger |0\rangle, \quad c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad (3.7)$$

que representam, em cada s tio, a aus ncia de part culas, a presen a de part cula com spin para cima, a presen a de part cula com spin para baixo e dupla ocupa  o, respectivamente. Ressaltamos, tamb m, que o termo cin tico comuta com o termo de intera  o no hamiltoniano, o nos d  ind cios da solubilidade do modelo. De fato, a aplica  o do operador hamiltoniano em cada um dos autoestados geradores   bem definida:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} |0\rangle &= 0; \\ \mathcal{H} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger |0\rangle &= (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger |0\rangle; \\ \mathcal{H} c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle &= (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2) c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle; \\ \mathcal{H} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle &= 2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Dessa forma, podemos construir a função de partição para cada estado $\mathbf{k}$,

$$Z_{\mathbf{k}} = \left(\sum_m e^{-\beta E_m} \right)^{G_0} = \left(1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2)} + e^{-2\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} \right)^{G_0}, \quad (3.9)$$

onde E_m são os autovalores de energia do sistema. Assim, podemos obter a função de partição total com o produto sob todos os estados $\mathbf{k}$:

$$Z = \prod_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}} = \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2)} + e^{-2\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} \right)^{G_0}. \quad (3.10)$$

Finalmente, determinada a função de partição acima, é imediato obter a energia livre do sistema:

$$\Omega = -G_0 \frac{1}{\beta} \ln Z = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\beta} \ln \left(1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2)} + e^{-2\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)} \right). \quad (3.11)$$

De fato, obter a energia livre equivale a solucionar o modelo, isto é, obter todas as propriedades termodinâmicas do sistema.

3.2 Representação de Exclusão

Agora, tendo em mãos algumas características do modelo, vamos partir para a representação em termos da estatística fracionária. Como vimos na seção anterior, esse modelo é exatamente solúvel, entretanto, a representação em termos de *exclusons* se fará fundamental para um melhor entendimento do modelo no contexto dos fundamentos da física estatística.

Primeiramente, é fácil verificar que a energia total do sistema é aditiva. e, assim, se encaixa no formalismo desenvolvido por Wu [14]:

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left\{ (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2) \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle + (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2) \langle n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle + U \sum_{\mathbf{k}} \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle \right\} \quad (3.12)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}\alpha} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} n_{\mathbf{k}\alpha},$$

onde $\mathbf{k}$ é um bom número quântico e α indexa a espécie. Agora evocamos a definição de Haldane [11]:

$$D_{\mathbf{k}\alpha} = G_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'\alpha'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} N_{\mathbf{k}'\alpha'}, \quad (3.13)$$

onde $D_{\mathbf{k}\alpha}$ é o número de estados disponíveis para uma partícula, $G_{\mathbf{k}}$ (que consideraremos independente de $\mathbf{k}$ e igual a G_0) é o número de estados disponíveis para uma partícula quando não há nenhuma outra partícula inserida no sistema, $N_{\mathbf{k}\alpha}$ é o número de partículas inseridas no sistema, e $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ é a matriz da interação estatística. Tendo essas definições em mãos, podemos escrever o peso estatístico W de forma semelhante ao que foi feito na equação (2.109):

$$W(N_{\mathbf{k}\alpha}) = \prod_{\mathbf{k}\alpha} \frac{(D_{\mathbf{k}\alpha} - N_{\mathbf{k}\alpha} - 1)!}{(D_{\mathbf{k}\alpha} - 1)! N_{\mathbf{k}\alpha}!} \quad (3.14)$$

Agora, vamos considerar o Ensemble grã-canônico a uma temperatura T . A função de partição do sistema pode ser representada por

$$Z = \sum_{N_{\mathbf{k}\alpha}} (N_{\mathbf{k}\alpha}) \exp -\beta \sum_{\mathbf{k}\alpha} N_{\mathbf{k}\alpha} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}, \quad (3.15)$$

onde $\beta = 1/T$. Definindo o número de ocupação médio, $n_{\mathbf{k}\alpha} = N_{\mathbf{k}\alpha}/G_0$, podemos, agora, explicitar a condição de maximização da grande função de partição (ou minimização da energia livre grande canônica), $\frac{\partial}{\partial n_i} [\ln W + G_0 \sum_i N_i (\mu_i - \varepsilon_i)/T] = 0$. Inicialmente, considerando o limite termodinâmico (G_0 e $N_{\mathbf{k}\alpha}$ muito grandes), calculamos o logaritmo do peso estatístico, W , e obtemos:

$$\begin{aligned} \log W \approx \sum_{\mathbf{k},\alpha} G_0 \left[\left(n_{\mathbf{k}\alpha} + 1 - \sum_{\mathbf{k}',\alpha'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\alpha\alpha'} n_{\mathbf{k}'\alpha'} \right) \log \left(n_{\mathbf{k}\alpha} + 1 - \sum_{\mathbf{k}',\alpha'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\alpha\alpha'} n_{\mathbf{k}'\alpha'} \right) \right. \\ \left. - n_{\mathbf{k}\alpha} \log n_{\mathbf{k}\alpha} - \left(1 - \sum_{\mathbf{k}',\alpha'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\alpha\alpha'} n_{\mathbf{k}'\alpha'} \right) \log \left(1 - \sum_{\mathbf{k}',\alpha'} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\alpha\alpha'} n_{\mathbf{k}'\alpha'} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

A equação acima pode ser identificada como a entropia de Haldane, a menos de uma constante multiplicativa. Substituindo a equação (3.16) na condição de minimização da energia livre, e definindo a função de Wu, $w_{\mathbf{k}\alpha} = D_{\mathbf{k}\alpha}/N_{\mathbf{k}\alpha}$, obtemos a equação de Wu-Haldane:

$$(1 + w_{\mathbf{k}\alpha}) \prod_{\mathbf{k}'\alpha'} \left(\frac{w_{\mathbf{k}'\alpha'}}{1 + w_{\mathbf{k}'\alpha'}} \right)^{g_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'}} = e^{\beta \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}} \quad (3.17)$$

Assim, o potencial termodinâmico, $\Omega = -\frac{1}{\beta} \ln Z$, assume a seguinte forma:

$$\beta \Omega_{frac} = \beta \frac{\Omega_0}{G_0} = - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \ln(1 + w_{\mathbf{k}\alpha}^{-1}). \quad (3.18)$$

A aditividade da energia demonstrada na equação (3.12), nos leva a uma escolha intuitiva (porém incorreta) para a energia dos *exclusons* $\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}$:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\mathbf{k}1} &= \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2 = \varepsilon_{\mathbf{k}2}, \\ \varepsilon_{\mathbf{k}3} &= U, \end{aligned} \quad (3.19)$$

e, assim, interpretarmos as espécies dos *exclusons* como: $n_{\mathbf{k}1} = \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$, $n_{\mathbf{k}2} = \langle n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle$ e $n_{\mathbf{k}3} = \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle$.

De fato, apesar de ser uma escolha intuitiva, comparando com os resultados da seção anterior, resumidos em (3.11), torna-se impossível obter a matriz de interação estatística de forma a recuperar consistentemente a termodinâmica do modelo. Assim, introduzimos a matriz Λ que transforma $N_{\mathbf{k}\alpha}$:

$$\tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha} = - \sum_{\mathbf{k}'\alpha'} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} N_{\mathbf{k}'\alpha'}, \quad (3.20)$$

e o peso estatístico:

$$W = \prod_{\mathbf{k}\alpha} \frac{(\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} - \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha} - 1)!}{(\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} - 1)! \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha}!}. \quad (3.21)$$

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

$$\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} = \tilde{G}_{\mathbf{k}} - \sum_{\mathbf{k}'\alpha'} \tilde{g}_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} \tilde{N}_{\mathbf{k}'\alpha'}. \quad (3.22)$$

O mesmo procedimento de minimização da energia livre pode ser usado para encontrar o conjunto de números médios de ocupação transformados, agora definidos por $\tilde{n}_{\mathbf{k}\alpha} = \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha}/\tilde{G}_0$. Consoante com esse fato, a energia livre do sistema se escreve em termos das novas matrizes:

$$\begin{aligned} \Omega = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} N_{\mathbf{k}\alpha} - \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\alpha} (\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} + \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha}) \ln(\tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} + \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha}) + \\ \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} \ln \tilde{D}_{\mathbf{k}\alpha} + \frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha} \ln \tilde{N}_{\mathbf{k}\alpha}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Ressaltamos que a energia do sistema é invariante sob a transformação de variáveis executada. No equilíbrio, obtido da condição $\partial\Omega/\partial N_{\mathbf{k}\alpha} = 0$, obtemos uma equação de Wu (3.17) modificada:

$$\prod_{\mathbf{k}'\alpha'} \frac{\tilde{w}_{\mathbf{k}'\alpha'}^{g_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha}}}{(1 + \tilde{w}_{\mathbf{k}'\alpha'})^{g_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha} + \Lambda_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha}}} = e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}}, \quad (3.24)$$

onde a matriz $g_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha}$ será dada por

$$g_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha} = - \sum_{\mathbf{k}''\alpha''} \tilde{g}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'';\alpha\alpha''} \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}'';\alpha\alpha''}; \quad (3.25)$$

e a função de Wu se escreve:

$$\tilde{w}_{\mathbf{k}'\alpha'} = \frac{\tilde{D}_{\mathbf{k}'\alpha'}}{\tilde{N}_{\mathbf{k}'\alpha'}}. \quad (3.26)$$

Assim, podemos obter a energia livre fracionária:

$$\beta\Omega_{frac} = - \sum_{\mathbf{k}\alpha} \ln(1 + \tilde{w}_{\mathbf{k}\alpha}^{-1}) \quad (3.27)$$

Foi possível obter 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 [14]:

$$\begin{aligned} g_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \text{e } \Lambda_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} = -\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.28)$$

A interpretação correta da matriz estatística foi dada na referência [10], onde se identificou a verdadeira matriz de interação estatística dada por

$$\tilde{g}_{\mathbf{k}\mathbf{k}';\alpha\alpha'} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

Essa matriz se mostrou também apropriada para descrever outras versões do modelo de Hubbard: o modelo atrativo [36], o modelo com *bond-charge interaction* [37], e o de Penson-Kolb-Hubbard [38]

Em termos das variáveis transformadas, a aditividade da energia permanece e podemos escrever:

$$E = \sum_{\mathbf{k}\alpha} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha} \tilde{n}_{\mathbf{k}\alpha}, \quad (3.30)$$

onde

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\alpha} \equiv - \sum_{\mathbf{k}'\alpha'} \varepsilon_{\mathbf{k}'\alpha'} (\Lambda)_{\mathbf{k}'\mathbf{k};\alpha'\alpha}^{-1}. \quad (3.31)$$

Usando a equação acima, podemos determinar as energias corretas de cada *exclucion*:

$$\begin{aligned} \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}1} &= \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2 = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}2}; \\ &\text{e } \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}3} = 2(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Nesta formulação corrigida, $\tilde{n}_{\mathbf{k}1}$ e $\tilde{n}_{\mathbf{k}2}$ constituem o número médio de ocupação dos $\mathbf{k}$ singularmente ocupados:

$$\tilde{n}_{\mathbf{k}1} = \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle - \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle; \quad (3.33)$$

$$\tilde{n}_{\mathbf{k}2} = \langle n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle - \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle. \quad (3.34)$$

Por outro lado, $\tilde{n}_{\mathbf{k}3}$ representa o número médio de estados com dupla ocupação:

$$\tilde{n}_{\mathbf{k}3} = \langle n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}\downarrow} \rangle. \quad (3.35)$$

Agora, usando as equações obtidas acima, podemos determinar os $\tilde{w}_{\mathbf{k}}$:

$$\begin{aligned} \tilde{w}_{\mathbf{k},1} &= e^{\beta \tilde{\varepsilon}}; \\ \tilde{w}_{\mathbf{k},2} &= (1 + \tilde{w}_{\mathbf{k},1}) e^{\beta(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},2} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},1})} = e^{\beta \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},2}} + e^{\beta(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},2} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},1})}; \\ \tilde{w}_{\mathbf{k},3} &= (1 + \tilde{w}_{\mathbf{k},2}) e^{\beta(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},3} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},2})} = e^{\beta \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},3}} + e^{\beta(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},3} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},2})} + e^{\beta(\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},3} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k},1})}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Por fim, conseguimos recuperar a energia livre do sistema:

$$\begin{aligned} \Omega_{frac} &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln (1 + e^{-\beta \varepsilon_{\mathbf{k},1}} + e^{-\beta \varepsilon_{\mathbf{k},2}} + e^{-\beta \varepsilon_{\mathbf{k},3}}); \\ &= -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + 2e^{-\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2)} + e^{-2\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}]. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Adicionalmente, para garantir a consistência do método, devem existir operadores de criação e destruição de *exclusons*, $\psi_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger$ e $\psi_{\mathbf{k}\alpha}$, respectivamente, que satisfaçam a seguinte equação:

$$\tilde{n}_{\mathbf{k}\alpha} = \langle \psi_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \psi_{\mathbf{k}\alpha} \rangle. \quad (3.38)$$

Na nossa formulação, é simples mostrar que

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}1} &= (1 - c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\downarrow}) c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger; \\ \psi_{\mathbf{k}2} &= (1 - c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}\uparrow}) c_{\mathbf{k}\downarrow}^\dagger; \\ \psi_{\mathbf{k}3} &= c_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\downarrow}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Finalmente, podemos concluir que representamos consistentemente nosso sistema em termos de uma FES. É importante ressaltar que, embora o sistema seja solúvel, suas propriedades no contexto da estatística fracionária de Haldane podem contribuir para um melhor entendimento de alguns fundamentos da mecânica estatística.

3.3 Análise de Escala do Grande Potencial Ω

As transições de fase, de acordo com a análise de minimização da energia livre do sistema, podem ser classificadas como transições de primeira ordem (descontinuidade do parâmetro de ordem e da entropia) e de segunda ordem, ou contínuas. Em um sistema quântico, as transições de segunda ordem ocorrem no chamado ponto crítico quântico (PCQ) e são caracterizadas pela “competição” dos parâmetros que descrevem o sistema. No PCQ de sistemas não-integráveis, as propriedades estáticas e dinâmicas do sistema podem ser descritas pela teoria de escala e do grupo de renormalização [39, 40].

Para fixar as ideias, vamos apresentar uma pequena digressão sobre sistemas (de spin, por exemplo) na criticalidade, usando alguns fundamentos da teoria de escala e do grupo de renormalização (GR). A teoria do GR é baseada em acompanhar mudanças de escala do sistema de forma que no limite de grandes tamanhos (comprimento de correlação) se atinja o sistema na condição de criticalidade. De fato, a cada mudança de um fator b na escala de comprimento, o parâmetro K que depende da temperatura e das interações no sistema também se altera; essas alterações são governadas por equações (mapas) que podem ser iteradas na forma $K_{n+1} = f(K_n)$, tal que no limite $n \rightarrow \infty$ atingimos o ponto fixo definido pela relação: $K^* = f(K^*)$. Ressaltamos que no ponto crítico o sistema é caracterizado por fortes flutuações e comprimento de correlação infinito, isto é, qualquer perturbação da ordem se propaga por todo sistema. Assim, utilizando o fato que o QCP é invariante à escala do sistema, podemos aplicar as equações do grupo de renormalização na região próxima da criticalidade, através da linearização de perturbações nas variáveis a partir de seus valores no ponto fixo (estável ou instável) no espaço de parâmetros.

Neste contexto, definimos g como a distância ao ponto crítico, isto é, quão distante o parâmetro que rege a transição de fase está do seu valor crítico. Dessa forma, no PCQ as grandezas físicas são descritas por leis de potência, com expoentes críticos bem definidos e singularidades em $g \rightarrow 0$. Assim, podemos definir os expoentes α , ν , β , γ e o expoente dinâmico z , pelas seguintes relações [41, 42, 43]:

$$\begin{aligned}
 \Omega_s &\propto |g|^{2-\alpha}; \\
 \xi &\propto |g|^{-\nu}; \\
 m &\propto |g|^\beta; \\
 \chi &\propto |g|^{-\gamma}; \\
 \tau &\propto |g|^{-\nu z}; \\
 m(H, g=0) &\propto H^{\frac{1}{\delta}},
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

onde Ω_s é a parte singular da energia livre, τ é o tempo crítico de relaxação, ξ é o comprimento de correlação, χ é a susceptibilidade do sistema, m é o parâmetro de ordem, e H é campo conjugado ao parâmetro de ordem. De fato, entender o sistema na região próxima ao PQC equivale a determinar todos os seus expoentes críticos. Ressaltamos, entretanto, que, em um ponto crítico, esses expoentes são interdependentes através das denominadas relações de escala [44].

Aplicando as ideias desenvolvidas acima no contexto do modelo de Hubbard de repulsão coulombiana com alcance infinito (descrito nas seções precedentes), temos que o PCQ é caracterizado por [35]

$$T = 0, \quad \mu = 0, \quad e \quad U = \Delta. \tag{3.41}$$

Portanto, é conveniente definir o parâmetro que governa a transição a temperatura nula por $g = (\Delta - U)/2$. Dessa forma, é possível escrever um análogo à equação (3.40) para o nosso modelo:

$$\begin{aligned}\Omega_s &\propto |g|^{2-\alpha}; \\ \xi &\propto |g|^{-\nu_g}; \\ N_3(\mu = 0, g) &\propto |g|^\beta; \\ \chi &\propto |g|^{-\gamma}; \\ \tau &\propto |g|^{-\nu_g z}; \\ N_3(\mu, g = 0) &\propto \mu^{\frac{1}{\delta}}.\end{aligned}\tag{3.42}$$

Na expressão acima, o parâmetro de ordem m foi identificado como o número duplas ocupações N_3 e o potencial químico μ como seu "campo" associado, que no ensemble grã-canônico satisfaz a equação $N_3 = -\left[\frac{\partial \Omega_s}{\partial \mu}\right]$. É importante ressaltar, que os cálculos que serão descritos a seguir foram obtidos para uma transição de fase governada pelo g . A teoria de escala para uma transição governada pelo T a $g = 0$, pode ser obtida de forma completamente análoga.

Pela teoria de grupo de renormalização, a redução de proporção b na escala do sistema (as grandezas alteradas serão representadas por variáveis primadas), o comprimento característico é alterado de tal forma que $L' = b^{-1}L$, e as variáveis termodinâmicas μ , U e T , respondem a essa mudança de escala na forma:

$$U' = b^{-y}U; \quad \mu' = b^x\mu; \quad |g'| = b^a|g|.\tag{3.43}$$

Vamos definir o campo de temperatura, normalizado por U , como

$$\left(\frac{T}{U}\right)' = b^y \left(\frac{T}{U}\right).\tag{3.44}$$

Após a mudança de escala, a parte singular da densidade de energia livre, Ω_S tem dependência com U' e com uma função de escala $\Omega_0\left(\frac{T}{U'}, \frac{\mu'}{U'}; |g|\right)$ da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\Omega'_S &= \frac{\Omega}{L^d} = U' \Omega_0\left(\frac{T}{U'}, \frac{\mu'}{U'}; |g|\right); \\ \Omega'_S &= U b^{-(d+y)} \Omega_0\left(\frac{T}{U} b^{-y}, \frac{\mu}{U b^{-(y+x)}}; b^a |g|\right),\end{aligned}\tag{3.45}$$

onde d é a dimensão espacial do sistema. Adicionalmente, nota-se que o comprimento de correlação vai ter uma dependência direta com b , se introduzirmos uma função de escala ξ_0 :

$$\xi\left(\frac{T}{U}, \frac{\mu}{U}; |g|\right) = b \xi_0\left(\frac{T}{U} b^{-y}, \frac{\mu}{U b^{-(y+x)}}; b^a |g|\right).\tag{3.46}$$

Usando o fato que b é arbitrário, podemos tomar $b^a |g| = 1$ e obtemos

$$\xi\left(\frac{T}{U}, \frac{\mu}{U}; |g|\right) = |g|^{-1/a} \xi_0\left(\frac{T}{U} |g|^{-y/a}, \frac{\mu/U}{|g|^{\frac{y+x}{a}}}; 1\right).\tag{3.47}$$

Então, comparando com (3.42), temos que $\nu_g = \frac{1}{a}$. Além disso, a incerteza na energia, ΔE , escala da mesma forma que U , logo $\Delta E' = b^{-y} \Delta E$. Assim, pelo princípio da incerteza de Heisenberg, $\Delta E' \Delta \tau' = |g|^{y-z} \Delta E \Delta \tau \leq \hbar$, concluímos que $y = z$.

Agregando os resultados acima, e definindo o expoente de *crossover* $\phi = \nu_g z$, resulta:

$$\Omega_S = |g|^{\nu_g(d+z)} \Omega_0 \left(\frac{T}{|g|^\phi}, \frac{\mu}{|g|^{\nu_g(z+x)}} \right), \quad (3.48)$$

Na equação acima, absorvemos a dependência multiplicativa com U na função de escala. Comparando a equação acima com a expressão para Ω_S em (3.42), obtemos a *relação de Hiperescala*:

$$2 - \alpha = \nu_g(d + z). \quad (3.49)$$

Na expressão acima, entendemos $d_{eff} = d + z$ como uma dimensão efetiva para o sistema.

Continuando nossa construção, sabemos que o número de duplas ocupações será dado por

$$N_3 = - \left(\frac{\partial \Omega_S}{\partial \mu} \right)_T = - |g|^{\nu_g(d-x)} \Omega_0 \left(\frac{T}{|g|^\phi}, \frac{\mu}{|g|^{\nu_g(z+x)}} \right). \quad (3.50)$$

No limite em que $\mu = 0$, obtemos

$$N_3(\mu = 0, g) = - |g|^{\nu_g(d-x)} \Omega_0 \left(\frac{T}{|g|^\phi} \right) \propto |g|^\beta. \quad (3.51)$$

Logo, encontramos que $\beta = \nu_g(d - x)$. Em seguida, vamos tomar o limite $|g| = 0$ na equação (3.50). Entretanto, para analisar esse limite, é conveniente eliminar a dependência com $|g|$. Para tal, vamos propor o seguinte *ansatz*:

$$\Omega_0 \left(\frac{T}{|g|^\phi}, \frac{\mu}{|g|^{\frac{z+x}{\alpha}}}} \right) = \left(\frac{\mu}{|g|^{\nu_g(z+x)}} \right)^r, \quad (3.52)$$

que transforma (3.50) em

$$N_3(\mu, g = 0) = - |g|^{\beta - r\nu_g(z+x)} (\mu)^r \propto |\mu|^{\frac{1}{\delta}}. \quad (3.53)$$

Imediatamente, concluímos que $\delta = \frac{1}{r}$. E, para eliminar a dependência com $|g|$, r deve satisfazer a condição abaixo:

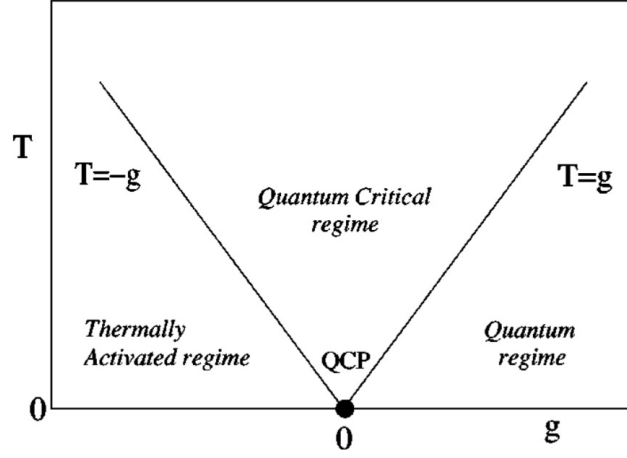
$$r = \frac{\beta}{\nu_g(x + z)} = \frac{\beta}{\Delta_{cross}}. \quad (3.54)$$

Por fim, em termos dos expoentes críticos da equação (3.42), temos que a parte singular da energia livre do sistema pode ser escrita como

$$\Omega_s(T, \mu; |g|) = \xi^{-(d+z)} \Omega_0 \left(\frac{T}{|g|^\phi}, \frac{\mu}{|g|^{\beta\delta}} \right). \quad (3.55)$$

Além disso, o comprimento de correlação ξ pode ainda ser descrito em duas formas assintóticas distintas:

$$\begin{aligned} \xi_g &\sim g^{-\nu_g}, \quad T = 0, \quad g \rightarrow 0^+; \\ \text{e } \xi_T &\sim T^{-\nu_T}, \quad g = 0, \quad T \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.56)$$

Figura 4 – Diagrama de fase em função de g e T , com linhas de *crossover*.

Fonte : Figura da Ref. [10]

Os valores da razão T/g^ϕ e o sinal de g podemos determinar três regimes nas proximidades do ponto crítico, separados por duas linhas de crossover, $T = g$ e $T = -g$, como mostrado na figura 4, onde $\phi = 1$.

Na figura 4, vemos que as linhas de *crossover* se encontram no PCQ. Ressaltamos também, que o regime termicamente ativado apresenta um comportamento tipo Boltzmann. No capítulo seguinte exploraremos esse regime no contexto do regime de spin incoerente, mas, por hora, focaremos nosso estudo no regime crítico e quântico crítico.

Tendo em mãos uma teoria de escala adequada para o nosso modelo, podemos analisar o potencial grã-canônico e determinar os expoentes críticos do sistema. Como já vimos, o PCQ é determinado por $T = 0$, $\mu = 0$ e $U = \Delta$. Agora, reorganizando a expressão obtida para a energia livre grã-canônica do sistema (4.2), considerando o regime onde $T \rightarrow 0$ ($e^{-\beta U} \ll 0$), obtemos

$$\begin{aligned} \Omega(T, \mu; g) &= \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2) - NT \ln 2 \\ &- T \sum_{\mathbf{k}} \ln \left\{ 1 + \frac{1}{2} e^{\beta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2)} \right\} + \mathcal{O}(e^{-\beta U/2}). \end{aligned} \quad (3.57)$$

As transições de fase quânticas são evidenciadas pela parte singular da energia livre, logo os dois primeiros termos, por serem regulares, não são úteis do ponto de vista da análise de escala. O terceiro termo, Ω_S , no entanto, apresenta singularidades para $U \rightarrow \Delta$ e $T \rightarrow 0$, logo será utilizado para obter os expoentes críticos do sistema. Agora, podemos reescrever esse termo assumindo $\mu = 0$ e substituindo o somatório pela integral, usando a densidade de estados na aproximação de *tight-binding*, $\sigma(\varepsilon)$, da seguinte forma:

$$\Omega_S(T, \mu = 0; g) = \frac{\Omega}{V} = -T \int_0^{\Delta/2} d\varepsilon \sigma(\varepsilon) \ln \left\{ 1 + e^{\beta(\varepsilon_k - U/2)} \right\}. \quad (3.58)$$

Para o cálculo da integral acima, devemos notar que a contribuição de energia da parte inferior da banda é desprezível para $T \rightarrow 0$. De fato, a maior contribuição vem do topo

da banda e podemos aproximar a densidade de estados no limite $U \rightarrow \Delta^-$ [45]:

$$\sigma(\varepsilon) = A_d \left(1 - \frac{2\varepsilon}{\Delta}\right)^{d/2-1} \left\{1 + \mathcal{O}\left(1 - \frac{2\varepsilon}{\Delta}\right)\right\}, \quad \frac{2\varepsilon}{\Delta} \rightarrow 1^-, \quad (3.59)$$

onde A_d é uma constante que depende da dimensão do sistema:

$$A_d = \frac{4}{\Delta \Gamma(d/2)} \left(\frac{d}{2\pi}\right)^{d/2}, \quad (3.60)$$

e $\Gamma(s)$ é a função gamma.

Inicialmente, trataremos o regime quântico (Q), $T = 0$ e $g \rightarrow 0$. Nesse caso, vamos considerar a seguinte substituição de variável: $y = \beta(\varepsilon - U/2)$, que transforma a equação (3.58) em

$$\Omega_S = -A_d T^2 \int_{-\beta U/2}^{-\beta g} \left(\frac{2g}{\Delta} - \frac{2T}{\Delta} y\right)^{d/2-1} \ln\left(1 + \frac{1}{f} e^y\right) dy. \quad (3.61)$$

Agora, integrando por partes duas vezes, para eliminar a dependência multiplicativa com T , e desprezando termos de ordem $\mathcal{O}(e^{-\beta U})$, obtemos

$$\Omega_S = -A_d \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \frac{4}{d(d+2)} \int_{-\beta U}^{\beta g} \left(\frac{2g}{\Delta} - \frac{2T}{\Delta} y\right)^{d/2+1} \frac{f e^y}{(e^y + f)^2} dy. \quad (3.62)$$

Por outro lado, como $g > T$, podemos usar uma expansão binomial para $\left(\frac{2g}{\Delta} - \frac{2T}{\Delta} y\right)^{d/2+1}$, resultando em

$$\begin{aligned} \left(\frac{2g}{\Delta} - \frac{2T}{\Delta} y\right)^{d/2+1} &= \left(\frac{2g}{\Delta}\right)^{\frac{d}{2}+1} \left(1 - \frac{T}{g} y\right)^{d/2+1} \\ &= \left(\frac{2g}{\Delta}\right)^{\frac{d}{2}+1} \sum_{m=0,1,2,\dots}^{\infty} \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2}+2\right)}{m! \Gamma\left(\frac{d}{2}-m+2\right)} \left(-\frac{T}{g} y\right)^m. \end{aligned} \quad (3.63)$$

A partir da expressão acima, podemos representar o potencial grã-canônico no regime Q como

$$\Omega_s^Q/N = -A_d \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \left(\frac{2g}{\Delta}\right)^{(d+2)/2} \left[a_0^Q + a_1^Q \frac{T}{g} + a_2^Q \left(\frac{T}{g}\right)^2 + \dots \right]. \quad (3.64)$$

Em seguida, usando o fato que estamos em baixas temperaturas, podemos estender os limites de integração inferior e superior para $-\infty$ e ∞ , respectivamente. Dessa forma, usando a equação (3.63), temos que os coeficientes da expansão serão dados por

$$a_m^Q = \frac{4}{d(d+2)} \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2}+2\right)}{\Gamma(m+1) \Gamma\left(\frac{d}{2}-m+2\right)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y^m f e^y}{(e^y + f)^2} dy \quad (3.65)$$

Calculando os coeficientes para $m = 0, 1, 2$, temos

$$\begin{aligned} a_0^Q &= \frac{4}{d(d+2)} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f e^y}{(e^y + f)^2} dy = \frac{4}{d(d+2)}; \\ a_1^Q &= \frac{2}{d} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y f e^y}{(e^y + f)^2} dy = \frac{2 \ln f}{d}; \\ a_2^Q &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y^2 f e^y}{(e^y + f)^2} dy = \frac{1}{2} \left[\frac{\pi^2}{3} + (\ln f)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.66)$$

Agora, analisando o regime quântico crítico (QC), $T \rightarrow 0$ e $g = 0$, vamos efetuar uma substituição de variável: $y = -\beta(\varepsilon - U/2)$, que transforma a equação (3.58) em

$$\Omega_S = -A_d T^2 \int_{\beta g}^{-\beta U/2} \left(\frac{2g}{\Delta} + \frac{2T}{\Delta} y \right)^{d/2-1} \ln \left(1 + \frac{1}{f} e^{-y} \right) dy. \quad (3.67)$$

Integrando por partes uma única vez (nesse caso, não precisamos retirar a dependência explícita com T) e desprezando termos de ordem $\mathcal{O}(e^{-\beta U})$, obtemos

$$\Omega_S = -A_d \frac{T\Delta}{d} \int_{\beta g}^{-\beta U} \left(\frac{2g}{\Delta} + \frac{2T}{\Delta} y \right)^{d/2} \frac{f e^{-y}}{(e^{-y} + f)} dy. \quad (3.68)$$

Em seguida, como $T > g$, podemos executar uma expansão binomial para $\left(\frac{2g}{\Delta} - \frac{2T}{\Delta} y \right)^{d/2+1}$, obtendo, assim,

$$\begin{aligned} \left(\frac{2g}{\Delta} - \frac{2T}{\Delta} y \right)^{d/2} &= \left(\frac{2T}{\Delta} \right)^{\frac{d}{2}+1} \left(\frac{g}{T} - y \right)^{d/2} \\ &= \left(\frac{2T}{\Delta} \right)^{\frac{d}{2}} \sum_{m=0,1,2,\dots}^{\infty} \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2}+1\right)}{m! \Gamma\left(\frac{d}{2}-m+1\right)} \left(\frac{g}{T} \right)^m y^{\frac{d}{2}-m}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

A partir da expressão acima, podemos representar o potencial grã-canônico no regime QC como

$$\Omega_s^{QC}/N = -A_d \left(\frac{\Delta}{2} \right)^2 \left(\frac{2T}{\Delta} \right)^{(d+2)/2} \left[a_0^{QC} + a_1^{QC} \frac{g}{T} + a_2^{QC} \left(\frac{g}{T} \right)^2 + \dots \right]. \quad (3.70)$$

Em seguida, usando o fato que $T \rightarrow 0$, podemos estender os limites de integração inferior e superior para 0 e ∞ , respectivamente. Dessa forma, usando a equação (3.69), os coeficientes da expansão serão dados por

$$a_m^{QC} = \frac{2}{d} \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2}+1\right)}{f m! \Gamma\left(\frac{d}{2}-m+1\right)} \int_0^\infty \frac{y^{d/2-m}}{e^y + 1/f} dy \quad (3.71)$$

Usando, agora, a representação integral das funções de Lerch (página 1039 da Ref. [23]),

$$\begin{aligned} \Phi(z, s, v) &= \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt \frac{t^{s-1} e^{-(v-1)t}}{e^t - z}, \\ [Re\ v > 0, \text{ or } |z| \leq 1, z \neq 1, \text{ Re } s > 0, \text{ or } \\ & z = 1, \text{ Re } s > 1], \end{aligned} \quad (3.72)$$

temos que os coeficientes da expansão têm uma forma explícita válida para todo m :

$$a_m^{QC} = \frac{1}{f m!} \Gamma\left(\frac{d}{2}\right) \Phi\left(-\frac{1}{f}, \frac{d}{2} - m + 1, 1\right), f = 2 \quad (3.73)$$

Como vimos acima, mais uma vez as funções de Lerch aparecem no contexto da estatística fracionária. Estas funções explicitam o comportamento *Non-Fermi Liquid* do sistema, e substituem as funções zeta de Riemann que surgem no cálculo da energia para os líquidos de Fermi. Nesse caso, conseguimos inferir uma propriedade importante delas:

que o modulo do parâmetro z nos fornece o número de ocupação médio dos estados $\mathbf{k}$ singularmente ocupados. Dessa forma, o nosso f contará a degenerescência do estado fundamental. Associando os resultados obtidos acima, podemos generalizar a expressão para o potencial grã-canônico da seguinte forma:

$$\Omega_s(x, w)/N = -A_d \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \left(\frac{2x}{\Delta}\right)^{(d+2)/2} (a_0 + a_1 w + a_2 w^2 + \dots), \quad (3.74)$$

onde denota-se $x = \max\{g, T\}$ e $w = \min\{g, T\}/x$. Nessa formulação, podemos acessar ambos os regimes Q e QC.

Agora, temos em mãos todas as ferramentas para determinar os expoentes críticos. Primeiramente, para o regime Q, $g \rightarrow 0$ e $T = 0$, temos que $x = g$ e $w = T/g$; logo, comparando com (3.55), obtemos

$$\nu_g(d + z) = \frac{1}{2}(d + 2). \quad (3.75)$$

Pela expressão acima, intuimos que $\nu_g = 1/2$ e $z = 2$. Além disso, no Regime QC temos um resultado similar a equação (3.75), então $\nu_T = \nu_g = \frac{1}{2}$; e, usando a relação de hiperescala (3.49): $\alpha_g = \alpha_T = 1 - \frac{d}{2}$. Além disso, é possível obter também o expoente de *crossover*, $\phi = \nu z = 1$. Esse expoente define as linhas de crossover onde $T = \pm|g|$ e, dessa forma, é possível observar os diferentes regimes do sistema na figura 4.

Por outro lado, pelo fato da transição de Mott ser governada pela interação, percebemos que o parâmetro de ordem m do sistema pode ser identificado como a densidade de duplas ocupações nos estados $\mathbf{k}$,

$$N_3 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}3} = \sum_{\mathbf{k}} e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}3}} \quad (3.76)$$

Em seguida, substituindo o somatório pela integral com a densidade de estados (3.59), temos

$$N_3 = \frac{1}{N} A_d \int_0^{\Delta/2} d\varepsilon \left(1 - \frac{2\varepsilon}{\Delta}\right)^{\frac{d}{2}-1} e^{-2\beta(\varepsilon-\mu)}. \quad (3.77)$$

Ressaltamos que a descontinuidade de N_3 é comandada pelo parâmetro $g' = \Delta - 2\mu$. Agora, usando a substituição $y = -2\beta(\varepsilon - \mu)$, temos que

$$N_3 = -\frac{1}{N} (T/2) A_d \int_{2\beta\mu}^{-\beta g'} dy \left(\frac{g'}{\Delta} + \frac{T}{\Delta} y\right)^{\frac{d}{2}-1} e^y; \quad (3.78)$$

e integrando por partes uma vez para eliminar a dependência com T , resulta

$$N_3 = \frac{A_d \Delta}{Nd} (T/2) \int_{2\beta\mu}^{-\beta g'} dy \left(\frac{g'}{\Delta} + \frac{T}{\Delta} y\right)^{\frac{d}{2}} e^y. \quad (3.79)$$

Podemos proceder usando uma expansão binomial semelhante à anterior nas equações (3.63) e (3.69), N_3 pode ser escrito pela expansão abaixo:

$$N_3 = \frac{A_d \Delta}{Nd} \left(\frac{2x}{\Delta}\right)^{\frac{d}{2}} [c_0 + c_1 y + c_2 y^2 + \dots], \quad (3.80)$$

onde $x = \max(T, g')$ e $y = \min(T, g')/x$, e os coeficientes são dados por

$$\begin{aligned} c_m &= \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)}{f m! \Gamma\left(\frac{d}{2} - m + 1\right)} \int_{2\beta\mu}^{-\beta g'} y^{\frac{d}{2}-m} e^y dy, \quad g' > T; \\ c_m &= \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2} + 1\right)}{m! \Gamma\left(\frac{d}{2} - m + 1\right)} \int_{2\beta\mu}^{-\beta g'} y^m e^y dy, \quad T > g'. \end{aligned} \tag{3.81}$$

Além disso, no regime em que $g' > \mu$, o parâmetro de ordem $N_3 \sim |g|^{d/2}$; assim, usando (3.42), indentificamos o expoente $\beta = d/2$. Por fim, para $g' < \mu$, a equação (3.81) assume a forma $N_3 \sim \mu^{\frac{d}{2}}$; e, pela equação (3.42), temos $\delta = \frac{2}{d}$.

4 TERMODINÂMICA DO MODELO DE HUBBARD DE ALCANCE INFINITO NO REGIME DE SPIN INCOERENTE

No capítulo anterior, o modelo de Hubbard foi mapeado em um gás ideal de três espécies obedecendo à uma FES. E, assim, obtivemos diversas propriedades gerais do modelo, assim como seu comportamento na criticalidade. O presente capítulo aborda resultados originais, obtidos por nós, no contexto de um regime especial do modelo de Hubbard de alcance infinito: o spin incoerente. Esses resultados estão sintetizados em um artigo intitulado *Thermodynamics of the Infinity-Range Hubbard Model in the Spin-Incoherent regime* [16](Apêndice A), publicado em 2022 no *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*.

Neste capítulo, inicialmente derivaremos a energia livre grã-canônica no regime de spin incoerente e limite de acoplamento forte. Em seguida, examinaremos a entropia e o calor específico. Mostraremos que essas quantidades são descritas por séries de potências, cujos coeficientes são resumidos em duas tabelas, das quais podemos obter gráficos para várias dimensões (até dez), e no limite $d \rightarrow \infty$. Para dimensões pares, as séries são finitas, então temos funções polinomiais com ordem crescente com a dimensionalidade. Destacamos também o uso de técnicas de soma de Borel para contornar a divergência da série para dimensões ímpares.

4.1 Energia livre grã-canônica no regime de spin incoerente

Existem duas maneiras básicas de gerar coerência, no sentido de alinhamento de spins, em uma rede: a presença de campo magnético, que faz com que os spins se alinhem com o campo externo, a depender da intensidade do campo; e a presença de estados duplamente ocupados, que fornecem ao sistema ordem antiferromagnética. O regime de spin incoerente é um regime muito interessante e que se manifesta em cadeias de Hubbard 1D, tendo recebido atenção especial ao longo dos anos [46], tanto nas versões contínua [47, 48] ou discreta [49]. No nosso modelo, não consideramos a existência de um campo magnético externo; logo, para acessar o regime de spin incoerente, utilizamos a energia térmica para eliminar duplas ocupações no sistema. Nesse contexto, o regime de spin incoerente é realizada sob duas condições físicas específicas: a primeira requer que a energia térmica seja muito baixa com relação à energia característica de excitação de carga, isto é, $T \ll E_F$, onde T é a temperatura e E_F é a energia de Fermi; a segunda condição exige que, apesar da energia térmica ser baixa, ela ainda é muito maior que a energia de spin característica, resultando em $J \equiv 4t^2/U \ll T$, onde t é a amplitude de salto entre vizinhos mais próximos, U é a interação de Coulomb repulsiva, e J é o acoplamento de troca antiferromagnética, ou seja, estamos trabalhando com graus de liberdade de spin altamente excitados. Em resumo, teremos a seguinte condição para o regime de spin incoerente:

$$\frac{4t^2}{U} \ll T \ll E_F (\approx t), \quad (4.1)$$

Ressaltamos, também, que o regime de spin incoerente é geralmente estudado em apenas uma dimensão espacial, pela facilidade do tratamento matemático, embora, em nosso estudo, realizamos uma extensão para dimensões arbitrárias na condição de acoplamento forte. Citando trabalhos importantes que abordaram esse regime, temos: na referência [50], este regime foi estudado no contexto do estado fundamental de sistemas fortemente correlacionados; além disso, na referência [15] a "Teoria Fracionária de Landau" foi introduzida e usada no regime de spin incoerente do Líquido de Luttinger (LL) em cadeias de Hubbard. Neste caso, resultados interessantes foram obtidos para o potencial químico e entropia do LL da Teoria Fracionária de Landau.

No capítulo anterior, obtivemos a seguinte expressão para a energia livre grâ-canônica:

$$\Omega_{frac} = -\frac{1}{\beta} \sum_{\mathbf{k}} \ln [1 + 2e^{-\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu - U/2)} + e^{-2\beta(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)}]. \quad (4.2)$$

Em nosso modelo, para garantir o regime de spin incoerente (4.1), devemos trabalhar no limite de acoplamento forte:

$$U \gg \Delta. \quad (4.3)$$

Podemos proceder substituindo a soma na equação (4.2) pela integral sobre a densidade dos estados $\sigma(\varepsilon)$:

$$\Omega = -\frac{1}{\beta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon \sigma(\varepsilon) \ln [1 + 2e^{-\beta(\varepsilon - \mu - U/2)} + e^{-2\beta(\varepsilon - \mu)}], \quad (4.4)$$

Em vista das condições (4.1) e (4.3), a contribuição não-nula para a integral acima vem do intervalo $[-\Delta/2, 0]$, então podemos aproximar a densidade de estados tipo *tight-binding* [45] por

$$\sigma(\varepsilon) = A_d \left(1 + \frac{2\varepsilon}{\Delta}\right)^{d/2-1} \left[1 + \mathcal{O}\left(1 + \frac{2\varepsilon}{\Delta}\right)\right], \quad \left(-\frac{2\varepsilon}{\Delta}\right) \rightarrow 1^-, \quad (4.5)$$

onde A_d é mesma constante d -dimensional definida na equação (3.60). Para resolver a integral em (4.4), considere a seguinte mudança de variável, $y = -\beta\varepsilon$, que a transforma em

$$\Omega = -\frac{A_d}{\beta^2} \int_{\beta\Delta/2}^0 dy \left(1 - \frac{2y}{\Delta\beta}\right)^{d/2-1} \ln [1 + 2Ae^y + Be^{2y}], \quad (4.6)$$

onde $A = e^{\beta(\mu+U/2)}$ e $B = e^{2\beta\mu}$. Integrando por partes, nós obtemos,

$$\begin{aligned} \Omega(T, \mu; U) = & -\frac{A_d \Delta T}{d} \ln(1 + 2A + B) - \frac{A_d \Delta T}{d} \\ & \times \int_0^{\beta\Delta/2} dy \left(1 - \frac{2y}{\Delta\beta}\right)^{d/2} \frac{2Ae^y + Be^{2y}}{1 + 2Ae^y + Be^{2y}}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Além disso, usando a condição de spin incoerente (4.1), podemos estender o limite superior de integração para ∞ , então a integral que devemos resolver é

$$I = \int_0^\infty dy \left(1 - \frac{2y}{\Delta\beta}\right)^{d/2} \frac{2Ae^y + Be^{2y}}{1 + 2Ae^y + Be^{2y}}. \quad (4.8)$$

Agora, pela expansão binomial,

$$\left(1 - \frac{2y}{\Delta\beta}\right)^{d/2} = \sum_{m=0,1,2,\dots}^{\infty} \frac{\Gamma(d/2 + 1)}{\Gamma(d/2 + 1 - m)\Gamma(m + 1)} \left(-\frac{2y}{\Delta\beta}\right)^m, \quad (4.9)$$

a integral pode ser expressa pela série de potências abaixo:

$$I = \sum_{m=0,1,2,\dots}^{\infty} a_m^{SI} \left(-\frac{T}{2td}\right)^m, \quad (4.10)$$

onde o sobrescrito "SI" significa spin incoerente, e os coeficientes da expansão, a_m^{SI} , são definidos por

$$a_m^{SI} = \frac{\Gamma(d/2 + 1)}{\Gamma(d/2 + 1 - m)\Gamma(m + 1)} \int_0^\infty dy y^m \frac{2Ae^y + Be^{2y}}{1 + 2Ae^y + Be^{2y}}. \quad (4.11)$$

A seguir, apresentaremos uma análise de (4.11) para dois regimes importantes do potencial químico:

(a) No primeiro caso, consideramos que μ está no intervalo $-U/2 \leq \mu < U/2$. Então, usando a equação (4.3), B será muito pequeno em comparação com A ; portanto, a equação (4.11) pode ser escrita na forma:

$$a_m^{SI} = \frac{\Gamma(d/2 + 1)}{\Gamma(d/2 + 1 - m)\Gamma(m + 1)} \int_0^\infty dy y^m \frac{e^y}{\frac{1}{2}e^{-\beta(\mu+U/2)} + e^y}. \quad (4.12)$$

Usando agora a forma integral da Função Lerch (??), podemos identificar diretamente que

$$a_m^{SI} = \frac{\Gamma(d/2 + 1)}{\Gamma(d/2 + 1 - m)} \Phi\left(-\frac{1}{2}e^{-\beta(\mu+U/2)}, m + 1, 0\right). \quad (4.13)$$

Aqui, devemos observar que, no capítulo anterior, as funções de Lerch também estavam presente na definição dos correspondentes coeficientes da série válida nas proximidades do PCQ: $T = 0$, $\mu = 0$ e $U = \Delta$. Isso sugere que as funções de Lerch desempenham um papel significativo na termodinâmica de sistemas que obedecem à FES. Mais importante, se usarmos a prescrição de que o módulo de z associado à função Lerch é igual ao número médio de ocupação de *exclusons* [10], encontramos

$$\langle n_{\mathbf{k},\alpha} \rangle = \frac{1}{2}e^{-\beta(\mu+U/2)}. \quad (4.14)$$

Vale ressaltar que, para $\mu = -U/2$,

$$\langle n_{\mathbf{k},\alpha} \rangle_{\mu=-U/2} = 1/2, \quad (4.15)$$

um valor bastante perceptível [10], que exploraremos no contexto do comportamento termodinâmico do modelo na próxima seção.

(b) Por completeza, vamos considerar também o caso $\mu \geq U/2$, que implica $B \gg A$. Portanto, usando o mesmo procedimento de (a), encontramos

$$a_m^{SI} = \frac{1}{2^m} \frac{\Gamma(d/2 + 1)}{\Gamma(d/2 + 1 - m)} \Phi\left(-e^{-2\beta\mu}, m + 1, 0\right), \quad (4.16)$$

do qual podemos identificar um regime termicamente ativado, como podemos ver na figura 4, para o número médio de ocupação térmica de *exclusons*:

$$\langle n_{\mathbf{k},\alpha} \rangle = e^{-2\beta\mu}. \quad (4.17)$$

4.2 Propriedades Termodinâmicas: Entropia e Calor Específico

Nesta seção, derivaremos o comportamento térmico de duas propriedades termodinâmicas relevantes: entropia e calor específico, sob a condição $\mu = -U/2$. Usando a definição da energia livre grã-canônica

$$\Omega = E - TS_N - \mu N, \quad (4.18)$$

podemos calcular a entropia por

$$S_N = - \left(\frac{\partial \Omega}{\partial T} \right)_N. \quad (4.19)$$

Usando agora a Eq. (4.7), encontramos

$$\begin{aligned} S_N(T) = & \frac{A_d \Delta}{d} \ln 3 + \frac{A_d \Delta}{d} \sum_{m=0,1,2,\dots}^{\infty} \frac{\Gamma(d/2 + 1)}{\Gamma(d/2 + 1 - m)} \\ & \times \Phi \left(-\frac{1}{2}, m + 1, 0 \right) (m + 1) \left(-\frac{T}{2td} \right)^m. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Observe que temos uma entropia residual em $T = 0$: $S_N(T = 0) = \frac{A_d \Delta}{d} \ln 2$, onde o fator $\ln 2$ é uma assinatura da estatística fracionária obedecida pelas partículas, o que leva à dupla degenerescência do estado fundamental. Em seguida, podemos escrever a entropia por sítio como:

$$S(T) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m \left(\frac{T}{t} \right)^m, \quad (4.21)$$

onde $\left(\frac{T}{t} \right)$ é a temperatura adimensional definida no intervalo $[0, 1]$, e a_m é dada por

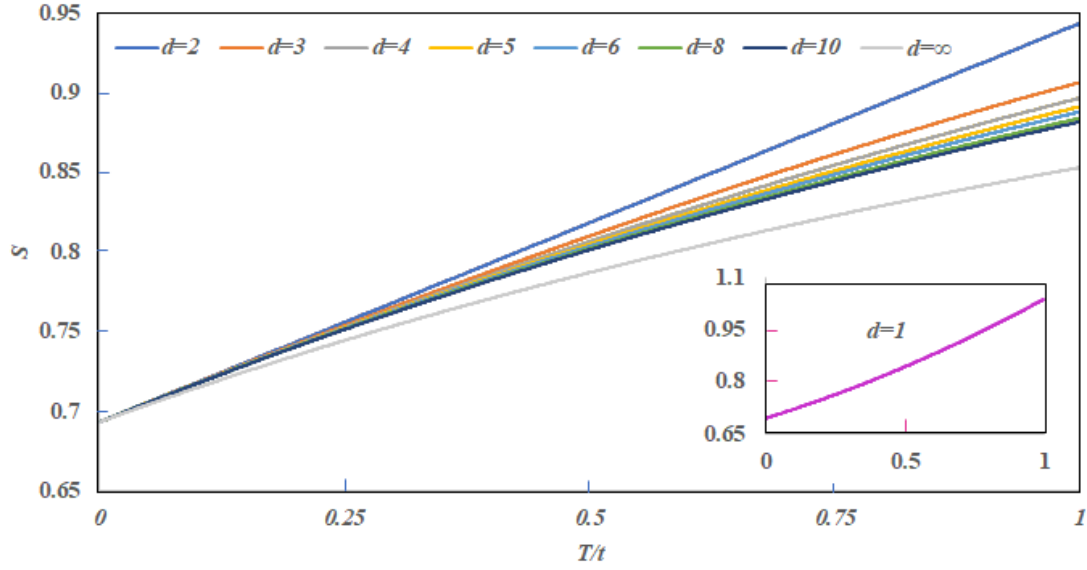
$$\begin{aligned} a_0 &= \ln 2; \\ a_m &= \frac{\Gamma(d/2 + 1)}{\Gamma(d/2 + 1 - m)} \Phi \left(-\frac{1}{2}, m + 1, 0 \right) (m + 1) \left(-\frac{1}{2d} \right)^m, \text{ for } m = 1, 2, 3, \dots \end{aligned} \quad (4.22)$$

Tabela 1 – Tabela dos coeficiente de a_0 a a_7 da série da entropia por sítio, para várias dimensões.

d	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5	a_6	a_7
1	0.69315	0.225	0.088125	0.09	0.14355	0.30762	0.80750	2.53784
2	0.69315	0.22500	0	0	0	0	0	0
3	0.69315	0.225	-0.029375	-0.00333333	-0.0010634	-0.00054254	-0.00036922	-0.00031648
4	0.69315	0.22500	-0.044062	0	0	0	0	0
5	0.69315	0.22500	-0.052875	0.00360	0.00022969	4.21875E-05	1.23047E-05	4.92188E-06
6	0.69315	0.22500	-0.05875	0.00667	0	0	0	0
8	0.69315	0.22500	-0.066094	0.01125	-0.00089722	0	0	0
10	0.69315	0.22500	-0.07050	0.01440	-0.0018375	0.0001125	0	0
∞	0.69315	0.22500	-0.088125	0.03000	-0.0095701	0.0029297	-0.00085449	0.00024414

Fonte : O autor (2022) na Ref.[16].

Figura 5 – Entropia por sítio, S , como função da temperatura adimensional, T/t , para várias dimensões.



Fonte : O autor (2022) na Ref.[16].

Agora, vamos calcular o calor específico por sítio. Usando a sua definição:

$$C(T) = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_N = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_N, \quad (4.23)$$

e (4.21), nós podemos obter:

$$C = \sum_{m=1,2,3,\dots}^{\infty} b_m \left(\frac{T}{t} \right)^m, \quad (4.24)$$

onde os coeficientes b_m estão relacionados com os a_m da seguinte forma:

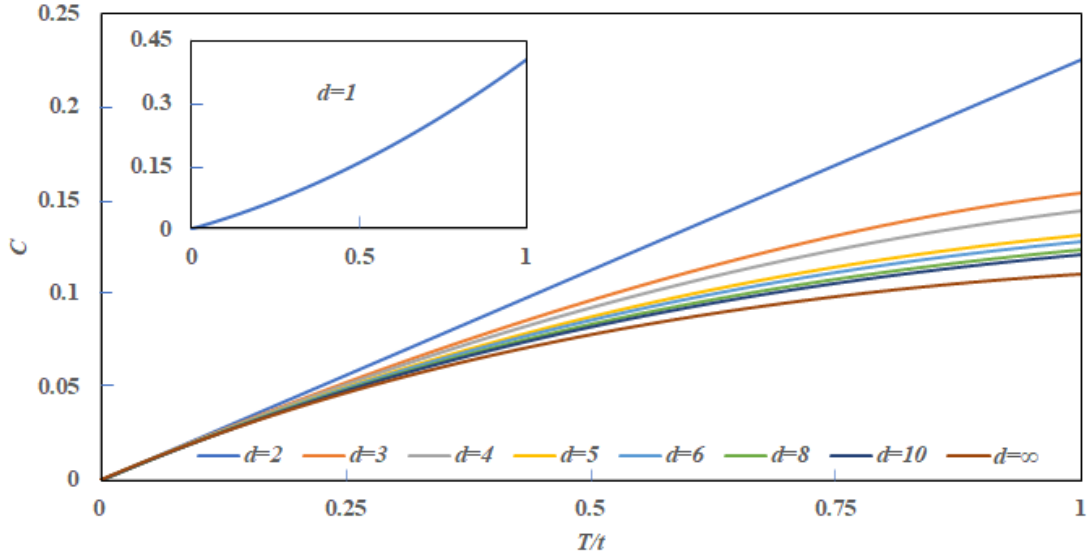
$$b_m = m \times a_m, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (4.25)$$

Tabela 2 – Tabela de coeficientes de b_1 a b_8 do calor específico por sítio, para várias dimensões.

d	b_1	b_2	b_3	b_4	b_5	b_6	b_7	b_8
1	0.22500	0.17625	0.27000	0.527344	1.50732	4.84497	17.76489	74.23187
2	0.22500	0	0	0	0	0	0	0
3	0.22500	-0.05875	-0.01000	-0.00391	-0.00266	-0.00222	-0.00222	-0.00261
4	0.22500	-0.08813	0	0	0	0	0	0
5	0.22500	-0.10575	0.01080	0.000844	0.00021	7.38281E-05	3.44531E-05	1.99336E-05
6	0.22500	-0.11750	0.02000	0	0	0	0	0
8	0.22500	-0.13219	0.03375	-0.00330	0	0	0	0
10	0.22500	-0.14100	0.04320	-0.00675	0.00055	0	0	0
∞	0.22500	-0.17625	0.09000	-0.038281	0.014648	-0.0051270	0.0017090	-0.00054932

Fonte : O autor (2022) na Ref.[16].

Figura 6 – Calor específico por sítio, C , em função da temperatura adimensional, T/t , para várias dimensões.



Fonte : O autor (2022) na Ref.[16].

Aqui, enfatizamos que $a_1 = b_1 = 0.225$ para qualquer d . Nas tabelas 1 e 2, podemos ver que, para dimensões pares, as séries que descrevem a entropia e o calor específico, (4.21) e (4.24), respectivamente, são finitas. Assim, para dimensões pares, temos funções polinomiais com ordem crescente com d , como podemos ver nas Figuras 5 e 6. Por exemplo, em duas dimensões temos uma linha reta, enquanto em quatro dimensões temos um comportamento parabólico com concavidade para baixo.

Para dimensões ímpares, ambas as séries divergem no contexto das técnicas de soma de Borel, e podemos, assim, classificar [51, 52] sua divergência assintótica como do tipo fatorial. De fato, em três dimensões, os coeficientes de série para entropia e calor específico, respectivamente, satisfazem

$$\begin{aligned} \lim_{m \rightarrow \infty} a_m &= 6 \frac{m}{144^m} m!; \\ \lim_{m \rightarrow \infty} b_m &= 6 \frac{m^2}{144^m} m!, \end{aligned} \quad (4.26)$$

de acordo com o formalismo desenvolvido em [53]. Assim, podemos truncar a série e levar em conta apenas os seis primeiros termos convergentes, no caso do calor específico. O mesmo procedimento pode ser feito para todas as dimensões ímpares. De fato, a ordem do critério de truncamento da entropia, m_S^* , pode ser obtida pela condição $|a_{m_S^*-1}| > |a_{m_S^*}| < |a_{m_S^*+1}|$:

$$m_S^* = \left\lceil \frac{5}{4}d - 1 + \sqrt{\frac{25}{16}d^2 - \frac{3}{2}d} \right\rceil, \quad (4.27)$$

onde $\lceil x \rceil$ é a função teto, definida como o menor inteiro igual ou maior que x . Além disso, para o calor específico temos uma condição similar: $|b_{m_C^*-1}| > |b_{m_C^*}| < |b_{m_C^*+1}|$, que resulta em

$$m_C^* = \left\lceil \frac{5}{4}d - 1 + \sqrt{\frac{25}{16}d^2 - \frac{3}{2}d + 1} \right\rceil. \quad (4.28)$$

Os resultados acima podem ser resumidos nas Figuras 1 e 2. Em geral, as curvas aumentam continuamente em função da temperatura adimensional, T/t , com formas semelhantes para $d \geq 3$. Neste contexto, investigamos a equação (4.22) no limite $d \rightarrow \infty$. Neste limite, a aparente singularidade com d é removida e os coeficientes a_m e b_m assumem a forma reduzida:

$$\begin{aligned} \lim_{d \rightarrow \infty} a_m &= \Phi \left(-\frac{1}{2}, m+1, 0 \right) (m+1) \left(-\frac{1}{4} \right)^m ; \\ \lim_{d \rightarrow \infty} b_m &= \Phi \left(-\frac{1}{2}, m+1, 0 \right) m(m+1) \left(-\frac{1}{4} \right)^m . \end{aligned} \quad (4.29)$$

Como podemos ver na expressão acima, as séries são convergentes nesse limite. Além disso, usando a equação (4.29), podemos construir as últimas linhas das tabelas 1 e 2, e gráficos para as propriedades termodinâmicas também são obtidos, conforme mostrado nas Figuras 5 e 6. Observe que ambas as curvas apresentam alguma atenuação com o aumento de d . Além disso, podemos enfatizar que a convergência da série neste limite reafirma a consistência da soma de Borel para dimensões ímpares, pois neste caso a paridade é imaterial.

5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

5.1 Conclusões

Inicialmente, neste trabalho, abordamos os fundamentos da estatística fracionária de exclusão (FES). Esta foi proposta por F. D. M. Haldane em 1991, e trata de uma generalização do princípio de Pauli para tratar sistemas de partículas que não se comportam nem como férmions nem como bósons. Essa estatística é baseada na contagem de estados quânticos e é válida em qualquer dimensão espacial. Além disso, verificamos, através de modelos simples, como partícula em uma caixa e oscilador harmônico, que a FES se mostrou efetiva para mapear um sistema de bósons e férmions interagentes em um sistema de quasi-partículas com interações meramente estatísticas, determinadas por uma matriz estatística g . Isso é fundamental para tornar o sistema mais tratável matematicamente, ou até mesmo fornecer uma interpretação física mais clara de um sistema já solúvel. Em seguida, descrevemos uma versão simplificada do problema de Wu, o gás ideal sob FES, considerando apenas uma espécie de partícula, e derivamos propriedades como energia e número de ocupação para o sistema. Ressaltamos, nesse caso, a obtenção de resultados interessantes no que concerne a termodinâmica de um gás homogêneo bidimensional. Nesse caso, conseguimos obter uma demonstração original de um teorema fundamental, que afirma que, em duas dimensões o calor específico à volume constante é independente da estatística utilizada para descrever o sistema. Por fim, tratamos o problema de Wu original, o gás ideal generalizado, e derivamos suas equações fundamentais.

Após a introdução dos métodos de estatística fracionária, nós utilizamos esse método para tratar um modelo interagente muito utilizado no contexto de elétrons fortemente correlacionados: o modelo de Hubbard de alcance infinito. Esse modelo é exatamente solúvel e bastante abordado na literatura. De fato, esse modelo interagente pode ser mapeado em um gás ideal de três espécies de *exclusons* obedecendo à uma EFS de Haldane-Wu com uma matriz estatística g bem definida. A matriz obtida é bastante notável, pois é adequada para descrever diversas variações do modelo de Hubbard. Assim, foi determinada a energia livre grã-canônica do sistema, a qual fornece toda a informação da termodinâmica do sistema. Em seguida, usando a parte singular da energia livre, exploramos o sistema na região próxima ao ponto crítico, $T = 0$, $\mu = 0$ e $U = \Delta$. Dessa forma, foi possível construir uma teoria de escala consistente com o modelo, e, assim, obter todos os expoentes críticos associados, o que nos fornece uma descrição completa do sistema na criticalidade, em ambos os regimes quântico e quântico crítico. Nesse contexto, ressaltamos que os coeficientes da série que representa a parte singular da energia livre grã-canônica são dados em termos das funções de Lerch. Essas funções representam uma assinatura da descrição do modelo por uma FES.

Por fim, abordamos resultados originais, obtidos por nós, no contexto de um regime especial do modelo de Hubbard de alcance infinito: o spin incoerente. Inicialmente, a energia livre grã-canônica no regime de spin incoerente e acoplamento forte. Assim, obtivemos uma expressão representada por uma série polinomial com funções de Lerch como coeficientes, uma assinatura de nossa descrição FES. A partir desse resultado, derivamos

a entropia e o calor específico em qualquer dimensão. Os coeficientes de série para essas quantidades foram resumidos em duas tabelas, das quais obtivemos parcelas para várias dimensões (até dez), e no limite $d \rightarrow \infty$. Para dimensões pares a série era finita, então temos funções polinomiais com ordem crescente com a dimensionalidade. Também destacamos o uso de técnicas de soma de Borel para contornar a divergência da série para dimensões ímpares. Além disso, no limite $d \rightarrow \infty$ a série é infinita, mas convergente. Em geral, as curvas, tanto para entropia quanto para calor específico, aumentam constantemente em função da temperatura adimensional, e apresentam alguma atenuação com o aumento de d . Finalmente, mencionamos que, embora nosso foco tenha sido nos aspectos físico-matemáticos fundamentais do modelo, esperamos que os resultados contribuam para um modelo amplamente utilizado para descrever propriedades físicas de sistemas de matéria condensada.

5.2 Motivações para pesquisas futuras

De maneira geral, visamos o estudo de modelos teóricos de física da matéria condensada, em especial o modelo de Hubbard e suas variações, com a aplicação de métodos de estatística fracionária de Haldane. Para criar um contexto da sua relevância física, apresentaremos uma digressão inicial. Na Ref. [54], os autores utilizaram o modelo de Bose-Hubbard para mostrar que modos semelhantes aos de Majorana podem ser realizados e testados em um sistema dissipativo fortemente correlacionado. Adicionalmente, na Ref. [55], foi utilizado um modelo semelhante para tentar entender transições de fase quânticas topológicas, emergência de modos relativísticos e ordem topológica local de luz em um sistema de luz-matéria fortemente interagente. Na Ref. [56] a luz quântica foi entendida como uma forma de controlar fases topológicas da matéria. Por outro lado, ressaltamos também que, em um trabalho recente do nosso grupo, ref. [57], encontramos uma conexão não-trivial entre o ponto de transição da fase topológica na rede de trímeros e aquele em um sistema bidimensional associado, em concordância com os resultados no contexto do bombeamento de Thouless em redes fotônicas. No futuro, pretendemos examinar alguns aspectos relevantes e ainda inconclusivos. De fato, os resultados reportados nas Ref. [54, 55, 56, 57] foram obtidos através da estatística de Bose-Einstein, deixando em aberto as consequências físicas e o entendimento da descrição dos fenômenos à luz da estatística fracionária de exclusão de Haldane. Neste contexto, examinaremos a possibilidade da extensão dos métodos de estatística fracionária para o caso de sistemas de bósons interagentes, como o modelo de Bose-Hubbard, [54, 58]. Estaremos também interessados na continuidade do estudo do modelo de Hubbard no regime de spin incoerente, Ref. [16, 15], estendendo nosso entendimento deste modelo em regimes de interesse teórico-experimental. Um possível viés envolverá a exploração da resposta magnética (suscetibilidade) do sistema.

REFERÊNCIAS

- [1] E. H. Lieb and B. Simon, “The thomas-fermi theory of atoms, molecules and solids,” *Advances in mathematics*, vol. 23, pp. 22–116, 1977.
- [2] B. I. Halperin, “Statistics of quasiparticles and the hierarchy of fractional quantized hall states,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 52, p. 1583, 1984.
- [3] F. Wilczek, “Quantum mechanics of fractional-spin particles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, p. 957, 1982.
- [4] R. Mackenzie and F. Wilczek, “Peculiar spin and statistics in two space dimensions,” *Int. J. Mod. Phys.*, vol. A3, p. 2827, 1988.
- [5] J. Nakamura, S. Liang, G. C. Gardner, and M. J. Manfra, “Direct observation of anyonic braiding statistics,” *Nature Physics*, vol. 16, p. 931, 2020.
- [6] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*. Addison-Wesley, 1969.
- [7] F. D. M. Haldane, “Fractional quantization of the hall effect: a hierarchy of incompressible quantum fluid states,” *Physical Review Letters*, vol. 51, p. 605, 1983.
- [8] F. Wilczek, *Fractional Statistics and Anyon Superconductivity*. World Scientific, 1990.
- [9] J. M. Luttinger, “Fermi surface and some simple equilibrium properties of a system of interacting fermions,” *Physical Review*, vol. 119, p. 1153, 1960.
- [10] C. Vitoriano, L. B. Bejan, A. M. S. Macêdo, and M. Coutinho-Filho, “Metal-insulator transition with infinite-range coulomb coupling: Fractional statistics and quantum critical properties,” *Phys. Rev. B*, vol. 61, p. 7941, 2000.
- [11] F. D. M. Haldane, “Fractional statistics” in arbitrary dimensions: A generalization of the pauli principle,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 67, p. 937, 1991.
- [12] M. V. N. Murthy and R. Shankar, “Exclusion statistics: From pauli to haldane,” *The IMSc Report No. 120*, pp. 1–104, 2009.
- [13] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*. Courier Corporation, 2012.
- [14] Y.-S. Wu, “Statistical distribution for generalized ideal gas of fractional-statistics particles,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 73, p. 922, 1994.
- [15] C. Vitoriano, R. R. Montenegro-Filho, and M. D. Coutinho-Filho, “Fractional exclusion statistics and thermodynamics of the hubbard chain in the spin-incoherent luttinger liquid regime,” *Phys. B*, vol. 98, p. 085130, 2018.
- [16] G. F. O. Ramos and M. D. Coutinho-Filho, “Thermodynamics of the infinity-range hubbard model in the spin-incoherent regime,” *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, vol. 55, p. 455001, 2022.

- [17] M. V. N. Murthy and R. Shankar, “Haldane exclusion statistics and second virial coefficient,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 72, p. 3629, 1994.
- [18] J. J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 3 ed., 2021.
- [19] F. A. N. Santos, L. C. B. da Silva, and M. D. Coutinho-Filho, “Topological approach to microcanonical thermodynamics and phase transition of interacting classical spins,” *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, vol. 2017, p. 013202, 2017.
- [20] T. Aoyama, “Specific heat of the ideal gas obeying the generalized exclusion statistics,” *Eur. Phys. B.*, vol. 20, p. 123, 2001.
- [21] G. E. Andrews, R. Askey, and R. Roy, *Special Functions*. Cambridge University Press, 1999.
- [22] R. M. May, “Quantum statistics of ideal gases in two dimensions,” *Phys. Review*, vol. 135, p. A1515, 1964.
- [23] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzik, *Table of Integrals, Series and Products*. New York: Academic Press, 7 ed., 2007.
- [24] V. E. Korepin and F. H. L. Essler, *Exactly Solvable Models of Strongly Correlated Electrons*. Singapore: World Scientific, 1994.
- [25] P. W. Anderson, *The theory of Superconductivity in the High- T_c Cuprates*. Princeton University Press, 1997.
- [26] N. F. Mott, “The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals,” *Proc. Phys. Soc.*, vol. 62, p. 416, 1949.
- [27] N. F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*. CRC Press, 1990.
- [28] F. Gebhard, *The Mott Metal Isolator Transitions*. Springer, 2010.
- [29] P. W. Anderson, “Absence of diffusion in certain random lattices,” *Phys. Rev.*, vol. 109, p. 1492, 1958.
- [30] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands,” *Proc. Roy. Soc.*, vol. 276, p. 238, 1963.
- [31] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands. ii. the degenerate band case,” *Proc. Roy. Soc.*, vol. 277, p. 237, 1964.
- [32] J. Hubbard, “Electron correlations in narrow energy bands iii. an improved solution,” *Proc. Roy. Soc.*, vol. 281, p. 401, 1964.
- [33] W. Metzner and D. Vollhardt, “Correlated lattice fermions in $d = \infty$ dimensions,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, p. 244, 1992.
- [34] E. H. Lieb and F. Y. Wu, “Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 20, p. 1445, 1968.

- [35] Y. Hatsugai and M. Kohmoto, “Exactly solvable model of correlated lattice electrons in any dimensions,” *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol. 61, p. 2056, 1992.
- [36] C. Vitoriano, K. R. Junior, and M. D. Coutinho-Filho, “Hubbard model with infinite-range attractive interaction,” *Phys. Review B*, vol. 72, p. 165109, 2005.
- [37] C. Vitoriano and M. D. Coutinho-Filho, “Fractional statistics and quantum scaling properties of the hubbard chain with bond-charge interaction,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 146404, 2009.
- [38] C. Vitoriano and M. D. Coutinho-Filho, “Fractional statistics and quantum scaling properties of the integrable penson-kolb-hubbard chain,” *Phys. Review B*, vol. 82, p. 125126, 2010.
- [39] K. G. Wilson, “Problems in physics with many scales of length,” *Scientific American*, vol. 241, pp. 158–179, 1979.
- [40] H. J. Maris and L. P. Kadanoff, “Teaching the renormalization group,” *American journal of physics*, vol. 46, pp. 652–657, 1978.
- [41] M. A. Continentino, *Quantum Scaling in Many-Body Systems*. Cambridge University Press, 2017.
- [42] S. Sachdev, *Quantum Phase Transition*. Cambridge University Press, 1999.
- [43] H. E. Stanley, *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*. Oxford University Press, 1971.
- [44] L. P. Kadanoff, W. Götze, D. Hamblen, R. Hecht, E. A. S. Lewis, V. V. Palciauskas, M. Rayl, J. Swift, D. Aspnes, and J. Kane, “Static phenomena near critical points: theory and experiment,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 39, p. 395, 1967.
- [45] E. N. Economou, *Green’s Function in Quantum Physics*. Springer, 1990.
- [46] G. A. Fiete, “Colloquium: The spin-incoherent luttinger liquid,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 79, p. 801, 2007.
- [47] G. A. Fiete and L. Balents, “Green’s function for magnetically incoherent interacting electrons in one dimension,” *Physical review letters*, vol. 93, p. 226401, 2004.
- [48] G. A. Fiete, “Fermi-edge singularity in a spin-incoherent luttinger liquid,” *Physical review letters*, vol. 97, p. 256403, 2006.
- [49] A. Feiguin and G. A. Fiete, “Spectral properties of a spin-incoherent luttinger liquid,” *Physical Review B*, vol. 81, p. 075108, 2010.
- [50] A. E. Feiguin and G. A. Fiete, “Spin-incoherent behavior in the ground state of strongly correlated systems,” *Physical Review Letters*, vol. 106, p. 146401, 2011.
- [51] M. Berry, *A Half-century of Physical Asymptotics and Other Diversions: Selected Works by Michael Berry*. World Scientific, 2017.
- [52] R. B. Dingle, *Asymptotic expansions: their derivation and interpretation*. Academic Press, 1973.

- [53] J. C. L. Guillou and J. Zinn-Justin, “Accurate critical exponents from the ε -expansion,” *Journal de Physique Lettres*, vol. 46, pp. 137–141, 1985.
- [54] C.-E. Bardyn and A. İmamoğlu, “Majorana-like modes of light in a one-dimensional array of nonlinear cavities,” *Physical Review Letters*, vol. 109, p. 253606, 2012.
- [55] S. Sarkar, “Topological quantum phase transition and local topological order in a strongly interacting light-matter system,” *Scientific Reports*, vol. 7, no. 1, pp. 1–15, 2017.
- [56] O. Dmytruk and M. Schirò, “Controlling topological phases of matter with quantum light,” *Communications Physics*, vol. 5, no. 1, p. 271, 2022.
- [57] V. M. M. Alvarez and M. D. Coutinho-Filho, “Edge states in trimer lattices,” *Physical Review A*, vol. 99, no. 1, p. 013833, 2019.
- [58] C. Gardner and B. Zoller, *The quantum world of ultra-cold atoms and light book II: the physics of quantum-optical devices*, vol. 4. World Scientific Publishing Company, 2015.

