

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
INSTITUTO DE FÍSICA  
MESTRADO EM FÍSICA

Carlos Eduardo da Silva Pierre Corsino

**Estudo de propriedades do modelo  
exatamente solúvel de Hatsugai-Kohmoto  
bidimensional**

Goiânia - GO

2026



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
INSTITUTO DE FÍSICA

## TERMO DE CIÊNCIA E DE AUTORIZAÇÃO (TECA) PARA DISPONIBILIZAR VERSÕES ELETRÔNICAS DE TESES

### E DISSERTAÇÕES NA BIBLIOTECA DIGITAL DA UFG

Na qualidade de titular dos direitos de autor, autorizo a Universidade Federal de Goiás (UFG) a disponibilizar, gratuitamente, por meio da Biblioteca Digital de Teses e Dissertações (BDTD/UFG), regulamentada pela Resolução CEPEC nº 832/2007, sem ressarcimento dos direitos autorais, de acordo com a [Lei 9.610/98](#), o documento conforme permissões assinaladas abaixo, para fins de leitura, impressão e/ou download, a título de divulgação da produção científica brasileira, a partir desta data.

O conteúdo das Teses e Dissertações disponibilizado na BDTD/UFG é de responsabilidade exclusiva do autor. Ao encaminhar o produto final, o autor(a) e o(a) orientador(a) firmam o compromisso de que o trabalho não contém nenhuma violação de quaisquer direitos autorais ou outro direito de terceiros.

#### 1. Identificação do material bibliográfico

Dissertação     Tese     Outro\*: \_\_\_\_\_

\*No caso de mestrado/doutorado profissional, indique o formato do Trabalho de Conclusão de Curso, permitido no documento de área, correspondente ao programa de pós-graduação, orientado pela legislação vigente da CAPES.

Exemplos: Estudo de caso ou Revisão sistemática ou outros formatos.

#### 2. Nome completo do autor

Carlos Eduardo da Silva Pierre Corsino

#### 3. Título do trabalho

Estudo de propriedades do modelo exatamente solúvel de Hatsugai-Kohmoto bidimensional

#### 4. Informações de acesso ao documento (este campo deve ser preenchido pelo orientador)

Concorda com a liberação total do documento  SIM     NÃO<sup>1</sup>

[1] Neste caso o documento será embargado por até um ano a partir da data de defesa. Após esse período, a possível disponibilização ocorrerá apenas mediante:

a) consulta ao(a) autor(a) e ao(a) orientador(a);

b) novo Termo de Ciência e de Autorização (TECA) assinado e inserido no arquivo da tese ou dissertação. O documento não será disponibilizado durante o período de embargo.

Casos de embargo:

- Solicitação de registro de patente;
- Submissão de artigo em revista científica;
- Publicação como capítulo de livro;
- Publicação da dissertação/tese em livro.

**Obs. Este termo deverá ser assinado no SEI pelo orientador e pelo autor.**



Documento assinado eletronicamente por **Hermann Freire Ferreira Lima E Silva**, Professor do **Magistério Superior**, em 09/03/2026, às 15:20, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Carlos Eduardo Da Silva Pierre Corsino, Discente**, em 09/03/2026, às 18:19, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).

---



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufg.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **6036144** e o código CRC **647E134D**.

---

Referência: Processo nº 23070.065978/2025-55

SEI nº 6036144

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS  
INSTITUTO DE FÍSICA  
MESTRADO EM FÍSICA

Carlos Eduardo da Silva Pierre Corsino

**Estudo de propriedades do modelo exatamente solúvel  
de Hatsugai-Kohmoto bidimensional**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física, do Instituto de Física, da Universidade Federal de Goiás (UFG), como requisito para obtenção do título de Mestre em Física.

**Área de concentração:** Física

**Linha de pesquisa:** Sistemas Fortemente Correlacionados

**Orientador:** Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva

Goiânia - GO

2026

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática do Sistema de Bibliotecas da UFG.

Silva Pierre Corsino, Carlos Eduardo da  
Estudo de propriedades do modelo exatamente solúvel de Hatsugai-Kohmoto bidimensional [digital] / Carlos Eduardo da Silva Pierre Corsino. - 2026. LXXXIX, 89 f.: 2026

Orientador: Prof. Dr. Hermann Freire Ferreira Lima e Silva  
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física (IF), Programa de Pós-Graduação em Física, Goiânia, 2026.  
Apêndice.  
Inclui: lista de figuras.

1. Modelo de Hatsugai-kohmoto. 2. Supercondutividade. 3. Onda de Densidade de Carga (CDW). 4. Onda de Densidade de Pares (PDW). 5. Informação Quântica de Fisher (QFI).

I. Freire Ferreira Lima e Silva, Hermann, orient. II. Título.

CDU 53



UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

INSTITUTO DE FÍSICA

## ATA DE DEFESA DE DISSERTAÇÃO

Ata nº 231 da sessão de Defesa de Dissertação de Carlos Eduardo da Silva Pierre Corsino, que confere o título de Mestre em Física, na área de concentração em Física.

Aos 09 dias do mês de janeiro de 2026, a partir das 15h00min, por meio de videoconferência, realizou-se a sessão pública de Defesa de Dissertação intitulada “Estudo de propriedades do modelo exatamente solúvel de Hatsugai-Kohmoto bidimensional”. Os trabalhos foram instalados pelo Orientador, Professor Doutor Hermann Freire Ferreira Lima e Silva (IF/UFG), com a participação dos demais membros da Banca Examinadora: Professor Doutor Alvaro Ferraz Filho (IIF/UFRN), membro titular externo; e Professor Doutor Rodrigo Gonçalves Pereira (IIF/UFRN), membro titular externo. Durante a arguição, os membros da banca não fizeram sugestão de alteração do título do trabalho. A Banca Examinadora reuniu-se em sessão secreta a fim de concluir o julgamento da Dissertação, tendo sido o candidato aprovado pelos seus membros. Proclamados os resultados pelo Professor Doutor Hermann Freire Ferreira Lima e Silva, Presidente da Banca Examinadora, foram encerrados os trabalhos e, para constar, lavrou-se a presente ata que é assinada pelos membros da Banca Examinadora, aos 09 dias do mês de janeiro de 2026.

### TÍTULO SUGERIDO PELA BANCA



Documento assinado eletronicamente por **Rodrigo Gonçalves Pereira, Usuário Externo**, em 09/01/2026, às 16:47, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Hermann Freire Ferreira Lima E Silva, Professor do Magistério Superior**, em 09/01/2026, às 16:47, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Alvaro Ferraz Filho, Usuário Externo**, em 09/01/2026, às 16:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no § 3º do art. 4º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site [https://sei.ufg.br/sei/controlador\\_externo.php?acao=documento\\_conferir&id\\_orgao\\_acesso\\_externo=0](https://sei.ufg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0), informando o código verificador **5883273** e o código CRC **DFE3A2F7**.

# Agradecimentos

- Agradeço aos meus pais, especialmente à minha mãe, que me apoiou durante toda essa trajetória.
- Aos meus amigos, em especial àqueles que cursaram comigo disciplinas que ninguém mais teve coragem de fazer.
- Ao meu orientador, Dr. Hermann Freire, por toda a orientação e pelos ensinamentos, sem os quais este trabalho não seria possível. Expresso minha profunda admiração por sua atuação, tanto como professor quanto como orientador, pois foi quem me mostrou o quão bonita pode ser a Física do Estado Sólido e a Física Estatística.
- Aos diversos professores incríveis com quem tive contato durante minha formação, dentre eles o Dr. Vanuildo da Silva Carvalho, por quem tenho grande admiração como pesquisador, e o Dr. Renato Borges Pontes, que me ensinou quântica durante a graduação, mas com quem também tive conversas inspiradoras que vão além do princípio da incerteza e da soma de momento angular.
- À CAPES, pelo apoio financeiro durante minha pesquisa.

# Resumo

Nesta dissertação, foram estudadas algumas tendências de ordenamento exibidas pelo modelo exatamente solúvel de Hatsugai–Kohmoto (HK) 2D em uma rede quadrada. Para esse fim, investigou-se a competição entre ordenamentos supercondutores (SC), onda de densidade de carga (CDW) e onda de densidade de pares (PDW), como função da interação, dopagem, campo magnético e deformação uniaxial. Consequentemente, foi confirmada a natureza interconectada das flutuações associadas às fases CDW e PDW para acoplamentos intermediários a fortes. Verificou-se também que, enquanto a aplicação de um campo magnético favorece a formação de uma fase CDW e possibilita o surgimento subsequente de uma fase PDW como ordem secundária, os efeitos da deformação favorecem a formação de uma fase PDW unidirecional como ordem primária em relação ao aparecimento subdominante de uma fase CDW unidirecional.

Outra linha de investigação desta dissertação consistiu na análise da chamada informação quântica de Fisher (QFI) em função da temperatura no modelo de HK. Essa quantidade permite detectar, por exemplo, a presença ou não de emaranhamento multipartido na fase isolante de Mott que emerge na situação de banda semicheia para interações fortes e na fase metálica do tipo líquido de não-Fermi que emerge para dopagens finitas. A análise das derivadas da QFI indica uma descontinuidade característica na transição entre os regimes de acoplamento fraco e forte, sugerindo uma influência importante da fase isolante de Mott nas fases eletrônicas que emergem como instabilidades em baixas temperaturas da fase metálica do tipo líquido de não-Fermi exibida pelo sistema.

Todos esses resultados ressaltam o valor do modelo de HK como uma plataforma analítica útil para investigar, de maneira exata, o surgimento de uma fase isolante de Mott, uma fase do tipo líquido de não-Fermi, fases com ordenamento de carga com simetria  $d$  e supercondutividade não-convencional, entre outros aspectos fundamentais relacionados a modelos eletrônicos com fortes interações. Por fim, discute-se brevemente uma generalização orbital do modelo de HK, a qual tem sido recentemente apontada como bastante relevante para descrever propriedades do paradigmático modelo de Hubbard bidimensional.

**Palavras-chave:** Modelo de Hatsugai-Kohmoto, supercondutividade, onda de densidade de carga (CDW), onda de densidade de pares (PDW), informação quântica de Fisher (QFI).

# Abstract

In this work, we examine various ordering tendencies exhibited by the exactly solvable two-dimensional Hatsugai–Kohmoto (HK) model on a square lattice. To this end, we investigate the competition among superconducting (SC), charge-density-wave (CDW), and pair-density-wave (PDW) orders as a function of the interaction strength, the doping, the magnetic field, and uniaxial strain. Consequently, the analysis confirms the interconnected nature of the fluctuations associated with the CDW and PDW phases for intermediate to strong couplings. It is also shown that, while the application of a magnetic field favors the formation of a CDW phase and subsequently enables the emergence of a PDW phase as a secondary order, strain effects favor the formation of a unidirectional PDW phase as the primary order, with a unidirectional CDW phase appearing only as a subdominant instability.

Another line of investigation in this work concerns the analysis of the quantum Fisher information (QFI) as a function of temperature in the HK model. This quantity enables the detection, for instance, of the presence or absence of multipartite entanglement in the Mott-insulating phase that arises at half-filling for strong interactions, as well as in the non-Fermi-liquid metallic phase that emerges at finite doping. The analysis of the QFI derivatives reveals a characteristic discontinuity in the transition between the weak- and strong-coupling regimes, suggesting an important influence of the Mott-insulating phase on the electronic phases that emerge as low-temperature instabilities of the non-Fermi-liquid-like metallic state exhibited by the system.

All these results highlight the value of the HK model as a useful analytical platform for investigating, within an exact approach, the emergence of a Mott-insulating phase, a non-Fermi-liquid-like phase, charge-ordered phases with  $d$ -wave symmetry, unconventional superconductivity, and other fundamental aspects related to strongly interacting electronic models. Finally, we briefly discuss an orbital generalization of the HK model, which has recently been identified as highly relevant for describing the properties of the paradigmatic two-dimensional Hubbard model.

**Keywords:** Hatsugai-Kohmoto model, superconductivity, charge density wave (CDW), pair density wave (PDW), quantum Fisher information (QFI).

# Lista de publicações

A maioria dos resultados apresentados nesta dissertação foi baseada nos resultados obtidos e publicados pelo presente autor com um colaborador e com o seu orientador nos seguintes periódicos internacionais da área:

1. **Strong pair-density-wave fluctuations in an exactly solvable doped Mott insulator**

Autores: Igor de M. Frolidi, Carlos Eduardo S. P. Corsino e Hermann Freire

Ano de publicação: 2024

Referência: Physical Review B **110**, 245136 (2024)

DOI: 10.1103/PhysRevB.110.245136

2. **Exact analysis of the interplay of charge order and unconventional pairings in the 2D Hatsugai-Kohmoto model**

Autores: Carlos Eduardo S. P. Corsino e Hermann Freire

Ano de publicação: 2025

Referência: Physics Letters A **563**, 131070 (2025)

DOI: 10.1016/j.physleta.2025.131070

# Lista de Figuras

Figura 1	– Representação esquemática do salto entre primeiros e segundos vizinhos em uma rede quadrada. . . . .	14
Figura 2	– A figura ilustra as diferentes regiões de ocupação $\Omega_0$ (sem ocupação), $\Omega_1$ (unicamente ocupado) e $\Omega_2$ (duplamente ocupado) no modelo de Hatsugai-Kohmoto. . . . .	18
Figura 3	– Representação esquemática das diferentes regiões de dopagem no modelo de HK 2D, juntamente com a representação do isolante de Mott. . . . .	20
Figura 4	– Densidade de estados do modelo de HK 2D em banda semicheia em uma rede quadrada para diferentes interações $U/W$ . . . . .	26
Figura 5	– Representação esquemática do efeito de <i>nesting</i> . Em (a), ilustra-se a superfície de Fermi não interagente do modelo de HK para $B = 0$ , $t' = 0$ e $\delta = 0$ em uma situação de banda semi-cheia. Em (b), a presença de campo magnético cria uma distinção entre spins para cima e para baixo, resultando em duas superfícies de Fermi distintas. . . . .	37
Figura 6	– Densidade de estados para o modelo OHK com $n = 2$ e diversos valores de $U$ para banda semicheia. . . . .	41
Figura 7	– Exemplo esquemático de algumas curvas de probabilidade em função da variável desconhecida $\theta$ . . . . .	44
Figura 8	– Diagrama de fases das tendências de ordenamento competidoras que emergem no modelo de HK 2D com $V_p = V_c = V = 0,65$ , sem campo magnético ( $B = 0$ ) e sem deformação ( $\delta = 0$ ). O rótulo ‘CDW + PDW’ significa que tanto CDW quanto PDW em $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ com simetria <i>s-wave</i> são encontrados dentro desta região. A cor bege denota uma região onde aparece uma CDW em $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ com simetria <i>s-wave</i> (com um PDW subdominante) no modelo. A parte vermelha denota SC do tipo singleto <i>s-wave</i> . As linhas tracejadas são apenas um guia visual. . . . .	57
Figura 9	– Diagrama de fases das ordens concorrentes no modelo HK 2D para $B = 0,05$ , $V = 0,4$ e $\delta = 0$ . As regiões em azul claro correspondem à fase CDW <i>d-wave</i> com $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ , e a cor bege denota a CDW <i>s-wave</i> com $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . As linhas tracejadas são apenas um guia visual. . . . .	58

Figura 10 – Diagrama de fases do modelo HK 2D para a anisotropia de deformação dada por $\delta_c = W/8$ e interação $V = 0,15$ . Ambas as ordens de PDW representadas acima são unidirecionais e possuem vetor de ordenamento próximo de $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ . A região amarela denota a fase CDW $d$ -wave próxima de $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , enquanto a cor bege corresponde à CDW $s$ -wave próxima de $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . As linhas tracejadas são apenas um guia visual. . . . .	61
Figura 11 – Diagrama de fases do modelo HK 2D para $t' = 0,45t$ e $V = 0,15$ (com $\delta = 0$ e $B = 0$ ). A região em cinza corresponde à fase metálica NFL. As linhas tracejadas são apenas um guia visual. . . . .	62
Figura 12 – Susceptibilidade ferromagnética (em unidades de $\mu_B$ ) para $x = 0,1$ e $u = 1,5$ com diferentes números de orbitais ( $n$ ) incluídos no modelo OHK 2D. Fica claro que, acima de quatro orbitais ( $n \geq 4$ ), a susceptibilidade ferromagnética do modelo é suprimida em baixas temperaturas. . . . .	63
Figura 13 – Competição entre diferentes susceptibilidades como função do potencial para o caso de carga $V_c$ e interação de Mott $u$ , com $V_p = 0,6$ , $x = 0,1$ , $B = 0$ e $\delta = 0$ . As linhas tracejadas são apenas um guia visual. . . . .	64
Figura 14 – Suscetibilidade exata do modelo de HK com $u = 0,6$ , $x = 0,1$ e $V = 0$ , $\chi_a^0$ , como função da temperatura. O subíndice $a$ representa os diferentes canais de susceptibilidade (de pareamento ou de carga). Note que, na legenda da figura, o sobrescrito indica se o fator de forma é do tipo $s$ - ou $d$ -wave. . . . .	65
Figura 15 – Suscetibilidade exata $\chi_a$ do modelo de HK para $u = 0,6$ , $x = 0,1$ e $V = 0,4$ , com o subíndice $a$ representando os diferentes canais de susceptibilidade (de pareamento ou de carga), como função da temperatura. Note que na legenda da figura o sobrescrito representa se o fator de forma é do tipo $s$ - ou $d$ -wave. . . . .	66
Figura 16 – A QFI $F_Q(\mathbf{q}, T)/N$ para diferentes valores do vetor $\mathbf{q}$ , com parâmetros $u = 0,5$ , $x = 0$ e $T \rightarrow 0$ . Na figura, cores mais quentes indicam valores mais elevados de $F_Q(\mathbf{q}, T)$ , enquanto tons mais frios correspondem a valores menores, evidenciando que o vetor mais favorável é $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . . . . .	68
Figura 17 – A QFI $F_Q(\mathbf{q}, T)/N$ em função da temperatura para diferentes valores de $u$ em banda semicheia, onde $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . Note a diferença de comportamento para acoplamentos fortes (i.e., $u \geq 1$ ). . . . .	68
Figura 18 – Figura esquemática da variação da ocupação da banda conforme aumenta a interação $u$ em banda semicheia. Embora todos os cenários correspondam à meia ocupação, a organização dos elétrons difere significativamente, o que determina o comportamento da QFI no modelo. . . . .	69
Figura 19 – A QFI $F_Q(\mathbf{q}, T)/N$ como função da temperatura para diferentes valores de dopagem e $u = 3/2$ , onde $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . . . . .	70
Figura 20 – A QFI $F_Q(\omega_g)/N$ como função de $\omega_g$ para diferentes valores de dopagem no limite $T \rightarrow 0$ , e com $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . . . . .	71

Figura 21 – Razão $F_Q(T)/F_Q(T_0)$ em função da temperatura para diferentes valores de dopagem, em que $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ e $u = 0,5$ . A figura torna evidente que, mesmo com a dopagem, o sistema sempre se comporta como um líquido de não-Fermi.	72
Figura 22 – Módulo da primeira derivada de $F_Q(\omega_g)$ associada à suscetibilidade de carga em $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ em relação a $\omega_g$ . O gráfico ilustra o caso de banda semicheia no modelo de HK 2D no limite $T \rightarrow 0$ .	73
Figura B.1 – QFI $F_Q(\mathbf{q}, T)/N$ para diferentes valores do vetor $\mathbf{q}$ , com parâmetros $u = 0,5$ , $x = 0,3$ e $T \rightarrow 0$ . Na figura, cores mais quentes indicam valores mais elevados de $F_Q(\mathbf{q}, T)$ , enquanto tons mais frios correspondem a valores menores, evidenciando que o vetor mais favorável é $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ .	87
Figura B.2 – QFI em função da temperatura para diferentes valores de dopagem, destacando o regime $x > 0,5$ . Observe que, conforme discutido no texto principal, para $x = 1$ , tem-se $F_Q = 0$ .	88
Figura B.3 – A razão $F_Q(T)/F_Q(T_0)$ , onde $T_0$ é uma temperatura de referência, definida como $T/W = 0,3$ . O ajuste para esse caso segue a forma $1/(a + T)^b$ , em que $a = 0,69$ e $b = 3,42$ .	88
Figura B.4 – Primeira derivada de $F_Q(\omega_g)$ associada à suscetibilidade de carga em $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ em relação a $\omega_g$ . O gráfico ilustra o caso com dopagem $x = 0,5$ no limite $T \rightarrow 0$ .	89

# Sumário

<b>Introdução</b>	<b>11</b>
<b>1 Modelos Efetivos</b>	<b>13</b>
1.1 Modelo “tight-binding”	13
1.2 Modelo de Hubbard	16
1.3 Modelo de Hatsugai-Kohmoto	17
1.3.1 Propriedades do modelo	19
1.3.2 Densidade de estados	23
1.3.3 Instabilidades para diferentes fases no modelo de HK 2D	25
1.3.4 Suscetibilidades e temperaturas críticas para cada fase eletrônica	29
1.3.5 Examinando casos limites do modelo de HK	34
1.3.6 Efeitos de perturbações no modelo	36
1.4 Modelo de Hatsugai-Kohmoto Orbital	39
1.4.1 Semelhanças com o modelo de Hubbard	40
1.4.2 Suscetibilidade no modelo OHK	41
<b>2 Informação Quântica de Fisher</b>	<b>43</b>
2.1 Informação de Fisher Clássica	43
2.2 O Limite de Cramér–Rao	44
2.3 Informação quântica de Fisher	45
2.4 O Limite Quântico de Cramér–Rao	46
2.4.1 Perspectiva Geométrica: O Tensor Geométrico Quântico	47
2.5 Papel do emaranhamento na metrologia quântica	48
2.6 QFI no estudo de sistemas emaranhados	49
2.7 QFI a partir da suscetibilidade	50
2.8 QFI no modelo de Hatsugai-Kohmoto	52
2.9 A importância das derivadas da QFI	52
2.10 Considerações sobre a QFI	53
<b>3 Resultados Obtidos</b>	<b>55</b>
3.1 Competição entre ordenamento de carga e pareamento não convencional	55
3.1.1 Efeito do campo magnético nas diferentes fases eletrônicas	57
3.1.2 Efeitos da deformação uniaxial sobre as fases do sistema	59
3.1.3 Efeitos do <i>hopping</i> para segundos vizinhos	61
3.1.4 Extensão orbital para susceptibilidade ferromagnética	63
3.1.5 Considerações sobre a competição entre as fases emergentes no modelo de HK	64
3.2 Propriedades da informação quântica de Fisher no modelo de HK	66

3.2.1	Análise do vetor momento para $F_Q(\mathbf{q}, T)$ . . . . .	67
3.2.2	QFI como função da temperatura . . . . .	67
3.2.3	QFI como função de $\omega_g$ . . . . .	69
3.2.4	QFI normalizada e suas propriedades . . . . .	71
<b>4</b>	<b>Conclusões e Perspectivas Futuras</b> . . . . .	<b>74</b>
	<b>Referências</b> . . . . .	<b>76</b>
	<b>Apêndices</b>	<b>84</b>
	<b>APÊNDICE A</b> Derivação das susceptibilidades de CDW em baixas temperaturas . . . . .	<b>85</b>
	<b>APÊNDICE B</b> Figuras relacionadas ao cálculo da QFI no modelo de HK .	<b>87</b>

# Introdução

O mecanismo subjacente da supercondutividade em altas temperaturas nos cupratos é, provavelmente, um dos enigmas mais profundos da física da matéria condensada [1], permanecendo um problema fundamental em aberto até os dias atuais. Nesse contexto, há um consenso importante na comunidade de que um modelo mínimo capaz de descrever microscopicamente a física desses materiais é o modelo de Hubbard bidimensional em uma rede quadrada, com interação local  $U$  da ordem da largura de banda  $W$  [2, 3]. Por outro lado, reconhece-se amplamente que esse regime de interação intermediária do modelo é um dos problemas mais difíceis de serem tratados teoricamente, tanto do ponto de vista analítico quanto numérico [4, 5]. Por esse motivo, modelos mais simples e exatamente solúveis, que possam capturar aspectos relevantes da física desses compostos, são extremamente valiosos para a área.

Um desses modelos é o chamado modelo de Hatsugai-Kohmoto (HK), proposto no início da década de 1990 [6] por dois físicos da Universidade de Tóquio, Y. Hatsugai e M. Kohmoto. Um modelo semelhante também foi introduzido por G. Baskaran na mesma época na Ref. [7]. O modelo de HK consiste em um modelo de férmions interagentes exatamente solúvel, que descreve tanto uma fase isolante de Mott em banda semicheia quanto uma fase metálica do tipo líquido de não-Fermi (NFL) que emerge para dopagem finita [8–10]. Recentemente, foi demonstrado que essa fase metálica NFL se torna instável com relação à formação de uma fase supercondutora não convencional em baixas temperaturas [11, 12], o que está em concordância qualitativa com o comportamento observado, por exemplo, nos cupratos supercondutores [2, 13, 14], entre outros sistemas. Por esse motivo, o principal objetivo deste trabalho consiste em investigar propriedades adicionais desse modelo na tentativa de obter novos insights sobre a notável física desses materiais fortemente correlacionados.

Um aspecto importante a ser abordado neste estudo é a competição entre diferentes fases eletrônicas que surgem no modelo de HK bidimensional em baixas temperaturas, a partir de uma abordagem exata. Como será mostrado adiante, além das fases isolante de Mott e NFL já conhecidas [6, 11, 12], o modelo também é capaz de descrever uma variedade de tendências de ordenamento adicionais, tais como ondas de densidade de carga (CDW) unidirecionais e bidirecionais, supercondutividade (SC) nos canais singleto e tripleto de spin, bem como fases do tipo onda de densidade de pares (PDW<sup>1</sup>). Isso demonstra a riqueza da física já capturada

---

<sup>1</sup> As fases PDW são estados de pareamento não-convencionais que apresentam momento finito para o centro de

por esse modelo efetivo relativamente simples. No entanto, cabe ressaltar aqui que nem todas essas fases emergentes desenvolverão necessariamente ordenamento de longo alcance em baixas temperaturas no presente modelo<sup>2</sup>. A principal mensagem que se busca transmitir nesta dissertação é a identificação da natureza interconectada entre certas tendências de ordenamento, além do estabelecimento de uma hierarquia entre essas fases, o que oferece pistas relevantes sobre o que pode ocorrer em descrições microscópicas mais realistas de supercondutores fortemente correlacionados [15].

Adicionalmente, será analisado o efeito da aplicação de deformações uniaxiais e campos magnéticos no modelo de HK bidimensional, como forma de intensificar ou suprimir fases eletrônicas específicas que surgem no modelo, permitindo separar tendências de ordenamento que se encontram muito próximas em energia no diagrama de fases correspondente. Também será considerada a modificação da estrutura de bandas não interagente, a fim de investigar a robustez de algumas das fases emergentes com relação a essas alterações no modelo, principalmente no limite de fortes acoplamentos. Por fim, será discutida uma possível generalização do modelo de HK, a qual pode ser relevante para comparações com sistemas mais realistas fortemente correlacionados, como, p. ex., o próprio modelo de Hubbard bidimensional.

A investigação da competição entre CDW e PDW desempenha um papel central na compreensão da física dos cupratos e de outros sistemas fortemente correlacionados. Além de emergir naturalmente em diversos cenários teóricos, essa competição possui relevância experimental direta, já que o ordenamento do tipo PDW é extremamente difícil de ser detectado em muitos materiais [16–19], em grande parte devido ao fato de que o sinal associado a essa fase ser tipicamente muito menor do que o do CDW [20]. Como o CDW produz modulações de densidade de carga facilmente observáveis por técnicas de espalhamento e microscopia, compreender a relação entre essas duas fases pode fornecer um caminho indireto, mas poderoso, para acessar a física do PDW. Dessa forma, identificar cenários em que CDW e PDW coexistem ou competem entre si não apenas esclarece a estrutura dessas fases nesses sistemas, mas também abre a possibilidade de inferir sobre as propriedades da fase PDW a partir de medidas experimentais mais acessíveis da fase CDW, o que torna esse estudo particularmente relevante.

Por fim, será realizada uma análise da informação quântica de Fisher (QFI) no modelo de HK bidimensional. Essa quantidade é particularmente útil para detectar se o sistema apresenta emaranhamento multipartido, além de ser capaz de distinguir entre diferentes regimes eletrônicos, como, p. ex., um líquido de Fermi e um líquido de não-Fermi. Como será explorado mais adiante, mesmo em situações em que não há emaranhamento multipartido, a QFI ainda fornece informações importantes sobre o sistema, permitindo atribuir um significado físico claro ao padrão de emaranhamento exibido pelo modelo.

---

massa do par de Cooper.

<sup>2</sup> Embora algumas fases eletrônicas exibam fortes flutuações no modelo de HK em uma rede quadrada, ainda assim algumas delas permanecerão como ordenamentos de curto alcance, como será discutido posteriormente nesta dissertação.

## 1

# Modelos Efetivos

O modelo de Hatsugai-Kohmoto (HK) foi proposto como uma alternativa simplificada para o estudo de sistemas fortemente correlacionados, em especial, no contexto da física da matéria condensada [6]. Sua principal característica é a solubilidade exata em qualquer dimensão, o que o torna uma ferramenta valiosa para investigar fenômenos complexos, como o surgimento de fases ordenadas e a transição de Mott<sup>1</sup>. Diferentemente de modelos eletrônicos mais realistas (como, por exemplo, o modelo de Hubbard 2D), porém difíceis de serem resolvidos exatamente, o modelo de HK permite o cálculo analítico de quantidades físicas relevantes, funcionando como um verdadeiro “laboratório teórico” para a compreensão de mecanismos fundamentais de sistemas com forte correlação eletrônica.

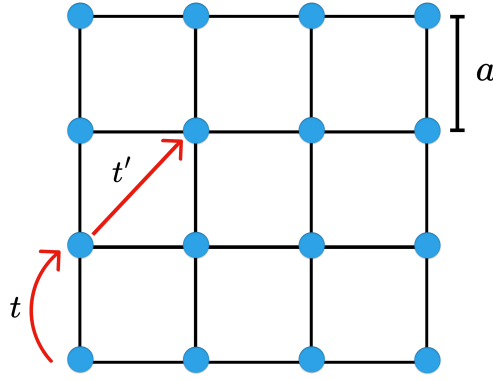
Esse modelo torna-se ainda mais interessante à luz de trabalhos recentes que mostram que a inclusão de múltiplos orbitais pode aproximá-lo da física do modelo de Hubbard, um paradigma para sistemas correlacionados, para o qual ainda não se dispõe de uma solução exata em dimensões finitas maiores que um. Portanto, para compreender adequadamente o modelo de HK, é conveniente iniciar a análise a partir de uma breve exposição do modelo *tight-binding* e do próprio modelo de Hubbard, fundamentais para uma boa compreensão de sua formulação e relevância.

## 1.1 Modelo “tight-binding”

O modelo *tight-binding*, ou modelo de ligação forte, constitui um ponto de partida importante para descrever o comportamento eletrônico em sólidos cristalinos [21]. Parte-se da hipótese de que os elétrons estão fortemente ligados aos núcleos atômicos e de que os estados eletrônicos do sistema podem ser construídos a partir de orbitais atômicos localizados [22, 23]. Esse modelo é particularmente útil para materiais em que a sobreposição entre as funções de

---

<sup>1</sup> Que ocorre quando o sistema exibe uma transição de uma fase metálica para uma fase isolante induzida por fortes correlações eletrônicas.



**Figura 1** – Representação esquemática do salto entre primeiros e segundos vizinhos em uma rede quadrada.

onda de diferentes sítios é pequena, como em semicondutores, isolantes ou metais com bandas estreitas.

A ideia central do modelo é descrever a dinâmica de elétrons em uma rede periódica, considerando que existe uma probabilidade finita de “salto” de elétrons entre sítios vizinhos. O Hamiltoniano correspondente é dado por

$$H = \sum_{ii',\sigma} t_{ii'} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i',\sigma}, \quad (1.1)$$

em que  $t_{ii'}$  é a matriz de “salto”, comumente referenciada pelo termo em inglês matriz de *hopping*, que representa a amplitude de probabilidade para um elétron sair do sítio  $i'$  e ocupar o sítio vizinho  $i$ . Esse comportamento está ilustrado na Figura 1. Os operadores  $c_{i,\sigma}^\dagger$  e  $c_{i,\sigma}$  são, respectivamente, os operadores de criação e aniquilação de um elétron no sítio  $i$  e projeção de spin  $\sigma$ .

Outra forma de representar os operadores e, conseqüentemente, o Hamiltoniano, é utilizando o espaço de momento. Essa representação pode ser muito importante em alguns sistemas, pois, dependendo da forma e da periodicidade da rede em questão, pode ser mais conveniente trabalhar no espaço recíproco. Para isso, utiliza-se uma transformada de Fourier, de modo que os operadores de criação e aniquilação são dados por [24]:

$$c_{i,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma},$$

$$c_{i,\sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger,$$

com  $N$  sendo o número de sítios. Dessa forma, o Hamiltoniano pode ser reescrito como

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k},\sigma}, \quad (1.2)$$

em que  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  é a relação de dispersão de energia, dependente da simetria da rede. No caso de uma rede quadrada, que será amplamente explorada neste trabalho, a relação de dispersão assume a

forma

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)], \quad (1.3)$$

na qual  $a$  é a chamada constante de rede mostrada na Figura 1 e o parâmetro de *hopping* é definido como

$$t_{ii'} = \begin{cases} -t, & \text{primeiros vizinhos,} \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (1.4)$$

Aqui,  $t$  é uma constante positiva que representa a amplitude de *hopping* entre primeiros vizinhos, i.e., o sítio mais próximo disponível para o elétron realizar o salto. O sinal negativo indica que esse processo reduz a energia do sistema, refletindo a tendência natural dos elétrons de se delocalizarem na rede.

De modo mais geral, pode-se escrever a dispersão para uma rede com dimensão arbitrária na forma

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{i=1}^d \cos(k_i a), \quad (1.5)$$

sendo  $d$  o número de dimensões do sistema analisado.

Essa expressão revela a formação de uma banda de energia com largura  $W = 4td$ . Esse resultado decorre do fato de que cada componente  $k_i$  do vetor de onda varia no intervalo  $[-\pi/a, \pi/a)$ , de modo que toda a física relevante está contida inteiramente dentro da primeira zona de Brillouin. No caso bidimensional, que possui papel central neste trabalho, a largura da banda resulta em  $W = 8t$ .

Se for adicionado o salto para segundos vizinhos, normalmente denotado por  $t'$ , como mostrado na Figura 1, a relação de dispersão adquire um termo extra, passando a ser expressa por

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4t' \cos(k_x a) \cos(k_y a), \quad (1.6)$$

em que  $t'$  pode assumir sinal negativo ou positivo, dependendo do problema estudado.

O modelo *tight-binding* é amplamente utilizado devido à sua simplicidade e ao seu poder de descrição qualitativa da estrutura de bandas eletrônicas. Ele permite compreender, por exemplo, como *gaps* de energia e bandas de condução emergem da natureza discreta dos sítios atômicos. Entretanto, por considerar apenas a energia cinética dos elétrons, o modelo ignora completamente as interações entre partículas, o que limita sua aplicabilidade em sistemas em que efeitos de correlação eletrônica são relevantes.

Para descrever tais sistemas fortemente correlacionados (como isolantes de Mott, materiais magnéticos ou supercondutores) é necessário incluir explicitamente as interações entre os elétrons.

## 1.2 Modelo de Hubbard

Embora o modelo *tight-binding* descreva adequadamente o comportamento de elétrons não interagentes em uma rede periódica, muitos dos fenômenos mais relevantes em matéria condensada (como magnetismo, supercondutividade e transições de fase) emergem justamente devido à presença de interações eletrônicas. Para capturar a física associada a esses fenômenos, é essencial considerar explicitamente a interação coulombiana entre partículas carregadas, que pode ser incorporada no formalismo da segunda quantização por meio de um termo de interação geral do tipo:

$$V_{ee} = \sum_{ii'jj'} U_{ii'jj'} c_{i,\sigma}^\dagger c_{i',\sigma'}^\dagger c_{j,\sigma} c_{j',\sigma'}, \quad (1.7)$$

em que  $U_{ii'jj'}$  representa a matriz de interação entre os estados localizados nos sítios  $i$ ,  $i'$ ,  $j$  e  $j'$ . Essa formulação é bastante geral e inclui diferentes tipos de contribuições: repulsões entre elétrons localizados no mesmo sítio (*on-site*), entre elétrons localizados em sítios distintos (*non-local interactions*) e termos de troca (*exchange*).

Na prática, entretanto, a forma mais relevante, e frequentemente dominante, da interação é a que ocorre quando dois elétrons ocupam o mesmo sítio da rede com spins opostos. Essa interação local, chamada de *on-site*, pode ser incorporada de forma simplificada adicionando um termo que penaliza energeticamente a dupla ocupação. Esse procedimento leva ao chamado modelo de Hubbard, que constitui o modelo mínimo capaz de capturar, ao mesmo tempo, os efeitos da delocalização eletrônica (via *hopping*) e da repulsão local [24, 25]. Seu Hamiltoniano, na forma mais simples, é dado por:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad (1.8)$$

onde  $\langle i,j \rangle$  denota soma sobre primeiros vizinhos,  $U$  é a energia de interação local quando dois elétrons de spins opostos ocupam o mesmo sítio e  $n_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}$  é o operador número.

O modelo de Hubbard expressa de forma concisa a competição fundamental entre a tendência dos elétrons de se moverem livremente pela rede e a tendência oposta de evitarem a dupla ocupação devido à repulsão local. Como consequência, em função da razão  $U/t$  e da densidade eletrônica, o sistema pode apresentar uma ampla variedade de fases, incluindo um fase isolante de Mott, estados ordenados magneticamente e, possivelmente, fases supercondutoras não convencionais.

Apesar de sua simplicidade formal, o modelo de Hubbard apresenta soluções exatas conhecidas apenas em limites específicos, como em uma dimensão espacial ou no caso de infinitas dimensões espaciais. Para outras situações, faz-se necessário recorrer a métodos analíticos aproximados ou a métodos de simulação numérica ou, ainda, ao estudo de modelos alternativos mais simples, mas que ainda sejam capazes de reproduzir aspectos essenciais da física de sistemas fortemente correlacionados.

### 1.3 Modelo de Hatsugai-Kohmoto

Devido às limitações relacionadas à solução exata em dimensões finitas maiores que um, e com o objetivo de contornar esse problema e aprofundar a compreensão da física de sistemas fortemente correlacionados, os físicos japoneses Yasuhiro Hatsugai e Mahito Kohmoto propuseram em 1992 um modelo alternativo [6], cujo Hamiltoniano é dado por:

$$H_{HK} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) c_{\mathbf{k}, \sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \sigma} + U \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}, \uparrow} n_{\mathbf{k}, \downarrow}, \quad (1.9)$$

o qual apresenta uma estrutura funcional que lembra o modelo de Hubbard, mas é formulado inteiramente no espaço de momentos.

Embora a forma do Hamiltoniano sugira, à primeira vista, uma possível correspondência com o modelo de Hubbard, existem diferenças conceituais profundas entre os dois. A principal delas é que, no modelo de Hatsugai-Kohmoto, a interação eletrônica possui alcance infinito, atuando entre férmions que compartilham o mesmo momento cristalino. Isso contrasta com a interação local no mesmo sítio presente no modelo de Hubbard. Tal modificação, embora introduza um aspecto não físico, torna o modelo exatamente solúvel em qualquer dimensão espacial, o que lhe confere grande valor como “laboratório teórico” para o estudo de fases correlacionadas.

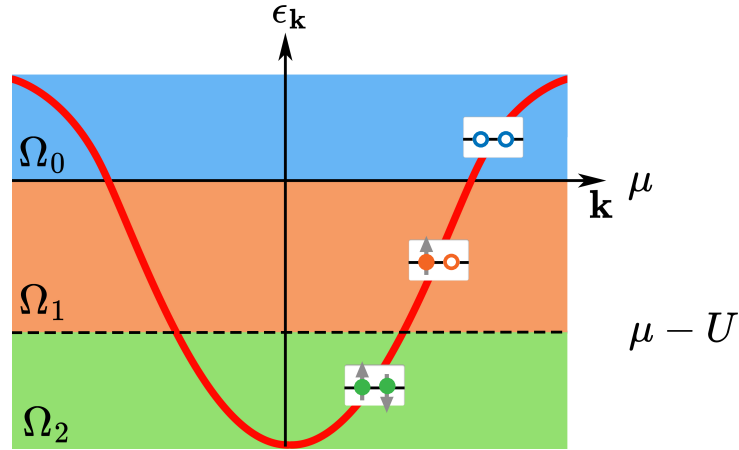
Além disso, trabalhos recentes [26–29] têm demonstrado que as limitações do modelo de HK podem ser mitigadas por meio da introdução de múltiplos orbitais, dando origem ao chamado modelo de Hatsugai-Kohmoto orbital (OHK). Essa generalização não apenas recupera de forma mais realista a física esperada de sistemas correlacionados, como também aproxima o modelo de HK do paradigmático modelo de Hubbard bidimensional [30].

Dessa forma, o ponto central do modelo é que o sistema se desacopla em setores de ocupação independentes para cada vetor de momento  $\mathbf{k}$ , como ilustrado de maneira esquemática na Figura 2. Quando escrito na base de ocupação eletrônica, obtém-se:

$$\begin{aligned} |0\rangle_{\mathbf{k}} & \quad E_0(\mathbf{k}) = 0, \\ |\uparrow\rangle_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} |0\rangle_{\mathbf{k}} & \quad E_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu, \\ |\downarrow\rangle_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} |0\rangle_{\mathbf{k}} & \quad E_{\downarrow}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu, \\ |\uparrow\downarrow\rangle_{\mathbf{k}} = c_{\mathbf{k}, \uparrow}^{\dagger} c_{\mathbf{k}, \downarrow}^{\dagger} |0\rangle_{\mathbf{k}} & \quad E_2(\mathbf{k}) = 2\epsilon_{\mathbf{k}} - 2\mu + U, \end{aligned} \quad (1.10)$$

em que os respectivos autovalores de energia estão indicados ao lado de cada estado.

Esse resultado é bastante intuitivo: o estado vazio possui energia nula; os estados de ocupação simples têm energia  $\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ , independente do spin; e, no caso de ocupação dupla, surge o termo adicional  $U$ , que representa a penalidade energética associada à presença de dois elétrons com spins opostos no mesmo estado de momento  $\mathbf{k}$ .



**Figura 2** – A figura ilustra as diferentes regiões de ocupação  $\Omega_0$  (sem ocupação),  $\Omega_1$  (unicamente ocupado) e  $\Omega_2$  (duplamente ocupado) no modelo de Hatsugai-Kohmoto.

O estado fundamental do modelo de Hatsugai-Kohmoto pode ser construído como um produto direto dos estados de menor energia em cada estado de momento  $\mathbf{k}$ . Como discutido anteriormente, o conjunto dos momentos é naturalmente particionado em três subconjuntos  $\Omega_0$ ,  $\Omega_1$  e  $\Omega_2$ , que correspondem, respectivamente, às regiões onde os estados vazios, de ocupação simples e de ocupação dupla são energeticamente favorecidos.

A estrutura geral do estado fundamental é dada por:

$$|g\rangle = \left( \prod_{\mathbf{k}_2 \in \Omega_2} c_{\mathbf{k}_2 \uparrow}^\dagger c_{\mathbf{k}_2 \downarrow}^\dagger \right) \left[ \prod_{\mathbf{k}_1 \in \Omega_1} \frac{1}{\sqrt{2}} \left( c_{\mathbf{k}_1 \uparrow}^\dagger + e^{i\phi_{\mathbf{k}_1}} c_{\mathbf{k}_1 \downarrow}^\dagger \right) \right] |0\rangle, \quad (1.11)$$

em que  $|0\rangle$  é o estado de vácuo e  $\phi_{\mathbf{k}_1}$  é uma fase arbitrária associada à liberdade de superposição dos estados de spin em  $\Omega_1$ . Por exemplo, ao escolher  $\phi_{\mathbf{k}} = 0$ , o estado em  $\mathbf{k}$  reduz-se ao estado simétrico  $(c_{\mathbf{k} \uparrow}^\dagger + c_{\mathbf{k} \downarrow}^\dagger)/\sqrt{2}$ , evidenciando a ausência de uma direção preferencial para os spins.

No caso repulsivo ( $U > 0$ ), o estado fundamental torna-se extensivamente degenerado devido à presença da região  $\Omega_1$ . Os modos  $\mathbf{k}$  de ocupação simples podem conter um elétron de spin para cima ou para baixo, e como essa escolha não altera a energia total, a degenerescência cresce exponencialmente como  $\mathcal{N}_{\text{deg}} = 2^{|\Omega_1|}$ , onde  $|\Omega_1|$  é o número de modos de ocupação simples. De forma análoga, no regime de meia ocupação (*half-filling*) e para  $U > W$ , todos os estados de momento são ocupados por um único elétron, de modo a evitar o custo energético da dupla ocupação, resultando novamente em uma degenerescência extensiva de spin.

Portanto, a degenerescência extensiva é uma característica intrínseca do modelo de HK não perturbado e reflete a ausência de correlações entre spins de diferentes momentos, permitindo a construção de um subespaço de estados fundamentais macroscopicamente degenerados.

### 1.3.1 Propriedades do modelo

Como discutido anteriormente, o modelo de Hatsugai-Kohmoto pode ser decomposto em setores independentes de momento  $\mathbf{k}$ . Dado que o Hamiltoniano é diagonal em cada setor, a função de partição total pode ser escrita como o produto das funções de partição setoriais:

$$Z_{\text{HK}} = \text{Tr} \left( e^{-\beta H_{\text{HK}}} \right) = \prod_{\mathbf{k}} Z_{\text{HK},\mathbf{k}}, \quad (1.12)$$

com

$$Z_{\text{HK},\mathbf{k}} = \text{Tr} \left( e^{-\beta H_{\text{HK}}(\mathbf{k})} \right) = 1 + 2e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}}} + e^{-\beta(2\xi_{\mathbf{k}}+U)}, \quad (1.13)$$

onde  $\beta = 1/T$  (adotando  $k_B = 1$ ) e  $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$  representa a relação de dispersão da banda em relação ao potencial químico  $\mu$ .

A partir da função de partição, podem ser extraídas diversas propriedades termodinâmicas, dentre elas, a média do número de ocupação eletrônico. Nesse caso, obtém-se:

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{Z_{\text{HK},\mathbf{k}}} \text{Tr} \left( n_{\mathbf{k}\sigma} e^{-\beta H_{\text{HK}}(\mathbf{k})} \right) = \frac{e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}}} + e^{-\beta(2\xi_{\mathbf{k}}+U)}}{1 + 2e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}}} + e^{-\beta(2\xi_{\mathbf{k}}+U)}}. \quad (1.14)$$

Um regime particularmente elucidativo é o limite de temperatura nula ( $T \rightarrow 0$ ), no qual a distribuição do número de ocupação simplifica para:

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \begin{cases} 0, & \mu < \epsilon_{\mathbf{k}} < \frac{W}{2} & (\mathbf{k} \in \Omega_0), \\ \frac{1}{2}, & \mu - U < \epsilon_{\mathbf{k}} < \mu & (\mathbf{k} \in \Omega_1), \\ 1, & -\frac{W}{2} < \epsilon_{\mathbf{k}} < \mu - U & (\mathbf{k} \in \Omega_2), \end{cases} \quad (1.15)$$

ou, de maneira mais compacta,

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \frac{1}{2} [\Theta(-\xi_{\mathbf{k}}) + \Theta(-\xi_{\mathbf{k}} - U)], \quad (1.16)$$

em que  $\Theta(x)$  representa a função degrau de Heaviside. Essa expressão evidencia como o preenchimento eletrônico se organiza no espaço de momento, em concordância com a dispersão ilustrada na Figura 2 e com os estados de ocupação discutidos anteriormente.

Para o parâmetro de dopagem, que é a grandeza que mede a fração de estados não ocupados em relação ao preenchimento de meia banda, define-se

$$x = 1 - \sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = 1 - N_s, \quad (1.17)$$

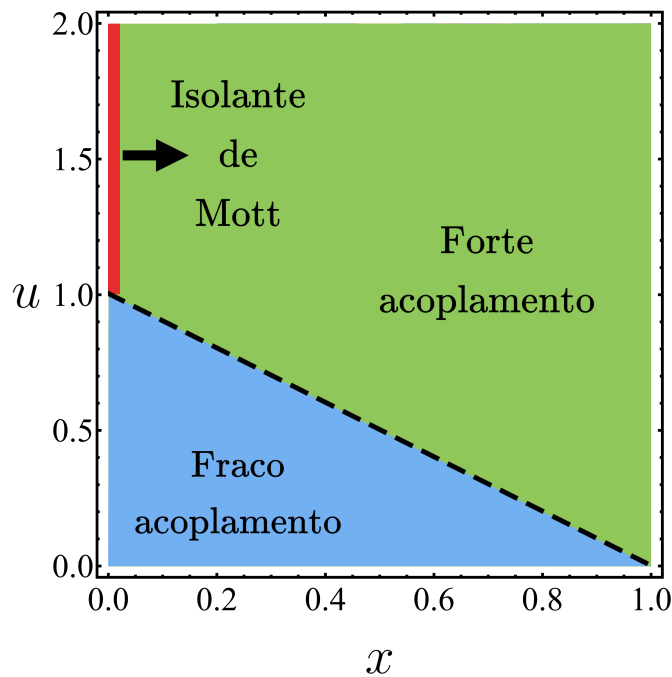
em que o termo  $N_s = \sum_{\mathbf{k},\sigma} \langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle$  representa o número total de elétrons. A partir da expressão acima, nota-se que  $x = 0$  corresponde à meia ocupação e  $x = 1$  ao “vácuo” eletrônico, pois, como mencionado, a dopagem mede o quão preenchida a banda está. O interessante no modelo de Hatsugai-Kohmoto bidimensional é a possibilidade de relacionar diretamente o preenchimento eletrônico com os intervalos de energia permitidos no espaço de momento.

No limite de temperatura nula ( $T = 0$ ), essa relação se torna mais simples e leva às seguintes expressões por partes:

$$x = \begin{cases} \frac{1}{2} - \tilde{\mu}, & \text{se } \tilde{\mu} - u < -\frac{1}{2} \text{ e } -\frac{1}{2} < \tilde{\mu} \leq \frac{1}{2}, \\ u - 2\tilde{\mu}, & \text{se } \tilde{\mu} - u > -\frac{1}{2} \text{ e } -\frac{1}{2} < \tilde{\mu} \leq \frac{1}{2}, \\ u - \tilde{\mu} - \frac{1}{2}, & \text{se } -\frac{1}{2} \leq \tilde{\mu} - u \leq \frac{1}{2} \text{ e } \tilde{\mu} \geq \frac{1}{2}, \\ 0, & \text{se } \tilde{\mu} - u < -\frac{1}{2} \text{ e } \tilde{\mu} > \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (1.18)$$

em que foram introduzidas as grandezas adimensionais  $\tilde{\mu} = \mu/W$  e  $u = U/W$ , representando as grandezas normalizadas pela largura de banda. Essas expressões revelam diversas características importantes. Em particular, observa-se a existência de duas formas distintas para a dopagem acima e abaixo da condição  $\mu - U = -\frac{W}{2}$ , ou, de maneira equivalente, em termos da dopagem, a linha  $u = 1 - x$ . Essa diferenciação surge porque, para valores de  $\mu - U < -W/2$ , não há mais estados duplamente ocupados disponíveis na banda, e o sistema passa a ser descrito apenas por estados de ocupação simples ou vazios.

Dessa forma, a condição  $u = 1 - x$  marca a transição entre um regime em que os estados duplamente ocupados ainda contribuem para o preenchimento e outro em que esses estados estão completamente excluídos da configuração de menor energia, o que é característico de sistemas fortemente correlacionados e está representado na Figura 3. A origem do isolante de Mott e o seu significado serão discutidos adiante.



**Figura 3** – Representação esquemática das diferentes regiões de dopagem no modelo de HK 2D, juntamente com a representação do isolante de Mott.

Outra quantidade extremamente importante é a função de Green, que representa, em termos físicos, a amplitude de propagação de uma partícula, seja no espaço real ou de momento. Quando se trabalha com temperatura finita, uma abordagem particularmente útil é a função de Green no formalismo de Matsubara. No caso de férmions, essa função permite descrever como uma excitação de um elétron com dado momento e spin evolui no tempo imaginário para temperaturas finitas. No modelo de Hatsugai-Kohmoto, a estrutura simples e diagonal do Hamiltoniano permite obter uma expressão exata para essa função.

A função de Green de Matsubara no espaço de momento é definida como:

$$G_\sigma(\mathbf{k}, \tau) = -\langle \hat{T}_\tau c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(0) \rangle, \quad (1.19)$$

a qual contém tanto a parte avançada quanto a retardada da função. A que será utilizada é a função de Green retardada, dada por:

$$G_\sigma^R(\mathbf{k}, \tau) = \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_\tau = -i\theta(\tau) \langle \{ c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau), c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(0) \} \rangle, \quad (1.20)$$

em que a notação com duplo colchete, é apenas uma forma mais compacta de representar a função de Green explicitamente nos operadores, e que será útil adiante. O sobrescrito  $R$  será omitido a partir de agora, para simplificar a notação.

A transformada de Fourier fornece a função de Green na frequência de Matsubara:

$$G_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \langle \hat{T}_\tau c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(0) \rangle, \quad (1.21)$$

com  $\omega_n$  sendo as frequências de Matsubara para férmions. Para obter uma expressão explícita no modelo de HK, pode-se derivar a equação (1.20) em relação ao tempo imaginário, obtendo-se a chamada equação do movimento

$$\frac{\partial}{\partial \tau} G_\sigma(\mathbf{k}, \tau) = -\delta(\tau) \langle \{ c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau), c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(0) \} \rangle + \langle \hat{T}_\tau [H_{HK}, c_{\mathbf{k},\sigma}(\tau)] c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(0) \rangle. \quad (1.22)$$

Aplicando a transformada de Fourier, essa equação no espaço de frequências assume a forma

$$i\omega_n \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n} = 1 + \langle \langle [c_{\mathbf{k},\sigma}, H_{HK}]; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n}, \quad (1.23)$$

que é interessante pois elimina a derivada explícita, substituindo-a por um fator de frequência multiplicativo.

Com base na equação (1.9), obtêm-se os seguintes comutadores que aparecem no cálculo da função de Green

$$[c_{\mathbf{k},\sigma}, H_{HK}] = (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)c_{\mathbf{k},\sigma} + U c_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}}, \quad (1.24)$$

$$[c_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}}, H_{HK}] = (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + U)c_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}}. \quad (1.25)$$

Substituindo o primeiro comutador na equação (1.23), obtém-se:

$$i\omega_n \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n} = 1 + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n} + U \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}}; c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n}. \quad (1.26)$$

Fazendo o mesmo procedimento para o último termo que aparece na equação acima, chega-se a

$$i\omega_n \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} | c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n} = \langle n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \rangle + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + U) \langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} | c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n}, \quad (1.27)$$

e isolando o termo  $\langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} | c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n}$ , se tem a relação

$$\langle \langle c_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} | c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n} = \frac{\langle n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \rangle}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - U}. \quad (1.28)$$

Substituindo esse resultado na equação (1.23), obtém-se a função de Green para o modelo de Hatsugai-Kohmoto:

$$i\omega_n G_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = 1 + (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) G_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) + \frac{U \langle n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \rangle}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - U}, \quad (1.29)$$

$$G_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1 + \frac{U \langle n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \rangle}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - U}}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu}. \quad (1.30)$$

Essa expressão pode ser simplificada por meio de frações parciais, resultando em:

$$G_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1 - \langle n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \rangle}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu} + \frac{\langle n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \rangle}{i\omega_n - \epsilon_{\mathbf{k}} + \mu - U}. \quad (1.31)$$

Essa é a forma exata da função de Green de partícula única no modelo de Hatsugai-Kohmoto. Ela revela a presença de dois polos distintos: um associado à inserção de uma partícula em um estado vazio, e outro à inserção em um estado já ocupado por um elétron de spin oposto (representado por  $\bar{\sigma}$ ). A ocupação média  $\langle n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \rangle$  aparece como fator de ponderação, refletindo a probabilidade de o modo  $\mathbf{k}$  já estar ocupado por um elétron com spin oposto.

Para compreender a dinâmica de transporte e a natureza espectral do modelo, é fundamental introduzir as excitações coletivas de carga conhecidas como *holons* e *doublons*. No contexto da base de ocupação definida na Eq. (1.10), o holon corresponde a uma excitação do estado vazio  $|0\rangle_{\mathbf{k}}$  para um estado unicamente ocupado no espaço de momentos. Por outro lado, o doublon corresponde a uma excitação de um estado unicamente ocupado para o estado duplamente ocupado  $|\uparrow\downarrow\rangle_{\mathbf{k}}$ , cuja formação implica em um custo energético adicional  $U$  devido à repulsão coulombiana.

A importância dessas quasipartículas transcende a simples classificação dos estados da base, elas governam a estrutura analítica da função de Green de uma partícula,  $G(\mathbf{k}, \omega)$ . Em um líquido de Fermi convencional, a função de Green possui apenas um polo simples próximo à superfície de Fermi, correspondendo a uma quasipartícula bem definida. No entanto, no modelo de Hatsugai-Kohmoto, as fortes correlações eletrônicas causam o “fracionamento” do elétron nas excitações coletivas de holons e doublons mencionadas acima.

Ao calcularmos o propagador do elétron, pode-se observar que ele se decompõe em dois polos distintos como pode ser observado na Eq. (1.31). O primeiro polo, localizado na energia  $\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ , está associado à transição entre o estado vazio e o simplesmente ocupado (setor do holon).

O segundo polo, deslocado pela energia de interação para  $\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + U$ , descreve a transição entre o estado simplesmente ocupado e a dupla ocupação (setor do doublon). Conseqüentemente, a densidade espectral do sistema não apresenta um único pico lorentziano, mas sim uma estrutura de dois picos separados pela escala de energia  $U$ . A dinâmica dos holons e doublons é, portanto, o mecanismo microscópico responsável pela abertura do gap de Mott: quando a interação  $U$  é suficientemente grande em relação à largura de banda, a banda de holons (inferior) e a banda de doublons (superior) se separam completamente, transformando o sistema em um isolante, mesmo na ausência de ordem magnética de longo alcance.

### 1.3.2 Densidade de estados

A densidade de estados, geralmente denotada por  $\mathcal{N}(\epsilon)$ , é uma função fundamental que quantifica o número de estados quânticos disponíveis por unidade de energia. Mais precisamente,  $\mathcal{N}(\epsilon) d\epsilon$  representa o número de estados acessíveis com energia entre  $\epsilon$  e  $\epsilon + d\epsilon$ . Essa função é essencial para determinar como os elétrons (ou outras partículas) se distribuem energeticamente em um sistema, sendo diretamente relacionada à ocupação eletrônica pela relação [22]

$$\mathcal{N}(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{dN_s}{d\epsilon_{\mathbf{k}}},$$

em que  $N_s$  é o número de estados do sistema.

Do ponto de vista técnico, a densidade de estados surge naturalmente ao se transformar integrais sobre o espaço recíproco (ou espaço de momento) em integrais sobre a energia. Essa transformação é possível porque a energia  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  dos estados eletrônicos depende do momento  $\mathbf{k}$ , permitindo que os estados acessíveis sejam contados por meio da relação

$$\int_{\text{1BZ}} \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} f(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \int d\epsilon \mathcal{N}(\epsilon) f(\epsilon),$$

onde  $f(\epsilon)$  é uma função arbitrária da energia (por exemplo, a função de Fermi). A densidade de estados  $\mathcal{N}(\epsilon)$  atua, assim, como uma “função peso” que traduz a distribuição dos níveis de energia resultantes da estrutura de bandas do sistema. Essa substituição é especialmente útil em sistemas translacionalmente invariantes, onde o hamiltoniano pode ser diagonalizado no espaço de  $\mathbf{k}$ , permitindo que somas (ou integrais) sobre  $\mathbf{k}$  sejam reescritas de forma mais conveniente e eficiente em termos da energia, já que, em muitos casos, é mais simples realizar a integração no espaço de energia do que no espaço de momento.

No modelo de Hatsugai–Kohmoto, a densidade de estados  $\mathcal{N}(\omega)$  pode ser diretamente relacionada à função de Green de partícula única  $G(\omega)$ , por meio da identidade

$$\mathcal{N}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} [G_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega + i0^+)].$$

Essa expressão estabelece que a densidade de estados é proporcional à parte imaginária da função de Green. Como visto anteriormente, no caso do modelo de HK, a função de Green possui duas

contribuições separadas, com pesos espectrais distintos que dependem da ocupação eletrônica. Como consequência, a densidade de estados total resulta de uma combinação ponderada das contribuições associadas a cada banda, refletindo diretamente os efeitos da interação local e da estatística de ocupação nos estados disponíveis para excitação.

Essa afirmação pode ser demonstrada partindo da identidade de Sokhotski–Plemelj [31], que é dada por

$$\frac{1}{s + i\omega} = \mathcal{P} \left( \frac{1}{s} \right) - i\pi\delta(s), \quad (1.32)$$

onde  $\mathcal{P}$  denota o valor principal. Aplicando essa identidade à função de Green  $G_\sigma(\mathbf{k}, \omega)$ , obtém-se:

$$\text{Im } G_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = -\pi [(1 - n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}}) \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) + n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}} - U)]. \quad (1.33)$$

Substituindo na expressão para a densidade de estados, chega-se à expressão

$$\mathcal{N}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} [(1 - n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}}) \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) + n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}} - U)], \quad (1.34)$$

que, como dito, apresenta duas partes distintas: uma relacionada à chamada banda “lower” que é associada a energia do estado unicamente ocupado  $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ , e a banda “upper” que é associada ao estado duplamente ocupado  $\xi_{\mathbf{k}} = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + U$ , o que explica o nome já que nesse caso se terá uma energia mais alta devido ao termo de interação  $U$ .

A Eq. (1.34) pode ser integrada utilizando-se a densidade de estados *tight-binding*. Um exemplo de grande interesse neste trabalho é o caso bidimensional, cuja densidade de estados (DOS) *tight-binding* é dada por

$$\mathcal{N}_2(\epsilon_{\mathbf{k}}) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi^2|t|} K \left( \sqrt{1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}}^2}{16t^2}} \right) & \text{para } |\epsilon_{\mathbf{k}}| < 4|t| \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (1.35)$$

em que a função

$$K(\lambda) = \int_0^\pi \frac{d\phi}{\sqrt{1 - \lambda^2 \cos^2 \phi}} \quad (1.36)$$

é a chamada integral elíptica de primeira espécie.

Realizando o cálculo para o caso bidimensional, obtém-se o resultado ilustrado na Figura 4, considerando-se a situação de banda semicheia. Nota-se que, para  $U > W$  em banda semicheia, a densidade de estados se anula no nível de Fermi. Esse comportamento é particularmente interessante, pois está associado ao chamado isolante de Mott [32].

O conceito de isolante de Mott é bastante intrigante, tendo surgido a partir das tentativas de compreender por que certos sólidos que, segundo a teoria de bandas, deveriam ser metálicos, mas exibem comportamento isolante. Em 1937, Jan Hendrik de Boer e Evert Verwey observaram que compostos como óxidos de metais de transição apresentavam resistividades anômalas, incompatíveis com a descrição de elétrons como quase-livres, apontando para a importância das

fortes correlações eletrônicas [33]. Posteriormente, em 1949, Nevill F. Mott formalizou a ideia de que, em certos sistemas, a repulsão coulombiana entre elétrons é tão intensa que, em banda semicheia (caso em que o sistema deveria se comportar como um metal segundo a teoria clássica de bandas) dois elétrons, mesmo com spins opostos, não conseguiriam ocupar o mesmo sítio. Assim, um gap pode se abrir mesmo em bandas parcialmente preenchidas, levando ao chamado isolante de Mott [34].

Assim, ao observar a Figura 3, a linha em vermelho representa a fase isolante de Mott, o que faz bastante sentido ao analisar a expressão para a dopagem dada pela Eq. (1.18). Isso porque, em banda semicheia e em forte acoplamento, o valor do potencial químico é exatamente  $\mu = W/2$ . Ao comparar esse resultado com a Figura 2, percebe-se que haverá apenas  $\Omega_1$  (ocupação simples), uma vez que o valor de  $\mu$ , que define o limite entre ocupação nula e simples, está localizado na borda superior da banda, não havendo mais ocupação dupla nem nula.

Um outro caminho possível é adotar uma aproximação que permita, mais adiante, a obtenção de expressões analíticas para algumas grandezas físicas. Nesse caso, considera-se uma DOS constante dada por  $\mathcal{N}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) = 1/W$ , válida no intervalo  $-W/2 \leq \omega \leq W/2$ . Assim, tem-se  $\mathcal{N}(\omega) = \mathcal{N}_0(\omega) + \mathcal{N}_1(\omega) + \mathcal{N}_2(\omega)$ , em que  $\mathcal{N}_i(\omega)$  representa a contribuição da região de momento  $\Omega_i$ . Para o termo associado à região  $\Omega_0$ , obtém-se

$$\mathcal{N}_0(\omega) = \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_0} \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) = \Theta(\omega) \mathcal{N}(\omega + \mu). \quad (1.37)$$

Para os estados  $\mathbf{k} \in \Omega_1$ , com ocupação intermediária  $n_{\mathbf{k},\sigma} = 1/2$ , tem-se

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_1(\omega) &= \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_1} \frac{1}{2} [\delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) + \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}} - U)] \\ &= \frac{1}{2} [\Theta(-\omega) \Theta(\omega + U) \mathcal{N}(\omega + \mu) + \Theta(-\omega + U) \Theta(\omega) \mathcal{N}(\omega + \mu - U)], \end{aligned} \quad (1.38)$$

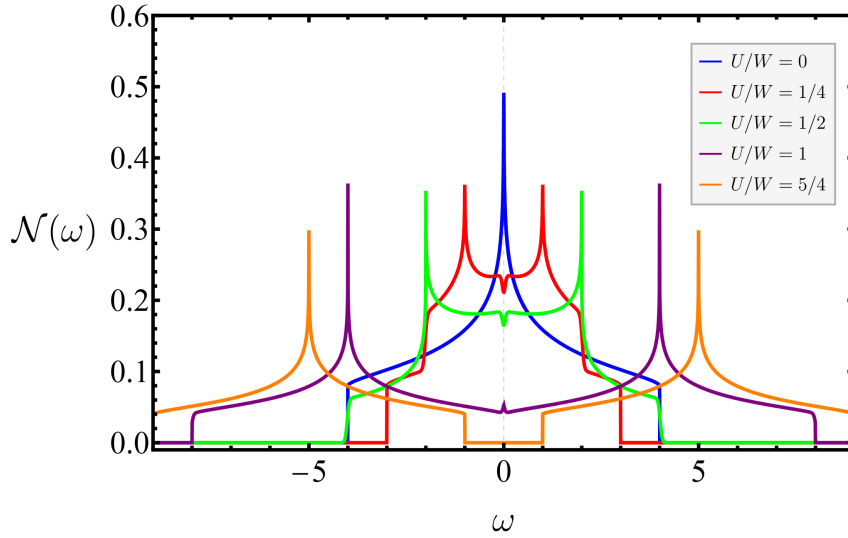
e, por fim, para a região duplamente ocupada  $\mathbf{k} \in \Omega_2$ , obtém-se

$$\mathcal{N}_2(\omega) = \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_2} \delta(\omega - \xi_{\mathbf{k}}) = \Theta(-\omega) \mathcal{N}(\omega - \mu). \quad (1.39)$$

Apesar de ser uma aproximação bastante simples, essa abordagem é surpreendentemente eficaz e será de grande utilidade nas análises subsequentes.

### 1.3.3 Instabilidades para diferentes fases no modelo de HK 2D

Uma questão central a ser investigada é a possível ocorrência de instabilidades que dão origem a fases ordenadas, tais como a fase supercondutora, a onda de densidade de carga (do inglês, *charge density wave* ou CDW) e a onda de densidade de pares (do inglês, *pair density wave* ou PDW). Cada uma dessas fases está associada a propriedades específicas em matéria condensada.



**Figura 4** – Densidade de estados do modelo de HK 2D em banda semicheia em uma rede quadrada para diferentes interações  $U/W$ .

No caso da supercondutividade, trata-se de uma fase caracterizada pela ausência de resistência elétrica: os elétrons podem se deslocar pelo material sem dissipação de energia. Essa propriedade confere aos supercondutores diversos comportamentos interessantes, entre os quais se destaca o efeito Meissner–Ochsenfeld [35, 36]. Nesse fenômeno, a aplicação de um campo magnético sobre o supercondutor resulta na expulsão desse campo para fora do material, tornando-o um diamagneto perfeito e permitindo efeitos espetaculares, como a levitação sobre ímãs.

Um dos primeiros passos para compreender a origem da supercondutividade foi dado pelo físico norte-americano Leon N. Cooper em 1956, que mostrou que uma interação atrativa, mesmo infinitesimal, entre dois elétrons próximos à superfície de Fermi leva à formação de um par ligado (os chamados pares de Cooper) [37]. No ano seguinte, John Bardeen, Leon Cooper e Robert Schrieffer generalizaram esse resultado e formularam a teoria BCS [38], que permanece como o arcabouço fundamental para a descrição da supercondutividade convencional.

No formalismo de segunda quantização, a interação atrativa responsável pelo emparelhamento pode ser escrita como

$$H_{SC} = -V_p \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \sigma}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \sigma'}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}'+\mathbf{q}/2, \sigma'} c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}/2, \sigma}, \quad (1.40)$$

em que  $V_p$  representa o potencial atrativo efetivo entre os elétrons, em geral, considerado pequeno.

A simetria do estado supercondutor é incorporada na descrição por meio de um fator de forma  $\gamma_{\mathbf{k}}$ , que define como ocorre o emparelhamento no espaço de momento. Essa escolha é crucial, pois diferentes fatores de forma levam a diferentes simetrias do parâmetro de ordem  $e$ , consequentemente, a distintas propriedades físicas. Entre as principais simetrias encontram-se:

- **Simetria *s-wave*** (simetria isotrópica no canal singleto): o parâmetro de ordem é constante em todas as direções,  $\gamma_{\mathbf{k}} = 1$ . Esse caso caracteriza os supercondutores convencionais cujo mecanismo de pareamento se deve a uma interação efetiva entre os elétrons intermediada por fônons, com os pares de Cooper em um estado singleto e momento angular nulo.
- **Simetria *d-wave*** (simetria anisotrópica no canal singleto com pontos nodais ao longo das diagonais): o parâmetro de ordem varia com a direção no espaço de momento e apresenta mudanças de sinal na superfície de Fermi. Um exemplo típico é a simetria  $d_{x^2-y^2}$ , para a qual o fator de forma fica  $\gamma_{\mathbf{k}} = \cos k_x - \cos k_y$ . O mecanismo de pareamento nesse caso, em geral, se deve a uma interação efetiva entre os elétrons intermediadas por flutuações de spin antiferromagnéticas. Essa simetria é observada em diversos supercondutores de alta temperatura como, por exemplo, os cupratos supercondutores.
- **Simetria *p-wave*** (simetria no canal tripleto): corresponde a pares de Cooper em um estado tripleto de spin, com parâmetro de ordem ímpar sob inversão de momento. Um exemplo desse tipo de pareamento é o canal tripleto quirral dado pelo fator de forma descrito por  $\gamma_{\mathbf{k}} = \sin k_x + i \sin k_y$ , que quebra a simetria de reversão temporal. Essa simetria, em geral, se deve à interação efetiva entre os elétrons intermediada por flutuações ferromagnéticas como ocorre em sistemas, como, por exemplo, o superfluido de  $^3\text{He}$  e alguns supercondutores topológicos.

Essa abordagem permite descrever tanto o estado supercondutor convencional quanto a fase PDW. A principal diferença entre esses dois casos está no momento total dos pares de Cooper: no estado supercondutor convencional, o pareamento ocorre com momento de centro de massa nulo, ou seja, na Eq. (1.40) tem-se que  $\mathbf{q} = 0$ , o que implica que os elétrons se emparelham com momentos opostos ( $\mathbf{k}$  e  $-\mathbf{k}$ ).

Já no caso do PDW, o pareamento ocorre com momento total finito,  $\mathbf{q} \neq 0$ , de modo que os pares possuem momento de centro de massa não nulo. Essa característica leva a uma modulação espacial da ordem supercondutora, que constitui a assinatura fundamental da fase PDW. Tal modulação se manifesta na dependência espacial do parâmetro de ordem, que assume a forma

$$\Delta(\mathbf{r}) \sim \Delta_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.41)$$

em que o parâmetro de ordem corresponde à grandeza que caracteriza a presença de correlações de pareamento no sistema, atuando como medida da amplitude e da fase do estado condensado de pares de elétrons. Esse conceito será discutido em maior detalhe adiante. Isso significa que a densidade de pares de Cooper varia periodicamente no espaço, com período  $2\pi/|\mathbf{q}|$ , formando uma onda de pares. Essa periodicidade implica na quebra espontânea da simetria de translação da rede, além da já usual quebra da simetria global de fase associada à supercondutividade.

O conceito de pareamento com momento total finito foi introduzido de forma pioneira e independente por Fulde e Ferrell [39], e por Larkin e Ovchinnikov [40], no contexto de sistemas

com desbalanço de spin induzido por campo magnético. Esse estado é hoje conhecido como FFLO (Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov), e pode ser interpretado como uma possível forma da fase PDW.

A fase conhecida como *charge density wave* é caracterizada por uma modulação periódica da densidade eletrônica no espaço real, frequentemente acompanhada por uma distorção da rede cristalina. Nessa fase, a densidade de carga varia segundo um padrão oscilatório do tipo

$$\rho(\mathbf{r}) \sim \rho_0 + \rho_{\mathbf{q}} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} + \phi), \quad (1.42)$$

em que  $\mathbf{q}$  é o vetor de onda da modulação e  $\phi$  uma fase arbitrária. Essa modulação quebra espontaneamente a simetria de translação discreta da rede cristalina, levando a uma reorganização do estado fundamental do sistema.

Historicamente, o conceito de CDW remonta ao trabalho de Rudolf Peierls na década de 1930, posteriormente consolidado em seu livro publicado em 1955 [41], no estudo de sistemas unidimensionais de férmions interagentes. Peierls demonstrou que uma cadeia unidimensional metálica torna-se instável a baixas temperaturas, desenvolvendo uma modulação periódica na densidade de carga que abre um gap na superfície de Fermi - fenômeno hoje conhecido como instabilidade de Peierls. Desde então, fases CDW foram observadas em diversos materiais quasi-unidimensionais e bidimensionais, incluindo compostos como  $\text{NbSe}_2$ ,  $\text{TaS}_2$ , bem como nos próprios cupratos supercondutores dopados, nos quais podem coexistir ou competir com outras fases ordenadas [42–44].

No modelo de HK, a fase CDW pode ser induzida por meio de um termo de interação atrativa no canal de densidade de carga, que favorece a formação de modulações periódicas da densidade eletrônica com um vetor de onda específico  $\mathbf{q}$ . A forma geral desse termo é dada por

$$H_{\text{CDW}} = -V_c \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2, \sigma'} c_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}/2, \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}/2, \sigma}, \quad (1.43)$$

onde

$$\rho_c(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma} \quad (1.44)$$

é o operador de densidade de carga no espaço de momento. Esse termo pode tanto penalizar quanto favorecer distribuições eletrônicas não uniformes, e sua inclusão permite investigar a instabilidade do sistema em relação à formação de uma onda de densidade de carga com periodicidade determinada por  $\mathbf{q}$ . O parâmetro  $V_c$  é positivo e o sinal negativo na frente da expressão indica que a interação é efetivamente atrativa.

Analogamente às instabilidades de ordenamento de carga e pareamento, há também a possibilidade de instabilidade no canal de spin, levando ao surgimento de fases magneticamente ordenadas. Esse tipo de ordenamento é particularmente relevante, pois inclui como casos específicos as fases ferromagnética e antiferromagnética, ambas podendo ser interpretadas como membros de uma classe mais geral conhecida como *Spin Density Waves* (SDW).

Do ponto de vista histórico, a noção de SDW foi introduzida por A. W. Overhauser no final da década de 1950 e início da década de 1960 [45, 46]. Em uma série de trabalhos pioneiros, Overhauser demonstrou que, em certos regimes, a interação de troca entre elétrons pode tornar energeticamente favorável a formação de uma modulação periódica da densidade de spin, mesmo na ausência de magnetização uniforme. Esse mecanismo, posteriormente conhecido como “instabilidade de Overhauser”, estabeleceu o fundamento conceitual para a compreensão moderna de SDWs e revelou que estados magneticamente modulados surgem naturalmente em sistemas metálicos com superfícies de Fermi que exibem o chamado *nesting*<sup>2</sup>.

A formulação teórica de SDWs apresenta forte analogia com aquela utilizada para CDW e PDW. Assim, como existe um operador associado à densidade de carga ou ao pareamento, há também um operador que descreve a densidade de spin no espaço de momento. Tal operador pode ser escrito como

$$\rho_s(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} c_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^\dagger \left( \frac{\sigma}{2} \right) c_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}. \quad (1.45)$$

Uma fase SDW corresponde a uma situação em que o valor esperado desse operador torna-se diferente de zero para algum vetor de onda  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ , indicando que a magnetização apresenta uma modulação espacial periódica, descrita, por exemplo, por

$$M(\mathbf{r}) \sim M_{\mathbf{Q}} \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r} + \phi), \quad (1.46)$$

onde  $M_{\mathbf{Q}}$  representa a amplitude do parâmetro de ordem e  $\phi$  é uma fase arbitrária.

Com essa análise, torna-se claro que tanto o ferromagnetismo quanto o antiferromagnetismo convencionais podem ser vistos como casos particulares de uma SDW. No ferromagnetismo, o vetor de modulação é nulo ( $\mathbf{Q} = 0$ ), resultando em magnetização uniforme em todo o material. Já no antiferromagnetismo em uma rede quadrada,  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ , o que produz alternância de spins de sítio para sítio. Dessa forma, o quadro de SDWs fornece uma descrição unificada para uma ampla família de fases magneticamente ordenadas, que frequentemente coexistem ou competem com outras instabilidades eletrônicas, como CDW, PDW e fases supercondutoras.

### 1.3.4 Suscetibilidades e temperaturas críticas para cada fase eletrônica

A suscetibilidade é uma grandeza física fundamental que quantifica a resposta de um sistema a uma perturbação externa. No contexto da matéria condensada, ela mede como uma ordem física - como magnetização, densidade de carga ou pareamento supercondutor - é induzida em resposta à aplicação de um campo conjugado. Por exemplo, a suscetibilidade magnética indica o quanto a magnetização varia com a aplicação de um campo magnético, enquanto a suscetibilidade de pareamento quantifica a tendência do sistema em formar pares de partículas

<sup>2</sup> Nesses casos, existe um vetor  $\mathbf{Q}$  finito capaz de conectar porções da superfície de Fermi, podendo amplificar as flutuações no canal de spin e favorecer a estabilização de uma fase SDW com uma modulação descrita por esse vetor.

(pares de Cooper) diante de uma interação atrativa. Do ponto de vista teórico, a divergência de uma suscetibilidade geralmente sinaliza uma instabilidade do estado fundamental e a possível transição para uma nova fase ordenada. Assim, o cálculo de suscetibilidades constitui uma ferramenta poderosa para diagnosticar transições de fase e identificar quais tipos de ordem emergem como mais energeticamente favorecidas em determinadas condições físicas.

No caso da suscetibilidade de pares, a perturbação externa é dada por um termo que acopla elétrons (Eq. (1.40)), favorecendo a formação de pares de Cooper. A suscetibilidade de pares no canal singleto é definida como:

$$\chi_p^0(i\nu_n, \mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n\tau} \langle \hat{T}_\tau \Delta_{\mathbf{q}}(\tau) \Delta_{\mathbf{q}}^\dagger(0) \rangle_0, \quad (1.47)$$

em que o operador  $\Delta_{\mathbf{q}}^\dagger$  cria um par com momento total  $\mathbf{q}$ , e é dado por

$$\Delta_{\mathbf{q}}^\dagger = \gamma_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}^\dagger. \quad (1.48)$$

Seu conjugado destrói um par com momento total  $\mathbf{q}$ . O valor esperado desses operadores no vácuo quântico corresponde ao parâmetro de ordem supercondutor. Nas expressões a seguir, o fator de forma associado à simetria de pareamento será omitido, a fim de não sobrecarregar a notação. Substituindo esses operadores na definição da suscetibilidade, obtém-se:

$$\chi_p^0(i\nu_n, \mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n\tau} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \hat{T}_\tau c_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^\dagger(0) c_{-\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}^\dagger(0) \rangle_0. \quad (1.49)$$

O subíndice 0 no braket da Eq. (1.47) indica que a média está sendo tomada em relação ao estado não interagente. Usando as regras de anticomutação entre os operadores de criação e aniquilação, a sequência de quatro operadores se fatoriza em produtos de duas funções de Green de partícula única:

$$\langle \hat{T}_\tau c_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}(\tau) c_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^\dagger(0) c_{-\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}^\dagger(0) \rangle_0 = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(\tau) G_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}(\tau), \quad (1.50)$$

onde  $G_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) = -\langle \hat{T}_\tau c_{\mathbf{k}\sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger(0) \rangle_0$  é a função de Green de Matsubara no espaço de momento e tempo imaginário, já calculada na Eq. (1.31), mas em termos da frequência. Portanto, realizando a transformada de Fourier, tem-se que  $\chi_p^0$  é dado por

$$\begin{aligned} \chi_p^0(i\nu_n, \mathbf{q}) &= -\frac{1}{N_s} \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n\tau} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(\tau) G_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}(\tau) \\ &= -\frac{1}{N_s\beta} \sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(i\omega_m) G_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}(i\nu_n - i\omega_m). \end{aligned} \quad (1.51)$$

Agora, realizando a soma de Matsubara sobre as funções de Green,

$$\begin{aligned}
\chi_p^0(i\nu_n, \mathbf{q}) &= -\frac{1}{N_s \beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_m \left( \frac{n_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}}{-i\omega_m - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}} + \frac{1 - n_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}}{-i\omega_m - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}} + U} \right) \\
&\quad \times \left( \frac{n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}}{i\nu_n - i\omega_m - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}} + \frac{1 - n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}}{i\nu_n - i\omega_m - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}} + U} \right) \\
&= -\frac{1}{N_s \beta} \sum_{\mathbf{k}} \sum_m \sum_{a,b}^{u,l} \frac{n_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^b}{(-i\omega_m - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a)(i\nu_n - i\omega_m - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b)} \\
&= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a,b}^{u,l} n_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^b \left[ \frac{-f(-\xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a)}{i\nu_n - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b} + \frac{f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b)}{i\nu_n - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b} \right] \\
&= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a,b}^{u,l} n_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^b \left[ \frac{1 - f(\xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a) - f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b)}{i\nu_n - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b} \right] \\
&= \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{a,b}^{u,l} \frac{n_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^b}{i\nu_n - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b} \left[ f(\xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a) + f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b) - 1 \right].
\end{aligned}$$

Obtém-se, assim, a expressão exata para a suscetibilidade de pares singleto no modelo de Hatsugai-Kohmoto. Note que foi introduzida a notação com índices  $a$  e  $b$ , os quais denotam a banda *upper* ( $\xi_{\mathbf{k}}^u = \xi_{\mathbf{k}} + U$ ,  $n_{\mathbf{k}}^u = n_{\mathbf{k}}$ ), indicada por  $u$ , e a banda *lower* ( $\xi_{\mathbf{k}}^l = \xi_{\mathbf{k}}$ ,  $n_{\mathbf{k}}^l = 1 - n_{\mathbf{k}}$ ), indicada por  $l$ .

A suscetibilidade de pares para o caso tripleto é bastante similar, sendo que a principal mudança consiste no fato de que, ao se calcular a função de correlação, acoplam-se pares com o mesmo spin, isto é

$$\chi_{p, \uparrow\uparrow}^0(i\nu_n, \mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n \tau} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \langle \hat{T}_\tau c_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^\dagger(0) c_{-\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^\dagger(0) \rangle_0, \quad (1.52)$$

o que, após manipulações algébricas, leva a

$$\begin{aligned}
\chi_{p, \uparrow\uparrow}^0(i\nu_n, \mathbf{q}) &= -\frac{1}{N_s} \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n \tau} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(\tau) G_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(\tau) \\
&= -\frac{1}{N_s \beta} \sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(i\omega_m) G_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}(i\nu_n - i\omega_m).
\end{aligned} \quad (1.53)$$

Portanto, a suscetibilidade de pares para o caso tripleto com  $L_z = 1$  assume a forma

$$\chi_{p, \uparrow\uparrow}^0(i\nu_n, \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{k}, a, b} n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}^a n_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}^b \frac{f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a) + f(\xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b) - 1}{i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b}, \quad (1.54)$$

em que a única diferença notável é que, neste caso, os spins dos fatores que compõem a equação são ambos para baixo (se fosse calculada a susceptibilidade correspondente a  $L_z = -1$ , seriam ambos para cima). Além disso, a simetria de pareamento no caso tripleto é do tipo  $p$ -wave, cujo índice está omitido apenas para não sobrecarregar a notação.

Para a suscetibilidade de carga, um procedimento bastante semelhante pode ser seguido, sendo calculada a chamada função de correlação densidade-densidade, dada por

$$\chi_c^0(\mathbf{q}, \tau) = -\frac{1}{N_s} \left\langle \hat{T}_\tau (\rho_c(\mathbf{q}, \tau) \rho_c(-\mathbf{q})) \right\rangle_0, \quad (1.55)$$

na qual o nome advém do fato da função de correlação (susceptibilidade) envolver dois operadores densidade de carga. Expandindo explicitamente os operadores, obtém-se

$$\begin{aligned} \chi_c^0(\mathbf{q}, \tau) &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \left\langle \hat{T}_\tau \left( c_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^\dagger(\tau) c_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^\dagger c_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} \right) \right\rangle_0 \\ &= \frac{1}{N_s} \left[ \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \sigma, \sigma'} \left\langle \hat{T}_\tau \left( c_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}(\tau) c_{\mathbf{k}'+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'}^\dagger \right) \right\rangle_0 \left\langle \hat{T}_\tau \left( c_{\mathbf{k}'-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma'} c_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^\dagger(\tau) \right) \right\rangle_0 \right. \\ &\quad \left. - \overbrace{\langle \rho_c(\mathbf{q}) \rangle_0 \langle \rho_c(-\mathbf{q}) \rangle_0}^{=0 \text{ para } \mathbf{q} \neq 0} \right]. \end{aligned} \quad (1.56)$$

Por fim, realizando a transformada de Fourier, encontra-se

$$\begin{aligned} \chi_c^0(i\nu_n, \mathbf{q}) &= \frac{1}{N_s} \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n \tau} \left\langle \hat{T}_\tau \rho_c(\mathbf{q}, \tau) \rho_c(-\mathbf{q}, 0) \right\rangle_0 \\ &= -\frac{1}{N_s \beta} \sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} G_\sigma(i\omega_m, \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}) G_\sigma(i\omega_m + i\nu_n, \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}). \end{aligned} \quad (1.57)$$

Realizando a soma de Matsubara, obtém-se uma expressão fechada para a suscetibilidade de carga:

$$\begin{aligned} \chi_c^0(i\nu_n, \mathbf{q}) &= -\frac{1}{N_s \beta} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_m \left( \frac{n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}}{i\omega_m - \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}} + \frac{1 - n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}}{i\omega_m - \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}} + U} \right) \\ &\quad \times \left( \frac{n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}}{i\nu_n + i\omega_m - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}} + \frac{1 - n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}}{i\nu_n + i\omega_m - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}} + U} \right) \\ &= -\frac{1}{N_s \beta} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_m \sum_{a,b}^{u,l} \frac{n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^b}{(i\omega_m - \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a)(i\nu_n + i\omega_m - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b)} \\ &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{a,b}^{u,l} n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^b \left[ \frac{f(\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a)}{i\nu_n + \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b} - \frac{f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b)}{i\nu_n + \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b} \right] \\ &= -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{a,b}^{u,l} n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^b \left[ \frac{f(\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a) - f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b)}{i\nu_n + \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b} \right]. \end{aligned}$$

Até o momento, todas as susceptibilidades foram calculadas exatamente no modelo de HK. No entanto, como demonstrado em um trabalho recente [11], a susceptibilidade exata com a interação atrativa de pares (i.e., a Eq. (1.40)) pode ser relacionada à suscetibilidade exata do modelo de HK por meio de uma relação do tipo Dyson, isto é,

$$\chi_p(i\nu_n, \mathbf{q}) = \frac{\chi_p^0(i\nu_n, \mathbf{q})}{1 - V_p \chi_p^0(i\nu_n, \mathbf{q})}. \quad (1.58)$$

Uma expressão análoga é válida para a susceptibilidade de carga, conforme mostrado no Apêndice A. Dessa forma, pode-se definir uma expressão geral na forma

$$\chi_a(i\nu_n, \mathbf{q}) = \frac{\chi_a^0(i\nu_n, \mathbf{q})}{1 - V_a \chi_a^0(i\nu_n, \mathbf{q})}, \quad (1.59)$$

onde o índice  $a$  indica se a susceptibilidade é de pares ( $p$ ) ou de carga ( $c$ ).

Essa é a equação de Dyson para a susceptibilidade, que mostra como a resposta do sistema se torna divergente quando  $\chi_a^0(i\nu_n) = \frac{1}{V_a}$ , sinalizando uma instabilidade associada ao surgimento de uma fase ordenada. Em particular, no limite de frequência nula, tem-se a relação

$$\chi_a^0(i\nu_n = 0, \mathbf{q}) \Big|_{T=T_c^a} = \frac{1}{V_a}, \quad (1.60)$$

com  $T_c^a$  sendo a temperatura crítica da fase correspondente. Essa condição fornece, portanto, um critério para o estudo das instabilidades que levam ao aparecimento de diferentes fases ordenadas no modelo.

Além das susceptibilidades de carga e de pares, há também a susceptibilidade de spin, que é fundamental para explorar possíveis ordenamentos magnéticos no sistema. Isso é especialmente relevante porque dois ordenamentos importantes são o ferromagnético e o antiferromagnético, mas ambos exigem certa cautela ao serem tratados no modelo de HK.

A susceptibilidade de spin pode ser calculada por um caminho muito similar ao usado no caso de carga, mas agora considerando o operador densidade de spin (Eq. (1.45)). Dessa forma, obtém-se:

$$\chi_s^0(i\nu_n, \mathbf{q}) = \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n \tau} \langle T \rho_s(\mathbf{q}, \tau) \rho_s(-\mathbf{q}, 0) \rangle_0 \quad (1.61)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} \left(\frac{\sigma}{2}\right)^2 G_\sigma(i\omega_m, \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}) G_\sigma(i\omega_m + i\nu_n, \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}) \quad (1.62)$$

$$= -\frac{1}{4\beta} \sum_{i\omega_m} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\sigma} G_\sigma(i\omega_m, \mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}) G_\sigma(i\omega_m + i\nu_n, \mathbf{k} + \frac{\mathbf{q}}{2}). \quad (1.63)$$

Comparando com a expressão da Eq. (1.57), nota-se que ambas têm a mesma estrutura funcional, o que leva imediatamente à relação:

$$\chi_s^0(i\nu_n, \mathbf{q}) = \frac{1}{4} \chi_c^0(i\nu_n, \mathbf{q}). \quad (1.64)$$

Assim, a susceptibilidade antiferromagnética pode ser calculada diretamente da Eq. (1.61) com  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . Já para o caso ferromagnético, correspondente a  $\mathbf{q} = (0, 0)$ , é necessário um cuidado extra. Como mostrado em um trabalho recente [47], no limite  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  a expressão obtida por teoria de resposta linear deixa de coincidir com o resultado termodinâmico. Isso significa que, nesse caso específico, o procedimento mais seguro é usar a expressão termodinâmica para a susceptibilidade ferromagnética:

$$\chi_s = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{\partial M}{\partial B} = \lim_{B \rightarrow 0} \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}} \left( \frac{\partial n_{\mathbf{k}, \uparrow}}{\partial B} - \frac{\partial n_{\mathbf{k}, \downarrow}}{\partial B} \right) \mu_B, \quad (1.65)$$

em que  $M$  é a magnetização,  $\mu_B$  é o magneton de Bohr e  $n_{\mathbf{k}, \sigma}$  é a ocupação média na presença de um termo de Zeeman, ou seja:

$$H_Z = -\mu_B B \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sigma c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma}, \quad (1.66)$$

de modo que a dispersão se torna  $\xi_{\mathbf{k}, \sigma} = \xi_{\mathbf{k}} - \mu_B B \sigma$ , levando à ocupação

$$\langle n_{\mathbf{k}, \sigma} \rangle = \frac{e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}, \sigma}} + e^{-\beta(2\xi_{\mathbf{k}} + U)}}{1 + e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}, \uparrow}} + e^{-\beta \xi_{\mathbf{k}, \downarrow}} + e^{-\beta(2\xi_{\mathbf{k}} + U)}}. \quad (1.67)$$

Vale destacar que essa sutileza no limite  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  continua sendo tema de debate. Como demonstrado por Ma e colaboradores [48], os limites  $\mathbf{q} \rightarrow 0$  e o limite termodinâmico não comutam. Isso exige cautela ao aplicar teoria de resposta linear para recuperar o comportamento físico nesse limite. Portanto, utilizaremos nesta dissertação a expressão termodinâmica para o cálculo dessa quantidade no modelo de HK.

### 1.3.5 Examinando casos limites do modelo de HK

Uma forma de verificar se os resultados obtidos no modelo de HK estão consistentes é testá-los em um caso limite conhecido. Nesse sentido, ao adicionar o termo de pareamento supercondutor (Eq. (1.40)) e tomar os limites  $U \rightarrow 0$  e  $\mathbf{q} \rightarrow 0$ , espera-se naturalmente recuperar o resultado da teoria BCS.

Em primeiro lugar, é interessante mostrar que reproduzimos a expressão para a energia do estado fundamental do modelo BCS. Para isso, parte-se do Hamiltoniano

$$H_{\text{HK}} + H_{\text{par}} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \xi_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + U \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}, \uparrow} n_{\mathbf{k}, \downarrow} - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}, \uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}, \downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}', \downarrow} c_{\mathbf{k}', \uparrow}, \quad (1.68)$$

em que, no caso BCS, tem-se que  $U = 0$ , embora esse termo seja mantido aqui inicialmente. A energia média do modelo HK–BCS pode ser avaliada como

$$E_0 = \langle g | H_{\text{HK}} + H_{\text{par}} | g \rangle = \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_1} \xi_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_2} (2\xi_{\mathbf{k}} + U) - n_0 V, \quad (1.69)$$

onde  $n_0 = \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_1} + \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_2}$ . Seguindo uma abordagem variacional análoga à análise da instabilidade de Cooper na teoria BCS, define-se o estado de par de Cooper

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_0} \alpha_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger |g\rangle + \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_1} \beta_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^\dagger |g\rangle, \quad (1.70)$$

com  $b_{\mathbf{k}}^\dagger = c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger$ . A normalização de  $|\psi\rangle$  implica

$$\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_0} |\alpha_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_1} |\beta_{\mathbf{k}}|^2 = 1. \quad (1.71)$$

A energia média do estado  $|\psi\rangle$  resulta então em

$$\begin{aligned} E = \langle \psi | H | \psi \rangle &= \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_0} 2\xi_{\mathbf{k}} |\alpha_{\mathbf{k}}|^2 + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_1} (2\xi_{\mathbf{k}} + U) |\beta_{\mathbf{k}}|^2 \\ &\quad - V \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \Omega_0} \alpha_{\mathbf{k}}^* \alpha_{\mathbf{k}'} - \frac{V}{16} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \Omega_1} \beta_{\mathbf{k}}^* \beta_{\mathbf{k}'} \\ &\quad - \frac{V}{4} \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_0, \mathbf{k}' \in \Omega_1} (\alpha_{\mathbf{k}}^* \beta_{\mathbf{k}'} + \alpha_{\mathbf{k}} \beta_{\mathbf{k}'}^*) + E_0. \end{aligned} \quad (1.72)$$

Ao adicionar um par ao sistema, a energia varia de  $E_C = E - E_0$ . Aplicando o método dos multiplicadores de Lagrange com a condição de normalização, obtêm-se as relações

$$\begin{aligned} \alpha_{\mathbf{k}} &= \frac{V}{2\xi_{\mathbf{k}} - E_C} \left( \sum_{\mathbf{k}' \in \Omega_0} \alpha_{\mathbf{k}'} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}' \in \Omega_1} \beta_{\mathbf{k}'} \right), \\ \beta_{\mathbf{k}} &= \frac{V}{2\xi_{\mathbf{k}} + U - E_C} \left( \sum_{\mathbf{k}' \in \Omega_0} \alpha_{\mathbf{k}'} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k}' \in \Omega_1} \beta_{\mathbf{k}'} \right). \end{aligned}$$

Somando as expressões em  $\Omega_0$  e  $\Omega_1$ , chega-se à equação auto-consistente

$$1 = \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_0} \frac{V}{2\xi_{\mathbf{k}} - E_C} + \frac{1}{4} \sum_{\mathbf{k} \in \Omega_1} \frac{V}{2\xi_{\mathbf{k}} + U - E_C}. \quad (1.73)$$

Usando a densidade de estados discutida na Seção 1.3.2, obtém-se:

$$\frac{V}{W} \int_0^{\frac{W}{2} - \mu} \frac{d\omega}{2\omega - E_C} + \frac{V}{8W} \int_{-U}^0 \frac{d\omega}{2\omega + U - E_C} + \frac{V}{8W} \int_0^U \frac{d\omega}{2\omega - U - E_C} = 1. \quad (1.74)$$

As integrais são simples e resultam em

$$\frac{V}{8W} \ln \left| \frac{(W - 2\mu - E_C)^4 (U - E_C)}{E_C^4 (U + E_C)} \right| = 1, \quad (1.75)$$

ou, tornando a equação adimensional,

$$\frac{v}{8} \ln \left| \frac{(1 - 2\tilde{\mu} - \varepsilon)^4 (u - \varepsilon)}{\varepsilon^4 (u + \varepsilon)} \right| = 1. \quad (1.76)$$

No caso  $u = 0$ , recupera-se exatamente o resultado da teoria BCS:

$$\varepsilon = -\frac{1 - 2\tilde{\mu}}{e^{2/v} + 1} \approx -(1 - 2\tilde{\mu})e^{-2/v}, \quad (1.77)$$

mostrando que, mesmo para um potencial  $v$  infinitesimal, ocorre a formação de um estado ligado com energia negativa (par de Cooper), uma vez que  $-1/2 \leq \tilde{\mu} \leq 1/2$ .

Um comentário importante: um cálculo similar aparece na Ref. [12]. No entanto, os autores dessa referência parecem ter esquecido um fator 2 multiplicando a relação de dispersão  $\xi_{\mathbf{k}}$  no segundo termo da Eq. (1.72), o que torna seus resultados incorretos para  $u$  finito. Ainda assim, no limite  $u \rightarrow 0$ , ambos os resultados convergem.

### 1.3.6 Efeitos de perturbações no modelo

Com as propriedades básicas do modelo estabelecidas, torna-se natural considerar perturbações externas para compreender como o sistema responde a influências adicionais. Entre as mais relevantes destacam-se: (i) a aplicação de um campo magnético externo, que permite investigar o comportamento magnético do sistema e (ii) deformações uniaxiais, capazes de favorecer ou suprimir determinadas fases ordenadas.

Partindo dessas considerações, define-se um Hamiltoniano semelhante ao original, mas agora com a inclusão explícita dessas perturbações:

$$H_{HK} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} (\xi_{\mathbf{k}} - \sigma B) c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + U \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\uparrow} n_{\mathbf{k}\downarrow} + H_V, \quad (1.78)$$

em que  $H_V$  representa os termos de interação adicionais no canal de carga ou de pares, definidos anteriormente.

A primeira modificação evidente é a presença do termo de Zeeman  $\sigma B$ , onde  $\sigma$  distingue os graus de liberdade de spin. Considera-se, de forma consistente, um campo aplicado ao longo do eixo  $z$ , de modo a manter o Hamiltoniano diagonal em spin.

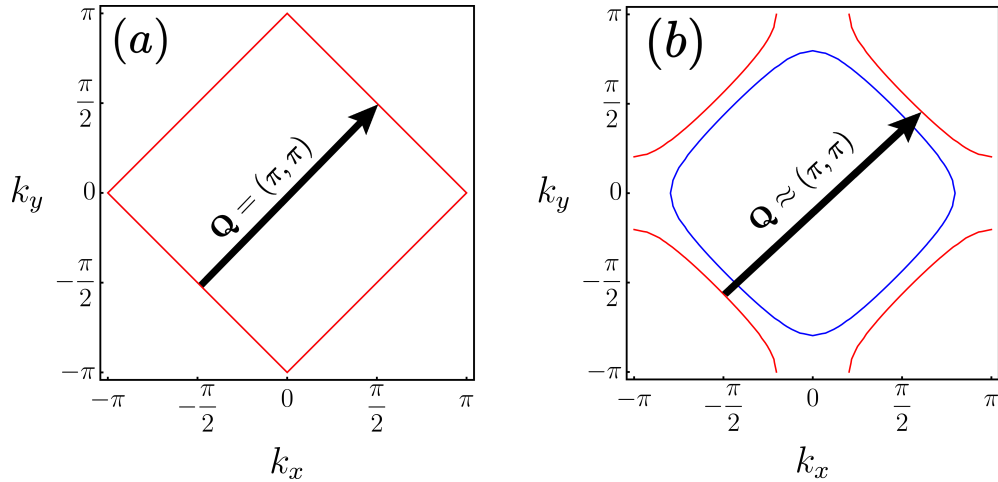
Além disso, sob uma tensão externa (*strain*) aplicada, a relação de dispersão eletrônica pode ser escrita da seguinte forma

$$\xi_{\mathbf{k}} = -2(t_x \cos k_x + t_y \cos k_y) - \mu,$$

com  $t_x = t - \delta$  e  $t_y = t + \delta$ , onde  $\delta$  quantifica uma deformação uniaxial. Dependendo de seu sinal, a deformação favorece o transporte eletrônico predominante na direção  $x$  ou  $y$ , influenciando a estabilidade relativa entre diferentes fases ordenadas.

Outro efeito relevante decorre da inclusão de processos de *hopping* para segundos vizinhos, que alteram a relação de dispersão para

$$\xi_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - \mu, \quad (1.79)$$



**Figura 5** – Representação esquemática do efeito de *nesting*. Em (a), ilustra-se a superfície de Fermi não interagente do modelo de HK para  $B = 0$ ,  $t' = 0$  e  $\delta = 0$  em uma situação de banda semi-cheia. Em (b), a presença de campo magnético cria uma distinção entre spins para cima e para baixo, resultando em duas superfícies de Fermi distintas.

onde  $t'$  representa a amplitude de salto entre segundos vizinhos. Esse termo afeta significativamente a geometria da superfície de Fermi e, por consequência, a competição entre diferentes instabilidades.

Tanto a deformação uniaxial quanto o *hopping* de segundos vizinhos distorcem a superfície de Fermi e modificam o mecanismo de *nesting*, já discutido amplamente na literatura [49, 50]. O *nesting* corresponde à existência de regiões extensas da superfície de Fermi conectadas por um mesmo vetor de onda  $\mathbf{q} = \mathbf{Q}$ , como ilustrado na Fig. 5, de forma que  $\xi_{\mathbf{k}} = -\xi_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}$ . Ao longo deste trabalho, utiliza-se a forma simetrizada equivalente,  $\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}} = -\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}$ .

No painel (a), observa-se o caso sem perturbações externas: o sistema apresenta uma única superfície de Fermi e existe um vetor  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  que conecta perfeitamente regiões distintas da superfície, caracterizando *nesting* perfeito. Já no painel (b), a aplicação de um campo magnético separa as superfícies de Fermi dos spins para cima e para baixo, tornando o *nesting* apenas aproximado. Mesmo quando um vetor conectando regiões opostas ainda existe, ele deixa de conectar toda a superfície devido à deformação introduzida.

Essa propriedade é particularmente importante para o estudo de ordenamento de carga no modelo. Para adquirir intuição inicial, considera-se o caso do gás de férmions livre, generalizando posteriormente para o modelo de HK. Impondo a condição de *nesting* na expressão da suscetibilidade de carga com  $\mu = 0$ , obtém-se:

$$\chi_c^{(0)}(\mathbf{q}, T) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{f(-\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}) - f(\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}})}{2\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}} = - \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tanh(\beta\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}/2)}{2\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}}, \quad \beta = 1/T, \quad (1.80)$$

onde se utilizou a identidade  $f(-\xi) = 1 - f(\xi)$ . A partir deste ponto, para simplificação, omite-se o índice  $\mathbf{k} - \frac{\mathbf{q}}{2}$ , pois será igual para todos os  $\xi$ .

Ao substituir a soma sobre  $\mathbf{k}$  por uma integral em energia com densidade de estados  $N(\xi)$

e assumir  $N(\xi) \simeq N(0) = 1/W$  (como discutido na Seção 1.3.2), obtém-se

$$\chi_c^{(0)}(\mathbf{q}, T) \simeq - \int_{-W/2}^{W/2} d\xi N(\xi) \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{2\xi} \simeq - \frac{1}{W} \int_0^{W/2} d\xi \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{\xi}. \quad (1.81)$$

Com a mudança de variáveis  $x = \beta\xi/2$ , chega-se à forma

$$\int_0^{W/2} d\xi \frac{\tanh(\beta\xi/2)}{\xi} = \int_0^{\beta W/4} dx \frac{\tanh(x)}{x}.$$

A integral acima admite a aproximação assintótica

$$\int_0^b \frac{\tanh(x)}{x} dx \approx \ln\left(\frac{4e^\gamma b}{\pi}\right),$$

onde  $\gamma \approx 0,57721$  é a constante de Euler–Mascheroni. Assim, a suscetibilidade de carga para o gás de férmions é dada por

$$\chi_c^{(0)}(\mathbf{q}, T) \approx - \frac{1}{W} \ln\left(\frac{e^\gamma W}{\pi T}\right).$$

Como mencionado anteriormente, um resultado semelhante ao obtido para o gás de férmions livre também se aplica ao modelo HK, embora a demonstração seja mais sutil devido à estrutura adicional do modelo. A primeira diferença relevante é que, no caso do HK, a suscetibilidade de carga é ponderada por fatores que medem a ocupação média dos estados. No limite de baixas temperaturas, essa dificuldade pode ser contornada utilizando a Eq. (1.16), juntamente com as densidades de estados discutidas na Seção 1.3.2. Nesse regime, a integral que define a suscetibilidade pode ser decomposta nos setores  $\Omega_0$ ,  $\Omega_1$  e  $\Omega_2$ , de modo que os fatores de ponderação tornam-se constantes dentro de cada setor e podem ser extraídos da integral. Isso leva a uma expressão análoga à obtida para o gás de férmions livres.

A segunda diferença importante é a presença de contribuições provenientes das bandas *upper* e *lower*, que distinguem termos de energia com e sem a contribuição da interação  $U$ . Nesse caso, a suscetibilidade passa a incluir termos mistos entre as duas bandas. Como consequência, o *nesting* pode ocorrer em duas situações distintas: (i) quando apenas termos não mistos contribuem, a condição é  $\mu = 0$ ; (ii) quando os termos mistos estão presentes, a condição é modificada para  $\mu = U/2$ , isto é, precisamente na situação de banda semicheia.

Essas modificações introduzidas pelos efeitos externos não alteram de forma qualitativa os resultados discutidos anteriormente. A principal diferença é que a inclusão do campo magnético quebra a simetria de spin  $SU(2)$ , introduzindo uma dependência explícita do spin na dispersão eletrônica. Dessa forma, a expressão para o número médio de elétrons por estado de momento e spin passa a ser

$$\langle n_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = \frac{e^{-\beta\xi_{\mathbf{k},\sigma}} + e^{-\beta(2\xi_{\mathbf{k}}+U)}}{1 + e^{-\beta\xi_{\mathbf{k},\uparrow}} + e^{-\beta\xi_{\mathbf{k},\downarrow}} + e^{-\beta(2\xi_{\mathbf{k}}+U)}}, \quad (1.82)$$

onde  $\xi_{\mathbf{k},\sigma} = \xi_{\mathbf{k}} - \sigma B$  representa a dispersão incluindo o termo de Zeeman.

De maneira análoga, a função de Green torna-se

$$G_{\mathbf{k},\sigma}(i\omega) = \frac{1 - \langle n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \rangle}{i\omega - \xi_{\mathbf{k},\sigma}} + \frac{\langle n_{\mathbf{k},\bar{\sigma}} \rangle}{i\omega - \xi_{\mathbf{k},\sigma} - U}, \quad (1.83)$$

de modo que a suscetibilidade de pares para o caso singleto assume a forma

$$\chi_p^0(i\nu_n, \mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, a, b} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^a n_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}^b \frac{f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^a) + f(\xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}^b) - 1}{i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b}, \quad (1.84)$$

onde as energias no denominador não dependem explicitamente do spin. Esse cancelamento ocorre porque os pares considerados são formados por elétrons com spins opostos e, portanto, com sinais opostos na contribuição de Zeeman. Contudo, como as energias entram no denominador com o mesmo sinal, as contribuições de Zeeman se anulam exatamente.

Para o caso de uma susceptibilidade supercondutora no canal tripleto, a expressão torna-se

$$\chi_{p, \uparrow \uparrow}^0(i\nu_n, \mathbf{q}) = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, a, b} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}^a n_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \downarrow}^b \frac{f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^a) + f(\xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^b) - 1}{i\nu_n - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^a - \xi_{-\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \uparrow}^b}, \quad (1.85)$$

onde, nesse caso, as energias carregam o índice de spin e os fatores de forma têm de ter paridade ímpar. Vamos analisar, nesta dissertação, a situação em que o fator de forma dessa possível fase supercondutora seja do tipo  $p$ -wave.

De maneira semelhante, a suscetibilidade de carga passa a ser escrita como

$$\chi_c^0(i\nu_n, \mathbf{q}) = -\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{a, b} \gamma_{\mathbf{k}} \gamma_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \bar{\sigma}}^b \frac{f(\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^a) - f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^b)}{i\nu_n + \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b}, \quad (1.86)$$

onde novamente as energias no denominador não carregam dependência explícita do spin, pois os termos envolvidos referem-se a elétrons de mesmo spin, fazendo com que as contribuições do campo magnético se cancelem.

A partir deste ponto, todos os resultados subsequentes serão expressos nessa formulação mais geral, que inclui de forma sistemática tanto a quebra de simetria induzida pelo campo magnético quanto os efeitos de deformação uniaxial da rede. O modelo original é recuperado como um limite particular, bastando tomar  $\delta = 0$  e  $B = 0$ .

## 1.4 Modelo de Hatsugai-Kohmoto Orbital

O modelo de Hatsugai-Kohmoto Orbital (OHK) é uma generalização natural do modelo HK, obtida pela introdução de um novo grau de liberdade chamado de “orbital”. Essa extensão tem sido explorada em trabalhos recentes como um caminho promissor para aproximar o modelo de Hubbard por meio de uma formulação exatamente solúvel. Os resultados indicam que, ao

aumentar o número de orbitais, o modelo OHK converge progressivamente para o comportamento do modelo de Hubbard [26, 27, 30].

Essa correspondência torna-se clara ao observar a expressão do Hamiltoniano do modelo [26]:

$$H_{\text{OHK}} = \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \beta, \sigma} t_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}\alpha\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\beta\sigma} - \mu \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \sigma} n_{\mathbf{k}\alpha\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \alpha, \beta} U_{\alpha\beta} n_{\mathbf{k}\alpha\uparrow} n_{\mathbf{k}\beta\downarrow}. \quad (1.87)$$

Aqui,  $t_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$  representa a matriz de hopping dependente do momento entre os orbitais, enquanto  $U_{\alpha\beta}$  denota a matriz de interação entre eles. Nota-se que o modelo possui a mesma estrutura do modelo de HK tradicional, diferenciando-se apenas pela presença dos índices orbitais  $\alpha$  e  $\beta$ , que ampliam o espaço de graus de liberdade do sistema.

### 1.4.1 Semelhanças com o modelo de Hubbard

Para entender como o modelo OHK se aproxima do modelo de Hubbard, é útil analisar o caso com dois orbitais em uma rede quadrada, onde se fixa  $N = 2$ , e  $N$  representa o número de elétrons. Nesse cenário, o Hamiltoniano do OHK assume a forma

$$H = -t \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) \left( c_{1\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{2\mathbf{k}\uparrow} + c_{2\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{1\mathbf{k}\uparrow} + c_{1\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{2\mathbf{k}\downarrow} + c_{2\mathbf{k}\downarrow}^\dagger c_{1\mathbf{k}\downarrow} \right) + U \sum_{\mathbf{k}} (n_{1\mathbf{k}\uparrow} n_{1\mathbf{k}\downarrow} + n_{2\mathbf{k}\uparrow} n_{2\mathbf{k}\downarrow}), \quad (1.88)$$

que é bastante similar ao Hamiltoniano do Hubbard com dois sítios [51], diferindo apenas pela soma em  $\mathbf{k}$  e pelo fator  $g(\mathbf{k})$  decorrente da definição  $t_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) = -t g(\mathbf{k})$ . Esse fator é dado por

$$g(\mathbf{k}) = \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i}, \quad (1.89)$$

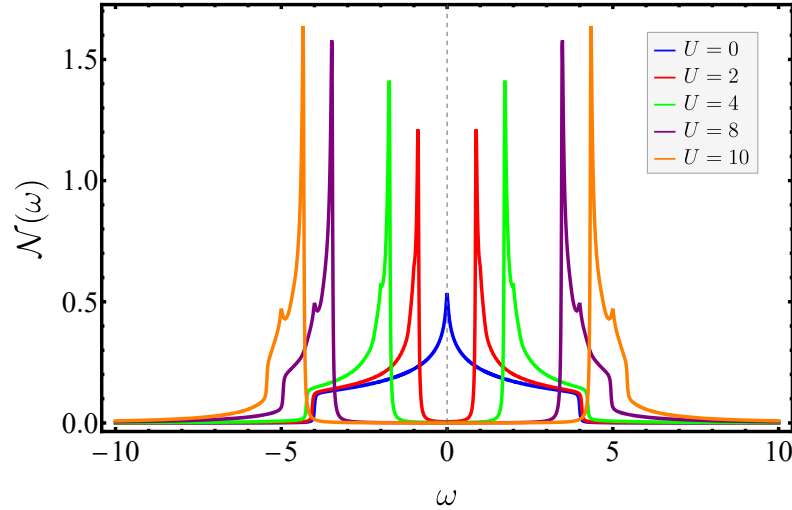
que, no caso da rede quadrada, assume a forma bem conhecida:

$$g(\mathbf{k}) = 2(\cos k_x + \cos k_y). \quad (1.90)$$

Para tornar essa semelhança ainda mais explícita, pode-se calcular a matriz do Hamiltoniano do OHK com dois orbitais:

$$\mathcal{H}_{\text{OHK},2}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & U & -tg^* & tg^* & 0 & 0 \\ 0 & -tg & 0 & 0 & -tg^* & 0 \\ 0 & tg & 0 & 0 & tg^* & 0 \\ 0 & 0 & -tg & tg & U & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - 2\mu \mathbb{I}_6. \quad (1.91)$$

Essa matriz é exatamente a mesma do modelo de Hubbard para dois sítios, com a única substituição  $t \rightarrow t g(\mathbf{k})$ . Esse comportamento geral permanece válido para mais orbitais: o modelo OHK com três orbitais equivale ao Hubbard com três sítios, com quatro orbitais equivale



**Figura 6** – Densidade de estados para o modelo OHK com  $n = 2$  e diversos valores de  $U$  para banda semicheia.

ao de quatro sítios, e assim sucessivamente. Trabalhos recentes mostram que, ao aumentar o número de orbitais, os resultados obtidos via OHK convergem rapidamente para aqueles do modelo de Hubbard [30].

Uma outra grandeza que reforça essa semelhança é a densidade de estados. Um aspecto característico do modelo de Hubbard 2D em banda semi-cheia é que ele exibe uma transição de Mott, mesmo para valores infinitesimais de  $U$ .

Observe a Figura 6, que mostra a densidade de estados do modelo OHK para dois orbitais. Nota-se que gaps de carga se formam mesmo para valores pequenos de  $U$ . Esse é um comportamento distinto do modelo de HK tradicional, no qual o gap de carga só se abre para  $U > W$ . Assim, o modelo orbital de HK recupera, por exemplo, uma característica essencial do modelo de Hubbard 2D. No trabalho de Mai e colaboradores [30], há uma figura semelhante à Figura 6, mas para quatro orbitais. Comparando com os resultados obtidos aqui, observa-se que ambas densidades de estados estão em concordância.

## 1.4.2 Suscetibilidade no modelo OHK

Após verificar essa semelhança entre os dois modelos, é natural calcular grandezas relevantes, como, por exemplo, a função de Green de uma partícula. Embora essa extensão do modelo possa parecer trivial à primeira vista, ela tem um impacto significativo na função de Green do modelo OHK, que não pode mais ser escrita na mesma forma que no caso de um único orbital, exigindo, portanto, o uso da representação de Lehmann. Isso ocorre porque o operador número  $n_{\mathbf{k},\alpha,\sigma}$  não comuta mais com o Hamiltoniano e a estrutura dos operadores de criação e aniquilação torna-se não trivial [48]. Consequentemente, esses operadores devem ser avaliados na base de autovalores do sistema interagente, o que pode ser entendido mais claramente examinando-se a

seguinte estrutura da função de Green:

$$G_{mn}^{\text{OHK}}(\mathbf{k}, \omega + i0^+) = \frac{1}{Z} \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_m} + e^{-\beta E_n}}{\omega + i0^+ + E_m - E_n} \langle m | c_{\mathbf{k},\beta,\sigma} | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k},\alpha,\sigma}^\dagger | m \rangle.$$

em que os elementos de matriz representam os operadores de criação e aniquilação na base de autovalores do Hamiltoniano completo. Do mesmo modo,  $E_m$  e  $E_n$  são os autovalores de energia do sistema. A função de partição é dada por  $Z = \text{Tr}(e^{-\beta H_{\text{OHK}}})$ , a partir da qual podem ser calculadas grandezas como a ocupação média, definida na Eq. (1.14).

Com a expressão para o número de ocupação médio nesse caso, pode-se calcular a suscetibilidade ferromagnética usando a fórmula termodinâmica já explicada anteriormente, de forma totalmente análoga à Eq. (1.65). Para a suscetibilidade antiferromagnética, o cálculo segue a mesma estrutura do modelo de HK e resulta na expressão

$$\begin{aligned} \chi_{\text{OHK}}^0(\mathbf{q}, \omega + i0^+) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\alpha,\beta} \sum_{n,m} \sum_{u,v} \frac{1}{Z_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} \frac{e^{-\beta(E_m+E_v)} - e^{-\beta(E_n+E_u)}}{\omega + i0^+ + E_n - E_m + E_u - E_v} \\ &\times \langle m | c_{\mathbf{k},\beta} | n \rangle \langle n | c_{\mathbf{k},\alpha}^\dagger | m \rangle \langle u | c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\alpha} | v \rangle \langle v | c_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\beta}^\dagger | u \rangle. \end{aligned} \quad (1.92)$$

em que os índices  $m$ ,  $n$ ,  $u$  e  $v$  percorrem os autoestados do Hamiltoniano.

É importante notar que esse cálculo pode se tornar rapidamente muito custoso do ponto de vista computacional. Por exemplo, para dois orbitais, a matriz do Hamiltoniano OHK tem dimensão 16, de modo que a soma acima escala como  $16^4 = 65536$ , sem contar a soma adicional nos orbitais e spins. Existem, no entanto, algumas estratégias para contornar esse problema, como explicado por Mai e colaboradores em um artigo recente [30].

## 2

# Informação Quântica de Fisher

## 2.1 Informação de Fisher Clássica

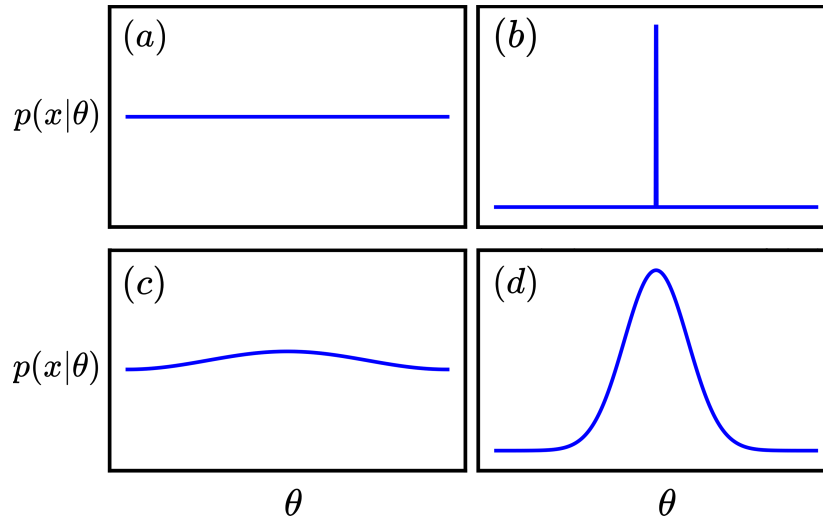
O conceito de *informação de Fisher* foi introduzido por Ronald A. Fisher em 1922, em um trabalho pioneiro sobre fundamentos da inferência estatística [52]. A ideia central consiste em quantificar a quantidade de informação que uma variável aleatória carrega sobre um parâmetro desconhecido que governa sua distribuição de probabilidade. Seja, então, um conjunto de dados  $x$  distribuído segundo uma densidade  $p(x|\theta)$ , dependente de um parâmetro real  $\theta$ , cujo valor se deseja estimar.

Para entender intuitivamente o significado dessa quantidade, é útil considerar alguns casos simples. Suponha que a probabilidade de encontrar uma grandeza  $x$  dependa do parâmetro desconhecido  $\theta$ . No painel (a) da Figura 7, a probabilidade é constante em relação a  $\theta$ ; nesse caso, nenhuma informação sobre o parâmetro pode ser extraída da distribuição. Já o painel (b) mostra o caso oposto: a probabilidade é descrita por uma função delta bem localizada, o que significa que o conhecimento sobre  $\theta$  é completo.

Os painéis (c) e (d) ilustram situações intermediárias. Quando a probabilidade varia lentamente com  $\theta$ , obtém-se apenas uma informação vaga sobre o parâmetro. À medida que surgem variações mais pronunciadas — como o pico mais estreito no painel (d) — a distribuição passa a carregar muito mais informação sobre  $\theta$ .

Essa análise qualitativa permite perceber que a chave está em avaliar a sensibilidade da distribuição de probabilidade a mudanças no parâmetro desconhecido. Caso fosse possível medir essa sensibilidade de forma sistemática, seria possível quantificar rigorosamente a informação contida na distribuição — e foi exatamente isso que Fisher propôs em sua formulação clássica [52, 53]:

$$F(\theta) = \int dx p(x|\theta) \left[ \partial_\theta \ln p(x|\theta) \right]^2. \quad (2.1)$$



**Figura 7** – Exemplo esquemático de algumas curvas de probabilidade em função da variável desconhecida  $\theta$ .

Essa expressão revela um significado geométrico profundo: a informação de Fisher mede a curvatura da função de verossimilhança em relação ao parâmetro  $\theta$ . Quanto maior o valor de  $F(\theta)$ , mais sensível é a distribuição de probabilidade a pequenas variações em  $\theta$ , e, portanto, mais informação pode ser extraída a partir das observações.

Uma grandeza intimamente relacionada à informação que pode ser extraída de uma distribuição é a sua variância, que quantifica o grau de dispersão em torno do valor médio. No contexto físico e estatístico, a variância representa a incerteza intrínseca de uma medição: valores pequenos indicam resultados altamente concentrados, enquanto valores grandes refletem alta flutuação. Para um observável  $M$ , ela é definida por  $(\Delta M)^2 = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$ , e desempenha um papel fundamental na metrologia, onde uma variância maior no estimador está associada a uma menor precisão. Como será visto adiante, essa conexão entre variância e informação de Fisher é essencial para a formulação dos limites fundamentais de estimação.

## 2.2 O Limite de Cramér–Rao

A importância fundamental da informação de Fisher manifesta-se por meio de um teorema central em teoria de estimação: o limite de Cramér–Rao. Esse resultado estabelece um limite inferior universal para a variância de qualquer estimador não enviesado de um parâmetro. Formalmente, para um estimador  $\hat{\theta}(x)$  que satisfaz a condição de não enviesamento,  $\mathbb{E}[\hat{\theta}] = \theta$ , em que  $\mathbb{E}$  denota o valor esperado no contexto da informação de Fisher, tem-se [54, 55]:

$$\text{Var}(\hat{\theta}) \geq \frac{1}{F(\theta)}, \quad (2.2)$$

em que  $\text{Var}(\hat{\theta})$  é a variância associada ao estimador  $\hat{\theta}(x)$ .

Esse limite é saturado quando o estimador é eficiente, isto é, quando atinge a menor variância permitida pela teoria. Para o caso de  $M$  medições independentes, a informação de Fisher total escala linearmente,  $F_{\text{total}} = MF(\theta)$ , resultando em

$$\text{Var}(\hat{\theta}) \geq \frac{1}{MF(\theta)}. \quad (2.3)$$

O limite de Cramér–Rao desempenha papel central em diversas áreas da ciência e engenharia, incluindo processamento de sinais [55], estimação de parâmetros em sistemas de comunicação [56] e análise estatística em experimentos de física [57]. Ele fornece um critério quantitativo para determinar quão bem um parâmetro pode ser estimado, servindo como referência fundamental para avaliar o desempenho de qualquer método de estimação.

## 2.3 Informação quântica de Fisher

Com o advento da teoria quântica da informação, tornou-se necessário estender o formalismo da informação de Fisher para sistemas quânticos. Esta extensão foi rigorosamente desenvolvida por Helstrom [58] e Holevo [59] no contexto da teoria de detecção e estimação quântica, na qual se busca, respectivamente, distinguir estados quânticos por meio de medições (detecção) e estimar parâmetros físicos desconhecidos que caracterizam esses estados (estimação). Nesse cenário, a informação de Fisher quântica surge como a grandeza fundamental que quantifica a sensibilidade do estado a variações de um parâmetro, estabelecendo limites de precisão para qualquer protocolo de medição. O trabalho pioneiro de Braunstein e Caves em 1994 [60] estabeleceu de forma definitiva a estrutura moderna da informação de Fisher quântica (QFI, do inglês *Quantum Fisher Information*).

Considerando um estado quântico  $\rho$  que evolui sob uma transformação unitária parametrizada por  $\theta$

$$\rho(\theta) = e^{-i\theta A} \rho(0) e^{i\theta A}, \quad (2.4)$$

onde  $A$  é um operador hermitiano (o gerador da evolução). A informação de Fisher quântica associada a esta evolução é definida em termos da decomposição espectral de  $\rho = \sum_k \lambda_k |k\rangle\langle k|$  como [60, 61]:

$$F_Q[\rho, A] = 2 \sum_{k,l} \frac{(\lambda_k - \lambda_l)^2}{\lambda_k + \lambda_l} |\langle k|A|l\rangle|^2, \quad (2.5)$$

onde a soma inclui apenas termos com  $\lambda_k + \lambda_l > 0$ .

Dessa forma, pode-se mostrar várias propriedades notáveis que a QFI possui que a tornam uma ferramenta poderosa em metrologia quântica [62, 63]:

1. **Limite para estados puros:** Um estado puro é aquele descrito por um único vetor de estado  $|\psi\rangle$  no espaço de Hilbert, contendo toda a informação quântica do sistema, em

contraste com estados mistos, que representam distribuições estatísticas de vários estados possíveis. Para um estado puro, a matriz densidade satisfaz  $\rho^2 = \rho$  e  $\text{Tr}(\rho^2) = 1$ , indicando ausência de incerteza clássica sobre o estado do sistema. Nessas condições, a QFI se reduz a quatro vezes a variância do operador  $A$  [60]:

$$F_Q[|\psi\rangle, A] = 4(\Delta A)^2 = 4(\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2). \quad (2.6)$$

2. **Convexidade:** A QFI é uma função convexa do estado quântico [61]:

$$F_Q[p\rho_1 + (1-p)\rho_2, A] \leq pF_Q[\rho_1, A] + (1-p)F_Q[\rho_2, A]. \quad (2.7)$$

3. **Limite superior:** Para qualquer estado quântico, a QFI é limitada superiormente por quatro vezes a variância [62]:

$$F_Q[\rho, A] \leq 4(\Delta A)^2. \quad (2.8)$$

## 2.4 O Limite Quântico de Cramér–Rao

Assim como no caso clássico, a QFI estabelece o limite fundamental de precisão para a estimação de um parâmetro  $\theta$  em um sistema quântico. Esse limite é conhecido como limite quântico de Cramér-Rao [58, 60] e é dado por

$$(\Delta\theta)^2 \geq \frac{1}{MF_Q[\rho, A]}, \quad (2.9)$$

onde  $M$  representa o número de medições independentes realizadas no sistema. Quanto maior o número de repetições, menor pode ser a incerteza na estimativa de  $\theta$ , porém jamais superando o limite imposto pela QFI.

Para atingir (ou *saturar*) esse limite, a medição realizada deve ser otimizada. A condição de otimalidade é satisfeita quando a observável medida está alinhada com o chamado *derivativo logarítmico simétrico* (SLD, do inglês *Symmetric Logarithmic Derivative*), denotado por  $L$ . Esse operador é definido implicitamente pela equação [60, 61]:

$$\frac{\partial\rho}{\partial\theta} = \frac{1}{2}(L\rho + \rho L). \quad (2.10)$$

Fisicamente, o SLD é o operador que quantifica a sensibilidade do estado quântico  $\rho$  em relação ao parâmetro  $\theta$ : ele mede como pequenas variações de  $\theta$  se refletem na estrutura do estado. A base dos autovalores de  $L$  fornece a medição ideal para extrair o máximo de informação sobre o parâmetro estimado.

Uma vez determinado o SLD, a QFI pode ser escrita de forma compacta como [62]

$$F_Q[\rho, A] = \text{Tr}(\rho L^2),$$

mostrando explicitamente que estados que respondem mais fortemente (isto é, com maior curvatura ou variação) ao parâmetro  $\theta$  possuem maior informação quântica de Fisher e, portanto, permitem estimativas mais precisas conforme o limite de Cramér-Rao.

### 2.4.1 Perspectiva Geométrica: O Tensor Geométrico Quântico

Até este ponto, a informação quântica de Fisher foi apresentada sob uma perspectiva estatística, relacionada à variância e à incerteza na estimação. No entanto, existe uma interpretação física mais profunda que conecta a QFI à geometria do espaço de Hilbert. Para compreender essa conexão, devemos fazer a seguinte pergunta: quão "distante" um estado quântico  $|\psi(\theta)\rangle$  está de seu vizinho infinitesimalmente perturbado  $|\psi(\theta + d\theta)\rangle$ ?

A medida natural de semelhança entre dois estados quânticos é a fidelidade (ou *overlap*). Se o parâmetro  $\theta$  varia ligeiramente, a "distância"  $ds^2$  entre o estado original e o perturbado pode ser definida como a parte do estado que deixa de se sobrepor a si mesmo:

$$ds^2 = 1 - |\langle\psi(\theta)|\psi(\theta + d\theta)\rangle|^2. \quad (2.11)$$

Ao expandir essa expressão em série de Taylor até segunda ordem em  $d\theta$ , surge naturalmente uma estrutura tensorial conhecida como **Tensor Geométrico Quântico** (QGT), denotado por  $\mathcal{Q}$  [64]. No caso geral de múltiplos parâmetros  $\vec{\lambda} = (\lambda_\mu, \lambda_\nu)$ , a distância no espaço de estados é dada por  $ds^2 = \sum_{\mu\nu} \mathcal{Q}_{\mu\nu} d\lambda_\mu d\lambda_\nu$ .

A grande vantagem de introduzir o QGT é que ele unifica dois conceitos fundamentais de geometria quântica por meio de suas partes real e imaginária [65]:

$$\mathcal{Q}_{\mu\nu} = g_{\mu\nu} + \frac{i}{2}\Omega_{\mu\nu}. \quad (2.12)$$

Cada componente possui um significado físico distinto:

1. **Parte Real ( $g_{\mu\nu}$ ):** É o tensor métrica quântica (métrica de Bures) que define a geometria para a evolução da matriz densidade. A informação de Fisher quântica fornece uma forma de definir tal métrica quântica, uma vez que:

$$F_{\mu\nu}^{(Q)} = 4g_{\mu\nu} = 4\text{Re}(\mathcal{Q}_{\mu\nu}). \quad (2.13)$$

Isso fornece uma interpretação geométrica para o limite de Cramér-Rao: estimar um parâmetro com alta precisão equivale a trabalhar em uma região do espaço de Hilbert onde a métrica é grande, ou seja, onde uma pequena variação no parâmetro gera uma grande "distância" (mudança drástica) no estado quântico.

2. **Parte Imaginária ( $\Omega_{\mu\nu}$ ):** É um tensor antissimétrico conhecido como curvatura de Berry. Enquanto a métrica quântica mede distâncias, a curvatura de Berry mede a fase geométrica acumulada pelo estado ao percorrer um caminho fechado no espaço de parâmetros, sendo fundamental para a descrição de efeitos topológicos em matéria condensada [66].

## 2.5 Papel do emaranhamento na metrologia quântica

Uma das descobertas centrais da metrologia quântica é que o emaranhamento quântico pode servir como um recurso fundamental para aumentar a precisão em protocolos de estimação de parâmetros, permitindo superar limitações que surgem mesmo em experimentos clássicos ideais [67, 68]. A relação profunda entre a QFI e o emaranhamento multipartido foi estabelecida em trabalhos seminais de Pezzé e Smerzi [69], Hyllus *et al.* [70] e Tóth [71].

Considere um sistema composto por  $N$  partículas de spin-1/2. Define-se o operador coletivo

$$J_l = \sum_{n=1}^N j_l^{(n)},$$

onde  $j_l^{(n)}$  representa o operador de momento angular da  $n$ -ésima partícula e  $l = x, y, z$  denota a direção escolhida. Esse operador coletivo desempenha papel essencial em protocolos metrológicos, pois descreve rotações globais aplicadas ao sistema.

Para estados *separáveis*, isto é, estados sem correlações quânticas entre as partículas e que podem ser escritos como produtos de estados individuais [72],

$$\rho_{\text{sep}} = \sum_m p_m \rho_1^{(m)} \otimes \rho_2^{(m)} \otimes \cdots \otimes \rho_N^{(m)}, \quad (2.14)$$

a QFI é limitada pela chamada *escala de shot-noise* [69, 71]:

$$F_Q[\rho_{\text{sep}}, J_l] \leq N. \quad (2.15)$$

O limite de shot-noise, também chamado de limite quântico padrão, representa a melhor precisão possível usando partículas totalmente independentes, sem emaranhamento. O nome se origina da óptica quântica, na qual flutuações estatísticas do número de fótons geram um ruído proporcional a  $\sqrt{N}$ . Nesse caso, a precisão obedece

$$(\Delta\theta)^2 \geq \frac{1}{N},$$

que decai apenas de forma linear com o número de partículas.

Por outro lado, estados emaranhados podem ultrapassar esse limite. O emaranhamento cria correlações quânticas globais que tornam o sistema mais sensível a pequenas variações do parâmetro, possibilitando alcançar a chamada *escala de Heisenberg* [73, 74]:

$$F_Q[\rho, J_l] \leq N^2, \quad (2.16)$$

o que leva a uma precisão máxima de

$$(\Delta\theta)^2 \geq \frac{1}{N^2}.$$

Essa melhoria quadrática em relação ao limite clássico é a assinatura mais forte do ganho metrológico proporcionado por emaranhamento multipartido. A escala de Heisenberg é considerada o limite fundamental da metrologia quântica linear e estabelece o melhor desempenho possível para protocolos baseados em estratégias de medida fisicamente realizáveis [68].

## 2.6 QFI no estudo de sistemas emaranhados

Pode-se adotar uma perspectiva complementar aos resultados apresentados: em vez de utilizar as Eqs. (2.15) e (2.16) como limites superiores para o  $F_Q$ , pode-se calcular diretamente a QFI e, a partir de seu valor, então determinar se o sistema em estudo é ou não emaranhado. Esse uso da função  $F_Q$  é bastante simples, pois, se o estado não possui emaranhamento multipartido, sabe-se que  $F_Q \leq N$ . Assim, sempre que o valor obtido ultrapassar esse limite, conclui-se que o sistema apresenta emaranhamento multipartido, como discutido na Ref. [62].

A ideia central é simples: embora estados separáveis obedeçam obrigatoriamente à limitação da escala de *shot-noise* da Eq. (2.15), estados emaranhados podem violar essa desigualdade. Dessa forma, sempre que, para algum gerador coletivo  $J_l$ , observa-se

$$F_Q[\rho, J_l] > N,$$

segue-se necessariamente que o estado  $\rho$  não é separável. Essa violação não depende de nenhuma tarefa metrológica específica; trata-se de uma propriedade estrutural do estado. Por essa razão, a QFI atua como uma testemunha de emaranhamento no sentido estabelecido por Pezzé e Smerzi [69], Hyllus *et al.* [70] e Tóth [71].

Essa abordagem confere, em diversas ocasiões, à QFI o título de *testemunha de emaranhamento multipartido*. Trata-se de uma denominação bastante apropriada, mas que carrega uma sutileza importante. Isso porque a informação de Fisher quântica não permite afirmar que um sistema não é emaranhado, ela apenas confirma se o sistema apresenta emaranhamento. De maneira análoga a uma testemunha, a QFI pode afirmar que observou determinado fenômeno, mas a ausência dessa observação não implica que o fenômeno não tenha ocorrido.

Esse critério é especialmente poderoso devido a três características fundamentais:

1. **Quantitatividade:** a razão  $F_Q/N$  fornece uma medida direta da intensidade das correlações quânticas presentes no sistema.
2. **Direcionalidade:** a escolha do gerador  $J_l$  permite sondar diferentes padrões de correlação, sensíveis às simetrias do Hamiltoniano.
3. **Detecção de emaranhamento multipartido:** violações progressivamente maiores do limite clássico, como  $F_Q > kN$ , certificam a presença de emaranhamento genuinamente multipartido envolvendo mais de  $k$  partículas [70, 75].

Em particular, Hyllus *et al.* [70] e Tóth [71] demonstraram que estados contendo apenas blocos de emaranhamento de até  $k$  partículas satisfazem a desigualdade

$$F_Q[\rho, J_l] \leq kN. \quad (2.17)$$

Portanto, observar

$$F_Q[\rho, J_l] > kN$$

implica que o estado possui emaranhamento envolvendo pelo menos  $(k + 1)$  partículas (se  $k > 1$ , esse emaranhamento é classificado como multipartido).

## 2.7 QFI a partir da susceptibilidade

Além de caracterizar a estrutura de emaranhamento multipartido, a QFI também desempenha papel importante na detecção de transições de fase quânticas. Em muitos sistemas de spin, modelos fermiônicos e redes bosônicas, a QFI é proporcional à susceptibilidade do sistema [76, 77]. Assim, divergências ou picos significativos na QFI acompanham pontos críticos, possibilitando identificar mudanças abruptas na ordem quântica sem a necessidade de parâmetros locais tradicionais.

Essa relação com a susceptibilidade e a informação de Fisher é explorada em diversos trabalhos como é o caso de Hauke e colaboradores [77], que demonstram que a QFI de um ensemble térmico pode ser diretamente medida por meio da susceptibilidade dinâmica do sistema. Este resultado tem implicações profundas tanto para a física experimental quanto para a compreensão teórica do emaranhamento em sistemas de muitos corpos [78–81].

A susceptibilidade dinâmica é uma função de resposta fundamental na física da matéria condensada, definida através da transformada de Fourier da função de correlação temporal [82], como já foi definido na seção 1.3.4.

A parte imaginária da susceptibilidade,  $\chi''(\omega, T) = \text{Im}[\chi(\omega, T)]$ , está relacionada à dissipação no sistema. Na representação de Lehmann, onde  $|\lambda\rangle$  denota os autoestados de energia com autovalores  $E_\lambda$ , a parte imaginária da susceptibilidade é dada por [77]:

$$\chi''(\omega, T) = \sum_{\lambda, \lambda'} (p_\lambda - p_{\lambda'}) |\langle \lambda | \hat{O} | \lambda' \rangle|^2 \pi \delta(\omega + E_{\lambda'} - E_\lambda), \quad (2.18)$$

onde  $p_\lambda = e^{-\beta E_\lambda} / Z$  são as probabilidades de ocupação térmicas. Essa expressão é obtida facilmente usando a relação de Sokhotski–Plemelj definida na Eq. (1.32).

O resultado central de Hauke *et al.* [77] estabelece uma relação exata entre a QFI e a susceptibilidade para sistemas em equilíbrio térmico, de modo que para um sistema quântico em equilíbrio térmico à temperatura  $T$  com operador densidade  $\rho = e^{-\beta H} / Z$ , a informação quântica de Fisher associada ao gerador  $\hat{O}$  é dada por:

$$F_Q[\rho, \hat{O}] = \frac{4}{\pi} \int_0^\infty d\omega \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right) \chi''(\omega, T), \quad (2.19)$$

onde  $\chi''(\omega, T)$  é a parte imaginária da susceptibilidade dinâmica e  $k_B = 1$ . Portanto, a QFI extrai o conteúdo de emaranhamento a partir das correlações quânticas contidas em  $\chi''(\omega, T)$ . Além disso, é importante mencionar aqui que, com essa definição de  $F_Q$ , a QFI é insensível ao chamado emaranhamento não local que pode se manifestar em fases topológicas.

A demonstração da equação acima segue diretamente da comparação entre as representações de Lehmann da QFI (2.5) e da susceptibilidade (2.18). Começamos notando que para um estado térmico:

$$\tanh\left(\frac{E_{\lambda'} - E_{\lambda}}{2T}\right) = \frac{p_{\lambda} - p_{\lambda'}}{p_{\lambda} + p_{\lambda'}}. \quad (2.20)$$

Utilizando a propriedade da função delta de Dirac:

$$2 \int_0^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right) \delta(\omega + E_{\lambda'} - E_{\lambda}) = \tanh\left(\frac{E_{\lambda'} - E_{\lambda}}{2T}\right), \quad (2.21)$$

substituímos (2.18) na integral (2.19):

$$\begin{aligned} \frac{4}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right) \chi''(\omega, T) &= \frac{4}{\pi} \sum_{\lambda, \lambda'} \int_0^{\infty} d\omega \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right) \\ &\quad \times (p_{\lambda} - p_{\lambda'}) |\langle \lambda | \hat{O} | \lambda' \rangle|^2 \pi \delta(\omega + E_{\lambda'} - E_{\lambda}) \\ &= 2 \sum_{\lambda, \lambda'} (p_{\lambda} - p_{\lambda'}) \tanh\left(\frac{E_{\lambda'} - E_{\lambda}}{2T}\right) |\langle \lambda | \hat{O} | \lambda' \rangle|^2 \\ &= 2 \sum_{\lambda, \lambda'} \frac{(p_{\lambda} - p_{\lambda'})^2}{p_{\lambda} + p_{\lambda'}} |\langle \lambda | \hat{O} | \lambda' \rangle|^2 \\ &= F_Q[\rho, \hat{O}], \end{aligned}$$

onde na última linha é fácil identificar que se recupera a definição da QFI (2.5).

Um ponto que até agora não foi considerado, seguindo a convenção da literatura, é a existência de um pré-fator na expressão (2.19) com a forma:

$$\frac{1}{(h_{max} - h_{min})^2} \quad (2.22)$$

em que  $h_{max}$  e  $h_{min}$  representam, respectivamente, os valores máximos e mínimos do operador  $\hat{O}$  usado para calcular a susceptibilidade. Por exemplo, ao se calcular o emaranhamento dos graus de liberdade de carga, utiliza-se a susceptibilidade de carga e, conseqüentemente, o fator citado corresponderá aos valores máximos e mínimos do operador densidade de carga. O raciocínio análogo aplica-se ao caso de spin.

De modo geral, diversas referências na literatura omitem o fator (2.22) em suas expressões, como é o caso da Ref. [77]. No entanto, Hauke *et al.* justifica essa omissão pelo fato de que, em seu sistema, esse fator é igual a um. Contudo, conforme explorado no trabalho de Si e colaboradores [83], esse fator pode ser crucial em diversos casos, incluindo o modelo de Hatsugai-Kohmoto, como será demonstrado adiante.

## 2.8 QFI no modelo de Hatsugai-Kohmoto

Até o momento, o cálculo da função  $F_Q$  foi tratado de maneira geral. Agora, calcularemos explicitamente essa quantidade no modelo de Hatsugai–Kohmoto utilizando a Eq. (2.19). Inicialmente, determina-se a parte imaginária da suscetibilidade do modelo por meio da Eq. (1.32). Para a susceptibilidade de carga, tem-se que:

$$\chi_c''(\omega, \mathbf{q}) = \frac{\pi}{N_s} \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{a,b}^{u,l} n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^b \left[ f(\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a) - f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b) \right] \delta\left(\omega + \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b\right).$$

Substituindo essa expressão na Eq. (2.19), obtém-se:

$$F_Q(\mathbf{q}, T) = \frac{4}{N_s} \int_0^\infty d\omega \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right) \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{a,b=u,l} n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^b \times \left[ f(\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a) - f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b) \right] \delta\left(\omega + \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b\right). \quad (2.23)$$

No caso da suscetibilidade de carga,  $h_{\max} = 2$  (decorrente essencialmente da soma dos operadores de número com spin *up* e *down*) e  $h_{\min} = 0$ . Assim, o fator (2.22) para carga assume o valor  $1/4$ . Substituindo-o na expressão anterior, chega-se à forma final da QFI para o modelo de HK:

$$F_Q(\mathbf{q}, T) = \frac{1}{N_s} \int_0^\infty d\omega \tanh\left(\frac{\omega}{2T}\right) \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{a,b=u,l} n_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^a n_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}, \sigma}^b \times \left[ f(\xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a) - f(\xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b) \right] \delta\left(\omega + \xi_{\mathbf{k}-\frac{\mathbf{q}}{2}}^a - \xi_{\mathbf{k}+\frac{\mathbf{q}}{2}}^b\right). \quad (2.24)$$

Para o caso de spin, o procedimento segue a mesma lógica. O operador densidade de spin possui valor máximo  $h_{\max} = 1/2$  e mínimo  $h_{\min} = -1/2$ .

Esse resultado é interessante, pois, conforme demonstrado na Seção 1.3.4, as susceptibilidades de spin e de carga diferem apenas por um fator  $1/4$  (veja a Eq. (1.64)). Assim, as funções  $F_Q$  para carga e spin mostram-se idênticas no modelo de Hatsugai–Kohmoto — um resultado que será analisado com mais detalhes no próximo capítulo.

## 2.9 A importância das derivadas da QFI

Como discutido até o momento, a função  $F_Q$  tem grande valor devido à quantidade de informação que pode fornecer sobre o sistema. No entanto, não apenas  $F_Q$  contém informações relevantes sobre as propriedades do sistema, como também suas derivadas desempenham um papel igualmente importante.

Na literatura, um ponto de interesse recorrente é a dependência de  $F_Q$  em relação ao parâmetro  $\omega_g = U - W$  [84]. Diversos trabalhos mostram que as derivadas de  $F_Q$  com relação

a  $\omega_g$ , seja a primeira ou a segunda, podem indicar transições de fase topológicas. No caso do modelo de Kitaev, por exemplo, essas derivadas evidenciam a presença de uma transição topológica por meio de picos ou não analiticidades que não aparecem necessariamente na própria função  $F_Q$  [85, 86]. Assim, as derivadas de  $F_Q$  constituem uma ferramenta poderosa para compreender melhor a física do modelo de Hatsugai-Kohmoto. Nos próximos capítulos, essas propriedades serão examinadas em detalhe, destacando como esse comportamento de  $F_Q$  pode fornecer pistas sobre regimes críticos e possíveis mudanças de fase no sistema.

## 2.10 Considerações sobre a QFI

A Eq. (2.19) possui profundas implicações tanto teóricas quanto experimentais:

1. **Mensurabilidade:** A QFI, uma quantidade que tradicionalmente requer tomografia completa do estado quântico (cuja complexidade escala exponencialmente com o número de partículas), torna-se acessível por meio de medidas de resposta linear [77]. Essas medidas podem ser realizadas via espectroscopia de Bragg em gases ultrafrios [87, 88] ou espalhamento de nêutrons em sistemas de matéria condensada [89].
2. **Detecção de emaranhamento:** Combinando a Eq. (2.19) com os critérios de emaranhamento baseados na QFI [Eqs. (2.15) e (2.16)], torna-se possível certificar emaranhamento multipartido diretamente a partir, p. ex., de medidas de espalhamento inelástico de nêutrons [77].
3. **Universalidade em transições de fase quânticas:** Próximo a pontos críticos quânticos, a QFI exhibe leis de escala universais [77, 90]. Para um sistema com tamanho linear  $L$  e temperatura  $T$  próximos à criticalidade, a QFI escala como

$$F_Q \sim L^{\Delta_Q} \Phi(TL^z), \quad (2.25)$$

onde  $\Delta_Q = d - 2\Delta_\alpha$  é a dimensão de escala associada à QFI,  $z$  é o expoente dinâmico,  $d$  é a dimensionalidade espacial,  $\Delta_\alpha$  é a dimensão de escala do operador  $\hat{O}$ , e  $\Phi$  é uma função universal de escala [77].

4. **Conexão com flutuações quânticas:** A integral na Eq. (2.19) é dominada por frequências altas, que não são acessíveis termicamente. O fator  $\tanh(\omega/2T)$  satura em  $\tanh(\omega/2T) \rightarrow 1$  para  $\omega \gg T$ , revelando que a QFI captura essencialmente flutuações quânticas, e não térmicas [77, 82]. Isso explica por que transições de fase térmicas não apresentam assinaturas particulares na QFI, ao passo que transições de fase quânticas deixam marcas claras.

A informação quântica de Fisher emerge, assim, como uma ferramenta unificadora em metrologia quântica, teoria de emaranhamento e física de sistemas de muitos corpos. Sua conexão

com a susceptibilidade dinâmica [Eq. (2.19)] não apenas fornece um caminho experimental para quantificar o emaranhamento em sistemas macroscópicos, como também revela uma relação profunda entre correlações quânticas, funções resposta e leis de escala em sistemas fortemente correlacionados [77–81].

## 3

## Resultados Obtidos

### 3.1 Competição entre ordenamento de carga e pareamento não convencional

Para compreender o efeito das perturbações externas ao modelo de HK, é fundamental entender antes como ocorre a competição entre diferentes fases na ausência de qualquer perturbação. Na literatura, trabalhos mostram que esse modelo é capaz de descrever tanto a fase isolante de Mott [11, 12] quanto o líquido de não-Fermi (NFL) ao se dopar o sistema. Para um potencial infinitesimal  $V \rightarrow 0$ , confirma-se que a única instabilidade da fase NFL, afastada da condição de banda semicheia, é a supercondutividade, em concordância com resultados anteriores disponíveis na literatura sobre esse modelo [11, 12, 91, 92]. No entanto, para um valor finito de  $V$ , obtém-se uma variedade de ordens de curto alcance<sup>1</sup> adicionais que emergem no diagrama de fases correspondente, conforme resumido na Figura 8. Observa-se que, para acoplamento fraco e próximo de banda semicheia, surge uma fase CDW com simetria  $d$ -wave e vetor de onda  $\mathbf{q} \approx (\pi, \pi)$  (bidirecional). Nessa região, o principal mecanismo por trás dessa ordem é a presença de um *nesting* aproximado da superfície de Fermi.

À medida que a interação local  $u$  atinge valores intermediários a fortes, uma fase emaranhada de CDW e PDW, também com vetor  $\mathbf{q} \approx (\pi, \pi)$ , passa a dominar. Esse comportamento ocorre desde pequenas dopagens até um valor crítico  $x_c$ , em concordância com os resultados apresentados na Ref. [92]. Essa região é rotulada como ‘CDW + PDW’ na Figura 8, sendo que ambas as fases possuem simetria do tipo  $s$ -wave.

Nesse regime, o PDW aparece como uma ordem subdominante em relação ao CDW. Em outras palavras, inicialmente, para valores menores do potencial  $V$ , a fase CDW se estabelece, e

<sup>1</sup> Ordens de curto alcance, nesse contexto, correspondem a situações em que a susceptibilidade correspondente é reforçada mas não diverge no limite de baixas temperaturas. Isso implica, pela Eq. (1.60), a existência de um potencial de corte finito, abaixo do qual as flutuações da fase eletrônica em análise se tornam subdominantes.

apenas quando  $V$  é aumentado o PDW emerge. Como consequência, sempre que a fase PDW se fortalece em determinada região, há uma fase CDW correspondente que a recobre, tornando o PDW subdominante. Essa característica não se restringe ao PDW bidirecional com simetria  $s$ -wave, mas também a outras simetrias das fases PDW analisadas.

O emaranhamento entre as regiões de CDW e PDW no modelo 2D de HK é particularmente relevante, pois indica uma conexão próxima entre essas duas fases [93–98]. Assim, o modelo de HK 2D fornece evidências que sustentam essa natureza interdependente entre CDW e PDW no regime de dopagem baixa a intermediária e interação local intermediária  $u$ . Um mecanismo semelhante foi proposto para descrever certos aspectos da física do regime de pseudogap nos cupratos nesse mesmo intervalo de dopagem [94–98].

Um comportamento interessante que pode ser extraído da Figura 8 é que o CDW bidirecional surge de forma recorrente ao longo das retas  $x = 1/2$  e  $u = x$ . Para compreender melhor esse resultado, é útil reescrever essas duas retas em termos do potencial químico por meio da Eq. (1.18). Fazendo isso, observa-se que ambas correspondem a um potencial químico nulo,  $\tilde{\mu} = 0$ , embora em regimes distintos: uma abaixo da linha  $u = 1 - x$  e outra acima.

No primeiro caso, quando  $u < 1 - x$ , isto é,  $\mu - U > -W/2$ , obtém-se

$$\tilde{\mu} = \frac{u - x}{2} \Rightarrow \tilde{\mu} = 0 \Rightarrow u = x. \quad (3.1)$$

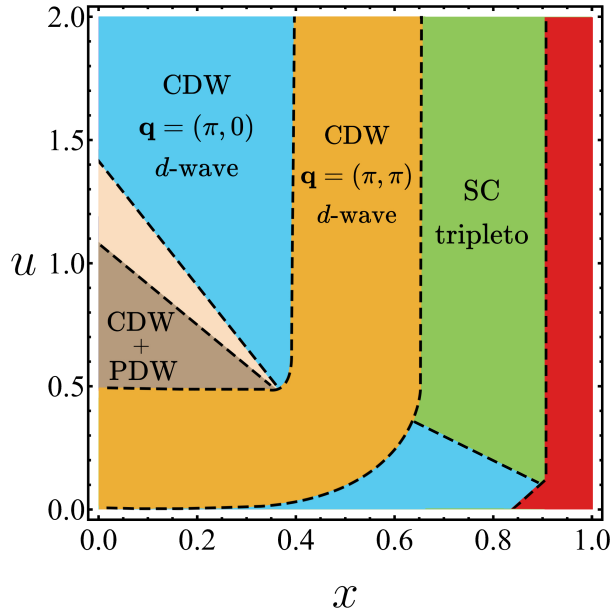
Já no regime acima da linha  $u = 1 - x$ , ou equivalentemente  $\mu - U < -W/2$ , a relação assume a forma

$$\tilde{\mu} = \frac{1}{2} - x \Rightarrow \tilde{\mu} = 0 \Rightarrow x = \frac{1}{2}, \quad (3.2)$$

o que mostra que a dopagem  $x = 1/2$  também corresponde ao caso em que o potencial químico é nulo. Esse ponto é crucial, pois exatamente em  $\mu = 0$  a superfície de Fermi apresenta *nesting* perfeito, como mostrado na seção 1.3.6. Em outras palavras, diferentes pontos da superfície de Fermi podem ser conectados por um mesmo vetor de onda  $\mathbf{q}$ , favorecendo instabilidades no canal de ordenamento de carga. Isso explica por que, nessas linhas, a fase CDW com vetor  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  é energeticamente favorecida.

É válido notar que essas mudanças de dopagem refletem a transição entre a região em que ainda pode ocorrer dupla ocupação e aquela em que a dupla ocupação deixa de ser possível. Esse ponto é relevante, pois, por exemplo, no caso de banda semicheia ( $x = 0$ ), quando  $U > W$ , a condição  $\mu - U < -W/2$  implica que a região  $\Omega_2$  está fora da banda. Em termos físicos, isso significa que a interação é tão forte que a presença de dois elétrons no mesmo estado torna-se energeticamente proibitiva, eliminando a possibilidade de dupla ocupação. Em geral, essa característica é típica de modelos com fortes interações. Como será mostrado mais adiante, esse comportamento se manifesta de forma clara na evolução das fases do modelo de HK.

Por fim, alguns pontos merecem destaque adicional. A fase CDW com simetria  $d$ -wave só se torna relevante para  $V \gtrsim 0,15$ ; abaixo desse valor, sua dominância sobre a supercondutividade



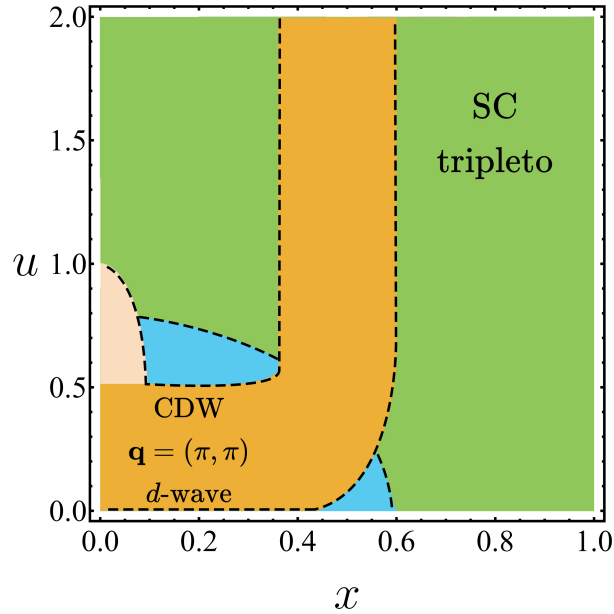
**Figura 8** – Diagrama de fases das tendências de ordenamento competidoras que emergem no modelo de HK 2D com  $V_p = V_c = V = 0,65$ , sem campo magnético ( $B = 0$ ) e sem deformação ( $\delta = 0$ ). O rótulo ‘CDW + PDW’ significa que tanto CDW quanto PDW em  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  com simetria  $s$ -wave são encontrados dentro desta região. A cor bege denota uma região onde aparece uma CDW em  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  com simetria  $s$ -wave (com um PDW subdominante) no modelo. A parte vermelha denota SC do tipo singleto  $s$ -wave. As linhas tracejadas são apenas um guia visual.

permanece bastante restrita. Além disso, para  $u > 1$  e  $x = 0$ , o sistema entra em uma fase isolante de Mott. Essa característica é fundamental, pois a presença de um isolante de Mott no modelo de HK sugere uma correspondência qualitativa com a física dos cupratos e de outros sistemas fortemente correlacionados, onde a transição de Mott desempenha papel central no surgimento de fases eletrônicas não-convencionais.

### 3.1.1 Efeito do campo magnético nas diferentes fases eletrônicas

Inicialmente, é instrutivo analisar o efeito da aplicação de um campo magnético sobre cada uma das fases estudadas. O caso mais simples é o do supercondutor do tipo singleto (com simetria  $s$ -wave ou  $d$ -wave), que nunca é favorecido pela presença de um campo magnético finito  $B$ . De maneira análoga, a fase singleto PDW também não é favorecida - ou, no máximo, é muito fracamente favorecida - pela aplicação de um campo magnético externo.

Em contraste, as fases supercondutoras do tipo spin-triplete e CDW exibem um comportamento mais interessante, pois passam a competir entre si dependendo do regime considerado. Para potenciais de interação pequenos ( $V \rightarrow 0$ ), a fase supercondutora tripleto domina o diagrama de fases. Entretanto, para valores intermediários ( $V_a \sim 0,4$ ), a fase CDW torna-se relevante e passa a competir diretamente com essa fase SC do tipo tripleto, como ilustrado no



**Figura 9** – Diagrama de fases das ordens concorrentes no modelo HK 2D para  $B = 0,05$ ,  $V = 0,4$  e  $\delta = 0$ . As regiões em azul claro correspondem à fase CDW  $d$ -wave com  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , e a cor bege denota a CDW  $s$ -wave com  $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ . As linhas tracejadas são apenas um guia visual.

diagrama de fases da Figura 9.

É importante destacar que esse resultado se mantém apenas para campos magnéticos moderados. À medida que  $B$  aumenta, torna-se necessário um potencial de interação mais intenso para que a fase CDW ocupe uma fração significativa do diagrama. Em regimes de campo elevado, a fase SC tripleto prevalece em praticamente todo o diagrama de fases. Além disso, para um campo magnético fixo (tipicamente até  $B/W \sim 0,1$ ), o aumento do potencial  $V$  expande a região CDW, enquanto a redução de  $V$  reforça a dominância da fase SC tripleto.

Outro ponto relevante é que, devido às flutuações ferromagnéticas intrínsecas ao modelo, mesmo um campo muito pequeno ( $B \sim 10^{-3}$ ) já é suficiente para que a fase supercondutora tripleto se estabeleça em grande parte do diagrama, sobretudo nas proximidades do isolante de Mott. Esse efeito está diretamente associado às intensas flutuações ferromagnéticas que emergem nesse regime e que atuam como mediadoras do pareamento de Cooper no canal tripleto. Essa forte flutuação pode ser observada na Figura 12. Esse resultado será discutido em maior detalhe em seções posteriores.

Um efeito adicional do campo magnético é o deslocamento da posição da região CDW no diagrama de fases. Comparando a Figura 8 com a Figura 9, observa-se que a região em que a CDW é favorecida passa a ocorrer em dopagens ligeiramente maiores. Esse deslocamento decorre do fato de que, quando a condição  $\tilde{B} + \tilde{\mu} = 0$  é satisfeita, uma das superfícies de Fermi divididas por spin apresenta *nesting* perfeito. Assim, enquanto anteriormente o *nesting* ocorria para  $\tilde{\mu} = 0$ , a presença do campo magnético introduz um termo adicional que precisa ser

compensado, produzindo o deslocamento característico.

Além disso, é importante notar que o vetor de onda favorecido pelo *nesting*,  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , é rigorosamente válido apenas quando as condições  $\mu = 0$  ou  $\mu = U/2$  são exatamente satisfeitas. Nas proximidades dessas regiões, contudo, ainda persiste um *nesting* aproximado da superfície de Fermi. Isso pode ser observado na Figura 9.

De forma geral, conclui-se que as fases supercondutoras singlete e PDW são sistematicamente suprimidas pela presença de um campo magnético externo. Em contrapartida, as fases SC tripleto são favorecidas, sobretudo nas proximidades do regime isolante de Mott, onde a supercondutividade passa a dominar sobre a fase PDW. Já a ordem CDW apresenta uma resposta mais sutil: embora seja levemente reforçada para  $x > 0,5$ , o principal efeito do campo magnético consiste em deslocar a região onde já era energeticamente favorecida.

### 3.1.2 Efeitos da deformação uniaxial sobre as fases do sistema

Ao se considerar os efeitos da deformação uniaxial, diversos fenômenos interessantes emergem. Na seção anterior, foi mostrado que as correlações SC se fortalecem sempre que as correlações CDW enfraquecem e vice-versa, evidenciando a competição entre ambas. Sabe-se, contudo, que a aplicação da deformação  $\delta$  reduz as tendências de ordenamento de carga, uma vez que o *nesting* da superfície de Fermi é gradualmente destruído.

Os resultados correspondentes são apresentados na Figura 10. A partir desse diagrama, observa-se que a fase SC tripleto, para dopagens intermediárias a altas, permanece relativamente robusta em todo o espaço de parâmetros. Por outro lado, a fase SC *d*-wave singlete desloca-se em direção às bordas do diagrama, e essa tendência se intensifica com o aumento da deformação uniaxial. Para valores elevados ( $\delta > 0,15$ ), essa fase desaparece completamente, restando apenas a supercondutividade tripleto.

O comportamento da fase CDW segue a tendência esperada. Embora algumas regiões onde a CDW domina ainda permaneçam qualitativamente semelhantes às anteriores, a fase torna-se visivelmente mais frágil, desaparecendo quase inteiramente já para valores moderados de  $V$ . Sua persistência em certos trechos específicos do diagrama decorre do fato de que a CDW com vetor  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  é intrinsecamente mais robusta nessas regiões. Assim, mesmo quando a deformação atua de forma a suprimi-la, algumas linhas remanescentes ainda resistem. Consequentemente, mantendo  $V$  fixo e aumentando  $\delta$ , a fase CDW desaparece gradualmente do diagrama de fases.

Um resultado particularmente notável ocorre para o PDW com vetor  $\mathbf{q} = (\pi, 0)$  (chamado também de unidirecional) quando se aplica compressão ao sistema. Até então, essa fase se mantinha bastante frágil; entretanto, sob deformação, o PDW com vetor  $\mathbf{q} = (\pi, 0)$  passa a ser fortemente favorecido em grande parte do diagrama de fases. De fato, ao se aumentar a deformação até um valor crítico  $\delta_c = W/8$ , emerge um fenômeno interessante: a fase PDW, que

anteriormente surgia apenas como subdominante, torna-se exatamente degenerada com a fase SC e passa a ocupar quase todo o diagrama. Esse efeito está indicado na Figura 10 pelo rótulo ‘SC + PDW’.

Esse efeito induzido pela deformação pode ser compreendido a partir da análise da estrutura de energias na relação de dispersão. O vetor de ordenamento favorecido é exatamente  $\mathbf{q} = (\pi, 0)$  e, na ausência de termos magnéticos, as expressões para as energias assumem a forma:

$$E_{\mathbf{k}}(0, 0) = -\frac{W}{4}(\cos k_x + \cos k_y) + 2\delta(\cos k_x - \cos k_y),$$

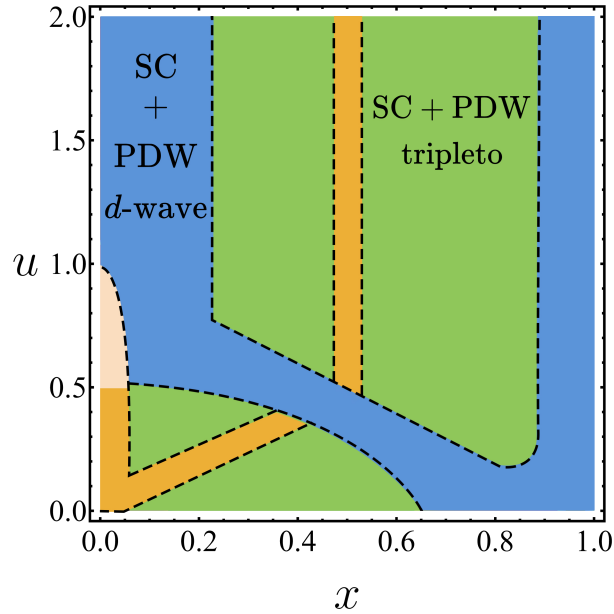
$$E_{\mathbf{k}}(\pi, 0) = \frac{W}{4}(\cos k_x - \cos k_y) - 2\delta(\cos k_x + \cos k_y).$$

Verifica-se diretamente que, para  $\delta = W/8$ , as energias associadas às fases PDW e SC tornam-se idênticas, caracterizando uma sinergia perfeita entre elas. Essa equivalência energética justifica o surgimento abrupto e a posterior dominância da fase PDW nesse regime crítico de deformação, sugerindo que a supercondutividade pode ser interpretada como um limite máximo do estado PDW. Esse resultado é especialmente relevante, pois mostra que, mesmo para  $V \rightarrow 0$ , o PDW emerge em uma fração considerável do diagrama. Como discutido na Ref. [92], na ausência de deformação uniaxial seria necessário um potencial finito relativamente alto para que essa fase aparecesse. Portanto, a anisotropia do *hopping* surge como um mecanismo natural para favorecer o PDW unidirecional.

Ao se focar especificamente na interconexão entre a fase PDW singleto e a CDW, verifica-se que a hierarquia entre essas duas fases torna-se notavelmente distinta dos casos discutidos anteriormente. A aplicação de deformação altera o equilíbrio entre essas ordens entrelaçadas, fazendo com que o PDW passe a constituir a ordem primária em interações mais fortes, acompanhado do surgimento subsequente de uma CDW unidirecional como fase secundária. Contudo, ambas permanecem associadas à mesma simetria e compartilham a mesma modulação descrita pelo vetor de onda  $\mathbf{q}$ . A única exceção ocorre no regime de interação fraca a intermediária e dopagem intermediária, no qual a CDW bidirecional com vetor  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  continua estabilizada em regiões do diagrama de fases, sustentada pelo *nesting* aproximado da superfície de Fermi do modelo HK 2D.

Por fim, nota-se que a deformação uniaxial atua de forma contrastante sobre as diferentes ordens. O CDW bidirecional é desfavorecido em decorrência da quebra do *nesting*, enquanto o PDW unidirecional é fortemente favorecido. O CDW unidirecional, por sua vez, tende a surgir nas mesmas regiões em que o SC *d-wave* é favorecido, aparecendo como fase subdominante em relação ao PDW. Já o PDW bidirecional é estabilizado apenas nas proximidades do isolante de Mott, sem, no entanto, se tornar a fase dominante. Para valores elevados de deformação, a fase predominante passa a ser o supercondutor do tipo tripleto.

Do ponto de vista experimental, ainda é bastante desafiador determinar se a onda de densidade de pares unidirecional pode ser favorecida por efeitos de tensão aplicada (*strain*) no contexto dos cupratos supercondutores. Até o momento, as evidências experimentais de um



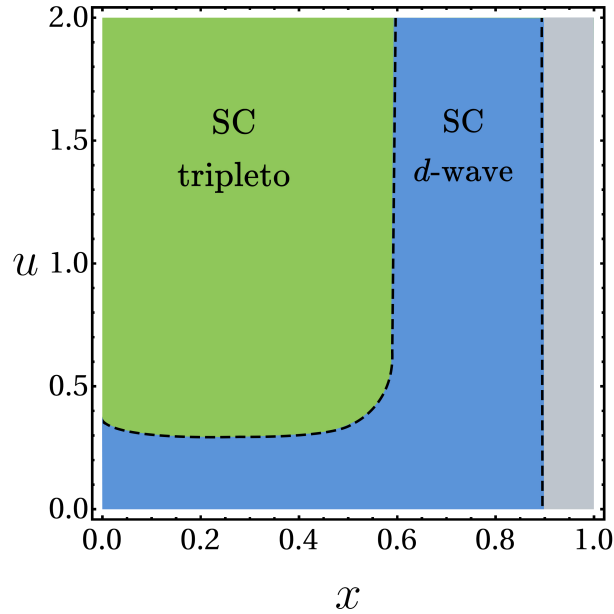
**Figura 10** – Diagrama de fases do modelo HK 2D para a anisotropia de deformação dada por  $\delta_c = W/8$  e interação  $V = 0,15$ . Ambas as ordens de PDW representadas acima são unidirecionais e possuem vetor de ordenamento próximo de  $\mathbf{q} = (\pi, 0)$ . A região amarela denota a fase CDW  $d$ -wave próxima de  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , enquanto a cor bege corresponde à CDW  $s$ -wave próxima de  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . As linhas tracejadas são apenas um guia visual.

estado PDW nesses compostos têm sido limitadas a técnicas de microscopia de tunelamento por varredura sensível à superfície (STM), como discutido, p. ex., na Ref. [99]. No entanto, experimentos de ressonância magnética nuclear (RMN) surgem como um caminho promissor para investigar a possível presença do PDW no interior dos compostos sob deformação uniaxial e medidas com esse objetivo estão atualmente em andamento.

### 3.1.3 Efeitos do *hopping* para segundos vizinhos

O principal efeito da introdução do termo de *hopping* para segundos vizinhos, conforme ilustrado na Figura 11, é a supressão das linhas que anteriormente favoreciam a fase CDW. Por exemplo, para interações em torno de  $V_a \sim 0,15$ , a fase CDW tipicamente surge - ainda que de forma fraca - ao longo das linhas  $u = x$  e  $x = 1/2$ , como mostrado na Figura 10. Esse resultado indica que a inclusão do termo  $t'$  enfraquece a fase CDW, em concordância com a intuição física: esse novo parâmetro destrói o *nesting* da superfície de Fermi que originalmente favorecia o ordenamento de carga. Isso não implica que a fase CDW desapareça por completo, mas sim que valores maiores de interação passam a ser necessários para que ela ocupe uma região significativa do diagrama de fases.

Outra modificação importante ocorre nas regiões supercondutoras singleto e tripleto. A região correspondente à supercondutividade  $d$ -wave é deslocada para valores mais altos de

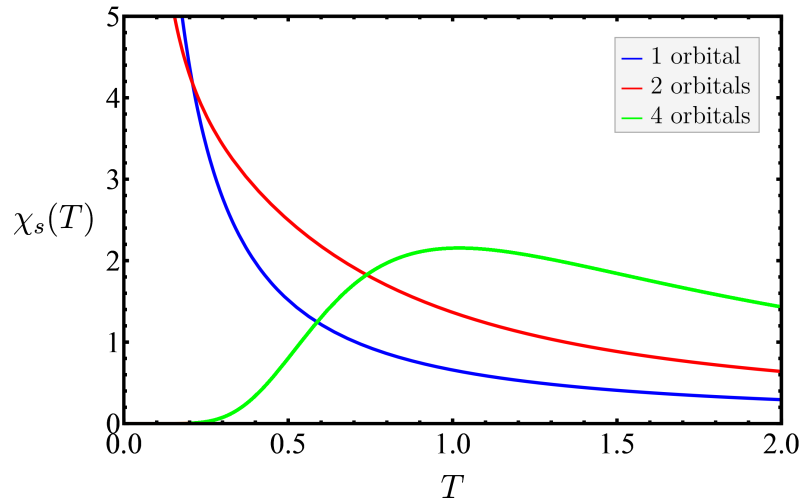


**Figura 11** – Diagrama de fases do modelo HK 2D para  $t' = 0,45t$  e  $V = 0,15$  (com  $\delta = 0$  e  $B = 0$ ). A região em cinza corresponde à fase metálica NFL. As linhas tracejadas são apenas um guia visual.

dopagem, embora a estrutura global das fases permaneça qualitativamente semelhante. Um detalhe relevante é que, nas proximidades de  $x \sim 1$ , onde anteriormente aparecia uma fase SC *s-wave*, não se encontra agora nenhuma solução estável para qualquer fase com  $V_a < 0,67$ . Isso é evidenciado pela faixa cinza próxima a  $x = 1$  no diagrama, que representa a fase metálica NFL. Tal comportamento decorre do fato de que, nessa região, as fases já eram intrinsecamente frágeis, de modo que a inclusão de  $t'$  acaba por suprimi-las completamente.

Sendo assim, os principais aprendizados resultantes da introdução do *hopping* para segundos vizinhos podem ser resumidos em dois pontos. Primeiro, confirma-se que a fase CDW depende fortemente do *nesting* da superfície de Fermi, como já era esperado. Segundo, e mais importante, verifica-se que as regiões onde a CDW domina tendem a ser intrinsecamente robustas, mesmo na ausência de perturbações externas. Nessas regiões, a fase CDW sofre apenas pequenas alterações, como deslocamentos, quando submetida a um campo magnético, por exemplo. Em contraste, quando a CDW é fraca, nenhuma perturbação externa é capaz de torná-la dominante. Assim, as regiões em que a CDW prevalece são precisamente aquelas em que já eram energeticamente favorecidas.

Esse comportamento contrasta fortemente com o da fase supercondutora tripleto, que em geral é favorecida por perturbações externas — especialmente na presença de um campo magnético. Como discutido ao longo deste capítulo, a fase SC tripleto tende a se estabilizar nas proximidades do isolante de Mott, seja pela introdução de um campo magnético (mesmo que pequeno), pela aplicação de deformação uniaxial (que, para certo valor, elimina todas as demais fases), ou ainda pela inclusão de  $t'$ .



**Figura 12** – Susceptibilidade ferromagnética (em unidades de  $\mu_B$ ) para  $x = 0,1$  e  $u = 1,5$  com diferentes números de orbitais ( $n$ ) incluídos no modelo OHK 2D. Fica claro que, acima de quatro orbitais ( $n \geq 4$ ), a susceptibilidade ferromagnética do modelo é suprimida em baixas temperaturas.

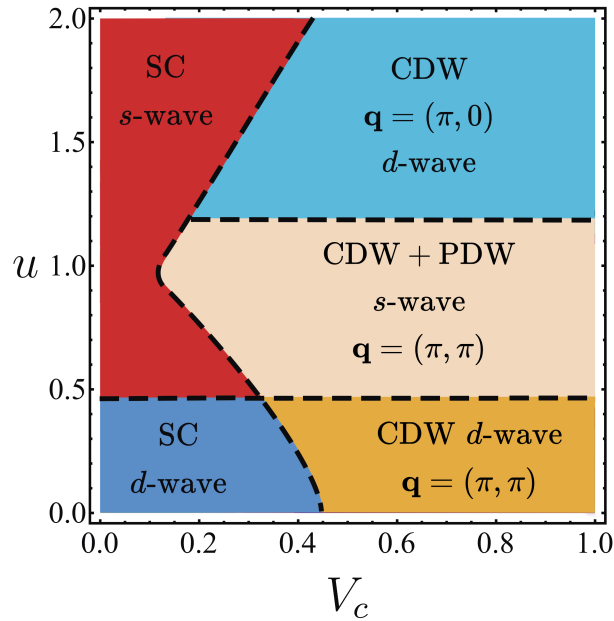
Espera-se que o predomínio da fase supercondutora tripleto para  $u$  finito seja, em grande parte, um artefato do modelo de HK 2D, o qual pode ser corrigido ao se considerar generalizações desse mesmo modelo mais realistas. Nesse contexto, diversos trabalhos recentes [26–29] têm proposto a extensão do modelo de HK bidimensional para incluir  $n \neq 1$  orbitais, formulando o chamado modelo de HK orbital, discutido na seção 1.4. Argumenta-se que, nessa versão estendida, o modelo de HK possa capturar a essência da física do paradigmático modelo de Hubbard 2D [30].

### 3.1.4 Extensão orbital para susceptibilidade ferromagnética

Como discutido na seção anterior, o comportamento obtido para a fase supercondutora tripleto, em que esta se estabiliza próximo ao isolante de Mott, não corresponde ao comportamento esperado para o modelo de Hubbard 2D com interação local  $U$  finita. Isso ocorre porque, fisicamente, o comportamento esperado nesse regime são flutuações antiferromagnéticas. No entanto, no modelo de HK existem fortes flutuações ferromagnéticas (observe a Figura 12) que, em geral, estão associadas à formação de uma fase SC do tipo tripleto. Essa característica pode estar diretamente relacionada ao comportamento inesperado observado no modelo de HK.

Contudo, ao realizarmos a extensão do modelo para incluir múltiplos orbitais discutida em detalhes na Seção 1.4, espera-se que o comportamento passe a refletir de forma mais realista a física do modelo de Hubbard 2D. Isso decorre do fato de que, conforme apontado em diversos trabalhos recentes [26, 27, 30], a inclusão de graus de liberdade orbitais faz com que o modelo de HK se aproxime do modelo de Hubbard em certos regimes.

De fato, a Figura 12 evidencia que, ao adicionar orbitais, em particular para  $n \geq 4$ , as



**Figura 13** – Competição entre diferentes suscetibilidades como função do potencial para o caso de carga  $V_c$  e interação de Mott  $u$ , com  $V_p = 0,6$ ,  $x = 0,1$ ,  $B = 0$  e  $\delta = 0$ . As linhas tracejadas são apenas um guia visual.

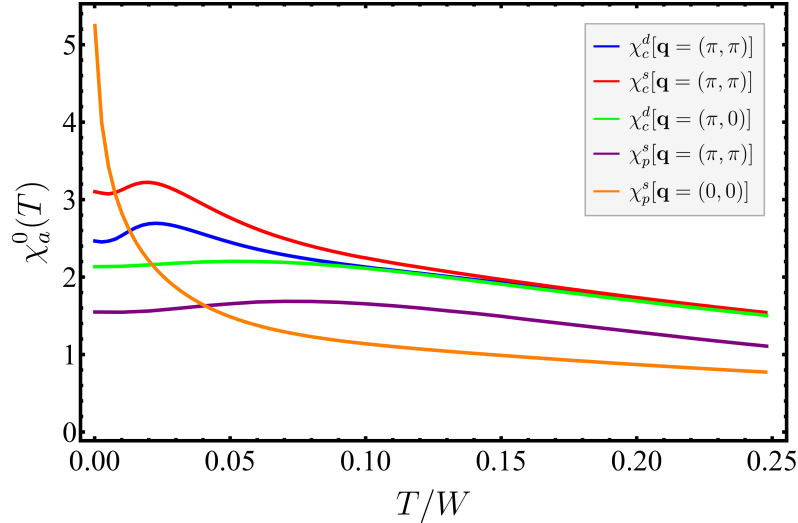
flutuações ferromagnéticas começam a diminuir, tendendo claramente a zero quando  $T \rightarrow 0$ . Esse comportamento já aponta para uma física mais realista no regime de fortes interações ( $u > 1$ ). O resultado exibido na Figura 12 está em acordo com o trabalho [30], no qual os autores demonstram que, ao adicionar orbitais, as flutuações ferromagnéticas de fato diminuem, permitindo que as flutuações antiferromagnéticas passem a dominar, como é esperado no modelo de Hubbard e em sistemas fortemente correlacionados mais realísticos.

### 3.1.5 Considerações sobre a competição entre as fases emergentes no modelo de HK

Todos os resultados abordados até aqui contribuem para a compreensão de como a competição entre as diferentes fases no modelo de Hatsugai-Kohmoto se comportam quando o sistema é submetido a efeitos externos, seja uma aplicação de tensão externa ou um campo magnético. Como pôde ser observado ao longo deste capítulo, os diagramas de fases são bastante ricos, especialmente ao se adicionar um potencial finito  $V$  ao modelo.

No entanto, a importância do estudo da competição entre essas fases vai muito além de simplesmente entender seu comportamento dentro do modelo. Essa análise também pode fornecer insights relevantes sobre fenômenos presentes em materiais reais. Isso se evidencia principalmente pelo fato de que um dos resultados obtidos foi a competição entre CDW e PDW, um comportamento que é esperado nos cupratos supercondutores [13].

Além de recuperar um comportamento característico desses materiais, os resultados teóri-



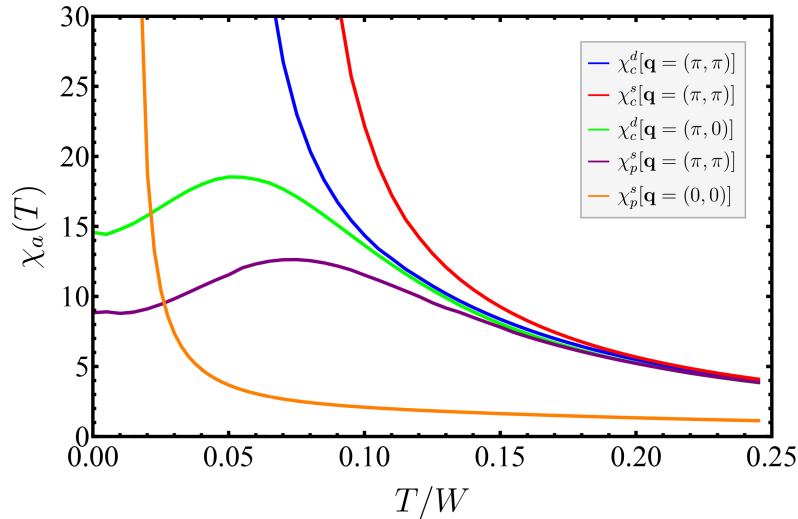
**Figura 14** – Suscetibilidade exata do modelo de HK com  $u = 0,6$ ,  $x = 0,1$  e  $V = 0$ ,  $\chi_a^0$ , como função da temperatura. O subíndice  $a$  representa os diferentes canais de susceptibilidade (de pareamento ou de carga). Note que, na legenda da figura, o sobrescrito indica se o fator de forma é do tipo  $s$ - ou  $d$ -wave.

cos aqui obtidos podem ser um caminho para compreender melhor a relação entre essas duas fases. Isso ocorre porque existe uma grande dificuldade experimental em mensurar diretamente o ordenamento de pares [16–19]. Essa dificuldade decorre do fato de que o sinal associado ao PDW costuma ser muito menor do que, por exemplo, o sinal típico do CDW [20].

Por outro lado, o CDW é uma fase consideravelmente mais simples de ser detectada experimentalmente, já que produz modulações de densidade diretamente observáveis por técnicas de espalhamento e microscopia. Dessa forma, ao demonstrar que em um determinado sistema existe uma relação de coexistência entre CDW e PDW, torna-se possível inferir a presença da fase PDW a partir da observação do CDW. Essa possibilidade pode facilitar de maneira significativa o estudo experimental do PDW, permitindo acessar propriedades dessa fase que, de outra forma, seriam difíceis de detectar. Dessa forma, acredita-se que os resultados obtidos a partir do modelo HK podem fornecer um guia teórico para futuras pesquisas sobre a fase PDW nos cupratos.

Vale ressaltar que, embora tenha sido feita anteriormente a consideração de que  $V_p = V_c$  nos diagramas apresentados, também é possível realizar uma análise da competição entre fases assumindo valores distintos para o potencial  $V_a$ , como ilustrado na Figura 13. Para obter um entendimento mais claro desse comportamento, considere a Figura 14, que apresenta a susceptibilidade  $\chi_a^0$  como função da temperatura. Aqui, o subíndice  $a$  indica os diferentes canais de susceptibilidade possíveis, isto é, de pareamento ou de carga. Essa figura corresponde ao caso em que  $u = 0,6$ ,  $x = 0,1$  e  $V_p = V_c = 0$ .

Observa-se que, a partir desse gráfico, é possível identificar qual fase eletrônica apresenta a maior temperatura crítica, bem como o valor do potencial necessário para que isso ocorra. Para isso, basta analisar a condição  $\chi_a^0 = 1/V_a$  e verificar a temperatura na qual essa igualdade é satisfeita. Por exemplo, ao fixar  $V_c = V_p = 0,4$ , tem-se a condição de que cada uma das suscetibi-



**Figura 15** – Suscetibilidade exata  $\chi_a$  do modelo de HK para  $u = 0,6$ ,  $x = 0,1$  e  $V = 0,4$ , com o subíndice  $a$  representando os diferentes canais de susceptibilidade (de pareamento ou de carga), como função da temperatura. Note que na legenda da figura o sobrescrito representa se o fator de forma é do tipo  $s$ - ou  $d$ -wave.

lidades satisfaça  $\chi_a^0 = 2,5$ . Assim, o procedimento para identificar visualmente qual fase possui a maior temperatura crítica consiste em verificar em qual temperatura cada susceptibilidade atinge essa condição e comparar qual delas ocorre à temperatura mais elevada. Caso a susceptibilidade não atinja esse valor em nenhuma temperatura, isso indica que não há divergência para aquele potencial.

Esse comportamento é mostrado na Figura 15. Note que tanto o PDW bidirecional quanto o CDW unidirecional não atingem valores iguais a 2,5, como pode ser observado na Figura 14, de modo que não ocorre divergência para essas duas fases para esse potencial e nessa configuração do sistema. Esse resultado, no caso do PDW, está de acordo com o obtido na Ref. [92], onde é mostrado que, para o PDW emergir e se sobressair ao estado supercondutor  $s$ -wave, é necessário um potencial finito  $V = 0,67$ .

## 3.2 Propriedades da informação quântica de Fisher no modelo de HK

Recentemente, observa-se um grande interesse em aplicações da Informação de Fisher Quântica (QFI) na física da matéria condensada, em particular no estudo de sistemas fortemente correlacionados [77–81]. Como discutido na Seção 2, essa grandeza possui grande relevância, pois não apenas quantifica a informação acessível sobre um parâmetro físico, como também pode fornecer indicações sobre a presença de emaranhamento multipartido no sistema.

Em particular, o comportamento de  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  pode revelar se as correlações quânticas presentes, por exemplo, em uma fase isolante de Mott ou em um líquido de não-Fermi exibidos

pelo modelo de HK, envolvem ou não emaranhamento multipartido. De modo geral, valores elevados da razão  $F_Q/N$  (que, em certos casos, pode inclusive divergir formalmente) sugerem a presença de emaranhamento multipartido no sistema. Por outro lado, valores pequenos de  $F_Q/N$  indicam que o emaranhamento está restrito a poucas partículas, caracterizando um emaranhamento de curto alcance.

Dessa forma, como ficará claro a seguir, mesmo quando o sistema não exhibe emaranhamento multipartido genuíno, a análise de  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  ainda fornece informações importantes sobre a natureza das correlações quânticas presentes no modelo.

### 3.2.1 Análise do vetor momento para $F_Q(\mathbf{q}, T)$

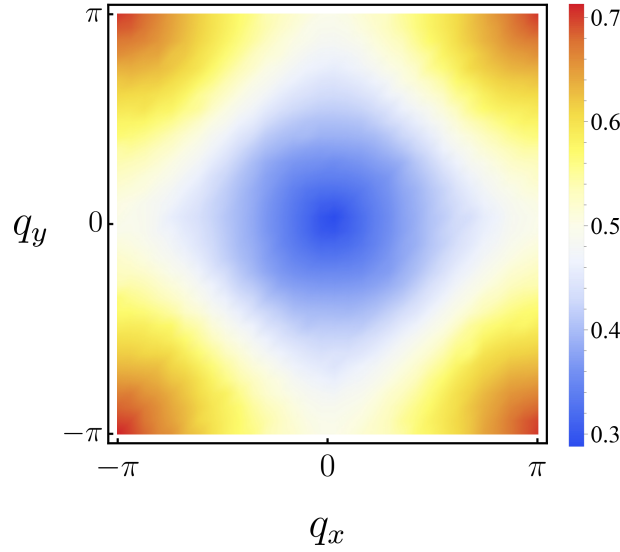
A função  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  depende também do vetor de onda  $\mathbf{q}$ , e, de modo geral, existem trabalhos na literatura que mostram que um dos vetores mais relevantes para verificar a aparição de emaranhamento multipartido no modelo de Hubbard em forte acoplamento é  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  [100, 101]. No entanto, essa escolha não é universal, podendo variar de acordo com o modelo e com o regime físico considerado. Dessa forma, é importante identificar qual vetor de momento maximiza o  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  no modelo de Hatsugai–Kohmoto. A Figura 16 mostra um diagrama para diferentes valores de  $q_x$  e  $q_y$ , ambos variando no intervalo  $[-\pi, \pi]$ , no regime de acoplamento intermediário para banda semicheia.

Observa-se claramente que os maiores valores de  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  ocorrem para o vetor  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , em concordância com o comportamento esperado a partir de resultados prévios na literatura. Esse padrão também persiste em toda a região de acoplamento intermediário, incluindo o regime dopado, como é mostrado na Figura B.1 do Apêndice B.

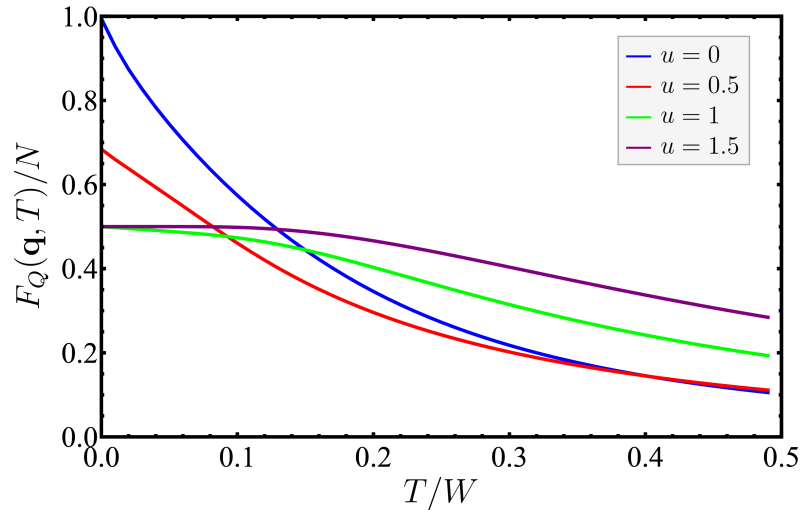
No entanto, é importante destacar que, no regime de forte acoplamento, esse comportamento muda. Como será discutido adiante, em baixas temperaturas — que são de maior interesse aqui, pois correspondem à região em que o emaranhamento atinge os valores mais altos — o valor de  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  torna-se praticamente constante. Esse comportamento é observado para todos os valores de  $q_x$  e  $q_y$ , de modo que, independentemente do vetor de onda  $\mathbf{q}$  escolhido, obtém-se  $F_Q/N = 0,5$ .

### 3.2.2 QFI como função da temperatura

Tendo identificado que o vetor mais favorável para a QFI é  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ , vale a pena explorar suas propriedades em função da temperatura, já que se espera que o emaranhamento seja mais intenso para valores baixos de  $T$ . Observando a Figura 17, nota-se que, em banda semicheia, o valor máximo de  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  ocorre para  $u = 0$ . No entanto, o fato de  $F_Q/N = 1$  indica que o sistema apresenta emaranhamento restrito a uma única partícula, ou seja, um emaranhamento de curto alcance.



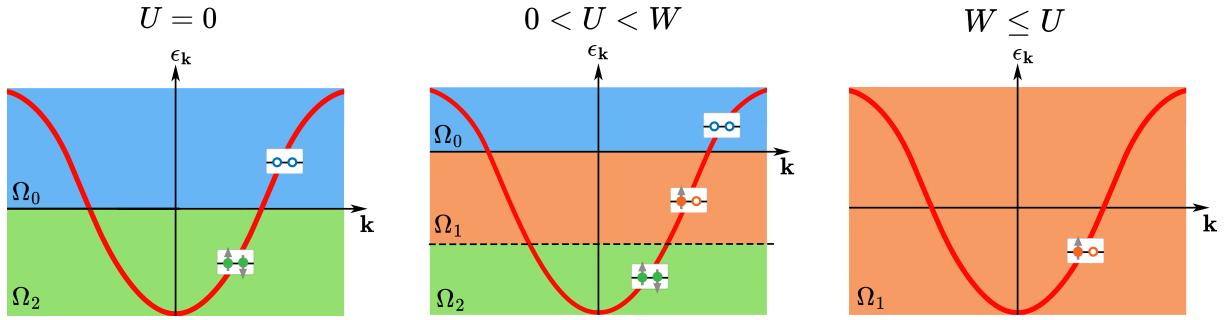
**Figura 16** – A QFI  $F_Q(\mathbf{q}, T)/N$  para diferentes valores do vetor  $\mathbf{q}$ , com parâmetros  $u = 0,5$ ,  $x = 0$  e  $T \rightarrow 0$ . Na figura, cores mais quentes indicam valores mais elevados de  $F_Q(\mathbf{q}, T)$ , enquanto tons mais frios correspondem a valores menores, evidenciando que o vetor mais favorável é  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ .



**Figura 17** – A QFI  $F_Q(\mathbf{q}, T)/N$  em função da temperatura para diferentes valores de  $u$  em banda semicheia, onde  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ . Note a diferença de comportamento para acoplamentos fortes (i.e.,  $u \geq 1$ ).

À medida que  $u$  aumenta, observa-se, em um certo sentido inesperadamente, uma diminuição contínua de  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  até que, em  $U = W$ , a QFI atinge seu valor mínimo,  $F_Q/N = 1/2$ . Também é possível identificar uma mudança de comportamento na região de forte acoplamento: para baixas temperaturas,  $F_Q(\mathbf{q}, T)/N$  forma um platô, mantendo-se constante em  $1/2$ . Esse comportamento está de acordo com o previsto na Ref. [84] e reflete o fato de que, nesse regime, as correlações quânticas tornam-se essencialmente locais e não se ampliam com a redução da temperatura.

Tal comportamento é consistente com o esperado para sistemas que não apresentam emaranhamento multipartido, conforme discutido na Seção 2. Para compreender melhor esse



**Figura 18** – Figura esquemática da variação da ocupação da banda conforme aumenta a interação  $u$  em banda semicheia. Embora todos os cenários correspondam à meia ocupação, a organização dos elétrons difere significativamente, o que determina o comportamento da QFI no modelo.

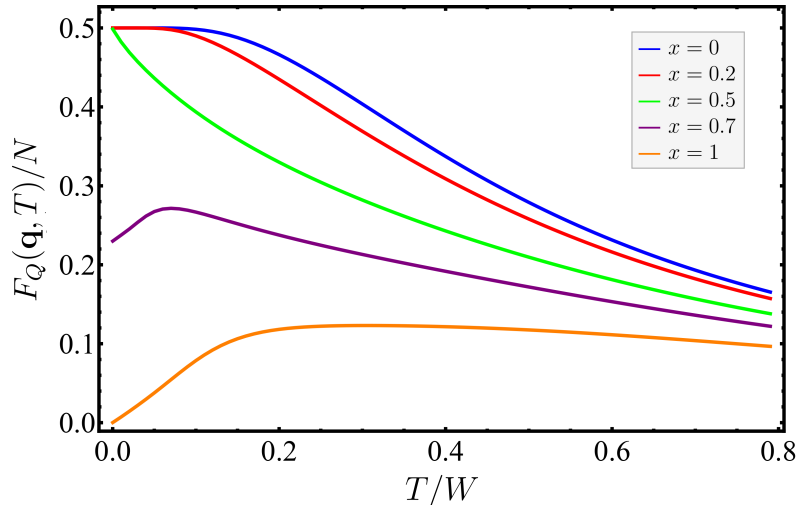
resultado, considere a Figura 18. No modelo de HK, a banda se divide em três regiões. Em banda semicheia, tem-se  $\mu = U/2$  em baixas temperaturas, de modo que  $\mu - U = -U/2$ . Quando  $U = 0$ , essas condições colapsam, restando apenas duas regiões: a duplamente ocupada e a vazia. Com o aumento da interação  $U$ , a região  $\Omega_1$  (unicamente ocupada) começa a se expandir. Nesse processo, parte dos elétrons que antes ocupavam o mesmo sítio passam a ocupar estados isolados, o que reduz gradualmente o emaranhamento do sistema, em concordância com os resultados apresentados da QFI.

No regime de forte acoplamento, a interação torna-se suficientemente intensa para que a repulsão coulombiana force os elétrons a maximizar sua distância mútua. Nesse cenário, o estado predominante é  $\Omega_1$ , com um elétron por sítio. Como consequência, o espaço de fase acessível é restringido e o emaranhamento tende ao valor de  $F_Q/N = 1/2$ . Ressalta-se que essa tendência em baixas temperaturas não é exclusiva do isolante de Mott, ocorrendo também na região de forte acoplamento enquanto a região  $\Omega_1$  predomina sobre  $\Omega_0$  (isto é, para dopagem  $x < 0,5$ ). Esse fato é ilustrado na Figura 19, que apresenta a função  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  para diferentes valores de dopagem em função da temperatura. Observa-se que, quanto maior a dopagem, mais a QFI é suprimida, de modo que em  $x = 1$ ,  $F_Q(\mathbf{q}, T)$  vai a zero quando  $T \rightarrow 0$ .

### 3.2.3 QFI como função de $\omega_g$

Embora o modelo de HK não revele um genuíno emaranhamento multipartido, conforme discutido na Seção 2, a dependência de  $F_Q$  com a temperatura não é a única fonte de informação relevante sobre o sistema. A análise de  $F_Q$  em função do parâmetro  $\omega_g \propto U - W$  também desempenha um papel importante. Ao longo desta seção, será adotada a forma normalizada desse parâmetro, definida como  $\omega_g = (U - W)/W$ .

Um primeiro aspecto interessante pode ser observado na Figura 20, que evidencia uma mudança abrupta em  $F_Q(\omega_g)$  na transição do regime de acoplamento fraco para o forte. A figura também corrobora o comportamento discutido anteriormente: o valor máximo da QFI ocorre



**Figura 19** – A QFI  $F_Q(\mathbf{q}, T)/N$  como função da temperatura para diferentes valores de dopagem e  $u = 3/2$ , onde  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ .

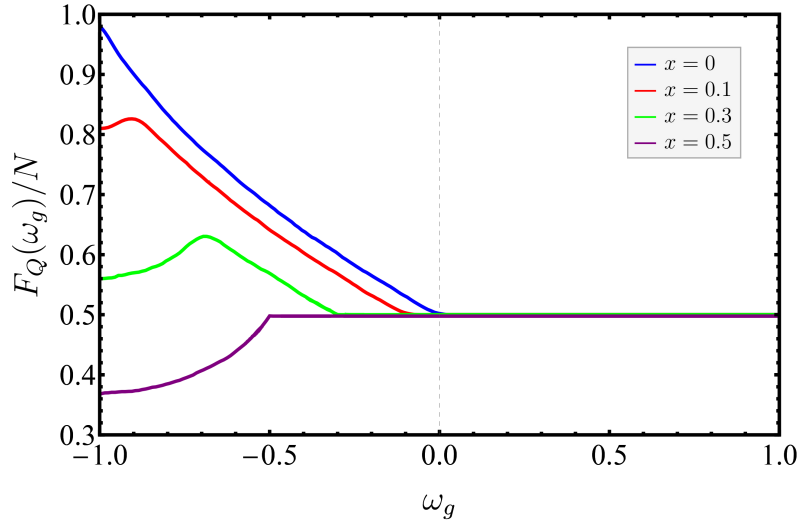
em  $U = 0$  ( $\omega_g = -1$ ), enquanto, no regime de forte acoplamento, a função se estabiliza em um valor constante.

Outro ponto importante, embora menos evidente, é a redução drástica de  $F_Q(\omega_g)$  para dopagens superiores a  $x = 0,5$ . No limite  $x = 1$ , a função torna-se identicamente nula para todos os valores de  $\omega_g$ , conforme ilustrado na Figura B.2 do Apêndice B. Esse comportamento é esperado, pois a dopagem reduz a densidade eletrônica e, conseqüentemente, diminui o emaranhamento. A Figura 19 mostra esse efeito em função da temperatura para diferentes valores de dopagem.

A transição abrupta entre os regimes de acoplamento fraco e forte induz uma descontinuidade na primeira derivada de  $F_Q(\omega_g)$ , como mostrado na Figura 22. Esse fenômeno ocorre sistematicamente para a QFI em função de  $\omega_g$  no limite de baixas temperaturas, pois, ao ingressar no regime de forte acoplamento,  $F_Q(\omega_g)$  tende a se estabilizar em um valor constante. Essa descontinuidade na derivada pode ser interpretada como uma assinatura do regime de forte acoplamento. Em banda semicheia, em particular, ela constitui uma possível assinatura da transição de Mott no modelo de Hatsugai–Kohmoto.

É importante destacar que o uso das derivadas da QFI para investigar transições de fase já encontra precedentes na literatura. Em particular, estudos recentes mostram que, no modelo de Kitaev em uma rede hexagonal, as derivadas de  $F_Q(\omega_g)$  sinalizam uma transição de fase topológica, tornando a QFI uma ferramenta útil nesse tipo de análise, mesmo quando o modelo em questão não apresenta emaranhamento multipartido [85].

Por fim, vale notar que o comportamento observado na Figura 22, embora ilustrado para banda semicheia, estende-se a outros valores de dopagem. O padrão é sempre o mesmo: uma variação contínua da QFI na região de acoplamento intermediário, seguida de uma descontinuidade exatamente no limiar para o regime de forte interação, como exemplificado também na



**Figura 20** – A QFI  $F_Q(\omega_g)/N$  como função de  $\omega_g$  para diferentes valores de dopagem no limite  $T \rightarrow 0$ , e com  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ .

Figura B.4 do Apêndice B.

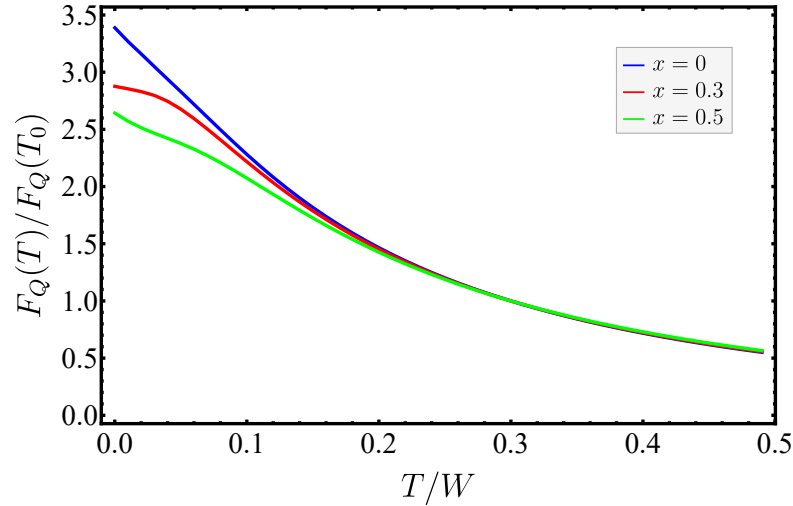
### 3.2.4 QFI normalizada e suas propriedades

Por fim, conforme discutido em um artigo recente (Ref. [84]), a razão  $F_Q(T)/F_Q(T_0)$  em função da temperatura, onde  $T_0$  representa uma temperatura de referência, pode atuar como um indicador útil para classificar um sistema como um líquido de Fermi ou um líquido de não-Fermi. Na Ref. [84], demonstra-se que, se essa quantidade apresentar um comportamento do tipo  $a + bT^2$ , então a fase eletrônica correspondente pode ser caracterizada como um líquido de Fermi.

Como já discutido e demonstrado na Ref. [11], a fase metálica do modelo de HK pode ser caracterizada como um líquido de não-Fermi. Para ser classificado como um líquido de Fermi, o sistema precisaria apresentar quasipartículas bem definidas em baixas energias, algo que não ocorre no modelo de HK, visto que sua função de Green possui dois polos distintos, associados às excitações coletivas dos holons e doublons, já mencionadas anteriormente.

Dessa maneira, observa-se na Figura 21 que o comportamento da razão  $F_Q(T)/F_Q(T_0)$  difere significativamente daquele esperado para um líquido de Fermi, o que é coerente com o caráter de líquido de não-Fermi do modelo. De fato, os resultados obtidos aqui nesta dissertação (tanto para a QFI normalizada em função da temperatura quanto em função de  $\omega_g$ ) são semelhantes aos de uma fase metal anômalo observada experimentalmente na Refs. [84, 102] em um composto do tipo cuprato supercondutor.

Comparando com os resultados de banda semicicheia apresentados na Ref. [84], o comportamento da razão  $F_Q(T)/F_Q(T_0)$  é, de fato, qualitativamente semelhante (veja, por exemplo, a Figura B.3 no Apêndice B). No entanto, ao analisar detalhadamente  $F_Q$  em função de  $\omega_g$ ,

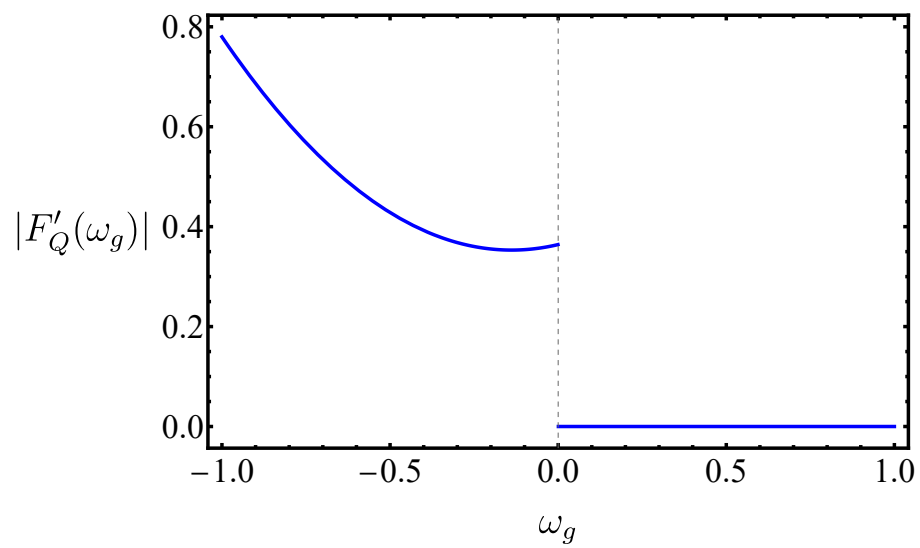


**Figura 21** – Razão  $F_Q(T)/F_Q(T_0)$  em função da temperatura para diferentes valores de dopagem, em que  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  e  $u = 0,5$ . A figura torna evidente que, mesmo com a dopagem, o sistema sempre se comporta como um líquido de não-Fermi.

surgem algumas discrepâncias quantitativas. Em particular, para valores moderados de  $\omega_g$ , o comportamento obtido está em concordância com aquele tipicamente associado a metais anômalos disponíveis na literatura. Contudo, no limite  $\omega_g \rightarrow \infty$ , observa-se uma diferença marcante: enquanto o resultado apresentado na Ref. [84] não possui um limitante superior, o comportamento encontrado neste trabalho tende a saturar em um valor constante, independentemente da temperatura.

A análise da primeira derivada de  $F_Q(\omega_g)$  em relação a  $\omega_g$  expõe também outros comportamentos interessantes. Para essa quantidade, observa-se que, em baixas temperaturas, surge sistematicamente uma descontinuidade na região que separa os regimes de acoplamento fraco e forte (veja a Figura 22, a Figura B.4 no Apêndice B e a Figura 3 no início desta dissertação). Esse resultado é relevante, já que não há consenso na literatura sobre a natureza universal de uma transição de Mott, ou seja, se é uma transição de fase de primeira ordem ou uma transição contínua. Além disso, é ainda tema de debate qual seria o parâmetro de ordem capaz de caracterizar essa transição. Dessa forma, os resultados obtidos neste trabalho para a QFI podem apontar para um caminho na busca desse entendimento.

Portanto, os resultados mencionados acima confirmam que o modelo de Hatsugai–Kohmoto exhibe uma fase metálica do tipo líquido de não-Fermi. Embora não seja ainda possível afirmar, de forma categórica, que o comportamento observado aqui corresponda exatamente ao de um metal anômalo observado experimentalmente, por exemplo, nos cupratos supercondutores [84, 102], os resultados da QFI oferecem um ponto de partida interessante para caracterizar de maneira mais precisa a natureza da fase de líquido de não-Fermi exibida por esse modelo.



**Figura 22** – Módulo da primeira derivada de  $F_Q(\omega_g)$  associada à suscetibilidade de carga em  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  em relação a  $\omega_g$ . O gráfico ilustra o caso de banda semicheia no modelo de HK 2D no limite  $T \rightarrow 0$ .

## 4

## Conclusões e Perspectivas Futuras

Nesta dissertação, foi examinada a competição entre diferentes tendências de ordenamento no modelo de HK 2D, o qual exibe uma fase isolante de Mott em banda semicheia e uma fase metálica NFL sob dopagem, quando submetido a distintas perturbações, incluindo campos magnéticos externos, deformação uniaxial e mudanças na estrutura de bandas (via adição de *hopping* de segundos vizinhos). Por meio de um cálculo analítico exato das susceptibilidades associadas aos parâmetros de ordem correspondentes, foram construídos diagramas de fases detalhados que capturam o surgimento e a competição entre as ordens SC, CDW e PDW no modelo.

Um resultado central dessa análise é que um modelo relativamente simples como o HK 2D pode reproduzir características físicas fundamentais tipicamente associadas a sistemas fortemente correlacionados mais complexos. Entre essas características, estão a competição entre as ordens SC e CDW, o surgimento de uma interconexão entre as ordens PDW e CDW em acoplamento intermediário ou forte em regime de baixa dopagem, e até mesmo uma correspondência profunda com a física do modelo de Hubbard 2D por meio de uma generalização orbital do modelo de HK 2D. Esse resultado é particularmente significativo, pois a solubilidade exata do modelo de HK fornece um arcabouço teórico analítico que permite potencialmente investigar a física do modelo de Hubbard 2D em acoplamentos intermediários ou fortes sem recorrer a métodos de simulações numéricas. Assim, o modelo de HK oferece uma plataforma tratável analiticamente para explorar a supercondutividade fortemente correlacionada induzida por flutuações quânticas, bem como seu entrelaçamento com as ordens CDW e PDW.

O estudo da relação entre CDW e PDW apresentado neste trabalho também possui relevância direta sob o ponto de vista experimental. Em materiais reais, a detecção da fase PDW é notoriamente difícil devido ao fato de que o sinal associado ao seu ordenamento de pares ser usualmente extremamente pequeno, enquanto o CDW produz modulações de densidade muito mais acessíveis por técnicas de espalhamento e microscopia.

Adicionalmente, foi realizada uma análise da chamada informação quântica de Fisher, que revelou propriedades interessantes da física do modelo de HK. Por meio da investigação dessa quantidade física, os resultados obtidos indicam que não foi verificada evidência de emaranhamento multipartido no sistema. Mesmo assim, a QFI se mostrou uma ferramenta útil para descrever como os elétrons se organizam e se correlacionam localmente. A análise de suas derivadas revelou um comportamento bastante interessante: ao derivar a função  $F_Q$  em relação ao parâmetro  $\omega_g \propto U - W$ , observou-se que, em baixas temperaturas, surge uma descontinuidade na transição do regime de acoplamento fraco para o forte. Esse resultado é relevante, já que não há consenso na literatura sobre a natureza universal da transição de Mott, ou seja, se é uma transição de fase de primeira ordem ou uma transição contínua. Além disso, é ainda tema de debate qual seria o parâmetro de ordem capaz de caracterizar essa transição. Dessa forma, os resultados obtidos neste trabalho podem apontar para um caminho na busca desse entendimento, uma vez que o comportamento da primeira derivada de  $F_Q$  oferece um possível “parâmetro de ordem” para caracterização da transição de Mott exibida pelo modelo de HK 2D. Todos esses resultados, ainda que preliminares, podem orientar investigações futuras em outros modelos fortemente correlacionados e apontar novas direções de pesquisa no estudo teórico dessas fases eletrônicas não convencionais emergentes.

Perspectivas futuras deste trabalho incluem a investigação das fases correlacionadas analisadas aqui mediante a incorporação de graus de liberdade orbitais adicionais ao modelo de HK, bem como sua extensão para incluir acoplamento spin-órbita (veja, por exemplo, as Refs. [103–106]), aproximando o modelo de materiais reais que exibem simultaneamente fortes correlações, propriedades topológicas e fases supercondutoras não convencionais. Outra direção promissora refere-se ao cálculo das propriedades de transporte associadas à fase NFL exibida pelo modelo de HK 2D e também de suas possíveis generalizações (veja, por exemplo, as Refs. [107–109], onde tais propriedades foram exploradas no contexto de outro modelo fortemente correlacionado que também apresenta uma fase NFL).

Em síntese, os resultados obtidos ao longo deste trabalho reforçam a versatilidade e a relevância do modelo de HK como uma ferramenta teórica poderosa para a investigação de sistemas fortemente correlacionados. Ao revelar conexões profundas entre diferentes ordens eletrônicas, fornecer diagnósticos alternativos para fenômenos complexos por meio da QFI e estabelecer possíveis conexões com a física dos cupratos supercondutores, este estudo contribui para a construção de uma compreensão unificada das várias fases emergentes em materiais fortemente correlacionados e tem o potencial de abrir novos caminhos para pesquisas futuras nesses sistemas.

## Referências

- 1 KEIMER, B. et al. From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides. *Nature (London)*, Nature Publishing Group, v. 518, n. 7538, 02 2015. ISSN 0028-0836. Disponível em: <<https://www.osti.gov/biblio/1357580>>. Citado na página 11.
- 2 LEE, P. A.; NAGAOSA, N.; WEN, X.-G. Doping a Mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 78, p. 17–85, Jan 2006. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.78.17>>. Citado na página 11.
- 3 ANDERSON, P. W. The resonating valence bond state in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  and superconductivity. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 235, n. 4793, p. 1196–1198, 1987. Citado na página 11.
- 4 LEBLANC, J. P. F. et al. Solutions of the Two-Dimensional Hubbard Model: Benchmarks and Results from a Wide Range of Numerical Algorithms. *Phys. Rev. X*, American Physical Society, v. 5, p. 041041, Dec 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevX.5.041041>>. Citado na página 11.
- 5 AROVAS, D. P. et al. The Hubbard model. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, Annual Reviews, v. 13, n. 1, p. 239–274, 2022. Citado na página 11.
- 6 HATSUGAI, Y.; KOHMOTO, M. Exactly solvable model of correlated lattice electrons in any dimensions. *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 61, n. 6, p. 2056–2069, 1992. Citado 3 vezes nas páginas 11, 13 e 17.
- 7 BASKARAN, G. An Exactly Solvable Fermion Model: Spinons, Holons and a Non-Fermi Liquid Phase. *Modern Physics Letters B*, v. 5, n. 9, p. 643–649, jan 1991. Citado na página 11.
- 8 CONTINENTINO, M. A.; COUTINHO-FILHO, M. D. Scaling close to a Mott transition in an exactly soluble model. *Solid State Communications*, Elsevier, v. 90, n. 10, p. 619–622, 1994. Citado na página 11.
- 9 VITORIANO, C. et al. Metal-insulator transition with infinite-range Coulomb coupling: Fractional statistics and quantum critical properties. *Physical Review B*, APS, v. 61, n. 12, p. 7941, 2000. Citado na página 11.
- 10 YEO, L.; PHILLIPS, P. W. Local entropies across the Mott transition in an exactly solvable model. *Physical Review D*, APS, v. 99, n. 9, p. 094030, 2019. Citado na página 11.
- 11 PHILLIPS, P. W.; YEO, L.; HUANG, E. W. Exact theory for superconductivity in a doped Mott insulator. *Nature Physics*, v. 16, n. 12, p. 1175–1180, dec 2020. ISSN 1745-2473. Disponível em: <<https://www.nature.com/articles/s41567-020-0988-4>>. Citado 4 vezes nas páginas 11, 33, 55 e 71.

- 12 LI, Y. et al. Two-stage superconductivity in the Hatsugai-Kohomoto-BCS model. *New Journal of Physics*, v. 24, n. 10, p. 103019, oct 2022. ISSN 1367-2630. Citado 3 vezes nas páginas 11, 36 e 55.
- 13 FRADKIN, E.; KIVELSON, S. A.; TRANQUADA, J. M. Colloquium: Theory of intertwined orders in high temperature superconductors. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 87, n. 2, p. 457–482, 2015. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 64.
- 14 TIMUSK, T.; STATT, B. The pseudogap in high-temperature superconductors: an experimental survey. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 62, n. 1, p. 61–122, 1999. Citado na página 11.
- 15 CORSINO, C. E. S.; FREIRE, H. Exact analysis of the interplay of charge order and unconventional pairings in the 2D Hatsugai-Kohmoto model. *Physics Letters A*, Elsevier, p. 131070, 2025. Citado na página 12.
- 16 BANERJEE, S.; RAMAKRISHNAN, T.; DASGUPTA, C. Phenomenological Ginzburg-Landau-like theory for superconductivity in the cuprates. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, APS, v. 83, n. 2, p. 024510, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 65.
- 17 LIU, X. et al. Discovery of a Cooper-pair density wave state in a transition-metal dichalcogenide. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 372, n. 6549, p. 1447–1452, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 65.
- 18 GU, Q. et al. Detection of a pair density wave state in UTe<sub>2</sub>. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 618, n. 7967, p. 921–927, 2023. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 65.
- 19 EDKINS, S. D. et al. Magnetic field-induced pair density wave state in the cuprate vortex halo. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 364, n. 6444, p. 976–980, 2019. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 65.
- 20 VINOGRAD, I. et al. Using strain to uncover the interplay between two- and three-dimensional charge density waves in high-temperature superconducting YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>y</sub>. *Nature Communications*, Nature Publishing Group UK London, v. 15, n. 1, p. 3277, 2024. Citado 2 vezes nas páginas 12 e 65.
- 21 ALTLAND, A.; SIMONS, B. D. *Condensed matter field theory*. [S.l.]: Cambridge university press, 2010. Citado na página 13.
- 22 KITTEL, C.; MCEUEN, P. *Introduction to solid state physics*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 23.
- 23 ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Solid State Physics*. [S.l.]: Holt-Saunders, 1976. Citado na página 13.
- 24 TURKOWSKI, V. Dynamical Mean-Field Theory for Strongly Correlated Materials. In: *Dynamical Mean-Field Theory for Strongly Correlated Materials*. [S.l.]: Springer, 2021. p. 1–11. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 16.
- 25 GEBHARD, F. Metal—insulator transitions. In: *The Mott Metal-Insulator Transition: Models and Methods*. [S.l.]: Springer, 2000. p. 1–48. Citado na página 16.

- 26 MANNING-COE, D.; BRADLYN, B. Ground state stability, symmetry, and degeneracy in Mott insulators with long-range interactions. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 108, p. 165136, Oct 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.108.165136>>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 40 e 63.
- 27 HACKNER, N. A.; MAI, P.; PHILLIPS, P. W. Solving the SU(N) orbital Hatsugai-Kohmoto model. *Physical Review A*, APS, v. 111, n. 6, p. 063316, 2025. Citado 3 vezes nas páginas 17, 40 e 63.
- 28 TENKILA, G.; ZHAO, J.; PHILLIPS, P. W. Dynamical spectral weight transfer in the orbital Hatsugai-Kohmoto model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 111, p. 045126, Jan 2025. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.111.045126>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 63.
- 29 SKOLIMOWSKI, J. Real-space analysis of Hatsugai-Kohmoto interaction. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 109, p. 165129, Apr 2024. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.109.165129>>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 63.
- 30 MAI, P. et al. Twisting the Hubbard model into the momentum-mixing Hatsugai-Kohmoto model. *Nature Physics*, Nature Publishing Group UK London, p. 1–7, 2025. Citado 6 vezes nas páginas 17, 40, 41, 42, 63 e 64.
- 31 DZYALOSHINSKI, I. et al. *Methods of quantum field theory in statistical physics*. [S.l.]: Courier Corporation, 1975. Citado na página 24.
- 32 ZHAO, M.; YANG, W.-W.; ZHONG, Y. Hatsugai-Kohmoto models: exactly solvable playground for Mottness and non-Fermi liquid. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 37, n. 18, p. 183005, 2025. Citado na página 24.
- 33 BOER, J. H. de; VERWEY, E. J. W. Semi-Conductors with Partially Filled Bands. *Proceedings of the Physical Society*, v. 49, n. 4S, p. 59–71, 1937. Citado na página 25.
- 34 MOTT, N. F. The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, v. 62, n. 7, p. 416–422, 1949. Citado na página 25.
- 35 MEISSNER, W.; OCHSENFELD, R. Ein neuer effekt bei eintritt der supraleitfähigkeit. *Naturwissenschaften*, Springer-Verlag Berlin/Heidelberg, v. 21, n. 44, p. 787–788, 1933. Citado na página 26.
- 36 FORREST, A. M. Meissner and Ochsenfeld revisited. *European Journal of Physics*, IOP Publishing, v. 4, n. 2, p. 117, 1983. Citado na página 26.
- 37 COOPER, L. N. Bound Electron Pairs in a Degenerate Fermi Gas. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 104, p. 1189–1190, Nov 1956. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.104.1189>>. Citado na página 26.
- 38 BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of Superconductivity. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 108, p. 1175–1204, Dec 1957. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175>>. Citado na página 26.
- 39 FULDE, P.; FERRELL, R. A. Superconductivity in a strong spin-exchange field. *Physical Review*, APS, v. 135, n. 3A, p. A550, 1964. Citado na página 27.

- 40 LARKIN, A.; OVCHINNIKOV, Y. N. Nonuniform state of superconductors. *Soviet Physics-JETP*, v. 20, n. 3, p. 762–762, 1965. Citado na página 27.
- 41 PEIERLS, R. E. *Quantum theory of solids*. [S.l.]: Oxford University Press, 1955. Citado na página 28.
- 42 SALVO, F. J. D.; MONCTON, D.; WASZCZAK, J. Electronic properties and superlattice formation in the semimetal  $\text{TiSe}_2$ . *Physical Review B*, APS, v. 14, n. 10, p. 4321, 1976. Citado na página 28.
- 43 JR, F. J. D. S.; RICE, T. M. Charge-density waves in transition-metal compounds. *Physics Today*, American Institute of Physics, v. 32, n. 4, p. 32–38, 1979. Citado na página 28.
- 44 GRUNER, G. *Density waves in solids*. [S.l.]: CRC press, 2018. Citado na página 28.
- 45 OVERHAUSER, A. W. Spin Density Waves in an Electron Gas. *Physical Review Letters*, v. 4, n. 8, p. 462–465, 1960. Citado na página 29.
- 46 OVERHAUSER, A. W. Spin Density Waves in Sodium. *Physical Review*, v. 128, n. 4, p. 1437–1452, 1962. Citado na página 29.
- 47 GUERCI, D. et al. Electrical transport in the Hatsugai-Kohmoto model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 111, p. 075124, Feb 2025. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.111.075124>>. Citado na página 34.
- 48 MA, Y. et al. Charge susceptibility and Kubo response in Hatsugai-Kohmoto-related models. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 112, p. 045109, Jul 2025. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/r4q9-hm45>>. Citado 3 vezes nas páginas 34, 41 e 85.
- 49 COLEMAN, P. *Introduction to Many-Body Physics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2015. Citado na página 37.
- 50 COHEN-STEAD, B. et al. Effect of strain on charge density wave order in the Holstein model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 100, p. 045125, Jul 2019. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.045125>>. Citado na página 37.
- 51 JAFARI, S. A. Introduction to Hubbard model and exact diagonalization. *arXiv preprint arXiv:0807.4878*, 2008. Citado na página 40.
- 52 FISHER, R. A. On the mathematical foundations of theoretical statistics. *Philosophical transactions of the Royal Society of London. Series A, containing papers of a mathematical or physical character*, The Royal Society London, v. 222, n. 594-604, p. 309–368, 1922. Citado na página 43.
- 53 FISHER, R. A. Theory of statistical estimation. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, Cambridge University Press, v. 22, n. 5, p. 700–725, 1925. Citado na página 43.
- 54 CRAMÉR, H. *Mathematical Methods of Statistics*. Princeton University Press, 1946. Citado na página 44.
- 55 KAY, S. M. *Fundamentals of Statistical Signal Processing: Estimation Theory*. [S.l.]: Prentice Hall, 1993. Citado 2 vezes nas páginas 44 e 45.

- 56 TREES, H. L. V. *Detection, Estimation, and Modulation Theory, Part I*. [S.l.]: Wiley, New York, 1968. Citado na página 45.
- 57 COWAN, G. *Statistical Data Analysis*. [S.l.]: Oxford University Press, 1998. Citado na página 45.
- 58 HELSTROM, C. W. *Quantum Detection and Estimation Theory*. [S.l.]: Academic Press, New York, 1976. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 46.
- 59 HOLEVO, A. S. *Probabilistic and Statistical Aspects of Quantum Theory*. [S.l.]: North-Holland, Amsterdam, 1982. Citado na página 45.
- 60 BRAUNSTEIN, S. L.; CAVES, C. M. Statistical distance and the geometry of quantum states. *Physical Review Letters*, APS, v. 72, n. 22, p. 3439–3443, 1994. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 46.
- 61 PETZ, D. *Quantum Information Theory and Quantum Statistics*. [S.l.]: Springer, Berlin, Heidelberg, 2008. Citado 2 vezes nas páginas 45 e 46.
- 62 TÓTH, G.; APELLANIZ, I. Quantum metrology from a quantum information science perspective. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, IOP Publishing, v. 47, n. 42, p. 424006, 2014. Citado 3 vezes nas páginas 45, 46 e 49.
- 63 PARIS, M. G. Quantum estimation for quantum technology. *International Journal of Quantum Information*, World Scientific, v. 7, n. supp01, p. 125–137, 2009. Citado na página 45.
- 64 PROVOST, J. P.; VALLEE, G. Riemannian structure on manifolds of quantum states. *Communications in Mathematical Physics*, v. 76, p. 289–301, 1980. Citado na página 47.
- 65 ZANARDI, P.; GIORDA, P.; COZZINI, M. Information-Theoretic Differential Geometry of Quantum Phase Transitions. *Physical Review Letters*, APS, v. 99, p. 100603, 2007. Citado na página 47.
- 66 BERNEVIG, B. A. Topological insulators and topological superconductors. In: *Topological Insulators and Topological Superconductors*. [S.l.]: Princeton university press, 2013. Citado na página 47.
- 67 GIOVANNETTI, V.; LLOYD, S.; MACCONE, L. Quantum-enhanced measurements: beating the standard quantum limit. *Science*, American Association for the Advancement of Science, v. 306, n. 5700, p. 1330–1336, 2004. Citado na página 48.
- 68 GIOVANNETTI, V.; LLOYD, S.; MACCONE, L. Advances in quantum metrology. *Nature Photonics*, Nature Publishing Group, v. 5, n. 4, p. 222–229, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 49.
- 69 PEZZÉ, L.; SMERZI, A. Entanglement, nonlinear dynamics, and the Heisenberg limit. *Physical Review Letters*, APS, v. 102, n. 10, p. 100401, 2009. Citado 2 vezes nas páginas 48 e 49.
- 70 HYLUS, P. et al. Fisher information and multiparticle entanglement. *Physical Review A*, APS, v. 85, n. 2, p. 022321, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 48, 49 e 50.
- 71 TÓTH, G. Multipartite entanglement and high-precision metrology. *Physical Review A*, APS, v. 85, n. 2, p. 022322, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 48, 49 e 50.

- 72 WERNER, R. F. Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model. *Physical Review A*, APS, v. 40, n. 8, p. 4277, 1989. Citado na página 48.
- 73 GIOVANNETTI, V.; LLOYD, S.; MACCONE, L. Quantum metrology. *Physical Review Letters*, APS, v. 96, n. 1, p. 010401, 2006. Citado na página 48.
- 74 DOWLING, J. P. Quantum optical metrology—the lowdown on high-N00N states. *Contemporary Physics*, Taylor & Francis, v. 49, n. 2, p. 125–143, 2008. Citado na página 48.
- 75 PEZZÉ, L. et al. Quantum metrology with nonclassical states of atomic ensembles. *Reviews of Modern Physics*, APS, v. 90, n. 3, p. 035005, 2018. Citado na página 49.
- 76 GU, S.-J. Fidelity approach to quantum phase transitions. *International Journal of Modern Physics B*, World Scientific, v. 24, n. 23, p. 4371–4458, 2010. Citado na página 50.
- 77 HAUKE, P. et al. Measuring multipartite entanglement via dynamic susceptibilities. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 12, n. 8, p. 778–782, 2016. Citado 5 vezes nas páginas 50, 51, 53, 54 e 66.
- 78 SCHEIE, A. et al. Witnessing entanglement in quantum magnets using neutron scattering. *Physical Review B*, APS, v. 103, n. 22, p. 224434, 2021. Citado 3 vezes nas páginas 50, 54 e 66.
- 79 ISLAM, R. et al. Measuring entanglement entropy in a quantum many-body system. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 528, n. 7580, p. 77–83, 2015. Citado 3 vezes nas páginas 50, 54 e 66.
- 80 BAŁUT, D.; BRADLYN, B.; ABBAMONTE, P. Quantum entanglement and quantum geometry measured with inelastic x-ray scattering. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 111, p. 125161, Mar 2025. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.111.125161>>. Citado 3 vezes nas páginas 50, 54 e 66.
- 81 MENON, V. et al. Multipartite entanglement in the one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 107, p. 054422, Feb 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.107.054422>>. Citado 3 vezes nas páginas 50, 54 e 66.
- 82 KUBO, R. Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, The Physical Society of Japan, v. 12, n. 6, p. 570–586, 1957. Citado 2 vezes nas páginas 50 e 53.
- 83 WANG, Y. et al. Local and Non-local Entanglement Witnesses of Fermi Liquid. *arXiv preprint arXiv:2502.13958*, 2025. Citado na página 51.
- 84 BAŁUT, D. et al. Quantum fisher information reveals UV-IR mixing in the strange metal. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, Elsevier, v. 635, p. 1354750, 2025. Citado 4 vezes nas páginas 52, 68, 71 e 72.
- 85 LAMBERT, J.; SØRENSEN, E. S. Revealing divergent length scales using quantum Fisher information in the Kitaev honeycomb model. *Physical Review B*, APS, v. 102, n. 22, p. 224401, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 53 e 70.
- 86 PEZZÈ, L. et al. Multipartite entanglement in topological quantum phases. *Physical review letters*, APS, v. 119, n. 25, p. 250401, 2017. Citado na página 53.

- 87 STÖFERLE, T. et al. Transition from a strongly interacting 1D superfluid to a Mott insulator. *Physical Review Letters*, APS, v. 92, n. 13, p. 130403, 2004. Citado na página 53.
- 88 ERNST, P. et al. Probing superfluids in optical lattices by momentum-resolved Bragg spectroscopy. *Nature Physics*, Nature Publishing Group, v. 6, n. 1, p. 56–61, 2010. Citado na página 53.
- 89 SQUIRES, G. L. *Introduction to the Theory of Thermal Neutron Scattering*. [S.l.]: Cambridge University Press, 2012. Citado na página 53.
- 90 SACHDEV, S. *Quantum Phase Transitions*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999. Citado na página 53.
- 91 ZHU, H.-S.; HAN, Q. Effects of electron correlation on superconductivity in the Hatsugai–Kohmoto model. *Chinese Physics B*, IOP Publishing, v. 30, n. 10, p. 107401, 2021. Citado na página 55.
- 92 FROLDI, I. d. M.; CORSINO, C. E. S. P.; FREIRE, H. Strong pair-density-wave fluctuations in an exactly solvable doped Mott insulator. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 110, p. 245136, Dec 2024. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.110.245136>>. Citado 3 vezes nas páginas 55, 60 e 66.
- 93 AGTERBERG, D. F. et al. The Physics of Pair-Density Waves: Cuprate Superconductors and Beyond. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, Annual Reviews, v. 11, n. 1, p. 231–270, mar 2020. ISSN 1947-5462. Citado na página 56.
- 94 CARVALHO, V. S. de; FREIRE, H. Evidence of a short-range incommensurate d-wave charge order from a fermionic two-loop renormalization group calculation of a 2D model with hot spots. *Annals of Physics*, v. 348, p. 32–49, 2014. ISSN 0003-4916. Disponível em: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491614001171>>. Citado na página 56.
- 95 FREIRE, H.; CARVALHO, V. S. de; PÉPIN, C. Renormalization group analysis of the pair-density-wave and charge order within the fermionic hot-spot model for cuprate superconductors. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 92, p. 045132, Jul 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.045132>>. Citado na página 56.
- 96 CARVALHO, V. S. de et al. Strong competition between  $\Theta_{II}$ -loop-current order and *d*-wave charge order along the diagonal direction in a two-dimensional hot spot model. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 92, p. 075123, Aug 2015. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.075123>>. Citado na página 56.
- 97 CARVALHO, V. S. de; PÉPIN, C.; FREIRE, H. Coexistence of  $\Theta_{II}$ -loop-current order with checkerboard *d*-wave CDW/PDW order in a hot-spot model for cuprate superconductors. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 93, p. 115144, Mar 2016. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.115144>>. Citado na página 56.
- 98 KLOSS, T. et al. Charge orders, magnetism and pairings in the cuprate superconductors. *Reports on Progress in Physics*, IOP Publishing, v. 79, n. 8, p. 084507, jul 2016. ISSN 1361-6633. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/79/8/084507>>. Citado na página 56.
- 99 HAMIDIAN, M. et al. Detection of a Cooper-pair density wave in Bi2Sr2CaCu2O8+ x. *Nature*, Nature Publishing Group UK London, v. 532, n. 7599, p. 343–347, 2016. Citado na página 61.

- 100 FANG, Y. et al. Amplified multipartite entanglement witnessed in a quantum critical metal. *Nature Communications*, Nature Publishing Group UK London, v. 16, n. 1, p. 2498, 2025. Citado na página 67.
- 101 BIPPUS, F. et al. Two-site entanglement in the two-dimensional Hubbard model. *arXiv preprint arXiv:2506.09780*, 2025. Citado na página 67.
- 102 GUO, X. et al. Conformally invariant charge fluctuations in a strange metal. *arXiv preprint arXiv:2411.11164*, 2024. Citado 2 vezes nas páginas 71 e 72.
- 103 MAI, P. et al.  $1/4$  is the new  $1/2$  when topology is intertwined with Mottness. *Nature Communications*, Springer Science and Business Media LLC, v. 14, n. 1, p. 5999, sep 2023. ISSN 2041-1723. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/s41467-023-41465-6>>. Citado na página 75.
- 104 MAI, P.; FELDMAN, B. E.; PHILLIPS, P. W. Topological Mott insulator at quarter filling in the interacting Haldane model. *Phys. Rev. Res.*, American Physical Society, v. 5, p. 013162, Mar 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevResearch.5.013162>>. Citado na página 75.
- 105 JABŁONOWSKI, K. et al. Topological Mott insulator in the odd-integer filled Anderson lattice model with Hatsugai-Kohmoto interactions. *Physical Review B*, APS, v. 108, n. 19, p. 195145, 2023. Citado na página 75.
- 106 WYSOKIŃSKI, M. M.; BRZEZICKI, W. Quantum anomalous Hall insulator in ionic Rashba lattice of correlated electrons. *Physical Review B*, APS, v. 108, n. 3, p. 035121, 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.108.035121>>. Citado na página 75.
- 107 MANDAL, I.; FREIRE, H. Transport in the non-Fermi liquid phase of isotropic Luttinger semimetals. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 103, p. 195116, May 2021. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.195116>>. Citado na página 75.
- 108 FREIRE, H.; MANDAL, I. Thermoelectric and thermal properties of the weakly disordered non-Fermi liquid phase of Luttinger semimetals. *Physics Letters A*, Elsevier BV, v. 407, p. 127470, aug 2021. ISSN 0375-9601. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2021.127470>>. Citado na página 75.
- 109 MANDAL, I.; FREIRE, H. Transport properties in non-Fermi liquid phases of nodal-point semimetals. *Journal of Physics: Condensed Matter*, IOP Publishing, v. 36, n. 44, p. 443002, aug 2024. Disponível em: <<https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/ad665e>>. Citado na página 75.
- 110 ZHAO, J.; NAVE, G. L.; PHILLIPS, P. W. Proof of a stable fixed point for strongly correlated electron matter. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 108, p. 165135, Oct 2023. Disponível em: <<https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.108.165135>>. Citado na página 85.

# Apêndices

# A

## Derivação das susceptibilidades de CDW em baixas temperaturas

Neste apêndice, vamos derivar exatamente a equação para a susceptibilidade de carga  $\chi_c(i\nu_n)$  em  $T \ll U, W$  na presença de uma interação atrativa que promove uma fase CDW. O objetivo é avaliar a susceptibilidade de carga em acoplamento finito, isto é,

$$\chi_c = \frac{1}{N^2} \int_0^\beta d\tau e^{i\nu_n\tau} \langle \hat{T}_\tau \rho_c(\mathbf{q}, \tau) \rho_c(-\mathbf{q}, 0) \rangle_{V_c}, \quad (\text{A.1})$$

e relacioná-la com a susceptibilidade exata do modelo de HK  $\chi_c^0(i\nu_n)$ , definida pela mesma expressão avaliada com  $V_c = 0$  na Eq. (1.57).

Nesse sentido, expande-se a média termodinâmica com interação. A função de correlação ordenada no tempo imaginário é dada por

$$\langle \hat{T}_\tau \rho_c(\mathbf{q}, \tau) \rho_c(-\mathbf{q}, 0) \rangle = \frac{\langle \hat{T}_\tau S(\beta) \rho_c(\mathbf{q}, \tau) \rho_c(-\mathbf{q}, 0) \rangle_0}{\langle \hat{T}_\tau S(\beta) \rangle_0}, \quad (\text{A.2})$$

sendo que o subscrito 0 denota valores esperados tomados em relação ao Hamiltoniano de HK e a matriz  $S$  é definida como

$$S(\beta) = \hat{T}_\tau \exp \left( - \int_0^\beta d\tau' H_{\text{CDW}}(\tau') \right). \quad (\text{A.3})$$

Expandindo o numerador, obtém-se:

$$\langle \hat{T}_\tau S(\beta, 0) \rho_c(\mathbf{q}, \tau) \rho_c(-\mathbf{q}, 0) \rangle_0 = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(V_c)^m}{m!} \left\langle \hat{T}_\tau \left( \int_0^\beta d\tau_1 H_{\text{CDW}}(\tau_1) \right)^m \rho_c(\mathbf{q}, \tau) \rho_c(-\mathbf{q}, 0) \right\rangle_0,$$

o que pode ser interpretado em termos de diagramas conectados e desconectados, como tipicamente obtido via o teorema de Wick [48, 110]. Todos os termos do tipo desconectado são cancelados pelo denominador. Para tornar isso explícito, considera-se a contribuição de primeira

ordem, tratando a variável  $\mathbf{q}$  como um índice para simplificar a notação:

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{T}_\tau \rho_{-q}(\tau_1) \rho_q(\tau_1) \rho_q(\tau) \rho_{-q}(0) \right\rangle = & \left\langle \hat{T}_\tau \rho_{-q}(\tau_1) \rho_q(\tau_1) \right\rangle \left\langle \hat{T}_\tau \rho_q(\tau) \rho_{-q}(0) \right\rangle \\ & + \left\langle \hat{T}_\tau \rho_{-q}(\tau_1) \rho_q(\tau) \right\rangle \left\langle \hat{T}_\tau \rho_q(\tau_1) \rho_{-q}(0) \right\rangle \\ & + \left\langle \hat{T}_\tau \rho_{-q}(\tau_1) \rho_{-q}(0) \right\rangle \left\langle \hat{T}_\tau \rho_q(\tau_1) \rho_q(\tau) \right\rangle. \end{aligned}$$

Observam-se aqui dois pontos importantes. Primeiro, o termo

$$\left\langle \hat{T}_\tau \rho_{-q}(\tau_1) \rho_{-q}(0) \right\rangle \left\langle \hat{T}_\tau \rho_q(\tau_1) \rho_q(\tau) \right\rangle$$

pode ser interpretado em termos de um diagrama desconectado e contribui apenas quando  $\mathbf{q} = 0$ . Por outro lado, se  $\mathbf{q} \neq 0$  (como considerado no texto principal), esse termo se anula.

Para os dois termos restantes, o produto

$$\left\langle \hat{T}_\tau \rho_{-q}(\tau_1) \rho_q(\tau) \right\rangle \left\langle \hat{T}_\tau \rho_q(\tau_1) \rho_{-q}(0) \right\rangle$$

pode ser interpretado como um diagrama conectado e gera uma contribuição da forma  $\chi(\tau_1 - \tau)\chi(\tau_1)$ . O outro termo é novamente desconectado.

Uma estrutura similar persiste em ordens superiores. Por exemplo, na ordem seguinte surgem seis termos não-nulos (quatro desconectados e dois conectados), resultando na série:

$$\chi_c = \chi_0 + V_c \chi_0^2 + (V_c)^2 \chi_0^3 + \dots, \quad (\text{A.4})$$

onde a notação foi levemente alterada, definindo-se  $\chi_0 \equiv \chi_c^0$ . Somando todos os termos, obtém-se o seguinte resultado para a série geométrica:

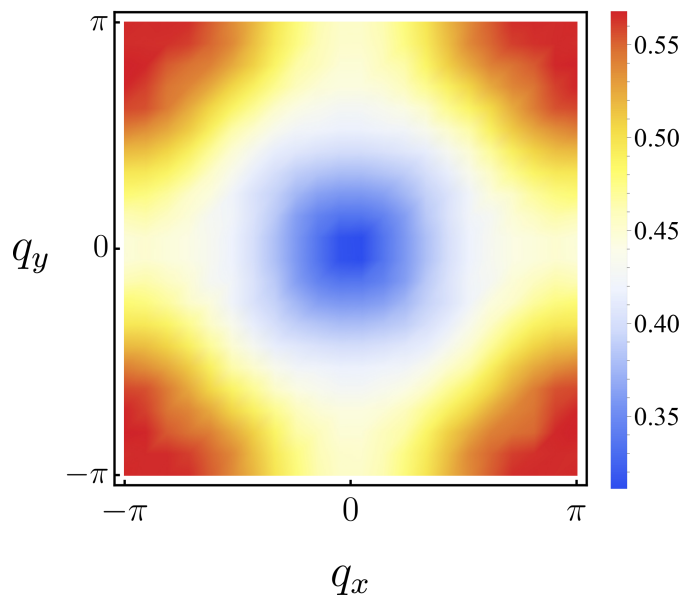
$$\chi_c = \sum_{m=0}^{\infty} V_c^m \chi_0^{m+1}(i\nu_n) = \frac{\chi_c^0(i\nu_n)}{1 - V_c \chi_c^0(i\nu_n)}. \quad (\text{A.5})$$

Esta é a equação do tipo Dyson para a susceptibilidade de carga do modelo em questão, a qual é discutida no texto principal.

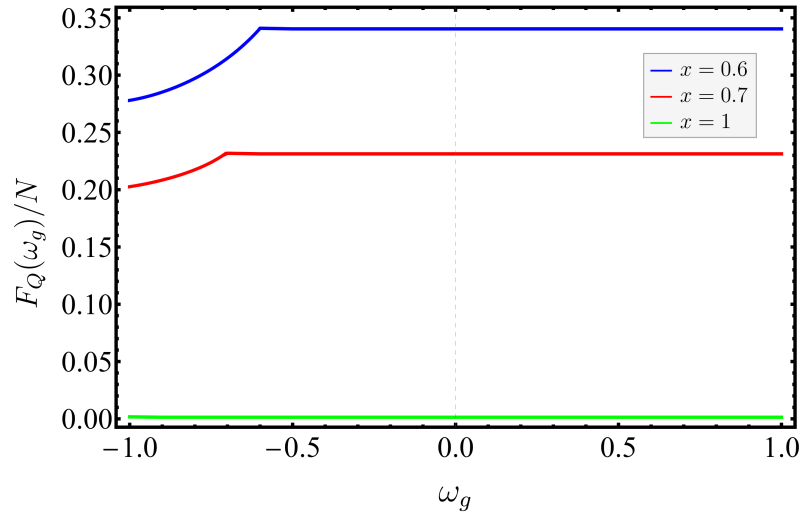
# B

## Figuras relacionadas ao cálculo da QFI no modelo de HK

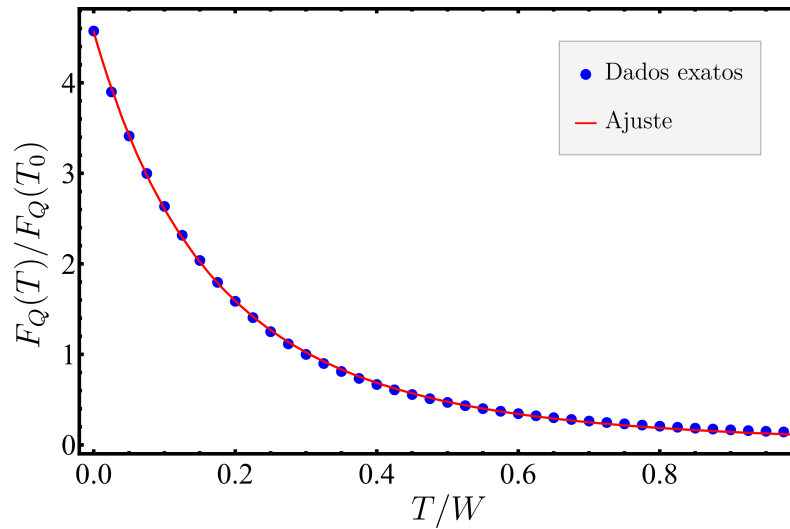
Neste apêndice, são apresentadas figuras adicionais que complementam os resultados obtidos ao longo desta dissertação. Tais figuras foram alocadas nesta seção com o objetivo de preservar a fluidez e a organização do texto principal, sem prejuízo à compreensão dos resultados discutidos.



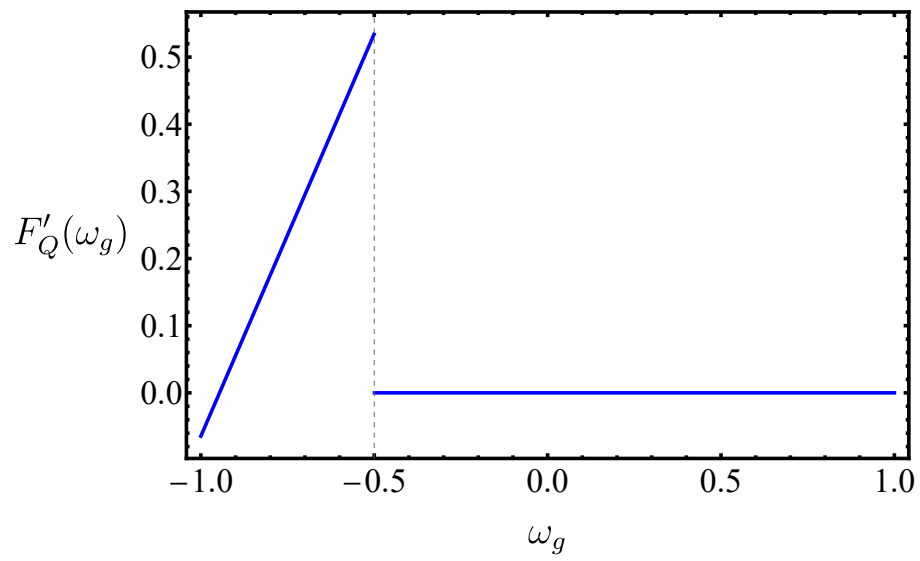
**Figura B.1** – QFI  $F_Q(\mathbf{q}, T)/N$  para diferentes valores do vetor  $\mathbf{q}$ , com parâmetros  $u = 0,5$ ,  $x = 0,3$  e  $T \rightarrow 0$ . Na figura, cores mais quentes indicam valores mais elevados de  $F_Q(\mathbf{q}, T)$ , enquanto tons mais frios correspondem a valores menores, evidenciando que o vetor mais favorável é  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$ .



**Figura B.2** – QFI em função da temperatura para diferentes valores de dopagem, destacando o regime  $x > 0,5$ . Observe que, conforme discutido no texto principal, para  $x = 1$ , tem-se  $F_Q = 0$ .



**Figura B.3** – A razão  $F_Q(T)/F_Q(T_0)$ , onde  $T_0$  é uma temperatura de referência, definida como  $T/W = 0,3$ . O ajuste para esse caso segue a forma  $1/(a + T)^b$ , em que  $a = 0,69$  e  $b = 3,42$ .



**Figura B.4** – Primeira derivada de  $F_Q(\omega_g)$  associada à suscetibilidade de carga em  $\mathbf{q} = (\pi, \pi)$  em relação a  $\omega_g$ . O gráfico ilustra o caso com dopagem  $x = 0,5$  no limite  $T \rightarrow 0$ .