

Guilherme Arantes Canella

Transições de fase quânticas em nanoestruturas desordenadas

Tese apresentada ao programa de Pós-Graduação em Química do Instituto de Química de Araraquara da Universidade Estadual Paulista, para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Área de Concentração: Físico-Química

Orientador: Profa. Dra. Vivian Vanessa França Henn

Araraquara

2021

FICHA CATALOGRÁFICA

C221t Canella, Guilherme Arantes
Transições de fase quânticas em nanoestruturas
desordenadas / Guilherme Arantes Canella. –
Araraquara : [s.n.], 2021
98 f. : il.

Tese (doutorado) – Universidade Estadual Paulista,
Instituto de Química
Orientador: Vivian Vanessa França Henn

1. Informação quântica. 2. Funcionais de densidade.
3. Supercondutividade. 4. Modelo de Hubbard. 5. Matéria
condensada. I. Título.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA TESE: Transições de fase quânticas em nanoestruturas desordenadas.

AUTOR: GUILHERME ARANTES CANELLA

ORIENTADORA: VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN

Aprovado como parte das exigências para obtenção do Título de Doutor em QUÍMICA, pela Comissão Examinadora:

Prof^ª. Dr^ª. VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN (Participação Virtual)
Departamento de Engenharia, Física e Matemática / Instituto de Química - UNESP - Araraquara



Dra. THEREZA CHRISTINA DE LACERDA PAIVA (Participação Virtual)
Departamento de Física dos Sólidos, Instituto de Física / Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ - Rio de Janeiro



Prof.^a Dr.^a ERICA REGINA FILLETTI NASCIMENTO (Participação Virtual)
Departamento de Engenharia, Física e Matemática / Instituto de Química - UNESP - Araraquara



Prof. Dr. VALDECI PEREIRA MARIANO DE SOUZA (Participação Virtual)
Departamento de Física / Instituto de Geociências e Ciências Exatas de Rio Claro - UNESP



Dra. MARIANA MIEKO ODASHIMA (Participação Virtual)
Instituto de Física / Universidade Federal de Uberlândia - UFU



Araraquara, 10 de dezembro de 2021

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

AGRADECIMENTOS

Como eu sempre digo, nós evoluímos com o passar do tempo e aprendemos muito com as pessoas que nos cercam. Independente se a experiência é boa ou ruim, nós acabamos aprendendo com aquela situação e nos moldando para situações futuras. Sendo assim, a pessoa que sou hoje e o que eu alcancei nesse trabalho são frutos do aprendizado que ganhei ao longo dos anos graças ao convívio com essas pessoas.

Gostaria de começar essa seção agradecendo duas pessoas extremamente importantes na minha vida: Eliana Arantes e Dante Canella, meus pais, que sempre me apoiaram, me incentivaram e fizeram tudo o que podiam para que eu tivesse as melhores condições para estudar e continuar estudando. Mesmo em situações difíceis entre nós eles nunca deixaram de me apoiar.

Em especial e não menos importante, gostaria de agradecer imensamente a minha orientadora e amiga Vivian França. A vida de pós-graduação para qualquer aluno na maioria das vezes é cansativa e desgastante, e eu costumo dizer que o orientador tem o poder de fazer esse período mais fácil ou mais difícil. No meu caso, a Vivian fez com que essa experiência fosse extremamente agradável e proveitosa, me ensinando e corrigindo quando precisava e me aconselhando sempre com as melhores observações possíveis. Para mim foi uma honra ter tido ela como orientadora e eu sempre vou agradecê-la por isso.

Outra pessoa muito importante e que me ajudou durante muitos anos é a Vitória Caviola, que teve muita paciência, compaixão, carinho e me ensinou muito sobre a vida. O companheirismo dela foi essencial para que eu pudesse concluir esse trabalho.

Aos meus amigos em especial, Carlos Yanke, Larissa Freitas e Clebson Silva, que me deram muito apoio moral e emocional em períodos críticos da minha vida durante essa fase. Com certeza a amizade deles foi muito importante para o meu êxito no doutorado.

À minha amiga e colega de trabalho em especial, Tatiana Pauletti, que me presenteou com vários momentos bons dentro e fora do laboratório, seja em discussões banais quanto em discussões científicas, sempre com carisma, simpatia e alegria. Tenho certeza ao dizer que essa foi a melhor amizade que o doutorado me propiciou.

Aos meus amigos de trabalho, Daniel Arisa e Caio Custódio, pela amizade, apoio e pelas discussões em relação ao projeto, e pelos bons momentos vividos nesses quatro anos.

Aos professores e Drs. Emerson Camargo, André Farias, Gustavo Rigolin, Roberto

Haiduke e Irene D'Amico que contribuíram para meu caráter como pesquisador, desde o período de graduação até a pós-graduação, alguns ensinando e outros orientando sempre de maneira positiva.

Gostaria de agradecer imensamente também a Bruna Souza, que nos últimos anos foi essencial para me ajudar a manter minha saúde mental saudável, o que afetou diretamente e positivamente o desenvolvimento do meu doutorado.

E por fim, o presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Agradeço também à FAPESP pelos recursos do projeto.

"Grant me the serenity to accept the things I cannot change, the courage to change things I can, and the wisdom to know the difference"

Epictetus

RESUMO

CANELLA, G. A. **Transições de fase quânticas em nanoestruturas desordenadas.** 2021. 98p. Tese (Doutor em Ciências) - Instituto de Química de Araraquara, Universidade Estadual Paulista, Araraquara, 2021.

O estudo de transições de fase quânticas tem despertado o interesse de cientistas teóricos e experimentais. Quando um sistema é exposto a uma desordem moderada ou forte a função de onda eletrônica se localiza transformando metais ou supercondutores em isolantes. Neste trabalho, investigamos as transições superfluido-isolante e metal-isolante através do emaranhamento quântico. Utilizamos o modelo de Hubbard fermiônico unidimensional para descrever as nanoestruturas desordenadas, obtendo os valores de energia e densidade através da teoria do Funcional da Densidade e quantificando o grau de emaranhamento do sistema através da entropia linear. Para a transição superfluido-isolante verificamos que ela pode ser desencadeada pela concentração de impurezas, pela intensidade de desordem ou pela densidade média de partículas. Encontramos uma relação direta entre a concentração crítica da transição e a densidade média e mostramos que a classificação da transição e a existência de um V_{min} depende se o sistema está em um estado de localização total ou localização ordinária. Na abordagem da termodinâmica fora do equilíbrio verificamos que a extração máxima de trabalho ocorre quando o sistema está exatamente na concentração crítica e que para temperaturas altas só é possível a produção de trabalho. Para a transição metal-isolante verificamos que, diferentemente da transição superfluido-isolante, há uma competição entre U e V pois cada parâmetro contribui de maneira diferente para a fase isolante. Mostramos que a relação entre a concentração crítica e a densidade média para esse caso depende do tipo da transição metal-isolante em questão.

Palavras-chave: Transição de fase quântica. Modelo de Hubbard. Teoria do funcional da densidade. Emaranhamento. Trabalho quântico

ABSTRACT

CANELLA, G. A. **Quantum phase transitions in disordered nanostructures**. 2021. 98p. Thesis (Doctor in Science) - Instituto de Química de Araraquara, Universidade Estadual Paulista, Araraquara, 2021.

The study of quantum phase transitions has aroused interest of theoretical and experimental scientists. When a system is exposed to moderate or strong disorder, the electronic wave function becomes localized, transforming metals or superconductors into insulators. In this thesis, we investigate the superfluid-insulator and metal-insulator transitions through quantum entanglement. We use the one-dimensional fermionic Hubbard model to describe the disordered nanostructures, obtaining the energy and density profiles via Density Functional theory and quantifying the degree of entanglement through the linear entropy. For the superfluid-insulator transition, we showed that it can be triggered by the concentration of impurities, the intensity of disorder or the average density of particles. We found a direct relationship between the critical transition concentration and the average density, and we showed that the order of the transition and the existence of a V_{min} depends on whether the system is in a state of total or ordinary localization. In the out-of-equilibrium thermodynamics approach we found that the maximum work extraction occurs when the system is exactly at the critical concentration and for high temperatures only work production is possible. For the metal-insulator transition we verified that unlike the superfluid-insulator transition, there is a competition between U and V due to their different contributions to the insulator phase. We showed that the relationship between the critical concentration and the average density for this case depends on the type of metal-insulator transition.

Keywords: Quantum phase transition. Hubbard model. Density Functional theory. Entanglement. Quantum work

LISTA DE FIGURAS

| | |
|--|----|
| Figura 1 - Representação da estrutura de bandas de materiais condutores (esquerda), semicondutores (centro) e isolantes (direita), em que a banda proibida é o <i>gap</i> de energia. | 19 |
| Figura 2 - Representação do movimento de um par de Cooper pela rede do cristal. O movimento primeiro elétron gera uma distorção na rede (fônon) aumentando a densidade de carga positiva naquela região, que acaba atraindo um segundo elétron. | 20 |
| Figura 3 - Representação de uma cadeia unidimensional de L sítios descrita pelo modelo de Hubbard em sua versão mais simples. | 25 |
| Figura 4 - Ilustração de três possíveis condições de contorno. Os painéis representam as condições de contorno (a) aberta, (b) periódica e (c) torcida. | 27 |
| Figura 5 - Ilustração do esquema de Kohn-Sham: utiliza-se um sistema fictício de elétrons não-interagentes que apresenta uma densidade do estado fundamental igual ao sistema real, quando sob ação do potencial externo $V_{KS}(r)$ | 31 |
| Figura 6 - Representação do ciclo auto-consistente para resolver as equações de Kohn-Sham. O valor de convergência é arbitrário. | 33 |
| Figura 7 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da intensidade de desordem V para diferentes concentrações de impurezas. Esses resultados foram extraídos de sistemas com densidade média $n = 0.8$ e interação $U = -5t$ entre partículas. As intensidades de desordem vão desde intensidades atrativas ($V < 0$) quanto repulsivas ($V > 0$). | 44 |
| Figura 8 - Probabilidades médias de dupla ocupação para sítios com impurezas \bar{w}_2^V e sem impurezas $\bar{w}_2^{V=0}$ em função da intensidade de desordem V para sistemas com (a) $C = 10\%$ de impurezas e (b) $C = 40\%$ de impurezas. Esses resultados foram tirados de sistemas com densidade média $n = 0.8$ e interação $U = -5t$ | 46 |
| Figura 9 - Energia por sítio E_i em função da intensidade de desordem V para sistemas com diferentes concentrações de impurezas C . Para todos os sistemas a densidade média é $n = 0.8$ e a interação é $U = -5t$ | 47 |
| Figura 10 - Resultados de emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C obtidos de sistemas com densidade média $n = 0.8$, interação $U = -5t$ e diferentes intensidades de desordem V | 48 |

| | |
|---|----|
| Figura 11 - Derivada da energia ∂E_i em função da concentração de impurezas C para sistemas com diferentes intensidades de desordem V . Todos os sistemas apresentam interação $U = -5t$ e densidade $n = 0.8$. Valores adimensionais. | 49 |
| Figura 12 - Probabilidades médias de dupla ocupação para sítios com impurezas \bar{w}_2^V e sem impurezas $\bar{w}_2^{V=0}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com intensidade (a) $V = -1t$ e (b) $V = -10t$ de desordem. Esses resultados foram tirados de sistemas com densidade média $n = 0.8$ e interação $U = -5t$ | 50 |
| Figura 13 - Energia por sítio E_i em função da concentração de impurezas C para sistemas com diferentes intensidades de desordem V . Para todos os sistemas a densidade média é $n = 0.8$ e a interação é $U = -5t$ | 51 |
| Figura 14 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com intensidade de desordem (a) atrativa ($V = -10t$) e (b) repulsiva ($V = 10t$) para diferentes densidades médias, todos com uma interação de $U = -5t$ | 53 |
| Figura 15 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com diferentes interações entre partículas U , com intensidades de desordem fortemente atrativa (a) $V = -10t$ e fortemente repulsiva (b) $V = 10t$. Para todos os sistemas a densidade média vale $n = 0.8$ | 55 |
| Figura 16 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com diferentes interações entre partículas U , com intensidades de desordem atrativa média (a) $V = -3t$ e fracamente atrativa (b) $V = -1t$. Para todos os sistemas a densidade média vale $n = 0.8$ | 56 |
| Figura 17 - Resultados de emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com interação $U = -5t$, densidade média $n = 0.8$ e intensidade de desordem $V = -10t$. Nesses sistemas foram aplicados confinamento harmônico com diferentes intensidades de potencial harmônico k | 58 |
| Figura 18 - Valores de energia por sítio E_i em função da concentração de impurezas C para sistemas com interação $U = -5t$, densidade média $n = 0.8$ e intensidade de desordem $V = -10t$. Nesses sistemas foram aplicados confinamento harmônico com diferentes intensidades de potencial harmônico k | 58 |

| | |
|--|----|
| Figura 19 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da intensidade do potencial harmônico k para sistemas com diferentes concentrações de impurezas C . Todos os sistemas apresentam interação $U = -5t$, densidade média $n = 0.8$ e desordem $V = -10t$ | 59 |
| Figura 20 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média de partículas n para sistemas com diferentes concentrações de impurezas, com intensidade de desordem fraca ($V = -1t$) e forte ($V = -10t$). Valores em unidades adimensionais.. | 60 |
| Figura 21 - Probabilidades médias de dupla ocupação para sítios com impurezas \bar{w}_2^V e sem impurezas $\bar{w}_2^{V=0}$ em função da densidade de partículas n para sistemas com intensidade de desordem (a) $V = -1t$ e (b) $V = -10t$. Esses resultados foram obtidos de sistemas com interação $U = -5t$ e com $C = 25\%$ de impurezas. Valores em unidades adimensionais. | 61 |
| Figura 22 - Energia por sítio E_i em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes concentrações de impurezas e com intensidades de desordem fraca ($V = -1t$) e forte ($V = -10t$). Para todos os valores a interação é de $U = -5t$. Valores em unidades adimensionais. | 62 |
| Figura 23 - Trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ em função da concentração do estado inicial C_0 para sistemas com (a) $L = 100$ sítios e $n = 0.8$ e (b) $L = 6$ sítios e $n = 1.0$, para diferentes intensidades de desordem V . Para todos os casos o valor da interação é de $U = -5t$ e $\beta = 100t$. Valores em unidades adimensionais. | 65 |
| Figura 24 - Valores de (a) variância média $\langle W^2 \rangle$ e (b) assimetria média $\langle W^3 \rangle$ para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 100t$, para diferentes intensidades de desordem V . Valores em unidades adimensionais. | 67 |
| Figura 25 - Valores de (a) trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ e (b) variância média $\langle W^2 \rangle$ para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 0.5t$, para diferentes intensidades de desordem V . Valores em unidades adimensionais.. | 68 |
| Figura 26 - Valores de (a) trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ e (b) variância média $\langle W^2 \rangle$ para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 0.0333t$, para diferentes intensidades de desordem V . Valores em unidades adimensionais. | 69 |

| | |
|--|----|
| Figura 27 - Valores de (a) trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ e (b) variância média $\langle W^2 \rangle$ em função da concentração C para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 100t$, para diferentes intensidades de desordem V do estado inicial. Para todos os casos a intensidade de desordem do estado final é $V_f = -10t$. Valores em unidades adimensionais. | 71 |
| Figura 28 - Valores de (a) trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ e (b) variância média $\langle W^2 \rangle$ em função da concentração C para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 0.0333t$, para diferentes intensidades de desordem V do estado inicial. Para todos os casos a intensidade de desordem do estado final é $V_f = -10t$. Valores em unidades adimensionais. | 72 |
| Figura 29 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média de partículas n para sistemas com diferentes interações intra-sítios e sem desordem (Mott MI). Valores em unidades adimensionais. | 74 |
| Figura 30 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e sem interação entre partículas (Anderson MI). Para esses sistemas a concentração de impurezas é de $C = 50\%$. Valores em unidades adimensionais. | 75 |
| Figura 31 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média n de partículas para sistemas com (a) diferentes concentrações de impurezas e intensidades de desordem e (b) com $C = 25\%$ e intensidade fortemente atrativa ($V = -20t$). Todos os casos apresentam interação $U = -5t$. Valores em unidades adimensionais. | 76 |
| Figura 32 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média de partículas n para sistemas com intensidade de desordem atrativa ($V = -20t$) e repulsiva ($V = 20t$), e interação $U = 5t$. Valores em unidades adimensionais. | 79 |
| Figura 33 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com intensidade de desordem (a) atrativa e (b) repulsiva. Em todos os casos, os sistemas apresentam interação $U = 10t$ e densidade média $n = 0.8$. Valores em unidades adimensionais. | 81 |
| Figura 34 - Probabilidades médias de ocupação simples (a) <i>spin-up</i> e (b) <i>spin-down</i> para sítios com impurezas \bar{w}_σ^V e sem impurezas $\bar{w}_\sigma^{V=0}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com intensidade de desordem $V = -20t$, densidade média $n = 0.8$ e interação $U = 10t$. Valores em unidades adimensionais. | 82 |

Figura 35 - Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da interação intra-sítio U para sistemas com (a) $C = 40\%$ de impurezas atrativas e (b) $C = 60\%$ de impurezas repulsivas, com densidade média $n = 0.8$. Valores em unidades adimensionais. . . . 84

LISTA DE TABELAS

| | |
|--|----|
| Tabela 1 - Resumo da metodologia utilizada para investigar cada transição de fase. . . . | 42 |
| Tabela 2 - Protocolos adotados no <i>sudden quench</i> . No protocolo 1 o parâmetro crítico é a concentração de impurezas C e no protocolo 2 é a intensidade de desordem V | 63 |
| Tabela 3 - Relação entre densidade crítica n_C e concentração de impurezas C para os diferentes tipos de transição metal-isolante (Mott, Anderson e Mott-Anderson). . | 79 |

LISTA DE ABREVIACOES E ACRONIMOS

| | |
|-------|--|
| HTSC | High- T_C Superconductors |
| SIT | Superfluid-insulator Transition |
| DFT | Density Functional Theory |
| MIT | Metal-insulator Transition |
| DMFT | Dynamic Mean Field Theory |
| KS | Kohn-Sham |
| OBC | Open Boundary Conditions |
| PBC | Periodic Boundary Conditions |
| TBC | Twisted Boundary Conditions |
| DMRG | Density-Matrix Renormalization Group |
| CI | Configuration theory |
| CC | Coupled Cluster |
| HK | Hohenberg-Kohn |
| LDA | Local-Density Approximation |
| BALDA | Bethe Ansatz Local Density Approximation |

SUMÁRIO

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 18 |
| 1.1 | Supercondutividade | 18 |
| 1.2 | Transições de fase quânticas | 21 |
| 1.2.1 | Transição Superfluido-Isolante | 21 |
| 1.2.2 | Transição Metal-Isolante | 22 |
| 2 | FUNDAMENTOS TEÓRICOS | 24 |
| 2.1 | Modelo de Hubbard | 24 |
| 2.2 | Teoria do Funcional da Densidade | 28 |
| 2.2.1 | Teoremas de Hohenberg-Kohn (HK) | 29 |
| 2.2.2 | Esquema de Kohn-Sham (KS) | 30 |
| 2.2.3 | Aproximações para a energia de troca e correlação: Aproximação da Densidade Local | 33 |
| 2.2.4 | DFT para o modelo de Hubbard | 34 |
| 2.3 | Emaranhamento | 35 |
| 2.3.1 | Entropia de von Neumann | 36 |
| 2.3.2 | Emaranhamento para o modelo de Hubbard | 38 |
| 3 | RESULTADOS | 42 |
| 3.1 | Regime de interação atrativa entre partículas $U < 0$ | 43 |
| 3.1.1 | Transição SI desencadeada pela intensidade de desordem V | 43 |
| 3.1.2 | Transição SI desencadeada pela concentração de impurezas C | 47 |
| 3.1.3 | O impacto da interação intra-sítio U | 54 |
| 3.1.4 | O impacto do confinamento harmônico | 57 |
| 3.1.5 | Transição SI desencadeada pela densidade média de partículas n | 59 |
| 3.1.6 | Estatísticas do trabalho quântico ao longo da transição SI | 62 |
| 3.2 | Regime de interação repulsiva entre partículas $U > 0$ | 73 |
| 3.2.1 | Transição MI desencadeada pela densidade média de partículas n | 73 |
| 3.2.2 | Transição MI desencadeada pela concentração de impurezas C | 80 |
| 3.2.3 | Transição MI desencadeada pela interação intra-sítio U | 83 |

| | | |
|---|---|----|
| 4 | CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS | 85 |
| | REFERÊNCIAS. | 88 |
| | APÊNDICE A Transição Superfluido-isolante | 97 |

1 INTRODUÇÃO

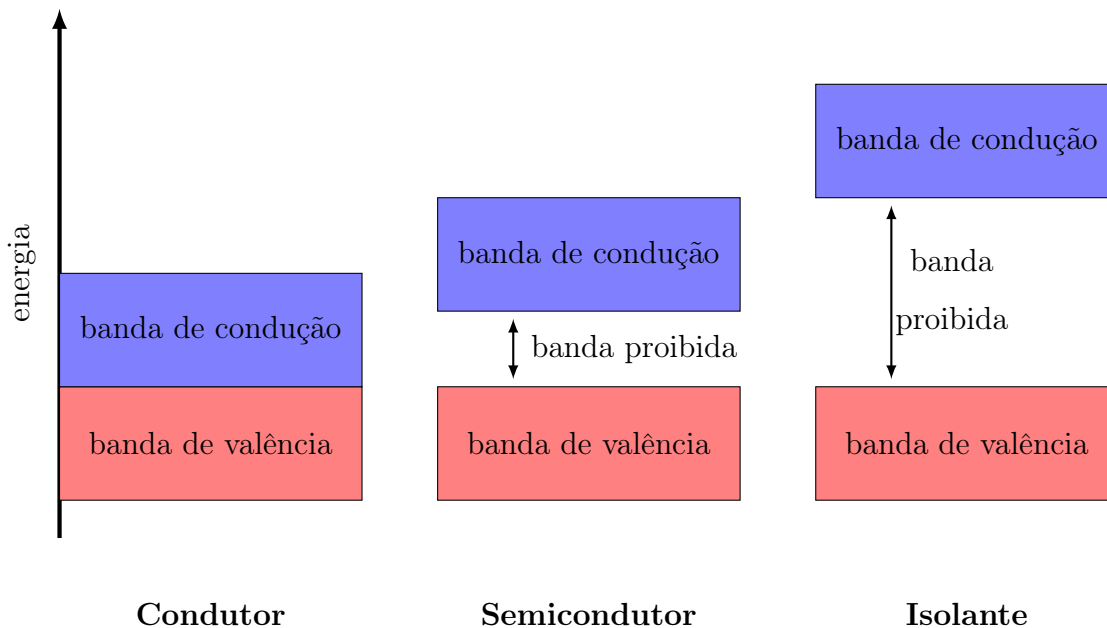
1.1 Supercondutividade

Na linha de pesquisa de Nanomateriais e Nanoestruturas, grande parte dos fundamentos teóricos é oriunda da chamada física da matéria condensada. Nesta linha de pesquisa, estudam-se não apenas as propriedades de materiais já conhecidos, mas busca-se também descobrir novos tipos de materiais, sendo que, em ambos os casos, sólidos têm se mostrado materiais promissores, pois já apresentam inúmeras aplicações, principalmente na área de tecnologias quânticas (1,2).

Materiais sólidos podem ser classificados de diferentes maneiras: quanto ao tipo de material do qual ele é composto, ao arranjo das partículas na sua estrutura cristalina, às diferentes ligações formadas por essas partículas, à estrutura de bandas e às propriedades elétricas, etc. Especificamente com relação à capacidade de conduzir corrente elétrica, os materiais podem ser classificados como condutores, isolantes ou semicondutores, como ilustra a Figura 1.

Materiais **condutores** são aqueles que apresentam uma camada de valência totalmente preenchida e não há um gap de energia entre a banda de valência e a de condução. Materiais **semicondutores** possuem um pequeno gap entre a banda de valência e a de condução, de forma que a passagem de elétrons de uma banda à outra requer energia, que pode vir, por exemplo, de uma excitação térmica ou óptica. Já os **isolantes** possuem um grande gap de energia entre a banda de valência e a de condução, o que proíbe a movimentação eletrônica de uma banda à outra.

Figura 1 – Representação da estrutura de bandas de materiais condutores (esquerda), semicondutores (centro) e isolantes (direita), em que a banda proibida é o *gap* de energia.



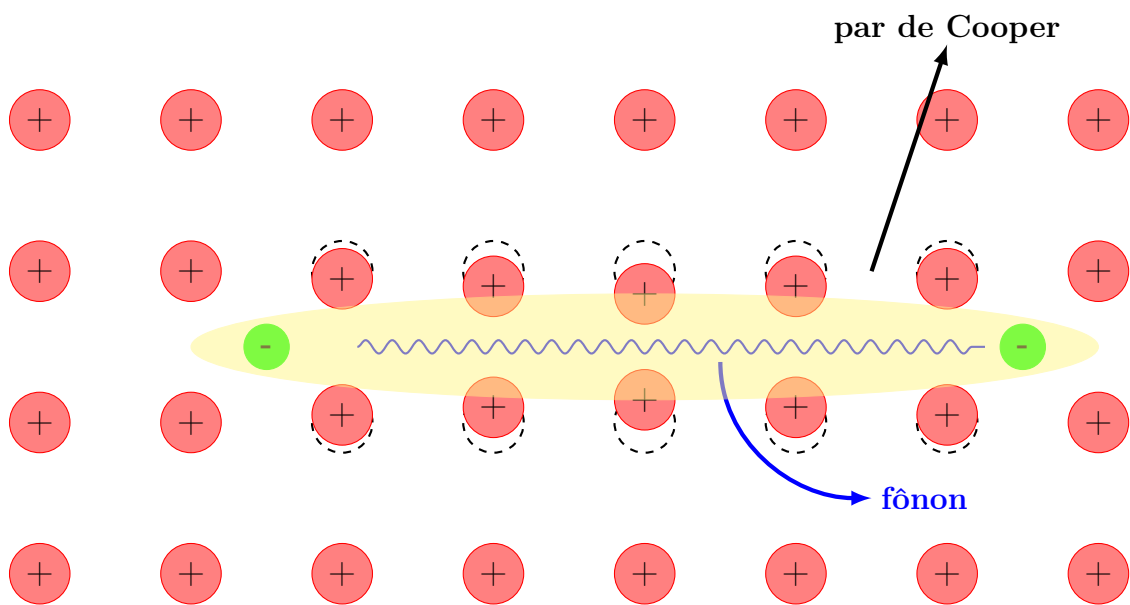
Fonte: Autoria própria.

Essas diferentes estruturas de bandas definem características específicas a esses tipos de materiais. Por exemplo, condutores são materiais cuja condutividade elétrica *diminui* com a temperatura, nos semicondutores a condutividade aumenta com a temperatura, e os isolantes não conduzem corrente elétrica. Entretanto, em 1911 o físico Heike Onnes descobriu que ao se resfriar um fio de mercúrio até 4.2 K , sua resistência elétrica sobre esse fio tende a zero (3), ou seja, a corrente elétrica pode fluir sem dissipação de calor. Esse fenômeno ficou conhecido como **supercondutividade**, que ocorre quando um material conduz eletricidade sem resistência alguma.

Três anos depois, Onnes descobriu que o chumbo também é um supercondutor só que a uma temperatura diferente (7 K) (4), ele percebeu então que essa temperatura de supercondutividade é específica para cada material, denominando-se assim **temperatura crítica** T_C . Nos anos seguintes, vários outros elementos foram descobertos como sendo supercondutores (5), mas apenas em 1957 é que John Bardeen, Leon Cooper e Rober Schrieffer conceberam a primeira teoria microscópica que explica o fenômeno da supercondutividade (6), conhecida como teoria BCS (do inglês, *Bardeen-Cooper-Schrieffer theory*). O aspecto central dessa teoria é a existência de uma interação efetiva atrativa entre dois elétrons: para $T < T_C$ um elétron se movendo em uma rede cristalina causa nesta uma

distorção, criando uma área de maior densidade de carga positiva ao seu redor. Um segundo elétron que esteja a uma certa distância dessa região de distorção (fônon) é atraído por ela. Assim, a interação efetiva entre esses dois elétrons será atrativa, devido à presença dos fônons da rede deformada. Esse sistema elétron-fônon-elétron ficou conhecido como **par de Cooper** (7), como ilustra a Figura 2.

Figura 2 – Representação do movimento de um par de Cooper pela rede do cristal. O movimento primeiro elétron gera uma distorção na rede (fônon) aumentando a densidade de carga positiva naquela região, que acaba atraindo um segundo elétron.



Fonte: autoria própria.

1.2 Transições de fase quânticas

1.2.1 Transição Superfluido-Isolante

Como vimos na seção anterior, podemos classificar um material em termos de suas propriedades de condução de 4 maneiras diferentes: condutor, semicondutor, isolante ou supercondutor. Entretanto, para que um material alcance o estado supercondutor, sua temperatura deve estar abaixo de uma determinada temperatura T_C . Portanto, um material que em $T > T_C$ é isolante ou condutor, poderá se tornar um supercondutor para $T < T_C$. Existe ainda uma outra classe de supercondutores chamados "supercondutores de alta temperatura crítica" HTSC (do inglês, *high- T_C Superconductors*), que, como o próprio nome diz, apresentam uma T_C bem maior do que os convencionais. Até o começo da década de 80, eram conhecidos apenas materiais cuja T_C é de poucos graus Kelvin, mas, em 1986, uma nova cerâmica foi descoberta com uma temperatura de aproximadamente 30 K (8). Nos anos seguintes, diversos materiais foram sendo descobertos com T_C cada vez mais próxima da temperatura ambiente. Atualmente, o sulfeto de hidrogênio H_2S com $T_C = 203\text{ K}$ (-70 °C) (9) é o supercondutor de maior temperatura crítica conhecido.

Do ponto de vista macroscópico, quando variamos a temperatura de um material e alcançamos uma T específica, esse material pode passar de uma fase para outra. Nesse caso, como quem determina a transição de fase são as flutuações térmicas, chamamos essa mudança de *transição de fase clássica* ou *transição de fase térmica*. Na medida em que $T \rightarrow 0$, flutuações térmicas desaparecem e restam apenas as flutuações quânticas. Diferentemente das térmicas, as flutuações quânticas são governadas por um outro tipo de parâmetro não-térmico que pode afetar a ordenação do sistema, como: campo magnético, impurezas (desordem) no sistema, concentração, entre outros (10). Porém, sendo transições em regime quântico, sua detecção nem sempre é trivial. Várias abordagens têm sido exploradas como, por exemplo, correlações quânticas (11) e concorrência (12) do estado fundamental, entropia de von Neumann (13), emaranhamento (14–16), entre outras.

Uma dessas transições é a **transição superfluido-isolante** SI (do inglês, *Superfluid-Insulator Transition*), fenômeno que foi primeiramente modelado por Anderson (17), que

propôs que para grau de desordem moderado ou forte a função de onda eletrônica do sistema se torna localizada, transformando metais ou supercondutores em isolantes (18, 19). Por se tratar de fenômenos de características opostas, materiais contendo ambas, localização e supercondutividade, são promissores para diversas aplicações, e estudá-los pode nos fornecer uma melhor compreensão de outros sistemas superfluidos diferentes como, por exemplo, supercondutores de alta T_C , nanofios supercondutores (16), gases atômicos ultra frios (20), entre outros.

Entretanto, a maioria dos estudos da transição SI tem tratado de sistemas bosônicos com fraca desordem ou não-interagentes (21–25), devido à limitação computacional de resolver exatamente sistemas de muitos corpos desordenados. Sendo assim, a teoria do Funcional da Densidade DFT (26) (do inglês, *Density Functional Theory*) apresenta vantagens em relação a outras técnicas pois permite o tratamento de problemas de muitos corpos de uma maneira suficientemente precisa com relativamente baixo custo computacional, uma vez que sua variável chave é a densidade eletrônica e não a função de onda.

Outro ponto importante é que nenhum dos estudos anteriores considerou sistemas superfluidos puramente fermiônicos e nenhum deles reportou a transição SI desencadeada pela concentração de impurezas V ou pela densidade de partículas n usando emaranhamento. Além disso, existe uma extensa discussão sobre a existência ou não de uma intensidade de desordem mínima V_{min} necessária para a localização em sistemas 1D e 2D (27–30) e também sobre a natureza da transição SI, se de fato é uma transição de fase ou um *crossover* (31, 32).

1.2.2 Transição Metal-Isolante

Como dito na seção anterior, uma mudança em certos parâmetros do sistema pode levar a uma transição entre as fases metálicas e isolante. Entretanto, diferentemente da transição SI a **transição metal-isolante** MI (do inglês, *Metal-Insulator Transition*) pode ser desencadeada por dois mecanismos distintos: um aumento no grau de desordem no sistema (por exemplo, interação Coulombica) que leva à uma localização das partículas em sítios específicos, conhecida como **transição Metal-Isolante de Anderson** (Ander-

son MI) (17), ou um aumento da interação entre partículas, conhecida como **transição Metal-Isolante de Mott** (Mott MI) (33–35), que também induz à uma localização quando há uma partícula por sítio.

Recentemente, significativos avanços têm sido alcançados em estudos teóricos considerando ambas transições (36–43). Entretanto, a maioria desses estudos utilizam a teoria do campo médio dinâmico DMFT (do inglês, *Dynamic Mean Field Theory*) (44), que apesar de conseguir tratar bem a correlação eletrônica em sistemas de muitos corpos é um método computacionalmente muito custoso.

O objetivo deste trabalho foi estudar as transições superfluido-isolante e metal-isolante em nanoestruturas desordenadas cujas impurezas foram distribuídas aleatoriamente pelo sistema. Para isso utilizamos a entropia linear como forma de quantificar o emaranhamento das diferentes fases. Nosso foco foi tentar entender como que certos parâmetros do sistema, como concentração de impurezas, densidade e outros, afetam o comportamento dessas transições. Encontramos uma relação entre a concentração de impurezas e a densidade do sistema para ambos os casos. Especificamente para a transição superfluido-isolante ainda fizemos um estudo incluindo temperatura no sistema, onde analisamos propriedades como trabalho quântico, variância e assimetria.

Os fundamentos teóricos da tese são apresentados no Capítulo 2, onde iniciamos pelo modelo de Hubbard. A segunda parte do capítulo é dedicada a apresentar os fundamentos da teoria do Funcional da Densidade (DFT) onde incluímos o esquema de Kohn-Sham (KS) e a versão da DFT para o modelo de Hubbard. A parte final do capítulo é reservada para a apresentação da definição de emaranhamento e como aplicamos o emaranhamento para o modelo de Hubbard.

No capítulo 3 apresentamos os resultados do trabalho onde começamos pela transição superfluido-isolante, passando pela análise dos sistemas sem temperatura e utilizando o emaranhamento como medida de quantificar a transição. Em seguida, discutimos os resultados obtidos através da análise do trabalho quântico e outros momentos quando incluímos temperatura no sistema. A última parte do capítulo foi destinada a discussão sobre a transição metal-isolante. Por fim, no Capítulo 4 apresentamos as conclusões finais e as perspectivas futuras.

2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 Modelo de Hubbard

Um dos grandes desafios de trabalhar com sistemas de muitos corpos é a descrição, em nível microscópico, da interação de uma grande quantidade de partículas. Sendo assim, é impossível resolver esses problemas analiticamente e, mesmo numericamente, a descrição exata se torna proibitiva já para poucas partículas.

Na tentativa de descrever sólidos microscopicamente, John Hubbard introduziu um Hamiltoniano que considera as correlações eletrônicas em bandas de energia, modelo que ficou conhecido como **modelo de Hubbard** (45). Apesar de ser um modelo relativamente simples, ele consegue prever diversos fenômenos interessantes como, por exemplo, ordenação magnética do material, transições de fase quânticas (metal-isolante e superfluido-isolante), efeitos de supercondutividade, entre outros.

O modelo de Hubbard consiste em considerar um sólido formado por posições nucleares (sítios) e elétrons em uma estrutura cristalina tridimensional. Uma vez que os núcleos são muito mais pesados que os elétrons, utiliza-se a aproximação de Born-Oppenheimer: rede cristalina estática, considerando portanto apenas os graus de liberdade eletrônicos. Em sua versão mais simples, o modelo de Hubbard considera interação de curto alcance, isto é, os elétrons interagem entre si apenas quando localizados em um mesmo sítio e possuem uma probabilidade de se deslocar para sítios vizinhos próximos. Sendo assim, o Hamiltoniano de Hubbard em segunda quantização é dado por:

$$\hat{H} = - \sum_{l=1,\sigma}^L t_{l,l+1} (\hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l+1,\sigma} + H.c.) - \tau (\hat{c}_{1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{L,\sigma} + H.c.) + \sum_{l=1}^L U_l \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} + \sum_{l=1,\sigma}^L V_l \hat{n}_{l\sigma}, \quad (1)$$

onde $t_{l,l+1}$ é o parâmetro de *hopping* associado à energia cinética do sistema, $H.c.$ é o Hermitiano conjugado do primeiro termo do parênteses, τ é o acoplamento entre o primeiro e o último sítio da cadeia, U_l é a interação intra-sítio, V_l é o potencial externo do sítio l , $\hat{c}_{l\sigma}^\dagger$ e $\hat{c}_{l\sigma}$ são os operadores de criação e destruição de partículas de spin σ no sítio l , respectivamente, e $\hat{n}_{l\sigma} = \hat{c}_{l\sigma}^\dagger \hat{c}_{l\sigma}$ é o operador densidade. A densidade média de partículas

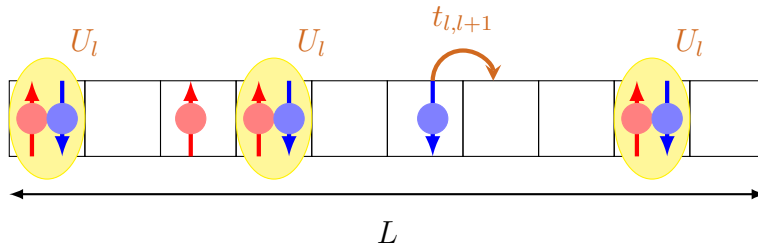
é definida como

$$n = \frac{N}{L}, \quad (2)$$

onde N é o número total de partículas ($N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$) e L é o número de sítios da cadeia.

A eq. (1) representa o Hamiltoniano de Hubbard para um sistema unidimensional. Basicamente, o modelo é representado por uma cadeia linear de sítios onde cada sítio pode acomodar até dois elétrons com spin opostos, como ilustra a Figura 3.

Figura 3 – Representação de uma cadeia unidimensional de L sítios descrita pelo modelo de Hubbard em sua versão mais simples.



Fonte: Autoria própria.

Para o caso particular em que o *hopping* t e a interação U é a mesma para todos os sítios, a distribuição de partículas pela cadeia vai depender de dois fatores: do potencial externo V_i e das condições de contorno. Para sistemas sem campos externos ($V_i = 0$), as partículas serão distribuídas de maneira equivalente pelos sítios da cadeia, e, assim, chamamos o sistema de homogêneo e, quando houver algum tipo de potencial externo ($V_i \neq 0$), então chamamos o sistema de heterogêneo. Mas note que pode haver efeitos de tamanho finito, que geram oscilações na distribuição de partículas, devido à presença das bordas, dependendo da condição de contorno adotada. As condições de contorno são inseridas através do acoplamento τ , onde, para condições de contorno abertas OBC (do inglês, *Open Boundary Conditions*) temos: $\tau = 0$; para condições de contorno periódicas PBC (do inglês, *Periodic Boundary Conditions*) temos: $\tau = t$; e, para condições de contorno torcidas TBC (do inglês, *Twisted Boundary Conditions*) temos $\tau = te^{i\varphi}$, onde φ é a torção (46), como ilustra a Figura 4.

Para alguns casos limites, o Hamiltoniano da eq. (1) tem solução exata. Para o caso em que a cadeia é homogênea e no limite $L \rightarrow \infty$, obtém-se, através da solução exata de Bethe-Ansatz (47), a energia do estado fundamental,

$$e = -2L \int_{-Q}^Q \rho(k) \cos k dk, \quad (3)$$

onde a função $\rho(k)$ vem de um conjunto de equações integrais acopladas de Lieb-Wu,

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} + \frac{\cos k}{2\pi} \int_{-B}^B \frac{8U\sigma(\lambda)}{U^2 + 16(\sin k - \lambda)^2} d\lambda \quad (4)$$

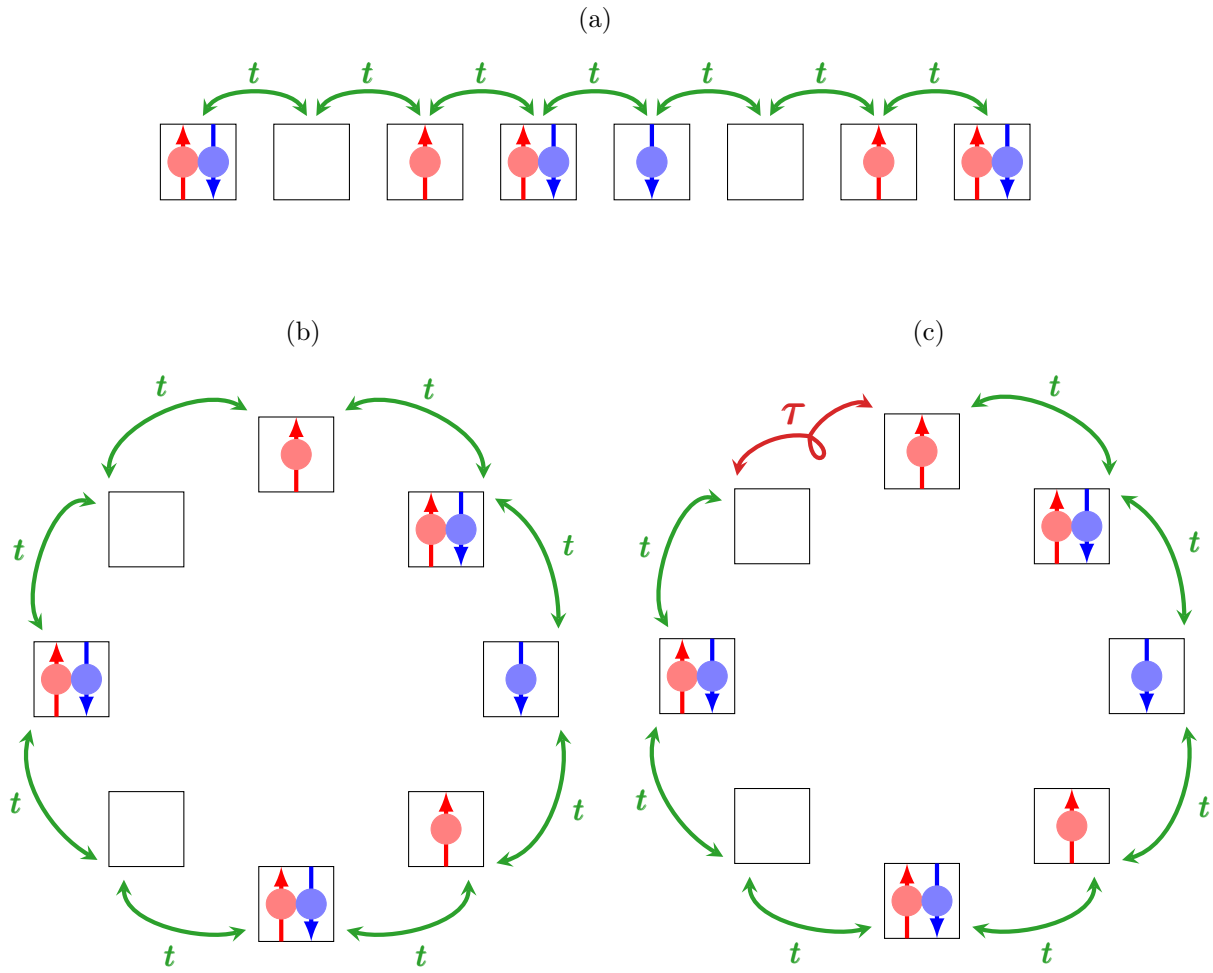
$$\sigma(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_{-Q}^Q \frac{4U\rho(k)}{U^2 + 16(\lambda - \sin k)^2} dk - \frac{1}{\pi} \int_{-B}^B \frac{2U\sigma(\lambda')}{U^2 + 4(\lambda - \lambda')^2} d\lambda', \quad (5)$$

em que Q e B são determinados pelas condições

$$\int_{-Q}^Q \rho(k) dk = n \quad \int_{-B}^B \sigma(\lambda) d\lambda = n_{\downarrow} \quad (6)$$

Para casos de cadeias heterogêneas e/ou de tamanhos finitos, deve-se utilizar outros métodos para resolver o Hamiltoniano da eq. (1) como, por exemplo, o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade DMRG (48) (do inglês, *Density-Matrix Renormalization Group*) ou a teoria do Funcional da Densidade DFT. Embora a DMRG seja numericamente exata, apresenta algumas dificuldades para algumas condições de contorno e se torna computacionalmente muito custosa para $L \gtrsim 200$ (49). Sendo assim, na próxima seção discutiremos os principais conceitos da DFT e suas vantagens em relação a outros métodos.

Figura 4 – Ilustração de três possíveis condições de contorno. Os painéis representam as condições de contorno (a) aberta, (b) periódica e (c) torcida.



Fonte: Adaptado (46).

2.2 Teoria do Funcional da Densidade

De acordo com a teoria da mecânica quântica, toda a informação possível de se obter sobre um sistema está contida em sua função de onda ψ . Em casos não relativísticos, sob ação de potenciais externos independentes do tempo, obtemos essas informações resolvendo a equação de Schrödinger independente do tempo, a qual com a aproximação de Born-Oppenheimer, que separa as descrições dos núcleos e dos elétrons devido à diferença de massa, é dada por:

$$(\hat{T} + \hat{U} + \hat{V}) |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (7)$$

onde

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2, \quad (8)$$

$$\hat{U} = \sum_{i < j} \frac{q^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (9)$$

$$\hat{V} = \sum_i \frac{Qq}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}|} = \sum_i v(\mathbf{r}_i), \quad (10)$$

em que o primeiro termo \hat{T} é o operador de energia cinética dos elétrons, o segundo \hat{U} é a interação Coloumbiana entre eles e o último termo \hat{V} é o potencial de interação entre os núcleos e os elétrons. Conhecendo a função de onda (ou supondo uma função tentativa que seja uma combinação linear de outras funções) e definindo o potencial \hat{V} , resolve-se a eq. (7), obtém-se a energia do sistema e, através dos valores esperados de operadores para essa ψ , calculam-se os observáveis como, por exemplo, a densidade de partícula do sistema

$$n(\mathbf{r}) = N \int d^3r_2 \int d^3r_3 \cdots \int \psi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d^3r_N. \quad (11)$$

Muitos métodos poderosos para se resolver a eq. (7) foram desenvolvidos para problemas de muitos corpos como, por exemplo, o método de Interação de Configuração CI (50) (do inglês, *Configuration Interaction*) ou a teoria de Pares Acoplados CC (51) (do inglês, *Coupled-Cluster theory*), porém a maioria desses métodos é baseada no conhecimento da função de onda.

Entretanto, o problema desses métodos é a grande demanda computacional, principalmente para sistemas com um grande número de átomos. Por exemplo, para descrever uma variável precisamos de um número P de parâmetros que está vinculado com uma acurácia a desejada para o resultado. Assim, como cada elétron precisa de 3 coordenadas para ser descrito, o número de parâmetros necessários para se descrever um sistema de N elétrons é

$$P = a^{3N}.$$

O valor de a é arbitrário e valores típicos estão entre $3 \leq a \leq 10$, onde para $a = 3$ a precisão é ruim e para $a = 10$ a precisão é boa. Então, para descrever um sistema com $N = 100$ elétrons e com uma boa precisão, o número de parâmetros necessários é de 10^{300} , que é um número proibitivo de parâmetros, mesmo com o avanço computacional que temos atualmente.

A grande diferença da DFT nesse sentido é que ela é uma teoria baseada na densidade eletrônica $n(r)$ do sistema, e não mais na função de onda. Uma vantagem prática dessa diferença é que para descrever o sistema não é necessário mais de $3N$ coordenadas dos elétrons, mas apenas de 3 coordenadas da densidade, ou seja, para se obter um resultado confiável usando um método baseado na função de onda precisam-se de 10^{3N} parâmetros, e, para um método baseado na densidade eletrônica, apenas 10^3 parâmetros.

2.2.1 Teoremas de Hohenberg-Kohn (HK)

A base da teoria do Funcional da Densidade é o **teorema de Hohenberg-Kohn** (52), que afirma que a energia E do estado fundamental, a função de onda ψ e qualquer outra propriedade molecular pode ser obtida univocamente através da densidade eletrônica do estado fundamental $n_0(r)$. Sendo assim, como consequência temos que a função de onda, a energia e os observáveis são *funcionais* da densidade eletrônica do sistema, ou seja,

$$\psi = \psi[n_0(r)], \quad E = E[n_0(r)], \quad O = O[n_0(r)].$$

O outro teorema que é base para a DFT é chamado de **teorema variacional de**

Hohenberg-Kohn, que afirma que sendo $n_0(r)$ a densidade eletrônica do estado fundamental, essa será a densidade que minimiza a energia do sistema,

$$E_0 = E[n_0] \leq E[n], \quad (12)$$

em relação à energia de qualquer outra densidade $n(r)$. Então,

$$\begin{aligned} E_0 &= \langle \psi[n_0] | \hat{H} | \psi[n_0] \rangle = \langle \psi[n_0] | \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} | \psi[n_0] \rangle \\ &= T[n_0] + U[n_0] + V[n_0] \\ &= F[n_0] + V[n_0], \end{aligned} \quad (13)$$

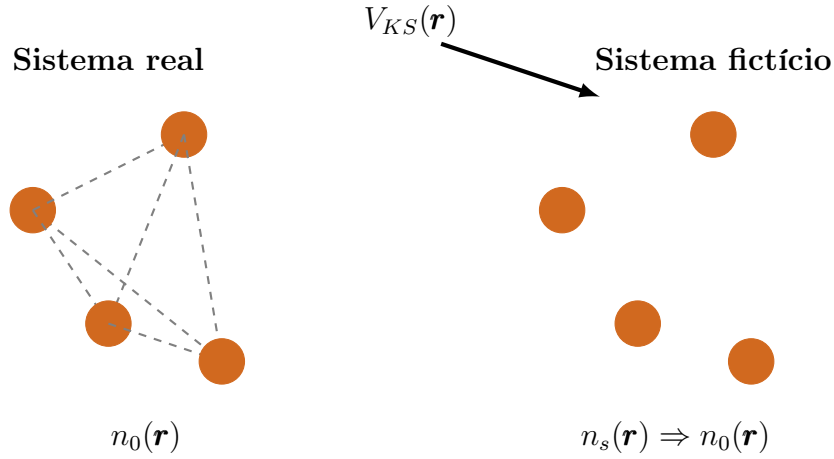
onde $F[n_0] = T[n_0] + U[n_0]$ é um funcional da densidade universal, e $V[n_0]$ é o funcional dependente do sistema específico. Entretanto, a eq. (13) não tem solução exata pois os funcionais $T[n_0]$ e $U[n_0]$ são desconhecidos na maioria dos casos. Sendo assim, é preciso utilizar aproximações para os termos de energia cinética e interação eletrônica.

2.2.2 Esquema de Kohn-Sham (KS)

Os teoremas de HK garantem que é possível calcular a energia e todas as outras propriedades moleculares através da densidade eletrônica do estado fundamental, e que essa densidade minimiza o valor da energia. Porém, os teoremas não fornecem meios para obter a densidade sem o conhecimento de ψ e ainda como calcular E e outras propriedades através de $n_0(r)$.

A solução para parte deste problema veio em 1965 com o **esquema de Kohn-Sham** (KS) (53). O esquema KS é capaz de resolver, a princípio, o problema de um sistema de elétrons interagentes através de um outro sistema de referência fictício de elétrons não-interagentes. Para isso, esse sistema fictício experimenta um potencial externo $V_{KS}(r)$, especificamente construído para que a densidade eletrônica fictícia seja igual à densidade do estado fundamental real.

Figura 5 – Ilustração do esquema de Kohn-Sham: utiliza-se um sistema fictício de elétrons não-interagentes que apresenta uma densidade do estado fundamental igual ao sistema real, quando sob ação do potencial externo $V_{KS}(\mathbf{r})$.



Fonte: Autoria própria.

Assim, definem-se duas novas quantidades,

$$\Delta T[n] \equiv T[n] - T_s[n] \quad (14)$$

$$\Delta U[n] \equiv U[n] - \frac{e^2}{2} \int d^3r' \int \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r, \quad (15)$$

em que a primeira é a diferença entre a energia cinética do sistema real e do fictício $T_S[n]$, e a segunda a diferença entre a energia de interação Coulombiana e a energia de Hartree U_H (energia eletrostática clássica, isto é, que descarta correlações quânticas). Substituindo as equações acima na eq. (13) temos

$$\begin{aligned} E[n] &= V[n] + T[n] + U[n] \\ &= \int n(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r} + T_s[n] - \frac{e^2}{2} \int d^3r' \int \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r + \Delta T[n] + \Delta U[n] \\ &= \int n(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r} + T_s[n] - \frac{e^2}{2} \int d^3r' \int \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r + E_{xc}[n], \end{aligned} \quad (16)$$

onde usamos a relação $\langle \psi | \sum_i v(\mathbf{r}_i) | \psi \rangle = \int n(\mathbf{r})v(\mathbf{r})d\mathbf{r}$. Define-se então o funcional **energia de troca e correlação** E_{xc} (do inglês, *exchange-correlation energy*),

$$E_{xc}[n] \equiv \Delta T[n] + \Delta U[n]. \quad (17)$$

Precisamos portanto encontrar a densidade $n(\mathbf{r})$ que minimiza a eq. (16),

$$0 = \frac{\delta E[n]}{\delta n(\mathbf{r})} = \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(\mathbf{r})} + V_{KS}(\mathbf{r}), \quad (18)$$

onde V_{KS} é o potencial de Kohn-Sham,

$$V_{KS}(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r' + V_{xc}(\mathbf{r}), \quad (19)$$

onde $V_{xc}(\mathbf{r}) \equiv \delta E_{xc}[n]/\delta n(\mathbf{r})$ é definido como **potencial de troca e correlação**.

A eq. (18) representa a minimização de um sistema de partículas não interagentes através de uma densidade $n(\mathbf{r})$ de partículas interagentes. Para resolver essa equação, a densidade eletrônica precisa satisfazer a equação de Schrödinger para o sistema fictício,

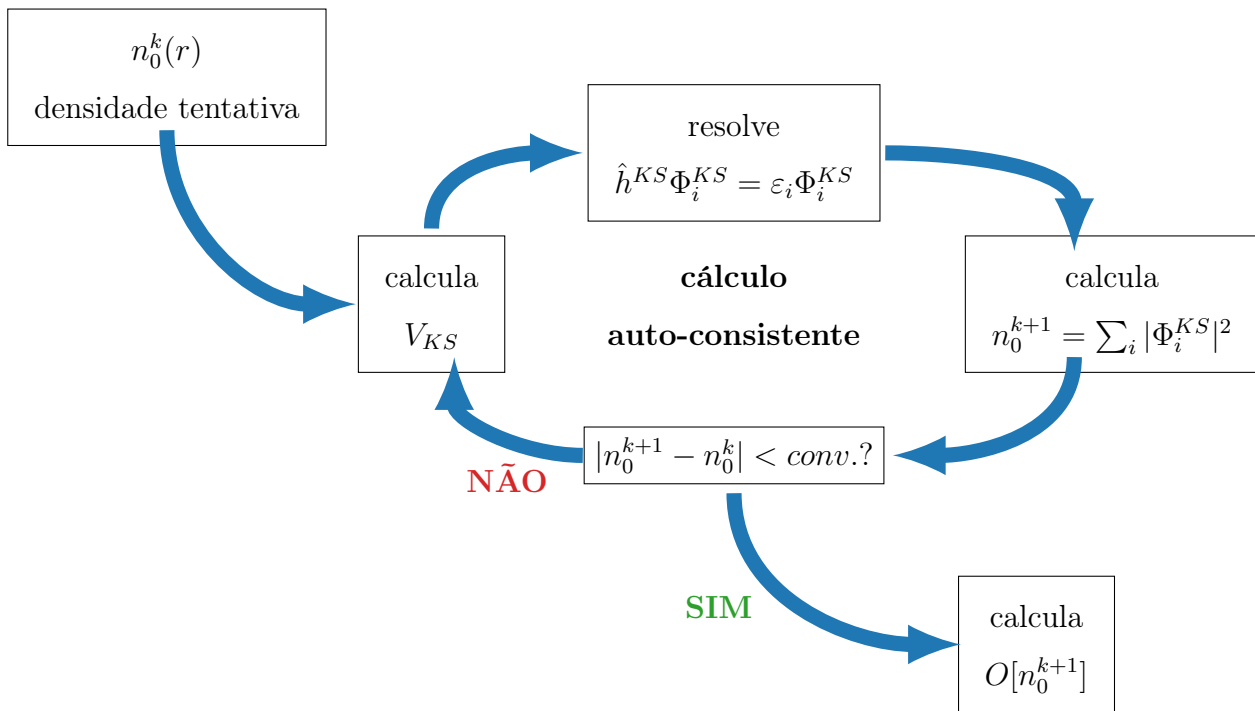
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{KS}(\mathbf{r}) \right] \Phi_i^{KS}(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Phi_i^{KS}(\mathbf{r}), \quad (20)$$

onde os orbitais Φ_i^{KS} que reproduzem a densidade do sistema real são chamados de **orbitais de Kohn-Sham** e levam à densidade,

$$n(\mathbf{r}) \equiv n_{KS}(\mathbf{r}) = \sum_i |\Phi_i^{KS}(\mathbf{r})|^2. \quad (21)$$

As eqs. (20) e (21) possuem dois problemas: a sua solução e o funcional E_{xc} . Em relação ao primeiro, para se encontrar a densidade $n(\mathbf{r})$ do sistema, são necessários os orbitais Φ_i^{KS} , mas para encontrá-los precisa-se resolver a equação de Kohn-Sham, que por sua vez, contém dois termos (o segundo e o terceiro termo de V_{KS}) que dependem de $n(\mathbf{r})$. Uma maneira de lidar com esse problema é utilizar uma ferramenta chamada de *método auto-consistente*, em que, primeiramente, define-se uma densidade tentativa $n(\mathbf{r})$ e com essa densidade calcula-se V_{KS} . Resolve-se então a eq. (20) e obtém-se os orbitais de Kohn-Sham. Com esses orbitais calcula-se uma nova densidade e compara-se esta nova densidade com a densidade tentativa inicial. Se o sistema convergir, isto é, se a diferença entre elas for menor do que um certo valor de precisão pré-estabelecido, a densidade foi encontrada e pode-se a partir dela obter a energia e outras propriedades do sistema. Caso a convergência não tenha sido obtida, essa densidade final é usada como densidade tentativa e um novo ciclo se inicia, como ilustra a Figura 6.

Figura 6 – Representação do ciclo auto-consistente para resolver as equações de Kohn-Sham. O valor de convergência é arbitrário.



Fonte: Autoria própria.

O segundo problema é o funcional E_{xc} . Até agora, pelos teoremas de Hohenberg-Kohn e pela equação de Kohn-Sham vemos que a DFT é exata. Entretanto, a energia de troca e correlação não é conhecida, exceto para casos particulares. Somente aqui, devido à necessidade de aproximações para essa expressão é que os cálculos de DFT se tornam aproximados, e a precisão destes dependerá crucialmente das aproximações utilizadas.

2.2.3 Aproximações para a energia de troca e correlação: Aproximação da Densidade Local

A aproximação mais simples para a energia de troca e correlação é a **aproximação da Densidade Local** (53) LDA (do inglês, *Local-Density Approximation*). A ideia central da LDA consiste em usar informações de sistemas interagentes, porém homogêneos (com $n(r) = n = constante$), como aproximação para sistemas heterogêneos, substituindo-se

n pela densidade exata $n(r)$ do sistema. Assim, por exemplo, se conhecermos o funcional da densidade explicitamente para uma propriedade no caso de sistemas homogêneos, $O^{hom}[n(r)]$, podemos aplicar a LDA para obter de forma aproximada a grandeza $O^{het}[n(r)]$ do sistema heterogêneo:

$$O^{LDA}[n(r)] \approx O^{het}[n(r)] = \int O^{hom}(n) d^3r \Big|_{n \rightarrow n(r)} \quad (22)$$

Por construção, a LDA é formalmente exata em sistemas homogêneos e uma boa aproximação em sistemas cuja densidade varie lentamente com a posição como, por exemplo, sólidos. Para o modelo de Hubbard, e em particular para cálculos de emaranhamento, a LDA se mostra uma aproximação eficiente, com desvios médios de $\sim 2\%$ (54–56).

2.2.4 DFT para o modelo de Hubbard

Como mostra a eq. (22), a realização de cálculos de DFT via aproximação LDA no modelo de Hubbard, requer funcionais da densidade para cadeias homogêneas para as grandezas de interesse. Para a energia, utilizamos o funcional aproximado analítico (LSOC) (57). Assim a LDA para a energia será dada por:

$$E^{LDA}[n; U] = \sum_i e^{LSOC}(n, U)|_{n \rightarrow n_i}, \quad (23)$$

$$e^{hom}(n, U) \approx e^{LSOC}(n, U) = -\frac{2\beta(U)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta(U)}\right), \quad (24)$$

onde $\beta(U)$ é um número obtido da equação transcendental

$$-\frac{2\beta(U)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{\beta(U)}\right) = -4 \int_0^\infty \frac{J_0(x)J_1(x)}{x [1 + \exp(Ux/2)]} dx, \quad (25)$$

em que J_0 e J_1 são as funções de Bessel de ordem 0 e 1, respectivamente, e $\beta(U)$ tem valor exato nos limites $\beta(U = 0) = 2$ e $\beta(U = \infty) = 1$.

Sendo assim, para obtermos a energia de troca e correlação por sítio de um sistema homogêneo, inserimos a energia cinética e a energia de Hartree,

$$e_{xc}(n, U) \approx e^{LSOC}(n, U) - t_s(n) - e_H(n), \quad (26)$$

onde

$$t_s = -\frac{4t}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right), \quad (27)$$

$$e_H = \frac{Un^2}{4}. \quad (28)$$

Apesar de existir um funcional aproximado para energia do modelo de Hubbard (58) mais geral que o LSOC, pois permite o tratamento de sistemas magnetizados e fenômenos dependentes de spin, neste trabalho adotamos o LSOC pois desconsideramos magnetização interna ou presença de campos magnéticos externos.

Neste trabalho utilizou-se o modelo de Hubbard unidimensional para descrever os superfluidos com cadeias de $L = 100$ sítios e também considerou-se uma interação intra-sítio e uma probabilidade de *hopping* uniforme por toda a cadeia ($U_l = U$ e $t_{l,l+1} = t$) e em unidades de t , com $t = 1$. Além disso, para todos os cálculos adotou-se a aproximação BA-LDA para a energia de troca e correlação e condição de contorno aberta. Sendo assim, reformulando a DFT para o modelo de Hubbard o Hamiltoniano KS é

$$\hat{h}^{KS} = -t \sum_{l=1,\sigma}^{100} \left(\hat{c}_{l,\sigma}^\dagger \hat{c}_{l+1,\sigma} + H.c. \right) + U \sum_{l=1}^{100} \hat{n}_{l,\uparrow} \hat{n}_{l,\downarrow} + \sum_{l=1,\sigma}^{100} V_l^{KS} \hat{n}_{l,\sigma}, \quad (29)$$

onde

$$V_l^{KS} = V^{KS}[n_i] = V[n_i] + V_H[n_i] + V_{xc}[n_i]. \quad (30)$$

2.3 Emaranhamento

A mecânica quântica, por natureza, é uma teoria que intriga pesquisadores desde o começo do século XX devido aos seus fenômenos contra-intuitivos, como por exemplo, o princípio da Incerteza de Heisenberg e o tunelamento quântico. Um de seus fenômenos mais fascinantes e talvez o mais desafiador é o **emaranhamento**. Um sistema, que é formado por subsistemas, é dito emaranhado se sua função de onda não pode ser escrita como um produto das funções de onda de seus subsistemas de maneira separada. Sendo

assim, uma medida feita sobre um subsistema irá afetar outros, dependendo do grau de emaranhamento que possuam.

Matematicamente, para um sistema composto por apenas dois subsistemas, ψ_1 e ψ_2 , o sistema total é emaranhado se:

$$|\psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle. \quad (31)$$

Os estados abaixo ilustram casos de sistema separável e emaranhado:

$$\begin{array}{ll} |\psi\rangle = |00\rangle = |0\rangle \otimes |0\rangle & |\phi\rangle = \frac{(|01\rangle + |10\rangle)}{\sqrt{2}} \\ \text{estado separável} & \text{estado emaranhado} \end{array}$$

onde a notação $|00\rangle$ indica duas partículas no estado $|0\rangle$, e $|01\rangle$ e $|10\rangle$ uma partícula no estado $|0\rangle$ e uma no estado $|1\rangle$.

Como pode ser visto, em ambos os casos o estado do sistema todo é bem definido, mas em sistemas emaranhados o de cada subsistema não é. Contudo, identificar e quantificar o grau de emaranhamento de um sistema não é uma tarefa trivial. E como o emaranhamento é uma peça importante no desenvolvimento de tecnologias quânticas, incluindo dispositivos de criptografia e computação quântica, é essencial que haja o desenvolvimento de novas ferramentas com esse intuito.

Na prática, a maneira de quantificar o grau de emaranhamento depende do tipo de sistema. Neste trabalho vamos tratar apenas de sistemas *bipartidos* (dois subsistemas) de estado total puro, para os quais o emaranhamento é bem definido pela **entropia de von Neumann** (59), técnica já bem estabelecida na literatura.

2.3.1 Entropia de von Neumann

Para obtermos informação sobre um determinado sistema na teoria Clássica da Informação usamos o conceito de *entropia*. A entropia mede a incerteza sobre uma medida aleatória de acordo com a probabilidade dessa medida de ocorrer. A maneira que fazemos isso classicamente é através da **entropia de Shannon** (59). Assim, considere um con-

junto $\mathcal{H} = \{h_1, h_2, \dots, h_k\}$ onde cada variável h_i está associada a uma probabilidade p_i , onde $\sum_i^k p_i = 1$. A entropia de Shannon associada com a distribuição de probabilidades $\{p_1, p_2, \dots, p_k\}$ é definida como

$$H(p_1, p_2, \dots, p_k) \equiv - \sum_i^k p_i \log_2 p_i. \quad (32)$$

O análogo quântico da entropia de Shannon é a **entropia de von Neumann** (59) em que a informação está associada com os estados quânticos $|\psi_i\rangle$ do sistema e sua distribuição de probabilidades $\{p_1, p_2, \dots, p_k\}$. A maneira que usamos para representar esses estados é através da **matriz densidade** ou **operador densidade**, definida como

$$\rho \equiv \sum_i^k p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (33)$$

Assim, a entropia de von Neumann para um determinado estado ρ é definida como

$$S(\rho) \equiv -Tr(\rho \log_2 \rho). \quad (34)$$

Se λ_i são os autovalores de ρ , então podemos reescrever a eq. (34) como

$$S(\rho) = - \sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i. \quad (35)$$

Para um estado total puro bipartido,

$$\rho_{12} = |\psi_{12}\rangle \langle \psi_{12}|,$$

pode-se quantificar o grau de emaranhamento entre os subsistemas através da expressão

$$S_1 = -Tr(\rho_1 \log_2 \rho_1), \quad (36)$$

onde ρ_1 é a matriz densidade reduzida do subsistema 1, que é obtida através do traço da matriz densidade total nos graus de liberdade do subsistema 2,

$$\rho_1 = Tr(\rho_{12}). \quad (37)$$

Pode-se mostrar que $S_1 = S_2 = -Tr[\rho_2 \log_2 \rho_2]$, com $\rho_2 = Tr[\rho_{12}]$, o que é consistente com o fato de que o grau de emaranhamento entre os subsistemas 1 e 2 é um só.

2.3.2 Emaranhamento para o modelo de Hubbard

Na seção anterior, vimos que o grau de emaranhamento de um sistema quântico está relacionado com a matriz densidade desse sistema. Então essa matriz densidade vai depender do tipo do subsistema e da natureza do emaranhamento. Por exemplo, se os subsistemas 1 e 2 são partículas com um determinado spin σ podemos ter o emaranhamento entre essas partículas devido às suas posições espaciais ou às suas orientações de spins. Se elas estiverem fixas, então o emaranhamento se dará apenas entre os spins.

No caso do modelo de Hubbard, as partículas podem ocupar diferentes sítios. Para uma cadeia com L sítios definimos um dos sítios como o subsistema 1 e o resto da cadeia como o subsistema 2. Sendo assim, o emaranhamento será entre a ocupação dos sítios pelas partículas, o que chamamos de *emaranhamento de ocupação*. Para isso precisamos reescrever a entropia na base de ocupação.

Como visto na Seção 2.2.4 a variável utilizada no modelo de Hubbard é o número de ocupação. Dessa maneira, os estados possíveis de um único sítio nesse modelo são: $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$ que representam, respectivamente, nenhuma ocupação, ocupação de uma partícula com spin *up*, ocupação de uma partícula com spin *down* e ocupação dupla de partículas com spins opostos (devido ao Princípio de Exclusão de Pauli).

Assim, representamos a matriz densidade reduzida de um sítio i na base de ocupação como

$$\rho_i = \begin{pmatrix} w_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_\uparrow & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_\downarrow & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w_2 \end{pmatrix} \\ = w_0 |0\rangle \langle 0| + w_\uparrow |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + w_\downarrow |\downarrow\rangle \langle \downarrow| + w_2 |\uparrow\downarrow\rangle \langle \uparrow\downarrow|, \quad (38)$$

onde w_0 é a probabilidade de ocupação nula, w_σ é a probabilidade de ocupação de uma partícula de spin σ e w_2 é a probabilidade de dupla ocupação, tal que $\sum_i w_i = 1$. Assim, de acordo com a eq. (35) entropia de emaranhamento do sítio i torna-se

$$S_i = -w_0 \log_2 w_0 - w_\uparrow \log_2 w_\uparrow - w_\downarrow \log_2 w_\downarrow - w_2 \log_2 w_2. \quad (39)$$

O valor esperado dos operadores de densidade serão:

$$\langle \hat{n}_\uparrow \rangle = Tr(\hat{n}_\uparrow \rho_i) = w_\uparrow + w_2 \quad (40)$$

$$\langle \hat{n}_\downarrow \rangle = Tr(\hat{n}_\downarrow \rho_i) = w_\downarrow + w_2 \quad (41)$$

$$\langle \hat{n}_{\uparrow\downarrow} \rangle = Tr(\hat{n}_{\uparrow\downarrow} \rho_i) = w_2. \quad (42)$$

Por consequência, a probabilidade de ocupação nula é $w_0 = 1 - w_\uparrow - w_\downarrow - w_2$. A probabilidade de dupla ocupação pode ser obtida em termos da energia do sistema,

$$w_2 = \frac{\partial e_0(n, U)}{\partial U}, \quad (43)$$

graças ao teorema de Hellman-Feynman (60), onde $e_0 = E_0/L$ é a energia do estado fundamental por sítio. Então através das expressões de densidade e magnetização $n = \langle \hat{n}_\uparrow \rangle + \langle \hat{n}_\downarrow \rangle$ e $m = (\langle \hat{n}_\uparrow \rangle - \langle \hat{n}_\downarrow \rangle) / 2$ e da eq. (43) obtemos as probabilidades de ocupação em função da energia, densidade e magnetização,

$$w_\uparrow = \frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} + m \quad (44)$$

$$w_\downarrow = \frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} - m \quad (45)$$

$$w_0 = 1 - n + \frac{\partial e_0}{\partial U}, \quad (46)$$

e reescrevemos a entropia de emaranhamento para o modelo de Hubbard homogêneo,

$$\begin{aligned} S_i(n, m, U) = & - \left(\frac{n_i}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} + m \right) \log_2 \left(\frac{n_i}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} + m \right) \\ & - \left(\frac{n_i}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} - m \right) \log_2 \left(\frac{n_i}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} - m \right) \\ & - \left(1 - n_i + \frac{\partial e_0}{\partial U} \right) \log_2 \left(1 - n_i + \frac{\partial e_0}{\partial U} \right) - \frac{\partial e_0}{\partial U} \log_2 \left(\frac{\partial e_0}{\partial U} \right). \end{aligned} \quad (47)$$

Esta é a equação que quantifica o emaranhamento de um único sítio em relação aos demais em cadeias de Hubbard. Se o estado do sítio é conhecido, então um dos $w_i = 1$ e os outros são nulos, e o emaranhamento é nulo. Ao contrário, quando há a total indeterminação do estado do sítio então todas as probabilidades de ocupação possuem o mesmo valor (1/4) e o emaranhamento é igual a 2. Então o valor da entropia de emaranhamento de von Neumann para um único sítio varia de 0 a 2.

A entropia de von Neumann está associada à pureza (61) dos subsistemas,

$$\gamma(\rho) \equiv Tr(\rho^\dagger \rho) = Tr(\rho^2). \quad (48)$$

A pureza mede o quão puro é um estado quântico. Assim, para um estado normalizado $|\psi\rangle$ em um espaço de Hilbert de dimensão a , a pureza satisfaz a relação $1/a \leq \gamma \leq 1$. Então para relacionar a pureza de um estado quântico com a entropia, expandimos a função logarítmica da eq. (34) e truncamos a série no primeiro termo,

$$\begin{aligned} S(\rho) &= -Tr(\rho \log_2 \rho) \\ &= -Tr \left\{ \rho \left[(\rho - 1) - \frac{(\rho - 1)^2}{2} + \dots \right] \right\} \\ &= -Tr[\rho(\rho - 1)] \\ &= 1 - Tr(\rho^2) = 1 - \gamma. \end{aligned} \quad (49)$$

Para sistemas homogêneos e em $L \rightarrow \infty$, em que todos os sítios são equivalentes, S será o mesmo para todos os sítios e obtidos exatamente pela expressão (47). Perceba portanto que temos na eq. (47) um funcional da densidade **exato** para o emaranhamento em sistemas homogêneos. Portanto podemos usá-lo em uma aproximação LDA (62) para obter o emaranhamento aproximado em cadeias heterogêneas.

A eq.(49) é chamada de **entropia linear** e relaciona de uma maneira mais simples a pureza de um estado e o emaranhamento. Assim, para um estado totalmente puro, $\gamma = 1$ e $S^{lin} = 1$, e para um estado parcialmente misturado a entropia de emaranhamento vai estar entre 0 e 1.

A entropia de von Neumann tem sido utilizada para medidas de emaranhamento em sistemas bipartites de estados puros (63). Entretanto, a entropia linear tem se mostrado uma alternativa mais viável para sistemas com muitos graus de liberdade (64–66), uma vez que computacionalmente ela é mais prática. Além disso, resultados experimentais de sistemas com átomos ultrafrios em redes ópticas tem sido precisamente reproduzidos pelo modelo de Hubbard unidimensional (67,68). Com essa motivação, França e colaboradores desenvolveram um funcional da densidade aproximado para a entropia linear (56).

Para expressar a entropia linear como uma função explícita da densidade, elas propuseram os funcionais

$$S^{lin}[n_i, U > 0] \approx 2n_i - \frac{3n_i^2}{2} + [(4n_i - 2)\alpha(U) - 4\alpha^2(U)] \times \Theta[n_i - \alpha(U) - 1/2], \quad (50)$$

para interações repulsivas e

$$S^{lin}[n_i, U < 0] \approx n_i - \frac{n_i^2}{2} + 2\alpha(|U|) \sin\left(\frac{\pi n_i}{2}\right) - 4\alpha^2(|U|) \sin^2\left(\frac{\pi n_i}{2}\right), \quad (51)$$

para interações atrativas, onde

$$w_2 \equiv \alpha(U) = 2 \int_0^\infty \frac{J_0(x)J_1(x)e^{Ux/2}}{(1 + e^{Ux/2})^2} dx, \quad (52)$$

vem da solução exata de Lieb-Wu e $\Theta(x)$ é uma função degrau

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{para } x < 0 \\ 1, & \text{para } x \geq 0 \end{cases} \quad (53)$$

Neste trabalho, utilizamos as expressões das eqs. (51) e (50) para quantificar o grau de emaranhamento dos sistemas.

3 RESULTADOS

A fundamentação teórica na qual o modelo de Hubbard é baseado e os critérios selecionados para descrever a desordem do sistema (impurezas pontuais com intensidade V_i) foram apresentados no capítulo 2.1. Consideramos como uma fase superfluida aquela cuja intensidade de desordem é $V = 0$ e $U < 0$ em contraponto com a fase metálica que é caracterizada quando $V = 0$ e $U > 0$. Além disso, foi definida uma *concentração de impurezas* C do sistema,

$$C = 100\% \times \frac{L_V}{L}, \quad (54)$$

onde L_V é o número de sítios com impurezas $V \neq 0$ e L é o número de sítios total da cadeia.

A Tabela 1 resume a metodologia utilizada para estudar cada transição.

Tabela 1 – Resumo da metodologia utilizada para investigar cada transição de fase.

| | transição superfluido-isolante | | transição metal-isolante |
|---------|--------------------------------|--|---------------------------|
| | $\mathbf{T} = \mathbf{0}$ | $\mathbf{T} \neq \mathbf{0}$ | $\mathbf{T} = \mathbf{0}$ |
| L | 100 | 6 | 100 |
| n | $0 < n \leq 1$ | semi preenchida | $0 < n \leq 2$ |
| U | $U < 0$ | | $U > 0$ |
| método | DFT | diagonalização exata | DFT |
| análise | entropia linear | trabalho quântico variância assimetria | entropia linear |

Nas próximas seções apresentamos e discutimos o impacto dessa desordem em superfluidos e metais.

3.1 Regime de interação atrativa entre partículas $U < 0$

É esperado que a transição superfluido-isolante (SI) seja desencadeada por uma variação da intensidade de desordem ou pela variação da densidade de partícula no sistema (69). Entretanto, utilizando o protocolo de desordem que adotamos, a concentração de impureza também é um parâmetro relevante para a transição. Sendo assim, analisamos a transição SI quando desencadeada por todos esses fatores citados.

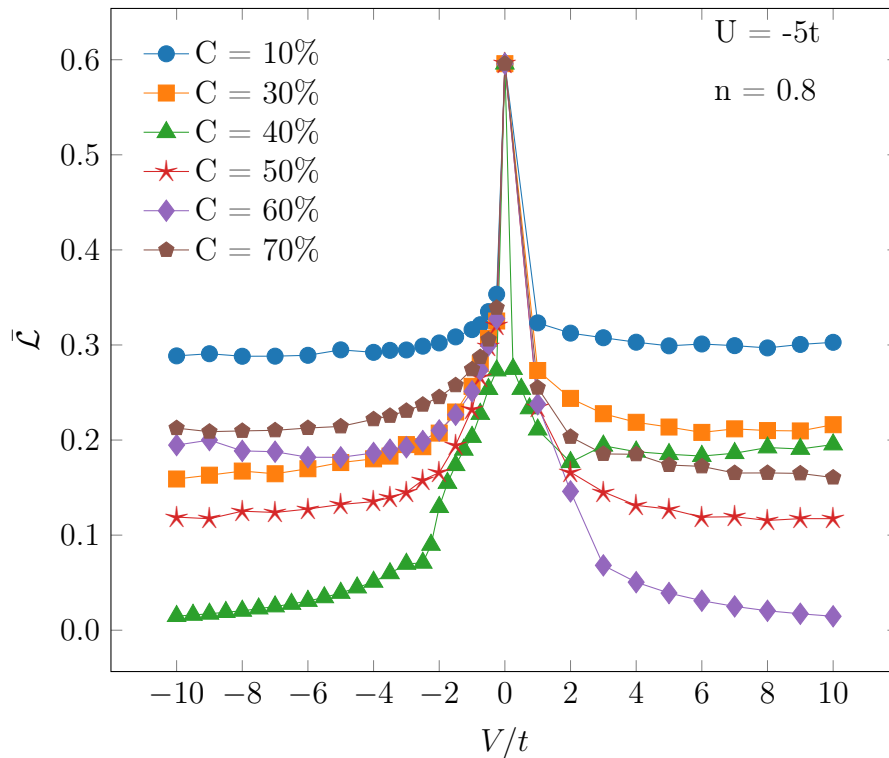
3.1.1 Transição SI desencadeada pela intensidade de desordem V

Primeiramente, analisamos a SI desencadeada pela intensidade de desordem V . Para isso, variamos a intensidade das impurezas tanto para regime atrativo ($V < 0$) quanto para repulsivo ($V > 0$), mantendo fixos a densidade ($n = 0.8$) e a interação ($U = -5t$). A Figura 7 mostra o emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da intensidade de impureza V para diferentes concentrações C .

Na Figura 7 observamos 4 aspectos importantes: primeiro, vemos que quando a intensidade da impureza é nula ($V = 0$) o valor de emaranhamento é máximo, o que é equivalente a um sistema homogêneo ($C = 0$). Segundo, qualquer pequeno valor de V ($V = -0.25t$) é suficiente para diminuir em pelo menos 50% o valor de emaranhamento. Terceiro, após esse decréscimo o emaranhamento satura, levando à interpretação de que o sistema está com seus graus de liberdade de carga congelados, ou seja, em um estado isolante. Esse comportamento é característico de uma transição superfluido-isolante: para $V = 0$ os pares de Cooper possuem total liberdade de ocupação em qualquer sítio da cadeia, diferentemente de quando $V < 0$, pois nesses casos os pares terão maior probabilidade de ocuparem os sítios com impurezas. Entretanto, para concentrações diferente de 40% o emaranhamento satura em valores finitos. Esse tipo de comportamento é característico de um sistema parcialmente localizado, que chamamos de **localização ordinária**, porque a posição específica dos pares de Cooper localizados não é totalmente definida: as impurezas são sem dúvida os sítios mais prováveis, mas como o número de pares é diferente

do número de impurezas (mais pares que impurezas para $C < C_C$ e mais impurezas do que pares para $C > C_C$ neste caso $C_C = 40\%$), há sempre uma certa indeterminação na localização. Já para o caso $C = 40\%$ há o número exato de sítios impuros necessários para localizar todos os pares de Cooper do sistema, assim o sistema está completamente localizado. Denominamos a concentração para a qual o sistema está em um estado **totalmente localizado** de concentração crítica C_C . E quarto, vemos que para impurezas atrativas o emaranhamento diminui com o aumento da concentração até $C = 40\%$, invertendo esse comportamento a partir dessa concentração.

Figura 7 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da intensidade de desordem V para diferentes concentrações de impurezas. Esses resultados foram extraídos de sistemas com densidade média $n = 0.8$ e interação $U = -5t$ entre partículas. As intensidades de desordem vão desde intensidades atrativas ($V < 0$) quanto repulsivas ($V > 0$).



Fonte: Autoria própria.

Quando olhamos para o emaranhamento em relação à concentração, vemos que ele apresenta um comportamento não monotônico. Para os casos em que $V < 0$, o emaranhamento mínimo ocorre em uma concentração crítica $C = C_C = 40\%$ ($n = 0.8$) e quando $V > 0$ o emaranhamento mínimo ocorre em $C_C = 60\%$. Essa mudança na concentração crítica evidencia a relação entre a intensidade de desordem (atrativa ou repulsiva) e a

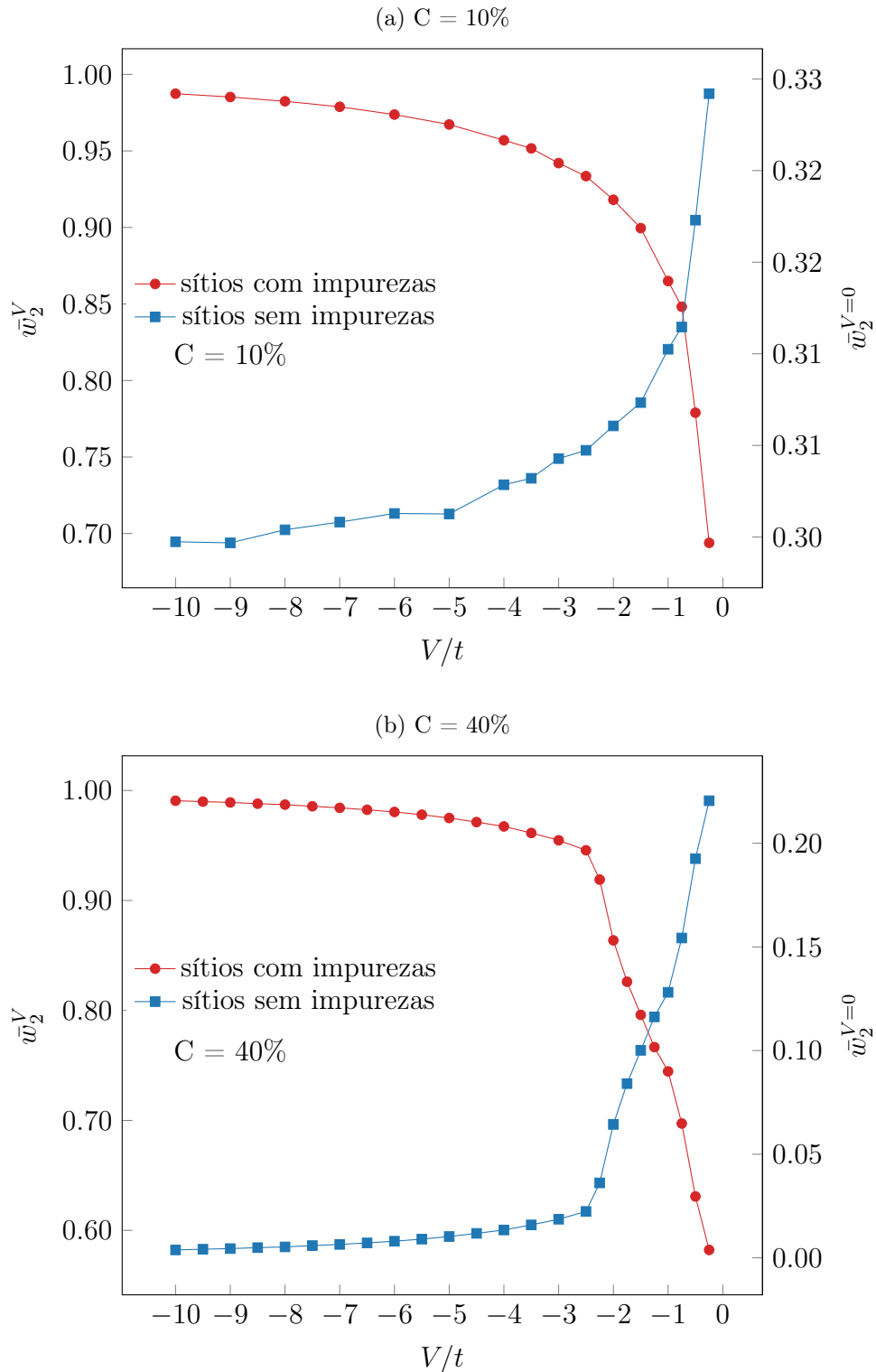
localização dos pares: para $C = 40\%$ e $V < 0$ o sistema possui 40 sítios com intensidade atrativa de desordem que são necessários para localizar os 40 pares de Cooper. Entretanto, para $V > 0$ são necessários 60 sítios com impurezas repulsivas para localizar os pares. E essa simetria é verificada para outros pares de concentrações, como por exemplo $C = 30\%$ para impurezas atrativas e $C = 70\%$ para impurezas repulsivas.

Esses estados de localização são confirmados pelas probabilidades de dupla ocupação em sítios com impurezas ($\bar{w}_2^V = \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle / L_V$) e sem impurezas ($\bar{w}_2^{V=0} = \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle / (L - L_V)$) mostrados na Figura 8. Para $C < C_C$ (Figura 8a) os pares estão em maior número do que os sítios com impurezas e portanto todos esses sítios estão ocupados ($\bar{w}_2^V \rightarrow 1$ para $V \rightarrow -\infty$) e ainda há alguns pares delocalizados em sítios sem impurezas. Para $C \geq C_C$ (Figura 8b) há mais sítios com impurezas do que pares, então há um certo grau de delocalização desses pares mas não há pares nos sítios sem impurezas ($\bar{w}_2^{V=0} \rightarrow 0$ para $V \rightarrow -\infty$).

Dessa forma, a localização total em C_C representa um estado bem definido com $\bar{w}_2^V = 1$ e $\bar{w}_2^{V=0} = 0$, que é caracterizado pelo $\bar{\mathcal{L}} \rightarrow 0$, diferentemente da localização ordinária onde $\bar{\mathcal{L}}$ satura em valores finitos. Surpreendentemente, a energia do estado fundamental não apresenta nenhum comportamento especial, como podemos ver na Figura 9, sugerindo assim que a SIT quando desencadeada pela intensidade das impurezas é suave, uma transição de fase quântica de segunda-ordem ou simplesmente um *crossover*.

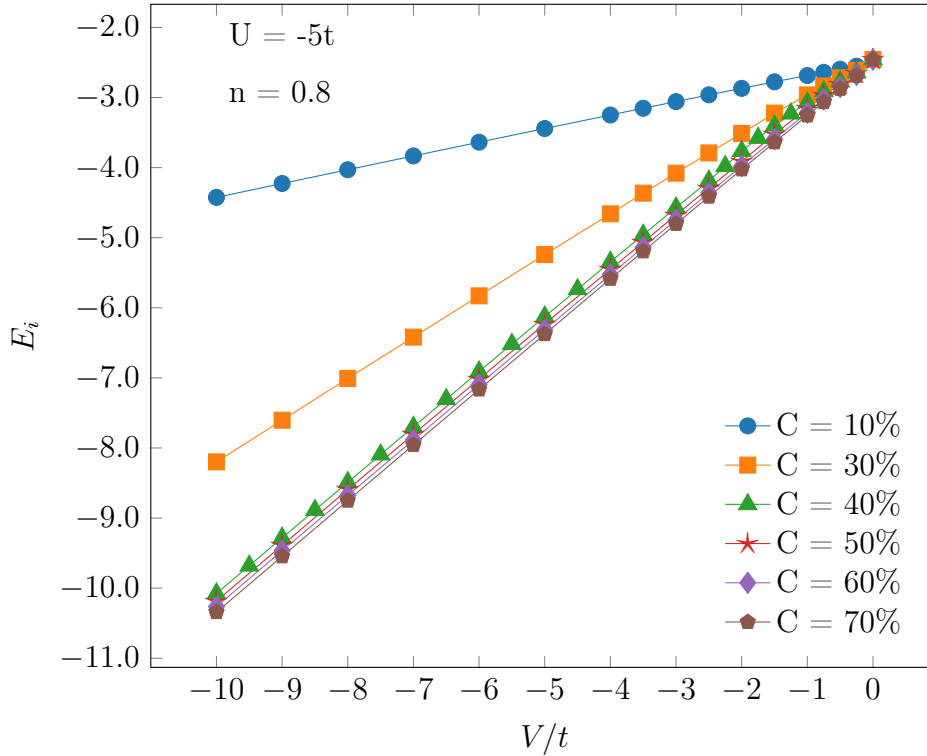
Para os casos de $V > 0$, as impurezas repulsivas irão repelir os pares para os sítios sem impurezas, sendo assim, no caso onde $C = 40\%$ os pares estarão localizados nos 60 sítios sem impurezas. Isso é evidenciado pela mudança de comportamento na Figura 7 para $V > 0$, onde a concentração que leva à localização total ($\bar{\mathcal{L}} \rightarrow 0$) passa a ser $C = 60\%$.

Figura 8 – Probabilidades médias de dupla ocupação para sítios com impurezas \bar{w}_2^V e sem impurezas $\bar{w}_2^{V=0}$ em função da intensidade de desordem V para sistemas com (a) $C = 10\%$ de impurezas e (b) $C = 40\%$ de impurezas. Esses resultados foram tirados de sistemas com densidade média $n = 0.8$ e interação $U = -5t$.



Fonte: Autoria própria.

Figura 9 – Energia por sítio E_i em função da intensidade de desordem V para sistemas com diferentes concentrações de impurezas C . Para todos os sistemas a densidade média é $n = 0.8$ e a interação é $U = -5t$.

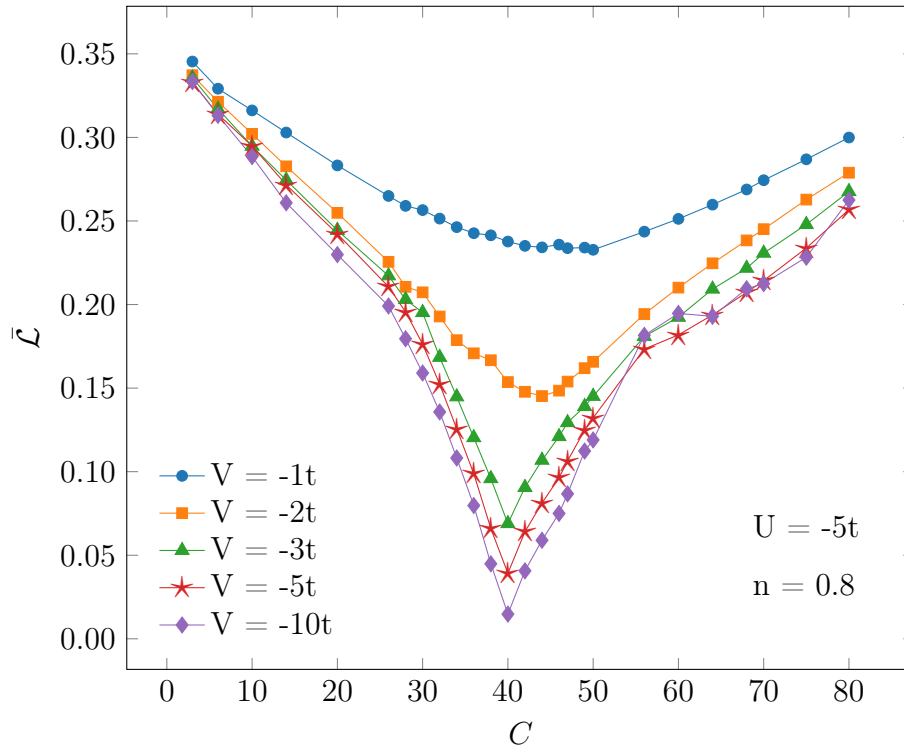


Fonte: Autoria própria.

3.1.2 Transição SI desencadeada pela concentração de impurezas C

Em seguida, monitoramos a relação entre emaranhamento e a concentração de impurezas, para intensidade de desordem atrativa fraca, moderada e forte. Como podemos ver na Figura 10, para se alcançar localização total na concentração crítica, que podemos verificar através de uma abrupta não-monotonicidade do emaranhamento quando $V \rightarrow \infty$, é necessário um V_{min} . Para $|V| < V_{min}$ (neste caso $V_{min} \sim 3t$), observamos um comportamento diferente do emaranhamento em função de C : a não-monotonicidade existe mas não é abrupta, o emaranhamento mínimo é maior que zero e não ocorre em $C = C_C = 40\%$.

Figura 10 – Resultados de emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C obtidos de sistemas com densidade média $n = 0.8$, interação $U = -5t$ e diferentes intensidades de desordem V .



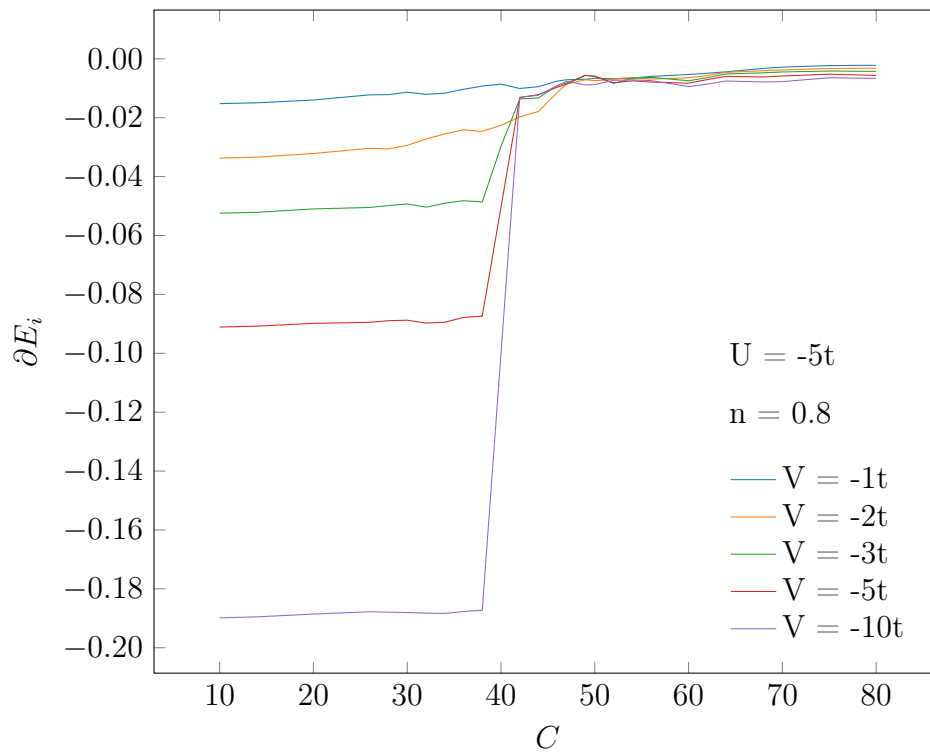
Fonte: Autoria própria.

Esse comportamento de $|V| < V_{min}$ é interpretado como uma **localização total frustrada** onde V não é suficientemente forte para atrair os pares para os sítios com impurezas. A probabilidade média de dupla ocupação nos sítios com e sem impurezas para sistemas com fraca intensidade de atração e forte intensidade de atração, apresentada na Figura 12, confirma nossa interpretação. $\bar{w}_2^{V=0}$ é sempre não nula para $V = -1t$. Ao contrário, para $V = -10t$ o sistema alcança o estado de localização total na concentração crítica C_C , onde $\bar{w}_2^V \approx 1$ para $C \leq C_C$ e $\bar{w}_2^{V=0} \rightarrow 0$ para $C \geq C_C$.

Além disso, a relação entre a energia do estado fundamental e a concentração C de impurezas, apresentada na Figura 13, revela a natureza da transição: para $|V| > V_{min}$ a transição ocorre de um estado de localização ordinária, apresentando uma descontinuidade na primeira derivada em $C = C_C$, como ilustra a Figura 11, o que caracteriza uma transição de fase quântica de primeira ordem (10). Para $|V| < V_{min}$ a energia é suave e não apresenta descontinuidade na primeira e na segunda derivada, indicando que não há transição de primeira ou segunda ordem, o que é consistente com a ausência de um

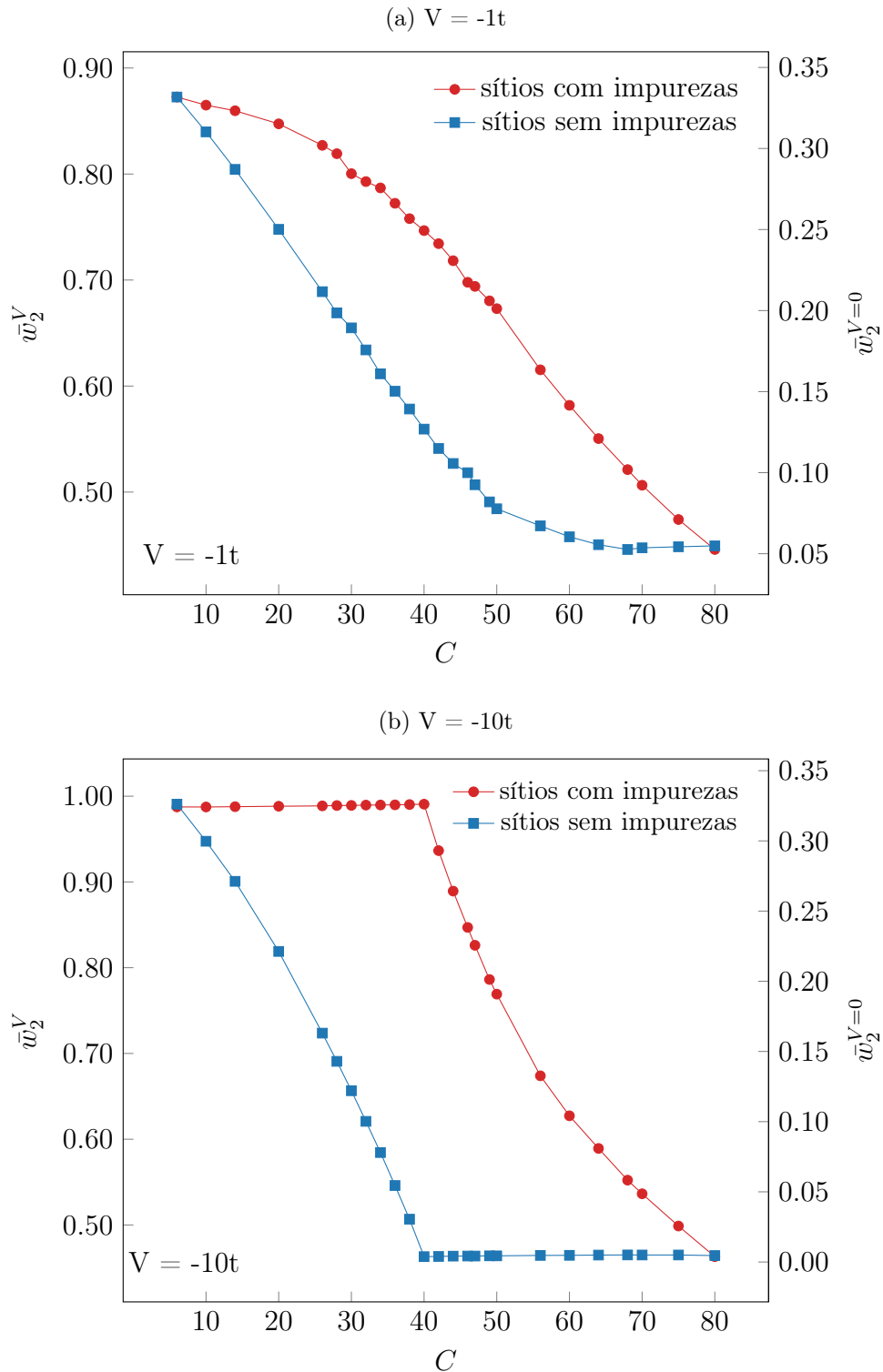
estado totalmente localizado. A existência de um V_{min} para que haja a transição explica o comportamento monotônico quando V é pequeno, como é visto na Figura 10.

Figura 11 – Derivada da energia ∂E_i em função da concentração de impurezas C para sistemas com diferentes intensidades de desordem V . Todos os sistemas apresentam interação $U = -5t$ e densidade $n = 0.8$. Valores adimensionais.



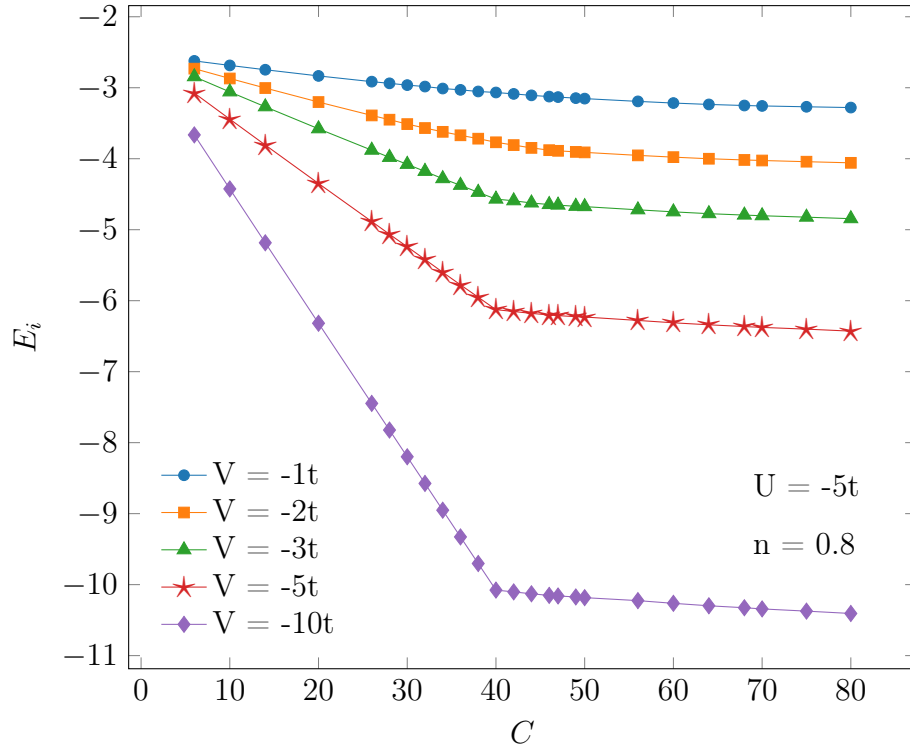
Fonte: Autoria própria.

Figura 12 – Probabilidades médias de dupla ocupação para sítios com impurezas \bar{w}_2^V e sem impurezas $\bar{w}_2^{V=0}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com intensidade (a) $V = -1t$ e (b) $V = -10t$ de desordem. Esses resultados foram tirados de sistemas com densidade média $n = 0.8$ e interação $U = -5t$.



Fonte: Autoria própria.

Figura 13 – Energia por sítio E_i em função da concentração de impurezas C para sistemas com diferentes intensidades de desordem V . Para todos os sistemas a densidade média é $n = 0.8$ e a interação é $U = -5t$.



Fonte: Autoria própria.

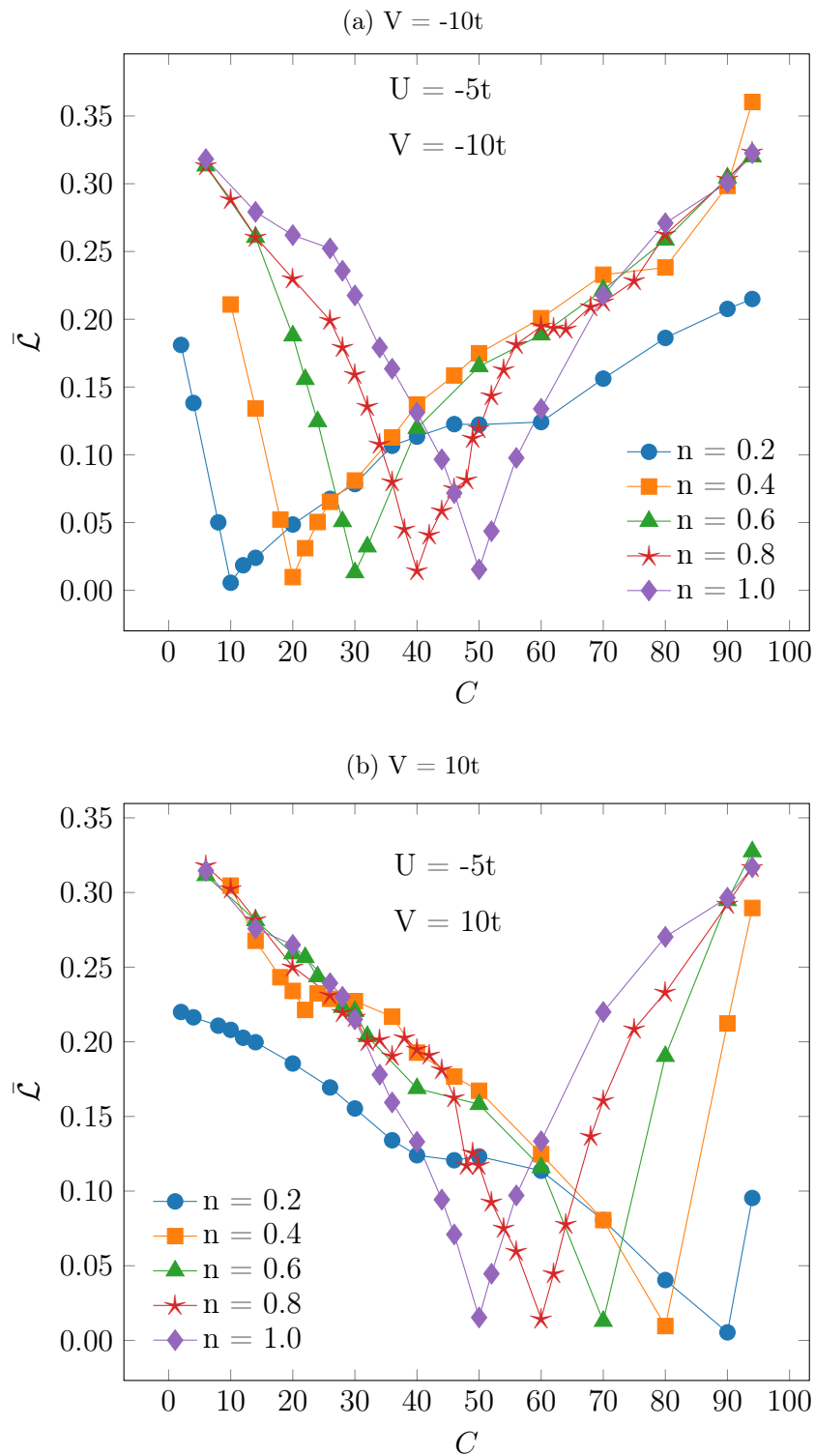
Em seguida exploramos a dependência entre a concentração crítica e a densidade média de partículas. Nessa concentração todos os sítios com impurezas fortemente atrativas ($V < 0$) estão duplamente ocupados, e não há partículas presentes em outros sítios. Os resultados presentes na Figura 14 mostram que C_C ocorre quando o número de pares, $N/2$, coincide com o número de sítios com impurezas. Para desordem fortemente repulsiva ($V > 0$) os sítios com impurezas irão repelir os pares, impedindo-os de se localizarem neles. Assim, para o caso $n = 0.8$ a concentração crítica passa a ser 60% pois 60 sítios estarão com impurezas fortemente repulsivas, e os pares estarão localizados nos 40 sítios sem desordem. De uma maneira geral, sendo L_V os sítios com impurezas e $L_0 = L - L_V$ os sítios sem impurezas, encontramos uma relação entre a concentração de impurezas do sistema e sua densidade média de partículas,

$$\begin{aligned}
\text{para } V < 0 \quad : \quad & \frac{N}{2} = L_V \\
& \frac{nL}{2} = \frac{CL}{100} \\
& C_C = 100 \frac{n}{2},
\end{aligned} \tag{55}$$

$$\begin{aligned}
\text{para } V > 0 \quad : \quad & \frac{N}{2} = L_0 \\
& \frac{nL}{2} = L - L_V = L - \frac{CL}{100} \\
& C_C = 100 \left(1 - \frac{n}{2}\right).
\end{aligned} \tag{56}$$

Para $C < C_C$ e $V < 0$ ($V > 0$) há mais pares do que sítios com impurezas (sem impurezas), assim todos esses sítios estão ocupados e os pares extras estão espalhados ao longo do resto da cadeia. Em $C = C_C$ os pares ocupam exatamente todos os sítios com impurezas (sem impurezas) para $V < 0$ ($V > 0$) e assim o sistema se encontra em um estado de localização total com emaranhamento nulo ($\bar{\mathcal{L}} \rightarrow 0$ para $|V| \rightarrow \infty$). Por fim, para $C > C_C$ há mais sítios com impurezas (sem impurezas) do que pares e esses pares estão todos localizados nesses sítios, entretanto como ainda há sítios com impurezas (sem impurezas) vazios o sistema mantém um certo grau de liberdade devido a competição entre as probabilidades de dupla ocupação e zero ocupação. Nesse caso não há localização total dos pares mas o sistema mantém uma localização ordinária, o que explica o fato do emaranhamento saturar a um valor finito $\bar{\mathcal{L}} > 0$.

Figura 14 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com intensidade de desordem (a) atrativa ($V = -10t$) e (b) repulsiva ($V = 10t$) para diferentes densidades médias, todos com uma interação de $U = -5t$.



Fonte: Autoria própria.

3.1.3 O impacto da interação intra-sítio U

Considerando que a intensidade de desordem V está relacionada com a presença de uma localização total ou parcial, e assim afetando diretamente a transição SI, realizamos também uma análise sobre a interação U e como ela impacta na concentração crítica para a localização total.

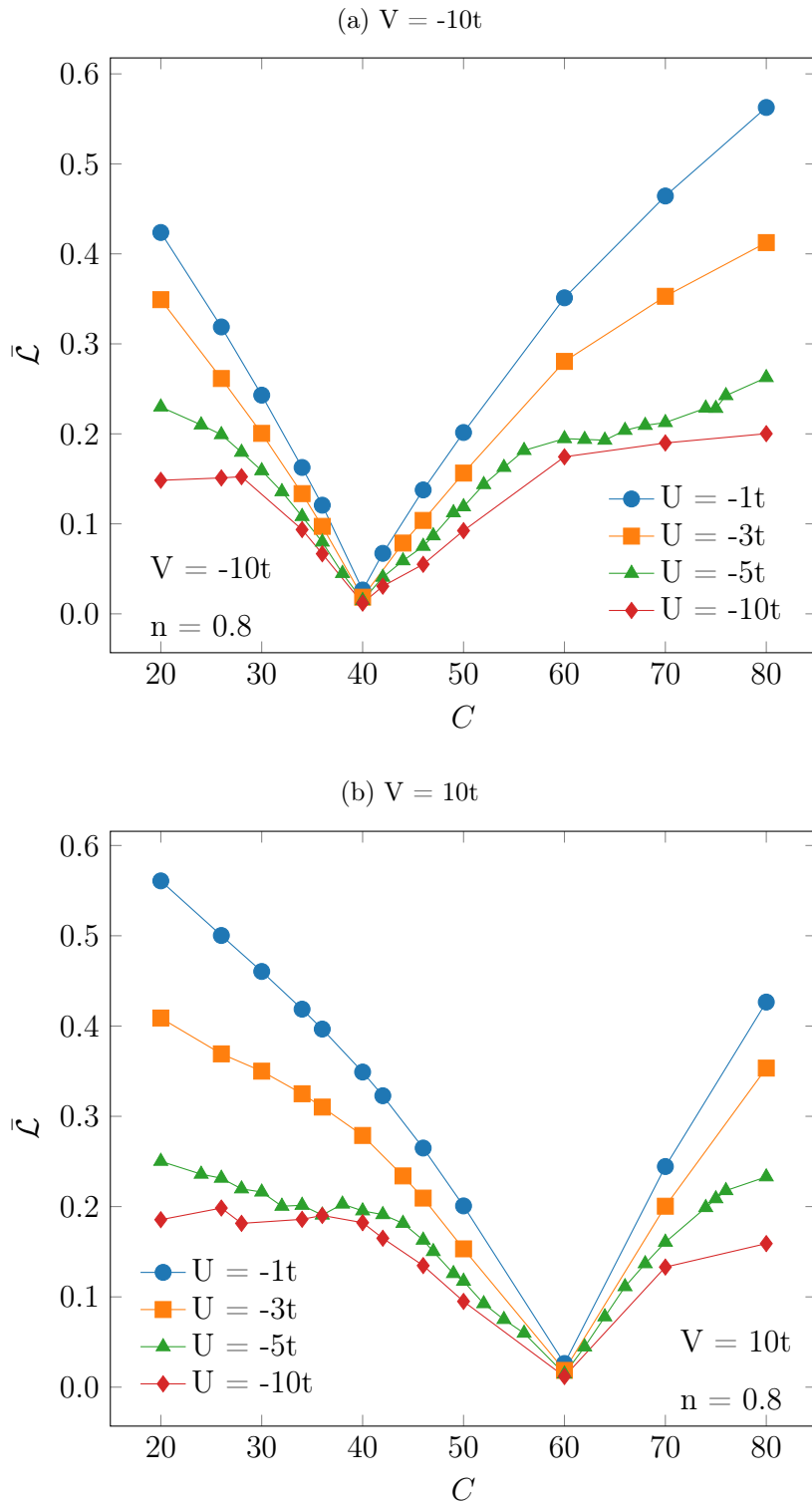
Como a intensidade de V pode ser atrativa ou repulsiva influenciando na localização dos pares e a interação U impacta no quanto os férmions se atraem quando estão no mesmo sítio, poderia haver uma relação entre essas duas grandezas de maneira a reforçar ou atenuar a transição SI, dependendo se há uma competição ($U < 0$ e $V > 0$) ou contribuição ($U < 0$ e $V < 0$) entre elas.

Inesperadamente, como mostra a Figura 15, a variação de U não apresenta nenhum impacto sobre a C_C nem para intensidade de desordem fortemente atrativa quanto para intensidade fortemente repulsiva, mantendo-se as mesmas relações apresentadas pelas equações 55 e 56.

Para intensidade de desordem moderadamente atrativa ($V = -3t$), o emaranhamento apresenta um mínimo próximo de zero em C_C para interação fortemente atrativa ($U = -10t$) e outro mínimo significativamente maior que zero para interação fracamente atrativa ($U = -1t$), como mostra a Figura 16a. Esse resultado revela que para intensidade de V moderadamente atrativa, existem um $U_{min} \approx -3t$ para que o sistema alcance um estado de localização total em C_C .

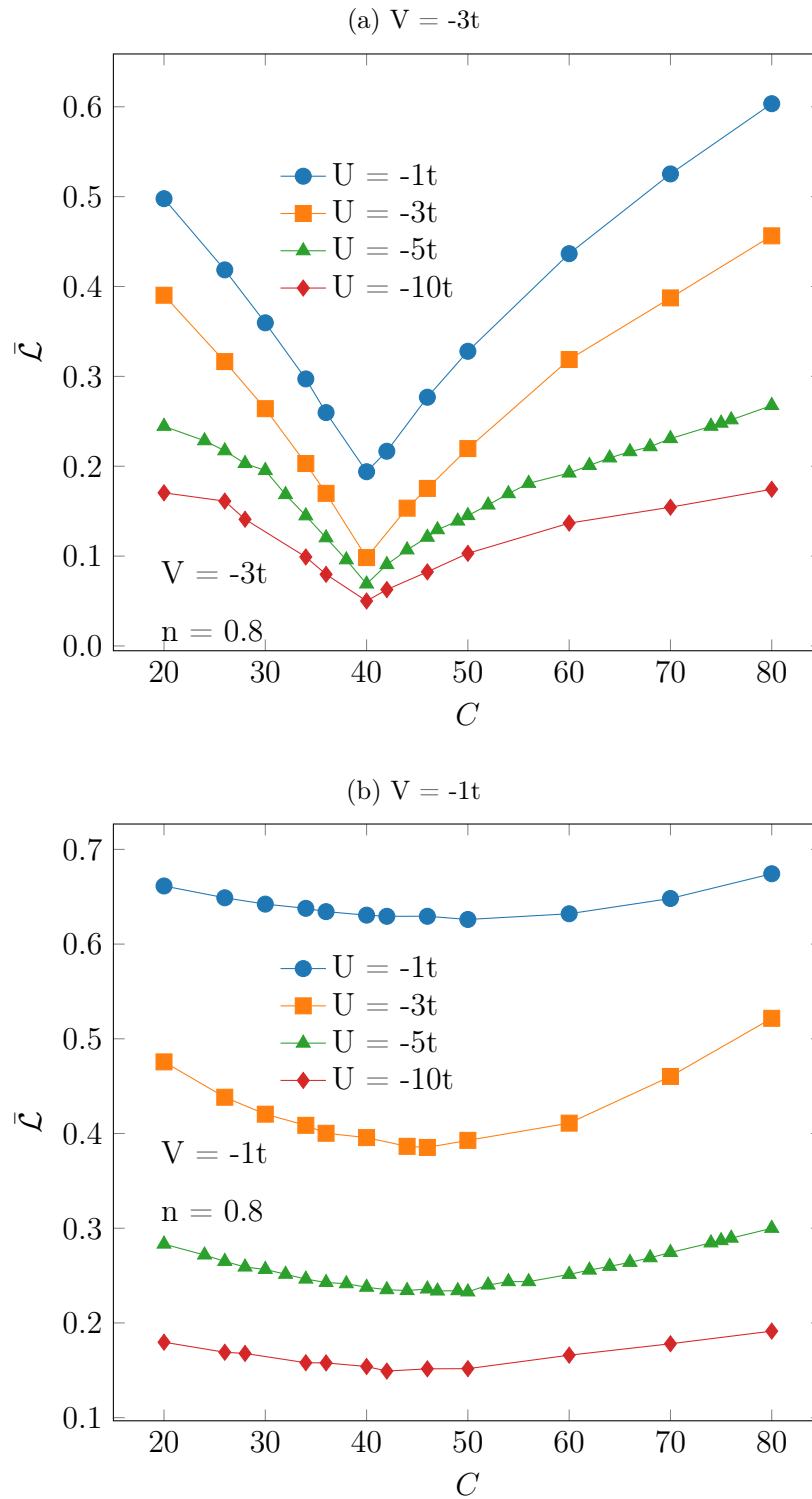
Entretanto, para desordem fracamente atrativa ($V = -1t$), como mostra a Figura 16b, o sistema não alcança um estado de localização total mesmo para uma interação fortemente atrativa $U = -10t$. Isso acontece pois como a intensidade de desordem é fraca os sítios com impurezas e sem impurezas são igualmente favoráveis a ocupação, levando os pares a ocuparem os sítios aleatoriamente. Como a localização total é caracterizada pela localização de todos os pares nos sítios com impurezas, ela não ocorre para esse caso.

Figura 15 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com diferentes interações entre partículas U , com intensidades de desordem fortemente atrativa (a) $V = -10t$ e fortemente repulsiva (b) $V = 10t$. Para todos os sistemas a densidade média vale $n = 0.8$.



Fonte: Autoria própria.

Figura 16 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com diferentes interações entre partículas U , com intensidades de desordem atrativa média (a) $V = -3t$ e fracamente atrativa (b) $V = -1t$. Para todos os sistemas a densidade média vale $n = 0.8$.



Fonte: Autoria própria.

3.1.4 O impacto do confinamento harmônico

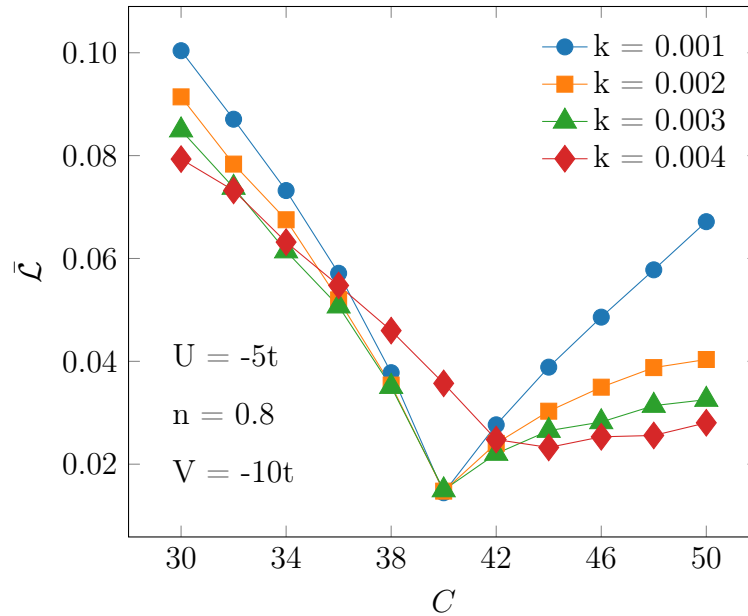
Uma das maneiras de se estudar experimentalmente transições de fase quânticas é utilizando átomos ultrafrios (do inglês, *ultracold atoms*), que são átomos resfriados a temperaturas perto do zero absoluto (na casa dos microkelvin, μK). Para simular esses tipos de sistemas na teoria utilizamos um *confinamento harmônico*: inserimos no Hamiltoniano (eq. (1)) um segundo potencial externo de comportamento parabólico $V_i = k(i - i_0)^2$ com curvatura k e centrado em $i_0 = 50.5$,

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \right) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} [V_i \hat{n}_{i\sigma} + k(i - i_0)^2]. \quad (57)$$

Primeiramente, analisamos a influência do confinamento harmônico na concentração crítica C_C para a localização total. Como vemos na Figura 17, para $k \lesssim 0.003$ o sistema ainda alcança a localização total, ou seja, o emaranhamento $\bar{\mathcal{L}} \rightarrow 0$ para $V \rightarrow -\infty$ na concentração crítica C_C . Para $k > 0.003$ o emaranhamento não tem o mínimo em C_C , mas satura em um valor próximo de zero ($\bar{\mathcal{L}} \approx 0.025$) para concentrações $C > C_C$. Esse deslocamento na concentração em relação a C_C para a localização pode ser explicada pela densidade efetiva no centro do potencial: para forte confinamento (maior k), os sítios da borda tornam-se energeticamente desfavoráveis para a ocupação de partículas (a menos que coincida com sítios de impureza $V < 0$), aumentando a densidade efetiva no centro da cadeia; e como vimos, quanto maior n , maior C_C . Porém, o fato de $\bar{\mathcal{L}}$ saturar para $C > C_C$ (em vez de voltar a aumentar, como nos casos com $k \leq 0.003$) sugere que para $k > 0.003$ o sistema está em um estado de localização ordinária, o que é também sugerido pelo comportamento ainda mais suave da energia, mostrado na Figura 18.

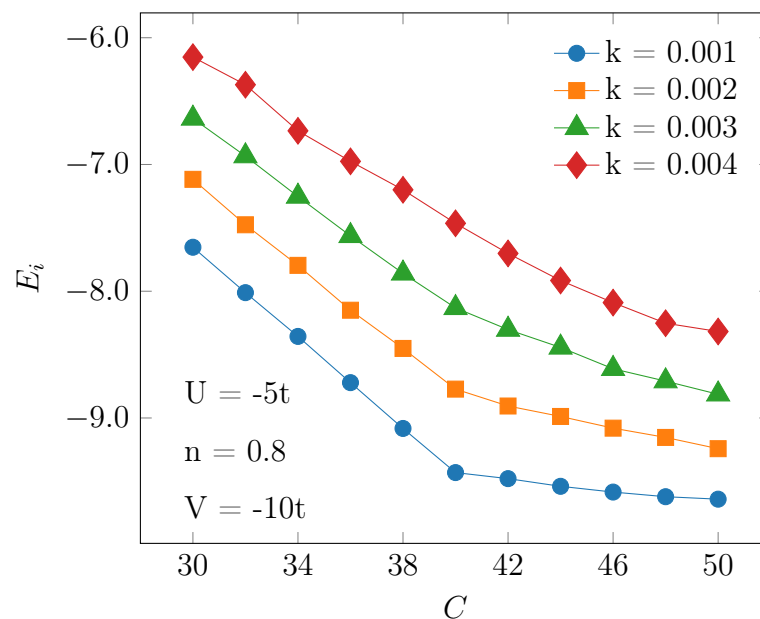
Para comprovar nossa hipótese, analisamos o emaranhamento médio em função da intensidade k . A Figura 17, demonstra que para concentrações C diferentes da crítica ($C_C = 40\%$ nesse caso), o emaranhamento satura em valores finitos com o aumento de k mas nunca chega a 0, confirmando que o sistema está em um estado de localização ordinária. Consistentemente, para $C = C_C$ o emaranhamento $\bar{\mathcal{L}} \rightarrow 0$ para confinamento harmônico fraco ($k < 0.003$), que representa localização total. Esse valor de k é o valor máximo de confinamento que pode ser introduzido no sistema sem afetar o estado de localização total ($k^{max} = 0.003$), assim, para qualquer valor de $k > k^{max}$ sistema estará em uma localização ordinária.

Figura 17 – Resultados de emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com interação $U = -5t$, densidade média $n = 0.8$ e intensidade de desordem $V = -10t$. Nesses sistemas foram aplicados confinamento harmônico com diferentes intensidades de potencial harmônico k .



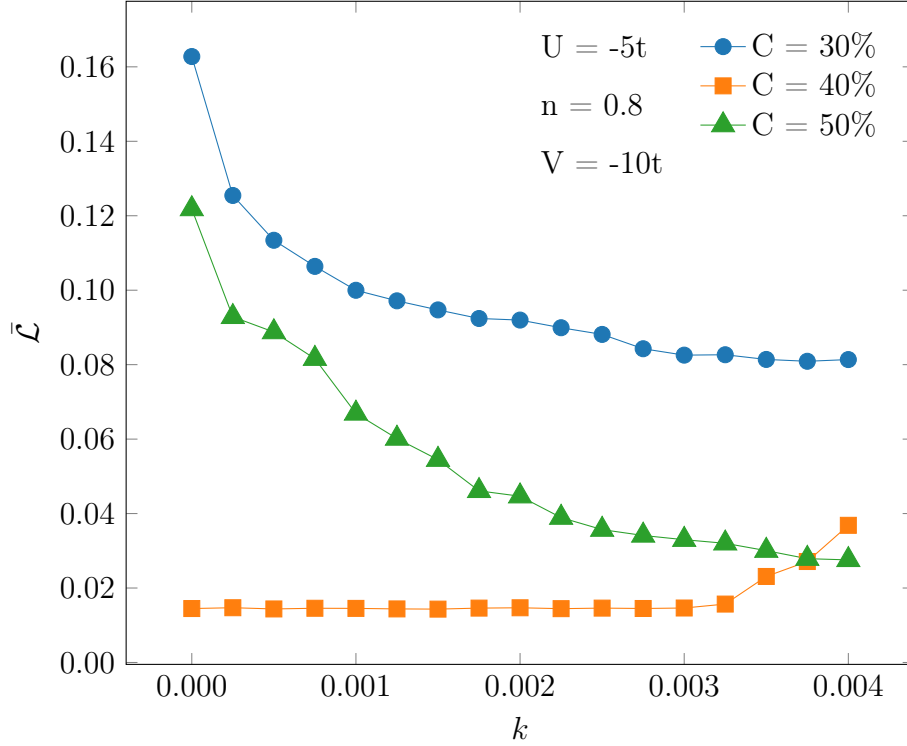
Fonte: Autoria própria.

Figura 18 – Valores de energia por sítio E_i em função da concentração de impurezas C para sistemas com interação $U = -5t$, densidade média $n = 0.8$ e intensidade de desordem $V = -10t$. Nesses sistemas foram aplicados confinamento harmônico com diferentes intensidades de potencial harmônico k .



Fonte: Autoria própria.

Figura 19 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da intensidade do potencial harmônico k para sistemas com diferentes concentrações de impurezas C . Todos os sistemas apresentam interação $U = -5t$, densidade média $n = 0.8$ e desordem $V = -10t$.



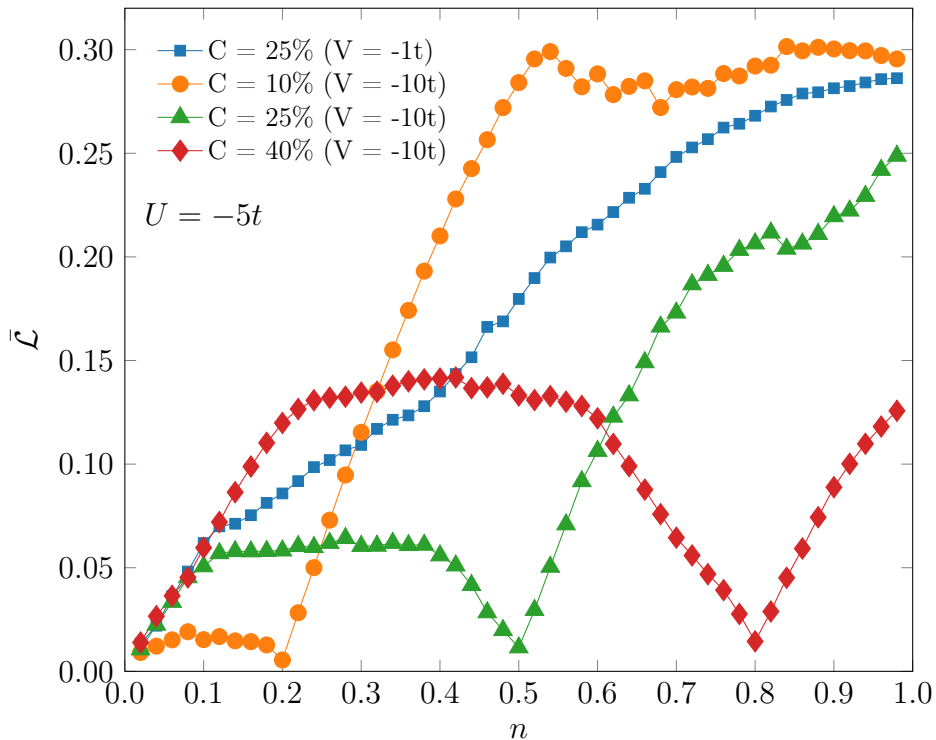
Fonte: Autoria própria.

3.1.5 Transição SI desencadeada pela densidade média de partículas n

Por fim, exploramos a transição desencadeada através da densidade de partículas do sistema para intensidades de desordem atrativa fraca e forte, como pode ser visto na Figura 20. Para intensidades suficientemente fortes de V , as mesmas características vistas anteriormente quando o sistema se encontra na concentração crítica $C = C_C$, podem ser observadas agora em uma densidade crítica $n_C = 2C/100$, como por exemplo, a não-monotonicidade abrupta do emaranhamento em $n = n_C$, indicando localização total com $\bar{\mathcal{L}} \approx 0$ e a localização ordinária com $\bar{\mathcal{L}}$ finito e constante para $n < n_C$. Esse comportamento reflete o fato de que para densidades pequenas a desordem dificulta a conexão dos pares (71–73), devido a uma maior distância média entre eles. Sendo assim, para uma concentração maior de impurezas o *plateau* observado em $n < n_C$ torna-se mais extenso

e apresenta um $\bar{\mathcal{L}}$ maior, pois a distância média entre os pares diminui.

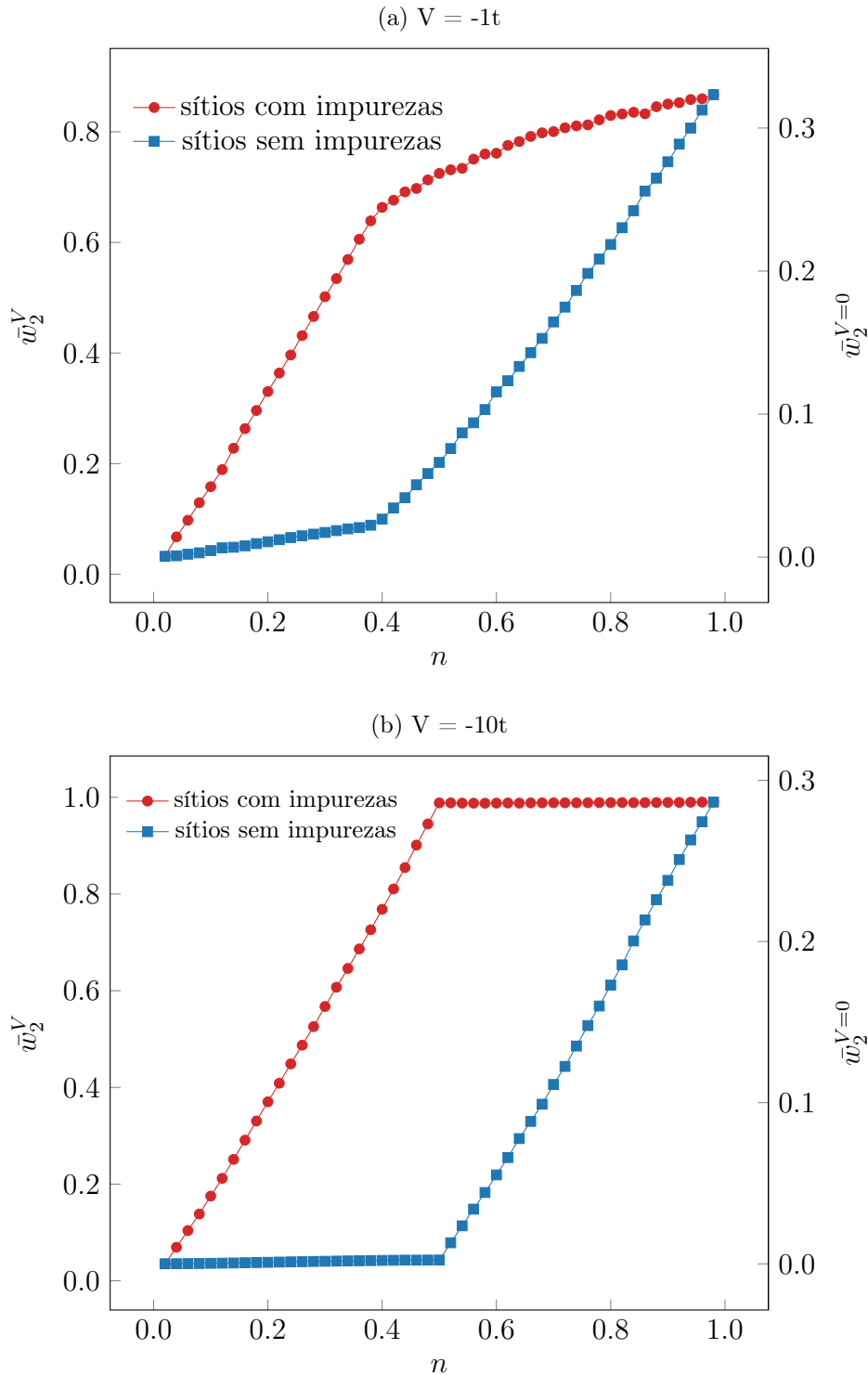
Figura 20 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média de partículas n para sistemas com diferentes concentrações de impurezas, com intensidade de desordem fraca ($V = -1t$) e forte ($V = -10t$). Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

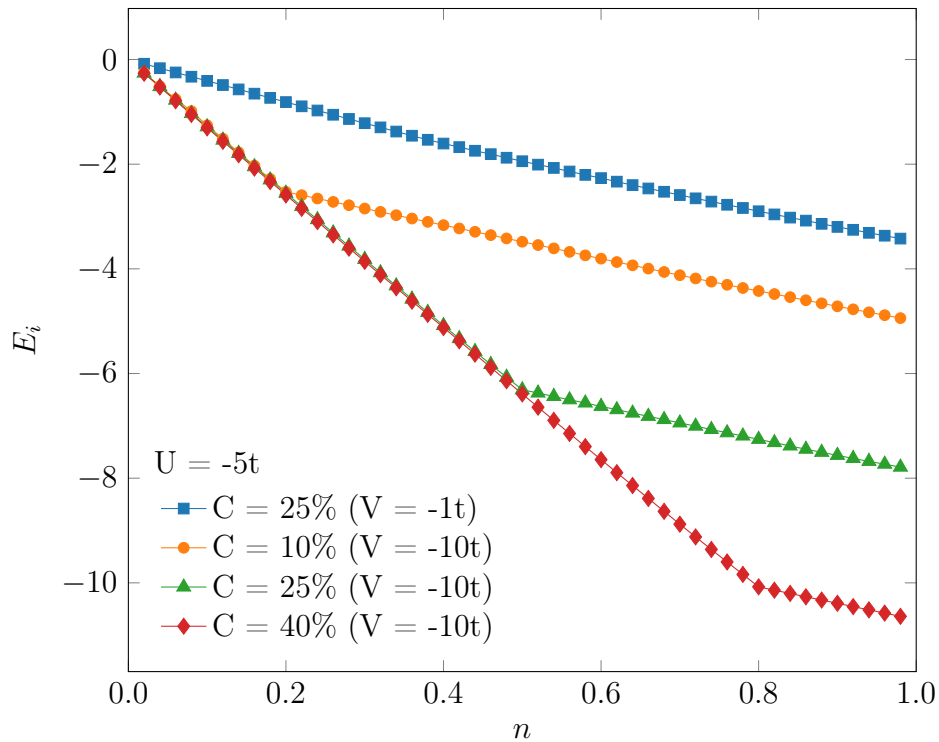
Para intensidades fracas de desordem, $V = -1t$, essas características não são observadas, ou seja, o emaranhamento decresce monotonicamente com a densidade n , o que confirma a existência de um V_{min} para se alcançar um estado de localização total. Além disso, ambos os perfis de energia por sítio e probabilidades de dupla ocupação em função da densidade média (Figura 21), corroboram para a interpretação de que o sistema alcança um estado de localização total para fortes intensidades de desordem ($V = -10t$), enquanto que para fraca desordem ($V = -1t$) o sistema se mantém em um estado de localização total frustrada. Além disso, a descontinuidade na primeira derivada da energia revela que a SIT quando desencadeada pela densidade também é uma transição de fase quântica de primeira-ordem em relação a um estado de localização total, enquanto que para um estado de localização ordinária a transição é suave (Figura 22).

Figura 21 – Probabilidades médias de dupla ocupação para sítios com impurezas \bar{w}_2^V e sem impurezas $\bar{w}_2^{V=0}$ em função da densidade de partículas n para sistemas com intensidade de desordem (a) $V = -1t$ e (b) $V = -10t$. Esses resultados foram obtidos de sistemas com interação $U = -5t$ e com $C = 25\%$ de impurezas. Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

Figura 22 – Energia por sítio E_i em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes concentrações de impurezas e com intensidades de desordem fraca ($V = -1t$) e forte ($V = -10t$). Para todos os valores a interação é de $U = -5t$. Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

3.1.6 Estatísticas do trabalho quântico ao longo da transição SI

Em sistemas de muitos corpos, interações fortes afetam diretamente as flutuações energéticas e, conseqüentemente, afetam a extração de trabalho em dinâmicas fora do equilíbrio. Assim, uma pergunta que fizemos nesse trabalho foi se era possível identificar a transição superfluido-isolante através da distribuição de trabalho nesse cenário e como a transição em si afeta a extração de trabalho. Então, avaliamos as propriedades estatísticas da distribuição do trabalho quântico após uma mudança abrupta (do inglês, *sudden quench*) de parâmetros específicos do sistema (desordem e concentração de impurezas). Além disso, também avaliamos essas propriedades com o aumento da temperatura do sistema.

Sudden quench Uma maneira de se explorar a dinâmica de sistemas quânticos isolados é aplicando o método chamado *sudden quench*, onde mudamos abruptamente um parâmetro do Hamiltoniano, tirando o sistema do equilíbrio. Assim, sendo λ o parâmetro crítico define-se o Hamiltoniano inicial como $\hat{H}_i = \hat{H}(\lambda_0)$ e então, instantaneamente, muda-se para o Hamiltoniano final $\hat{H}_f = \hat{H}(\lambda)$ sem que ocorra a evolução no tempo ($\tau = 0$).

Como a transição SI é desencadeada tanto pela intensidade de desordem quanto a concentração de impurezas, essas duas propriedades do sistema foram escolhidas como parâmetros críticos. Sendo assim, definimos dois protocolos: no *protocolo 1* o parâmetro crítico é a concentração e no *protocolo 2* é a intensidade de desordem.

A diferença entre os dois protocolos se dá em relação a variação do parâmetro crítico: no protocolo 1 a concentração do \hat{H}_f será sempre a concentração consecutiva em relação a concentração do \hat{H}_i . Por exemplo, para superfluidos com cadeias de $L = 6$ sítios, as concentrações de impurezas possíveis são 16%, 33%, 50%, 66% e 83%. Sendo assim, no primeiro *quenching* os Hamiltonianos inicial e final são, $\hat{H}_i = \hat{H}(C = 16\%)$ e $\hat{H}_f = \hat{H}(C = 33\%)$, no segundo *quenching* são $\hat{H}_i = \hat{H}(C = 33\%)$ e $\hat{H}_f = \hat{H}(C = 50\%)$ e assim por diante. No protocolo 2 a intensidade de desordem V do Hamiltoniano final é mantida fixa, e varia-se apenas a intensidade do Hamiltoniano inicial. A Tabela 2 resume os dois protocolos.

Tabela 2 – Protocolos adotados no *sudden quench*. No protocolo 1 o parâmetro crítico é a concentração de impurezas C e no protocolo 2 é a intensidade de desordem V .

| protocolo 1 | protocolo 2 |
|---|---|
| $\hat{H}_i(C_i) \Rightarrow \hat{H}_f(C_{i+1})$ | $\hat{H}_i(V_i) \Rightarrow \hat{H}_f(V)$ |

Trabalho quântico Em sistemas quânticos, a distribuição de trabalho quântico contém importantes informações sobre as transições entre os autoestados, o que faz com que as propriedades estatísticas mudem dramaticamente ao longo da transição. Nesse sentido, usamos os três primeiros momentos da distribuição de trabalho para analisar o comportamento da transição quando o sistema é tirado do equilíbrio, onde a expressão para o momento de k -ésima ordem é

$$\langle W^k \rangle = \sum_i P(W_i)(W_i - \bar{W})^k, \quad (58)$$

onde para sistemas fechados a distribuição de probabilidade (74) é dada por

$$P(W) = \sum_{n,m} \delta [W - (E_m - E_n)] p_n p_{m|n}, \quad (59)$$

onde p_n é a população do n -ésimo autoestado $|n\rangle$ de H_i , $p_{m|n}$ é a probabilidade de encontrar o sistema no estado $|m\rangle$ depois do *quench* quando o estado inicial era $|n\rangle$ e os três primeiros momentos são o trabalho quântico médio ($k = 1$), a variância ($k = 2$) e a assimetria ($k = 3$).

A probabilidade de ocupação inicial do n -ésimo autoestado é dado pelo fator de Boltzmann

$$p_n = \frac{\exp(-\beta E_n)}{Z(\beta)}, \quad (60)$$

onde $Z(\beta) = \sum_n e^{-\beta E_n}$ é a função de partição do Hamiltoniano inicial, $\beta = (k_B T)^{-1}$ é a temperatura inversa e $p_{m|n}$ é dada por

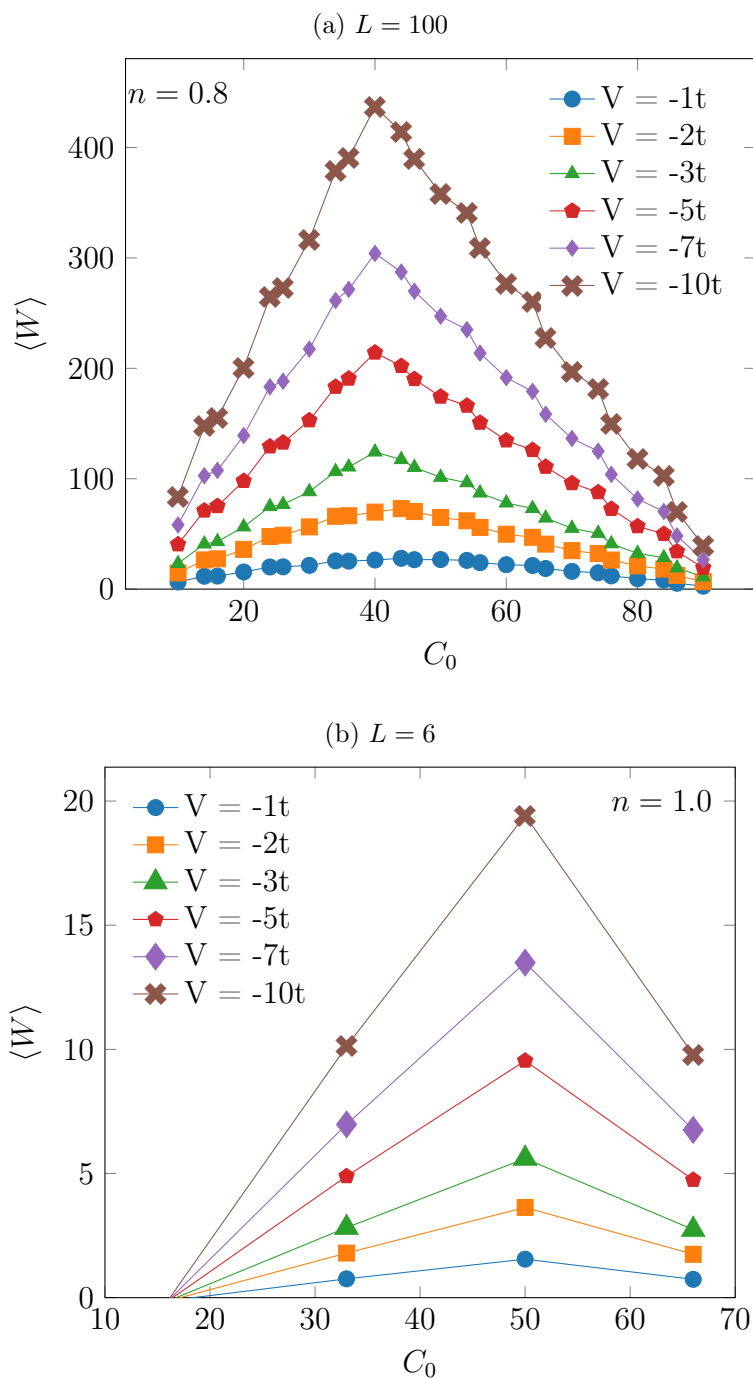
$$p_{m|n} = |\langle m|n\rangle|^2. \quad (61)$$

Os cálculos de *sudden quench* foram todos obtidos via diagonalização exata para sistemas com $L = 6$ sítios e densidade média $n = 1.0$. Considerando que cada conjunto de parâmetros $(C_i; V_j)$ possui diferentes configurações de impurezas para ambos Hamiltonianos inicial e final, cada *quench* de H_i para H_f possui um número diferente de combinações possíveis de estados, assim as quantidades analisadas são uma média sobre todas essas combinações.

Primeiramente, calculamos o trabalho quântico para sistemas com cadeias de $L = 100$ sítios e densidade média $n = 0.8$, como descrito no Apêndice [APÊNDICE A](#), para poder validar os resultados que obtivemos para cadeias menores de $L = 6$ sítios. Pela Figura [23a](#), podemos ver que o ponto onde há a extração máxima de trabalho quântico do sistema é em $C = 40\%$, precisamente a concentração crítica C_C encontrada para o perfil de emaranhamento da Figura [10](#). Ainda, comparando com a Figura [23b](#), vemos que o perfil do trabalho para sistemas de cadeias menores possui o mesmo comportamento que o perfil de cadeias grandes, além do pico se encontrar na mesma concentração crítica. Isso evidencia que os resultados obtidos para cadeias com $L = 6$ sítios não apresenta efeitos de borda significativos capaz de alterar os resultados, dando uma maior confiabilidade para

os resultados seguintes. Além disso, podemos notar que para essa temperatura específica ($\beta = 100t$) a extração de trabalho é possível para qualquer concentração de impurezas ou intensidade de desordem.

Figura 23 – Trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ em função da concentração do estado inicial C_0 para sistemas com (a) $L = 100$ sítios e $n = 0.8$ e (b) $L = 6$ sítios e $n = 1.0$, para diferentes intensidades de desordem V . Para todos os casos o valor da interação é de $U = -5t$ e $\beta = 100t$. Valores em unidades adimensionais.

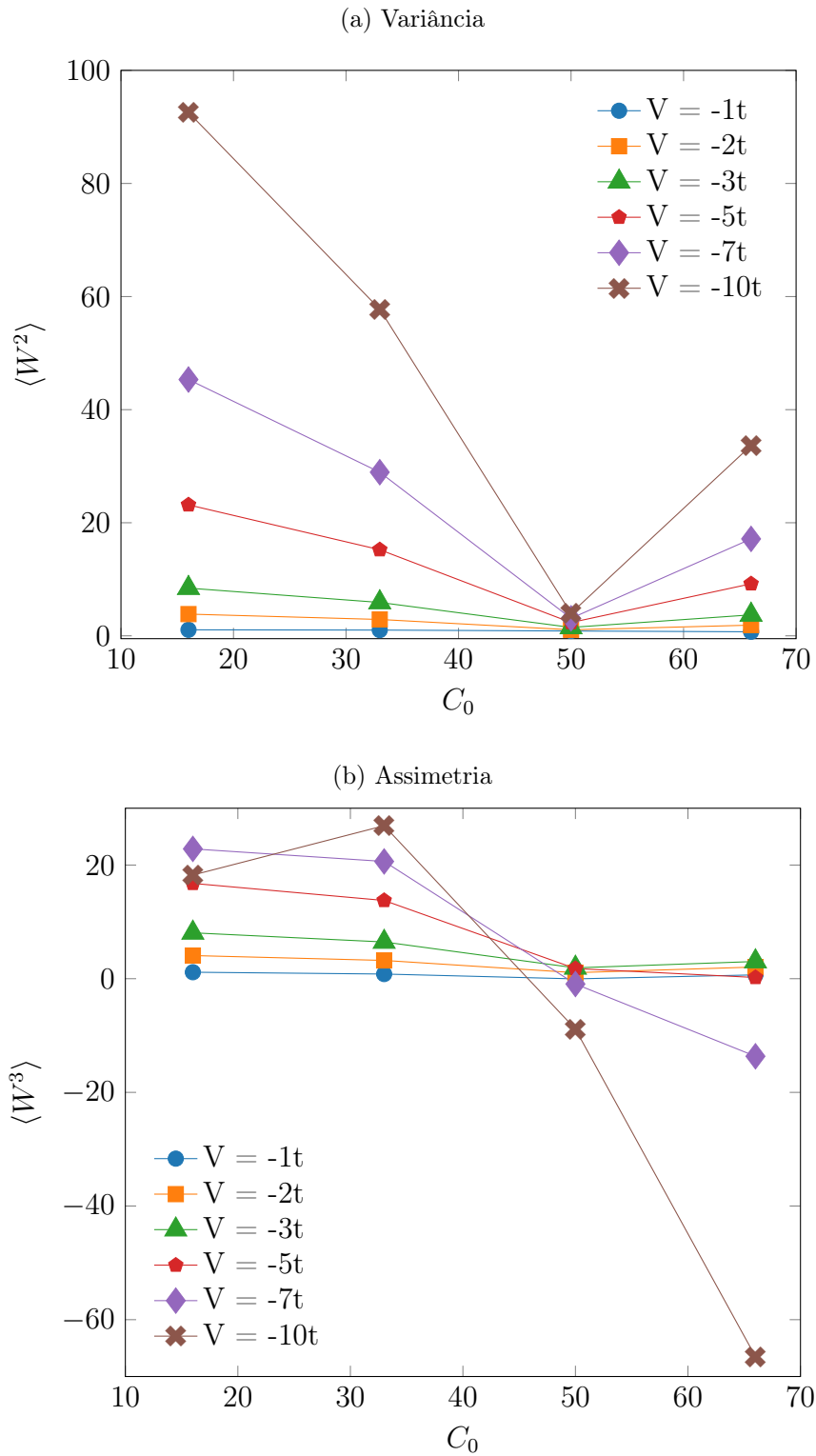


Além da extração máxima de trabalho na concentração crítica ($C = 50\%$) vemos também pela Figura 24a que o processo é otimizado pois não há flutuações (a variância praticamente desaparece). Esse máximo de trabalho sendo extraído com uma dispersão quase nula está relacionado com o fato de que, basicamente, a energia está sendo transferida entre dois estados "efetivos". Considerando que a distribuição leva em conta as possíveis transições entre \hat{H}_i e \hat{H}_f , quando o $\langle W \rangle$ é grande isso indica que a distribuição está centrada em uma diferença de energia $E_m - E_n$ que é grande e como a variância é pequena, então poucos são os estados que de fato contribuem para o trabalho. É como se o $\langle W \rangle$ fosse descrito por uma única transição entre ψ_0 e ψ_f , onde esses estados seriam os estados efetivos.

Outra relação importante é quando comparamos o perfil do trabalho com o do emaranhamento. Como podemos notar, independente do tamanho da cadeia o trabalho apresenta uma descontinuidade exatamente na concentração crítica do sistema, o que indica que também é possível de se detectar a transição SI. Além disso, a extração de trabalho se dá no ponto onde o emaranhamento é mínimo, mostrando uma relação direta entre essas duas grandezas. Por fim, pela Figura 24b vemos uma mudança no sinal da assimetria de positivo para negativo a partir da concentração crítica, comportamento semelhante visto para a transição metal-isolante de Mott (75). Essa mudança de sinal indica um deslocamento da distribuição de probabilidades o que confirma a transição entre as fases superfluida e isolante.

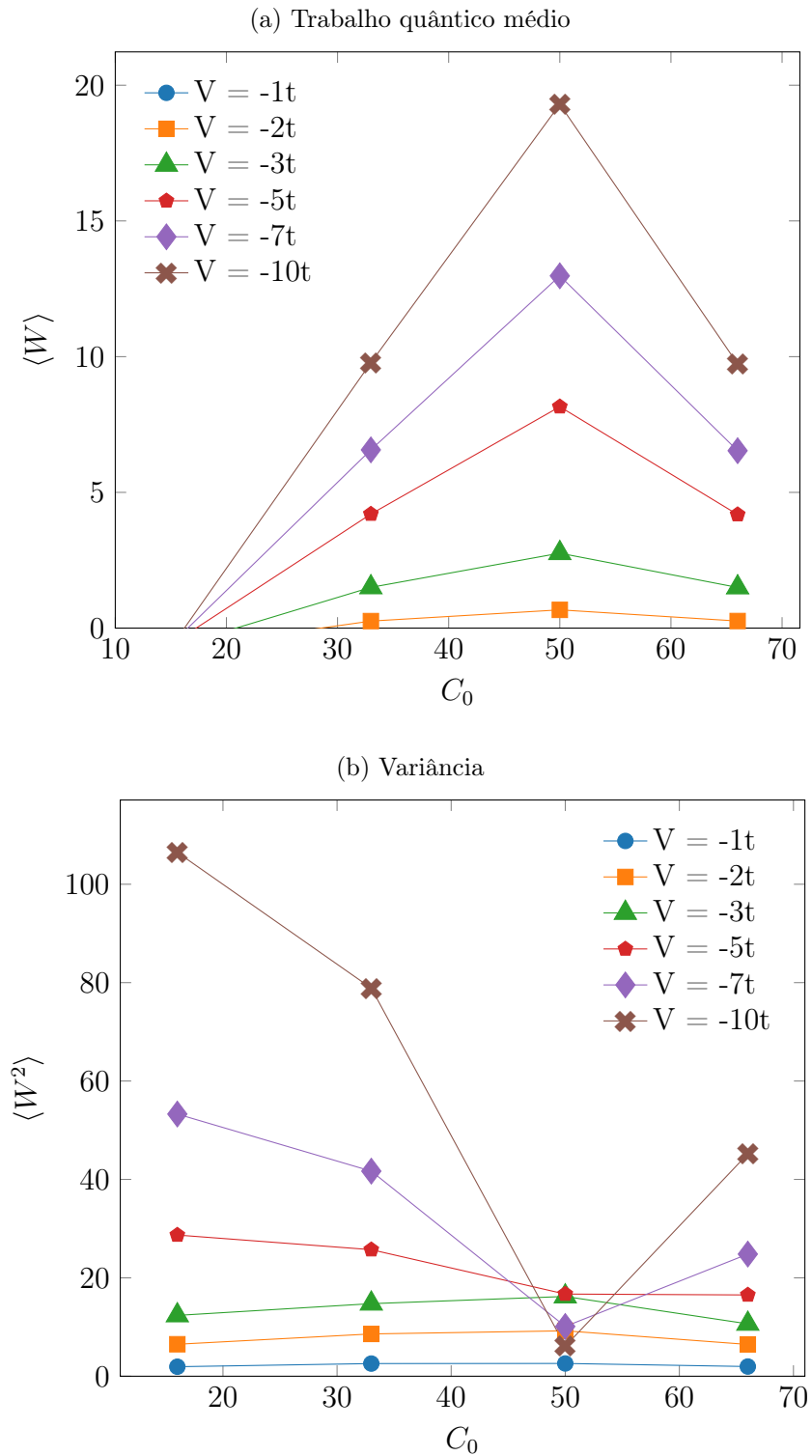
Para temperaturas moderadas ($\beta = 0.5t$) vemos que é possível a extração de trabalho quântico do sistema exceto para o caso de intensidades de desordem baixas ($V = -1t$), como mostra a Figura 25a. Além disso, a Figura 25b mostra que a temperatura começa a afetar também a dispersão do trabalho, o que indica que agora mais estados estão contribuindo para a diferença $E_f - E_0$. Entretanto, para altas temperaturas a Figura 26 mostra que é apenas possível de produzir trabalho e que as flutuações são grandes.

Figura 24 – Valores de (a) variância média $\langle W^2 \rangle$ e (b) assimetria média $\langle W^3 \rangle$ para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 100t$, para diferentes intensidades de desordem V . Valores em unidades adimensionais.



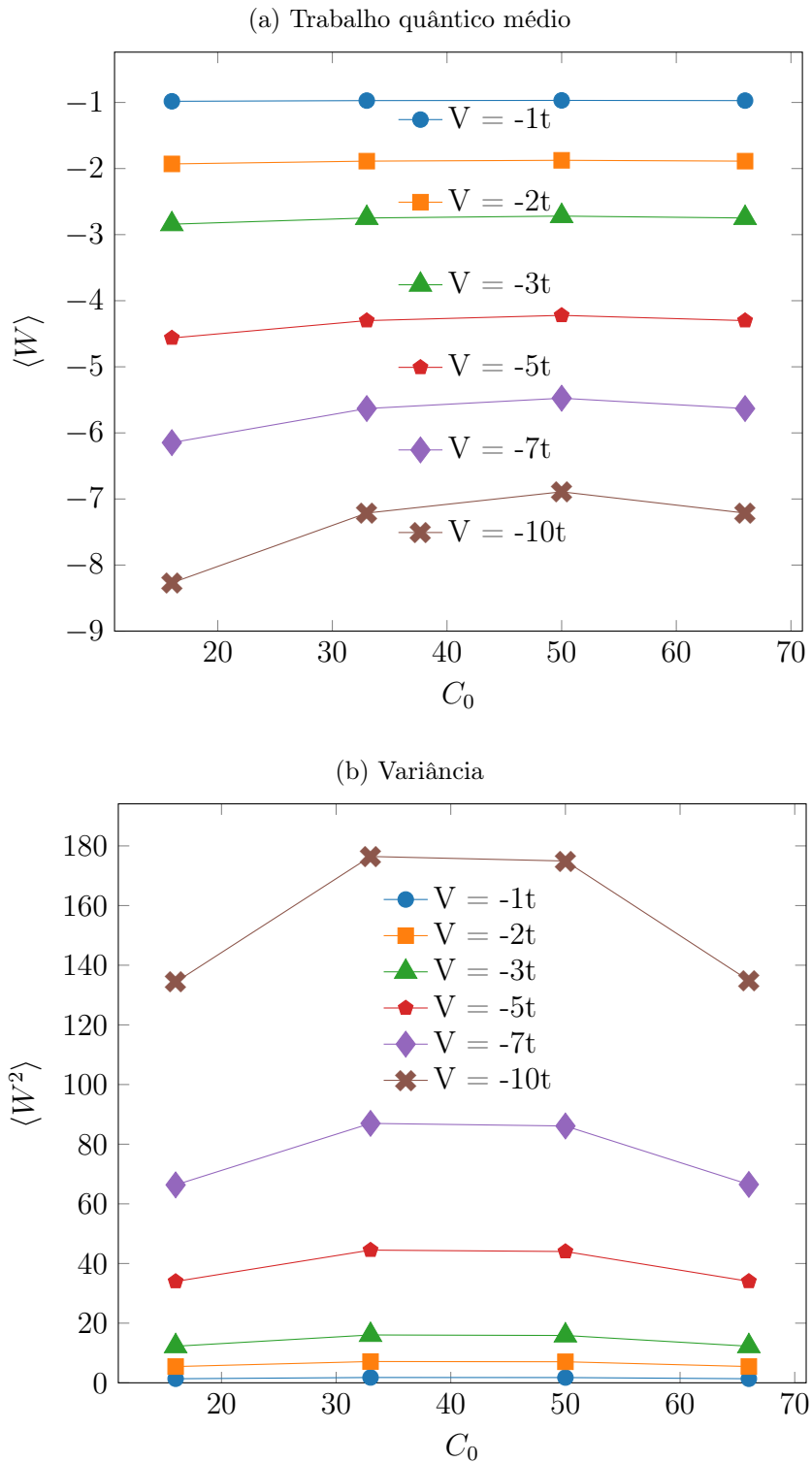
Fonte: Autoria própria.

Figura 25 – Valores de (a) trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ e (b) variância média $\langle W^2 \rangle$ para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 0.5t$, para diferentes intensidades de desordem V . Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

Figura 26 – Valores de (a) trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ e (b) variância média $\langle W^2 \rangle$ para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 0.0333t$, para diferentes intensidades de desordem V . Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

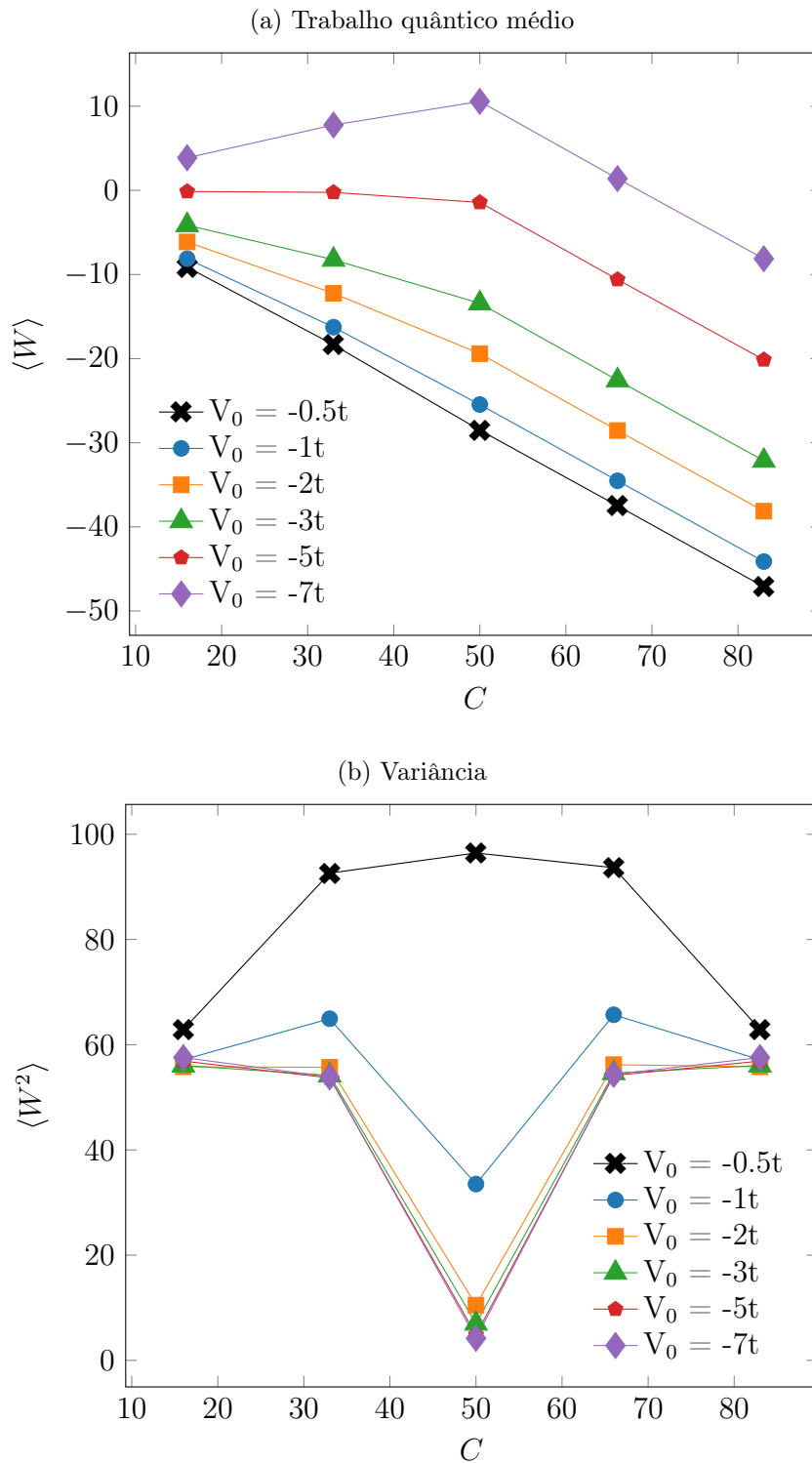
Em seguida, investigamos o trabalho quântico médio e os outros dois momentos no protocolo 2, onde mantivemos a mesma concentração de impurezas e variamos a intensidade de desordem entre os estados inicial e final.

Pela Figura 27a, vemos que o máximo de extração de trabalho quântico é na concentração crítica assim como no protocolo 1. Entretanto, diferentemente do protocolo 1 vemos que aqui apenas em alguns casos conseguimos extrair trabalho quântico do sistema, mesmo para uma intensidade de desordem fortemente atrativa do estado inicial ($V = -7t$). Além disso, para uma intensidade de $V = -5t$ não conseguimos mais extrair trabalho na concentração crítica e em intensidades abaixo dessa não extraímos de nenhuma concentração.

Na Figura 23b observamos novamente um comportamento distinto daquele observado no protocolo 1. É possível identificar a transição superfluido-isolante mesmo para uma desordem fracamente atrativa ($V = -1t$), apesar de bem suave. No caso da Figura 27a vemos que a assinatura da transição desaparece para valores $|V| \leq 2t$. Esse resultado pode ser explicado quando olhamos a Figura 27b: mesmo para intensidades fracas a variância é alta, indicando que vários estados estão contribuindo para a diferença de energia $E_f - E_0$ que leva àquele valor de trabalho quântico. Isso mostra também que as transições são mais afetadas pela intensidade de desordem.

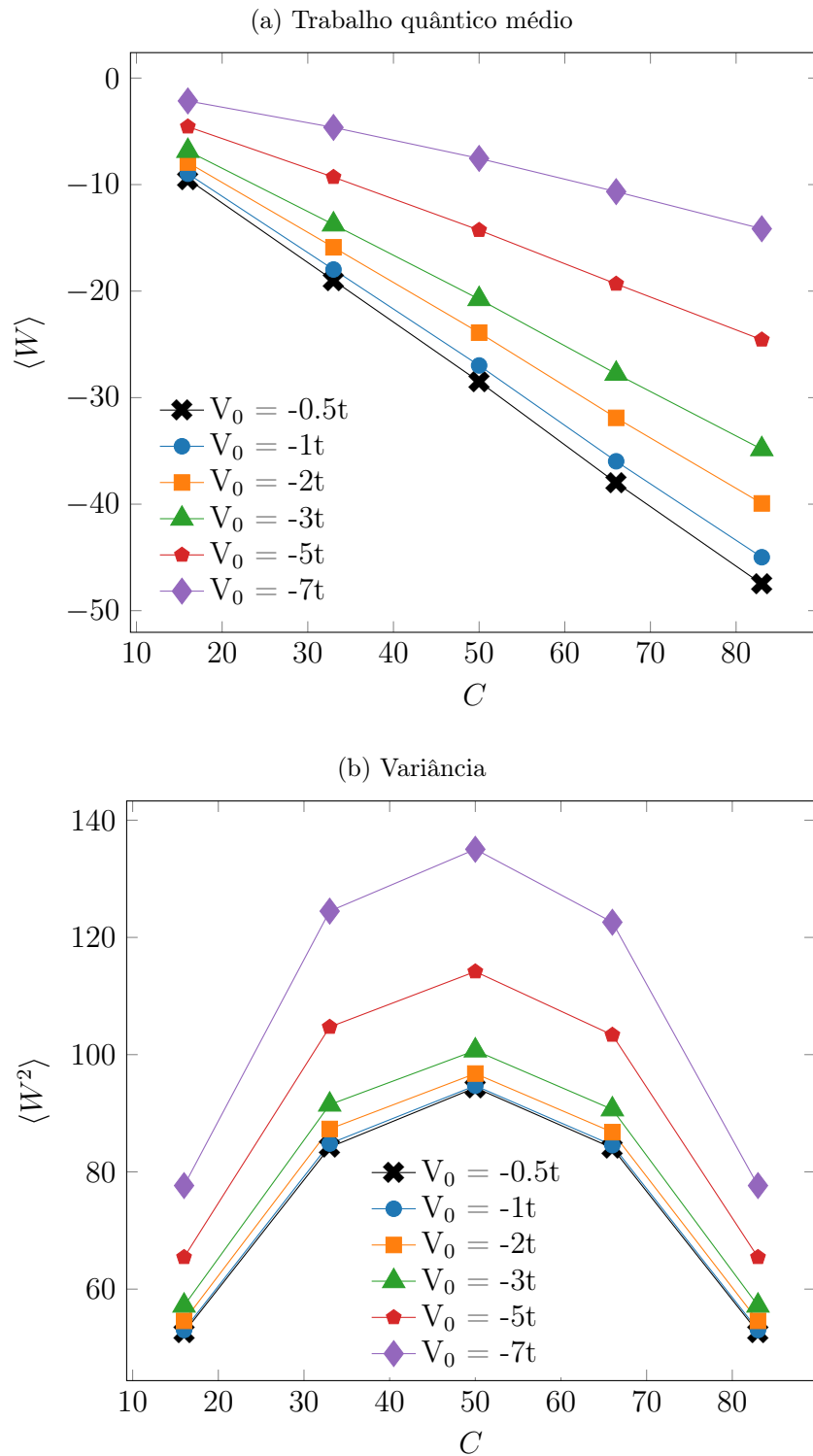
Por fim, a Figura 28 revela que em altas temperaturas a assinatura da transição desaparece completamente mesmo para intensidades de desordem fortemente atrativas, ou seja, não é mais possível extrair trabalho de nenhum caso e as flutuações quânticas são grandes.

Figura 27 – Valores de (a) trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ e (b) variância média $\langle W^2 \rangle$ em função da concentração C para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 100t$, para diferentes intensidades de desordem V do estado inicial. Para todos os casos a intensidade de desordem do estado final é $V_f = -10t$. Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

Figura 28 – Valores de (a) trabalho quântico médio $\langle W \rangle$ e (b) variância média $\langle W^2 \rangle$ em função da concentração C para sistemas com $L = 6$ sítios, densidade $n = 1.0$, interação $U = -5t$ e $\beta = 0.0333t$, para diferentes intensidades de desordem V do estado inicial. Para todos os casos a intensidade de desordem do estado final é $V_f = -10t$. Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

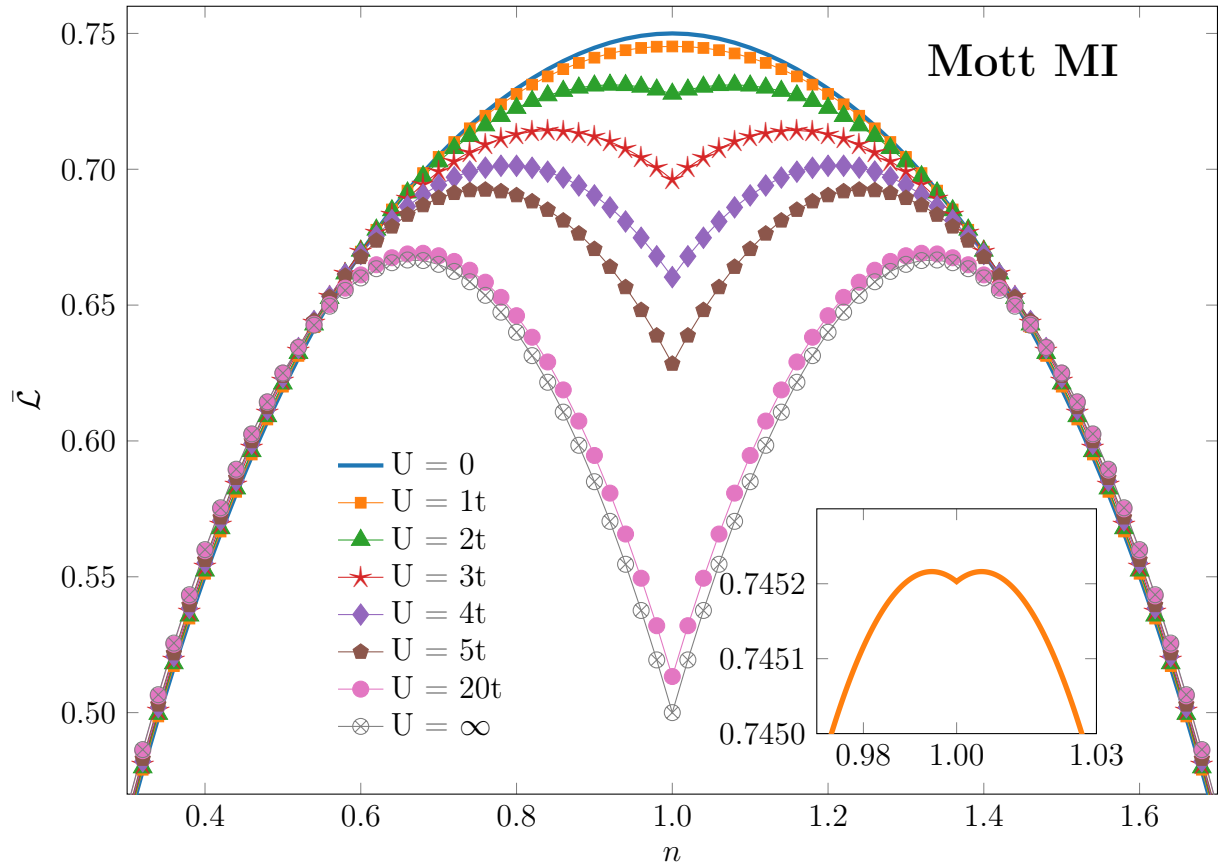
3.2 Regime de interação repulsiva entre partículas $U > 0$

Assim como no caso da transição SI, aqui também aplicamos cálculos de DFT para obter valores de energia e densidades e usamos a entropia linear para quantificar o grau de emaranhamento dos sistemas e investigar a transição MI de Mott-Anderson em cadeias com impurezas. Apesar de ser uma ferramenta conhecidamente eficaz para se identificar transições de fase quânticas (76–80) e estados exóticos da matéria (81–85), o emaranhamento também tem sido utilizado para explorar a transição MI de Mott mas em sistemas sem desordem (86–89). Entretanto, poucos estudos investigaram a transição MI de Mott-Anderson do ponto de vista do emaranhamento (90–92).

3.2.1 Transição MI desencadeada pela densidade média de partículas n

A fim de investigar o comportamento de ambos os fenômenos juntos (MI de Mott-Anderson), primeiro analisamos cada caso separado (MI de Mott e MI de Anderson). Pela Figura 29 vemos que a transição de Mott, que ocorre quando não há desordem no sistema ($V = 0$), apresenta uma queda no emaranhamento com o aumento da interação U , no ponto de densidade média $n = 1$. Nesse valor de densidade, surge um mínimo local para valores de $U \gtrsim 2t$ que se torna mais acentuado conforme o valor da interação aumenta. Denominamos essa densidade como *densidade crítica* n_C^U . A saturação do emaranhamento em um valor finito de $\mathcal{L} = 0.5$ para $U \rightarrow \infty$ é a assinatura da transição de Mott, onde o aumento da interação U congela os graus de liberdade das partículas em relação a probabilidade de *hopping* entre os sítios, apresentando probabilidades máximas de ocupação simples ($w_\uparrow = w_\downarrow \rightarrow 0.5$ - ver Apêndice). Apesar das partículas estarem congeladas nos sítios, o emaranhamento para $U \rightarrow \infty$ não é zero pois as partículas ainda possuem os graus de liberdade de spin, que não estão congelados. Isso resulta em um tipo de localização parcial.

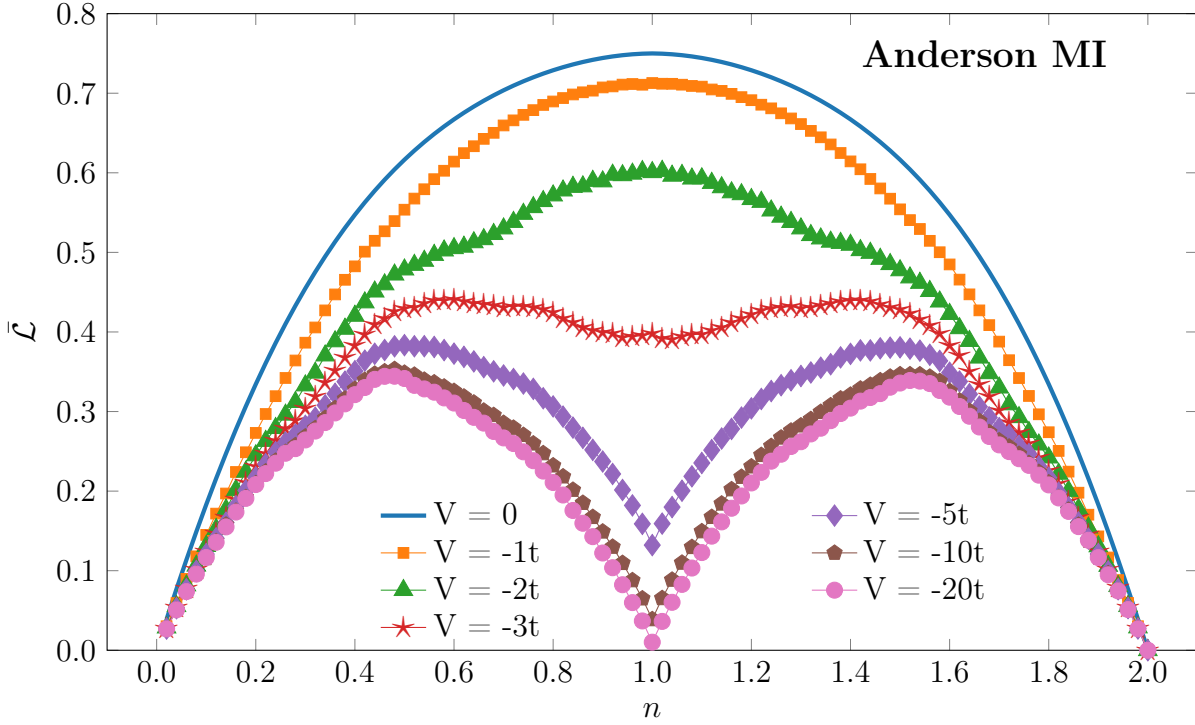
Figura 29 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média de partículas n para sistemas com diferentes interações intra-sítios e sem desordem (Mott MI). Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

De maneira semelhante, como mostra a Figura 30, na transição MI Anderson há uma queda do emaranhamento com o aumento da intensidade de desordem com mínimo de emaranhamento na densidade crítica $n_C^V = 2C/100$ para valores de $|V| \gtrsim 3t$. Esse mínimo em n_C^V primeiramente observado na transição SI (93,94) é a assinatura que caracteriza a localização de Anderson: uma desordem V atrativa congela os graus de liberdade das partículas favorecendo a dupla ocupação nos sítios com impurezas. Entretanto, diferentemente do caso de Mott, na transição de Anderson há uma localização total das partículas caso a intensidade de desordem for suficientemente forte ($\bar{w}_2 \rightarrow 1$ e $\bar{\mathcal{L}} = 0$ para $|V| \rightarrow \infty$).

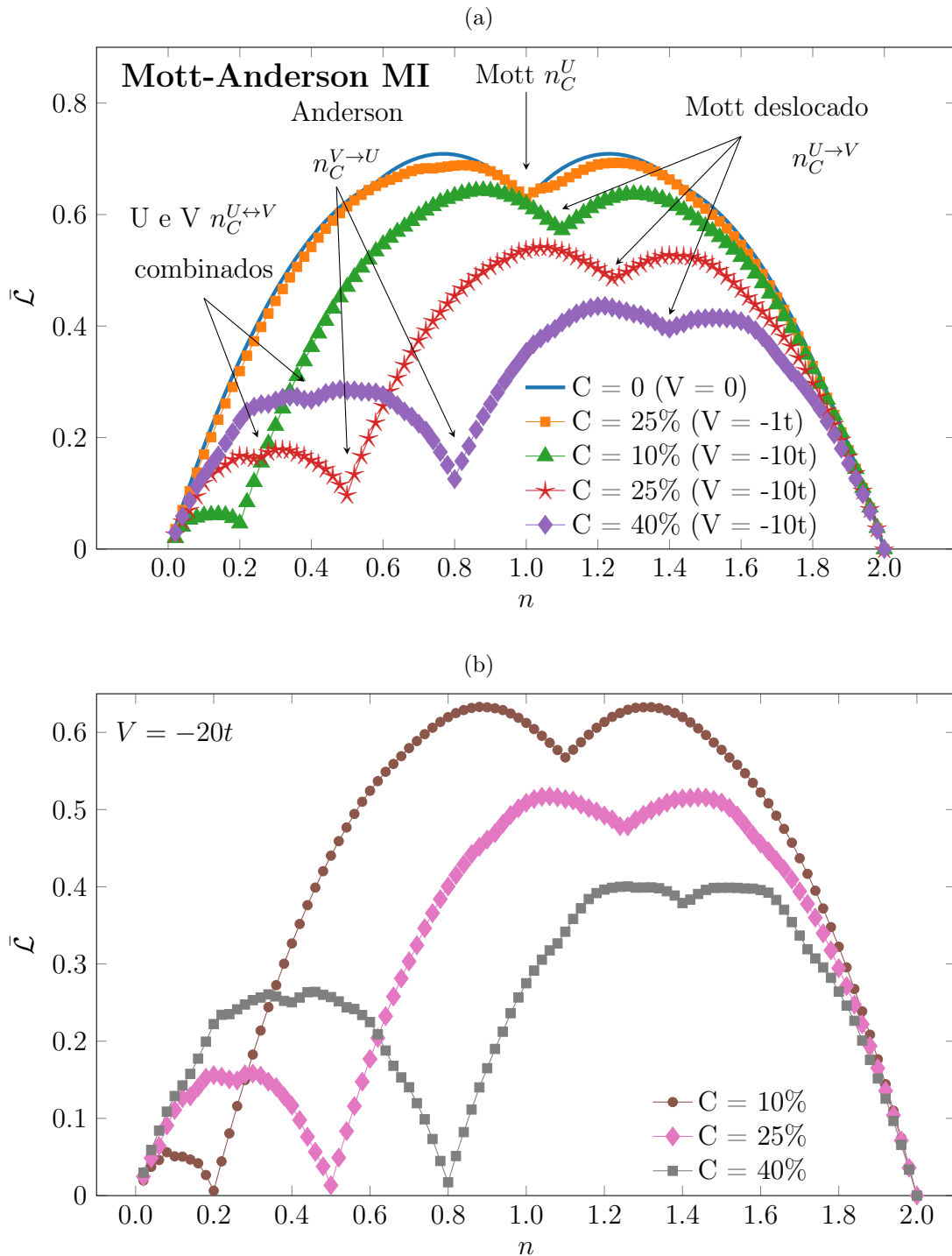
Figura 30 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e sem interação entre partículas (Anderson MI). Para esses sistemas a concentração de impurezas é de $C = 50\%$. Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

Por fim, analisamos o comportamento da transição MI na presença de desordem V e interação U , como mostra a Figura 31. Vemos pela Figura 31a que com uma intensidade de desordem fraca ($V = -1t$) o perfil de emaranhamento é semelhante ao do caso "clean" ($C = 0$ e $V = 0$): o mínimo se mantém em $n_C^U = 1$ e o mínimo em n_C^V da transição de Anderson não aparece, permanecendo apenas a Mott MI. Conforme o valor de V cresce, a desordem começa a impactar na transição de Mott (Figura 31b): a densidade crítica da transição de Mott é deslocada para valores de $n_C^{U \rightarrow V} > 1$, o que indica que a densidade efetiva nos sítios sem impurezas ($n_{V=0}$) é menor que n , pois como as partículas estão localizadas nos sítios com impurezas ($V < 0$) é necessário uma densidade $n > 1$ para satisfazer a relação de $n_{V=0} = 1$ na transição de Mott.

Figura 31 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média n de partículas para sistemas com (a) diferentes concentrações de impurezas e intensidades de desordem e (b) com $C = 25\%$ e intensidade fortemente atrativa ($V = -20t$). Todos os casos apresentam interação $U = -5t$. Valores em unidades adimensionais.



Fonte: Autoria própria.

Para desordem atrativa ($V < 0$) a maioria das partículas está localizada nos sítios com impurezas L_V podendo ter até 2 partículas por sítio, ou seja, $2L_V$. Sobram assim $L - L_V$ sítios sem impurezas e $N - 2L_V$ partículas nesses sítios. Sendo assim, a densidade efetiva dos sítios sem impurezas pode ser definida como,

$$n_{V=0} \equiv \frac{(N - 2L_V)}{(L - L_V)}. \quad (62)$$

A densidade crítica $n_C^{U \rightarrow V}$ será portanto a densidade média n para que $n_{V=0} = 1$, que em termos de concentração pode ser escrita como,

$$\begin{aligned} n_{V=0} &= 1, \\ \frac{(N - 2L_V)}{(L - L_V)} &= 1, \\ N &= L + L_V, \\ \frac{N}{L} &= 1 + \frac{L_V}{L}, \\ n_C^{U \rightarrow V} &= 1 + \frac{C}{100}. \end{aligned} \quad (63)$$

De modo semelhante, tem-se uma densidade efetiva para os sítios com impurezas definida como

$$n_V \equiv \frac{N}{L_V}, \quad (64)$$

onde a densidade crítica $n_C^{U \leftrightarrow V}$ tem que ser menor que 1 para que $n_V = 1$. Essa densidade crítica é induzida pela desordem e está associada a uma transição do tipo Mott (*Mott-like MI*) que, em termos de concentração, é dado por

$$\begin{aligned} n_V &= 1, \\ \frac{N}{L_V} &= 1, \\ \frac{N}{L} &= \frac{L_V}{L}, \\ n_C^{U \leftrightarrow V} &= \frac{C}{100}. \end{aligned} \quad (65)$$

Os mínimos suaves em $n_C^{U \leftrightarrow V}$ são induzidos por desordem suficientemente forte, como mostra a Figura 31a, que para os casos $V = 0$ e $V = -1t$ estão ausentes. Além disso, a

densidade crítica n_C^V permanece em $2C/100$ mas com um valor de emaranhamento maior que 0 (em comparação com a Figura 30), indicando que na presença de interação U é preciso um valor de desordem mais forte para que o sistema alcance uma localização total ($\mathcal{L} = 0$). Isso ocorre pois enquanto $U > 0$ contribui favorecendo a ocupação simples das partículas (w_\uparrow, w_\downarrow), V contribui favorecendo a dupla ocupação (w_2). Sendo assim, para a transição MI de Anderson há uma competição entre U e V de maneira que o sistema precisa de uma desordem mais forte para alcançar a fase isolante, o que contrasta com a transição SI quando desencadeada por desordem, pois nesse caso $U < 0$ também favorece a dupla ocupação e essa competição não é observada (93, 94).

Outra característica que vemos na Figura 31a é que o mínimo na densidade crítica $n_C^{V \rightarrow U}$ é menor para concentrações menores pois o impacto de U é menos relevante para densidades baixas, diminuindo a competição entre V e U . Além disso, a Figura 31b mostra que com uma desordem suficientemente forte o sistema alcança a localização total em $n_C^{V \rightarrow U}$ independente da interação U . Ainda, vemos um comportamento semelhante ao que víamos para a transição SI: uma "plataforma" no perfil de emaranhamento para valores de $n < n_C^{V \rightarrow U}$ que está relacionada com a dificuldade de conexão entre as partículas devido a distância média dos sítios com impurezas. Com o aumento de C , a distância entre esses sítios diminui e a plataforma fica mais extensa e apresenta um $\bar{\mathcal{L}}$ maior.

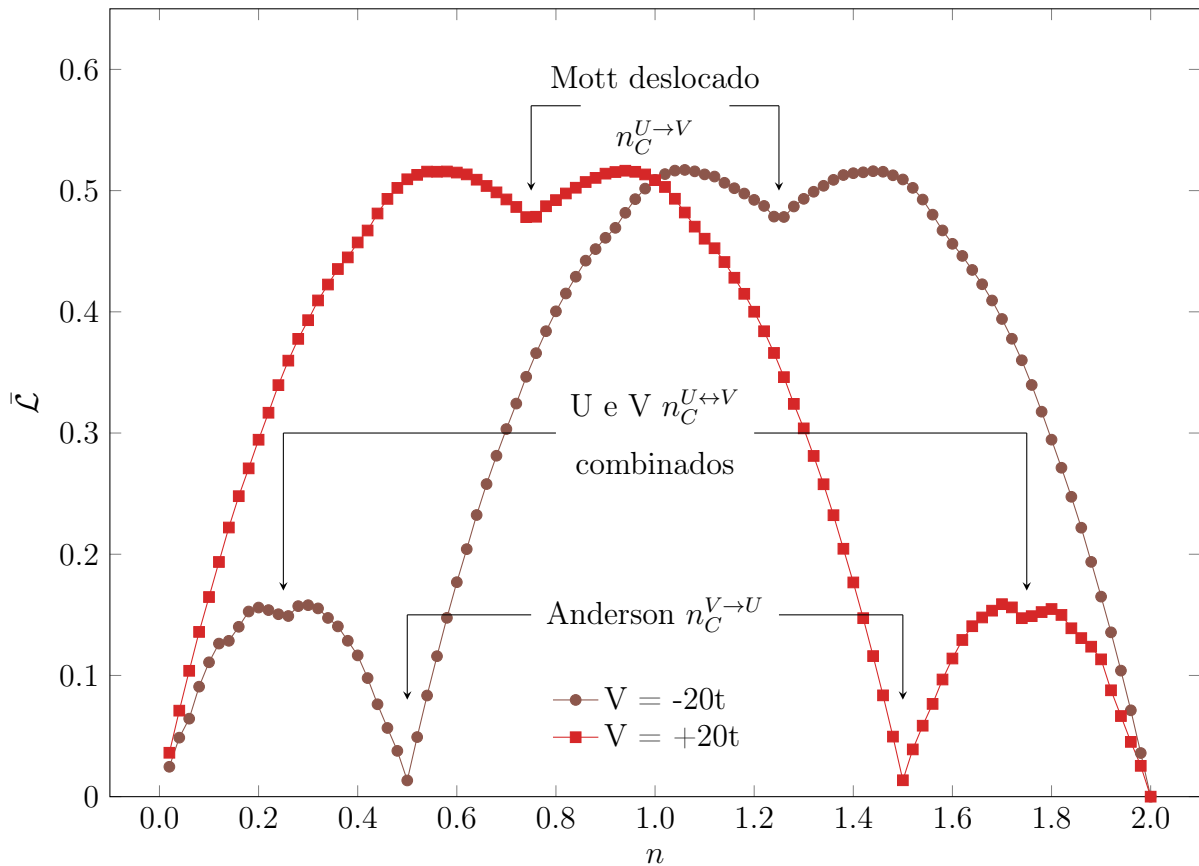
A Tabela 3 resume os tipos de transição (Mott, Anderson ou Mott-Anderson) e as respectivas densidades críticas para intensidade de desordem atrativa ($V < 0$). Para obter as mesmas expressões para intensidade de desordem repulsiva, utiliza-se a simetria partícula-buraco e toma-se $n_C \rightarrow \tilde{n}_C = 2 - n_C$. A simetria partícula-buraco pode ser confirmada através da Figura 32, onde temos $n_C^V = 0.5$, $n_C^{U \rightarrow V} = 1.25$ e $n_C^{U \leftrightarrow V} = 0.25$ para $V < 0$ (curva marrom) e $n_C^V = 1.50$, $n_C^{U \rightarrow V} = 0.75$ e $n_C^{U \leftrightarrow V} = 1.75$ para $V > 0$ (curva vermelha).

Tabela 3 – Relação entre densidade crítica n_C e concentração de impurezas C para os diferentes tipos de transição metal-isolante (Mott, Anderson e Mott-Anderson).

| Transição | Mott | Anderson | Mott-Anderson |
|-------------------|-----------------------|-------------------------|--|
| MI | $U \gtrsim 2t, V = 0$ | $ V \gtrsim 3t, U = 0$ | $U \gtrsim 2t, V \gtrsim 3t$ |
| densidade crítica | $n_C^U = 1$ | $n_C^V = 2C/100$ | $n_C^{U \rightarrow V} = 1 + C/100$ $n_C^{V \rightarrow U} = n_C^V = 2C/100$ $n_C^{U \leftrightarrow V} = C/100$ |

Fonte: Autoria própria.

Figura 32 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da densidade média de partículas n para sistemas com intensidade de desordem atrativa ($V = -20t$) e repulsiva ($V = +20t$), e interação $U = 5t$. Valores em unidades adimensionais.



3.2.2 Transição MI desencadeada pela concentração de impurezas C

Semelhantemente ao comportamento da transição SI, na metal-isolante também vemos uma não-monotonicidade na concentração crítica ($C = 40\%$) com $\bar{\mathcal{L}} \approx 0$ indicando um estado de localização total do sistema (Anderson MI), como mostra a Figura 33a. Além disso, esse mínimo também está relacionado com a intensidade de desordem: para fraca desordem, a não-monotonicidade torna-se menos abrupta e o mínimo não ocorre em C_C , caracterizando o estado de localização total frustrada.

Entretanto, na transição MI vemos um mínimo local adicional em $C = 80\%$ que corresponde a transição de Mott: nesse ponto a interação suficientemente forte ($U = 10t$) favorece a ocupação simples das partículas (w_\uparrow, w_\downarrow), e praticamente todos os sítios estão ocupados ou com partículas de *spin-up* ou de *spin-down*. Essa interpretação é confirmada pelas probabilidades médias de ocupação como mostra a Figura 34.

A Figura 33b mostra a simetria em relação ao sinal da desordem: para desordem repulsiva a concentração crítica é $C = 60\%$ pois agora 60 sítios possuem impurezas repulsivas e as partículas estarão duplamente ocupadas nos 40 sítios sem impurezas. Da mesma maneira, temos a simetria em relação ao mínimo local que para impurezas repulsivas ocorre em $C = 20\%$.

Figura 33 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com intensidade de desordem (a) atrativa e (b) repulsiva. Em todos os casos, os sistemas apresentam interação $U = 10t$ e densidade média $n = 0.8$. Valores em unidades adimensionais.

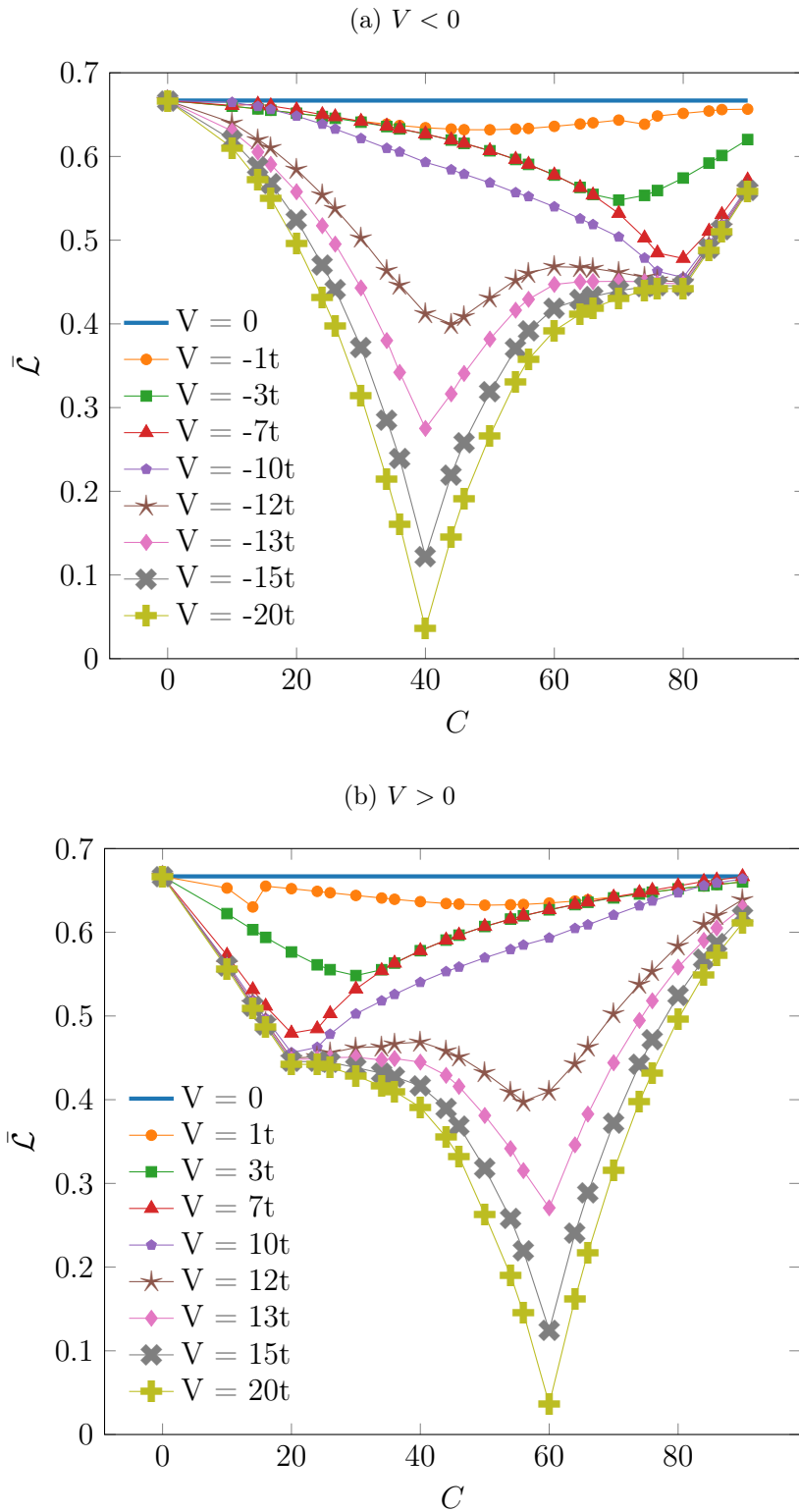
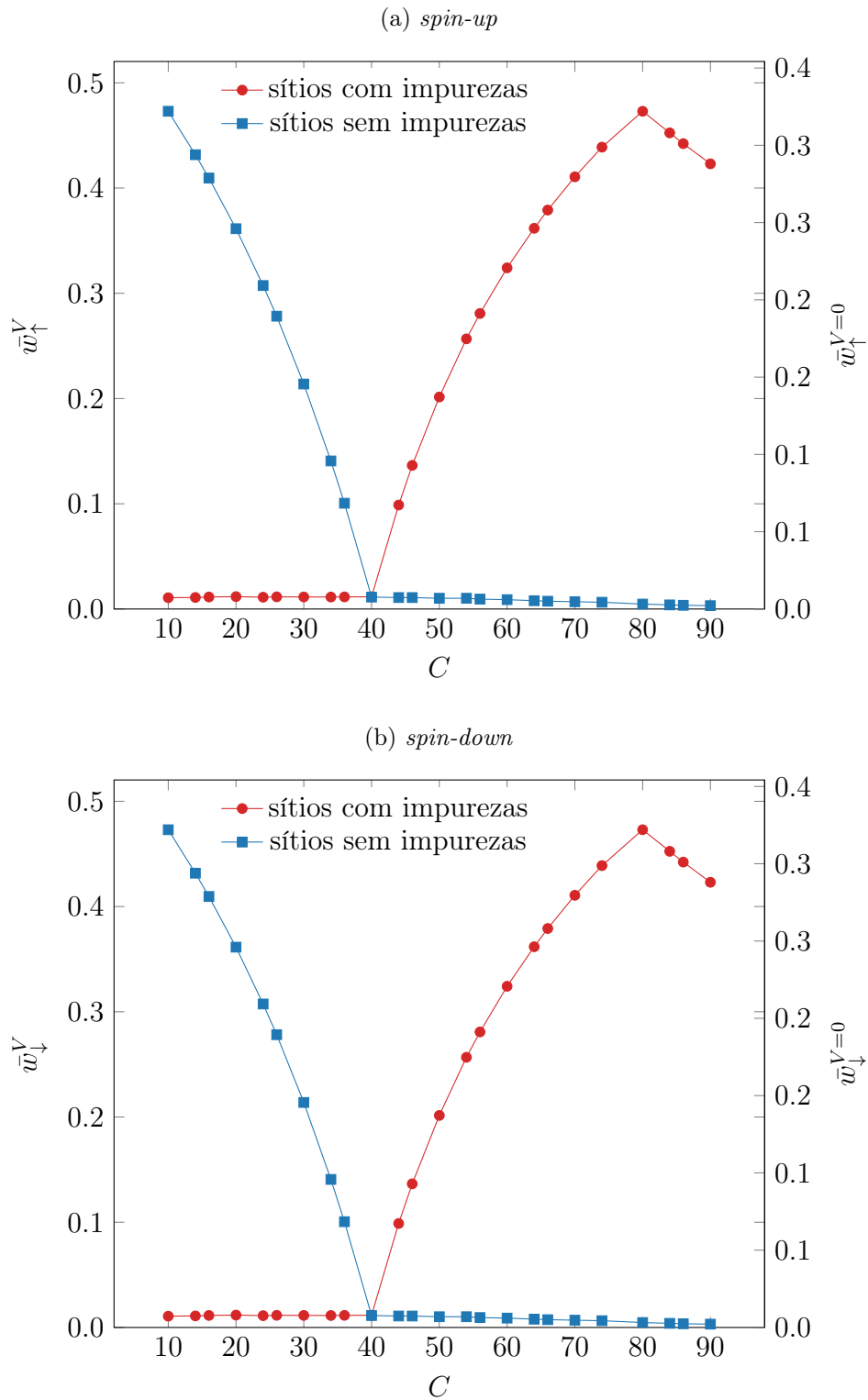


Figura 34 – Probabilidades médias de ocupação simples (a) *spin-up* e (b) *spin-down* para sítios com impurezas \bar{w}_σ^V e sem impurezas $\bar{w}_\sigma^{V=0}$ em função da concentração de impurezas C para sistemas com intensidade de desordem $V = -20t$, densidade média $n = 0.8$ e interação $U = 10t$. Valores em unidades adimensionais.



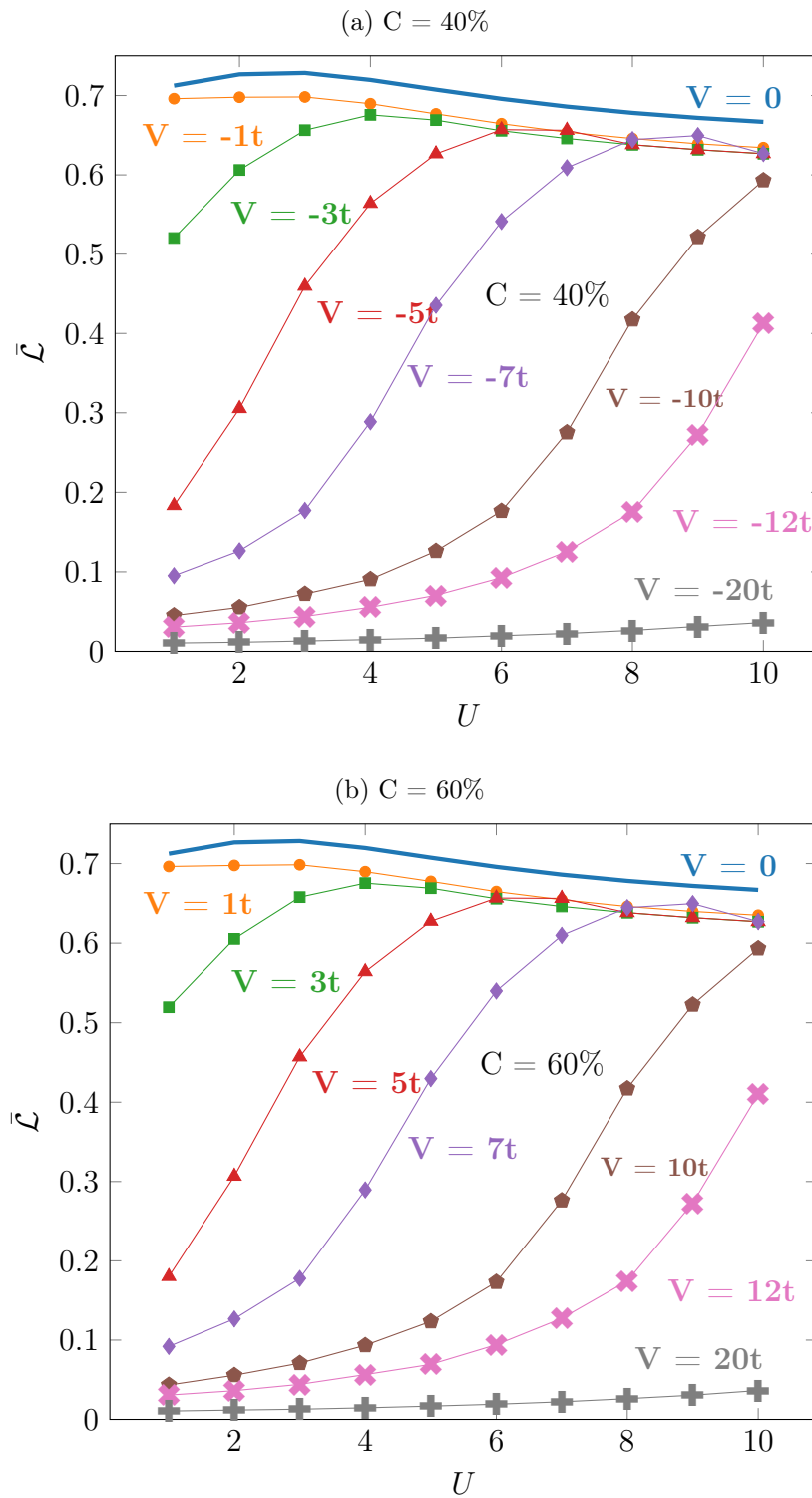
Fonte: Autoria própria.

3.2.3 Transição MI desencadeada pela interação intra-sítio U

Por fim, quando analisamos o perfil de emaranhamento médio em função da interação intra-sítio fica mais explícito a competição entre U e V . A Figura 35 mostra que é necessário uma desordem fortemente atrativa ($V = -20t$) ou repulsiva ($V = +20t$) para se alcançar o estado de localização total. Mesmo uma intensidade de desordem $V = -10t$, que no caso do regime de $U < 0$ era considerada fortemente atrativa, no regime $U > 0$ ela não é suficientemente forte para levar o sistema há localização total, já que V contribui favorecendo a ocupação dupla dos sítios com impurezas (w_2) enquanto que U contribui favorecendo as probabilidades desemparelhadas (w_\uparrow e w_\downarrow).

Sendo assim, podemos resumir que para os casos de concentração crítica quanto maior a interação U e menor a intensidade V o sistema estará em um estado onde as partículas tem maior mobilidade, sendo classificado como um estado metálico. Entretanto, quanto menor a interação U e maior a intensidade V o sistema estará em um estado de pouca mobilidade das partículas, sendo classificado como isolante.

Figura 35 – Emaranhamento médio $\bar{\mathcal{L}}$ em função da interação intra-sítio U para sistemas com (a) $C = 40\%$ de impurezas atrativas e (b) $C = 60\%$ de impurezas repulsivas, com densidade média $n = 0.8$. Valores em unidades adimensionais.



4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Na presente tese, estudamos duas transições de fase quânticas em nanoestruturas desordenadas: a transição superfluido-isolante e a transição metal-isolante. Utilizamos o modelo de Hubbard fermiônico unidimensional para descrever as nanoestruturas e a desordem foi inserida através de impurezas localizadas, aleatoriamente distribuídas na cadeia, de acordo com uma concentração específica. Para identificar essas transições foi utilizado o grau de emaranhamento quantificado via entropia linear.

No Capítulo 1, apresentamos brevemente diferentes tipos de fases e como elas se relacionam. Discutimos também a diferença entre uma transição de fase clássica e uma transição de fase quântica, e quais as principais características da última. Além disso, discorreremos das duas principais transições aqui estudadas: a transição metal-isolante e a transição superfluido-isolante.

No Capítulo 2, introduzimos a fundamentação teórica do modelo de Hubbard e as especificidades que adotamos neste trabalho. Adicionalmente, apresentamos os fundamentos da teoria do Funcional da Densidade e sua formulação para o modelo de Hubbard. Por fim, discutimos a formulação do emaranhamento para esse modelo e as aproximações que adotamos para o cálculo da entropia linear.

O Capítulo 3 foi dedicado às discussões dos resultados. Começamos investigando a transição superfluido-isolante e sua relação com a concentração de impurezas. Mostramos que a transição SI pode ser desencadeada pela intensidade das impurezas V , pela concentração das impurezas C e pela densidade média de partículas n . Vimos que enquanto a interação U praticamente não afeta a transição, o confinamento harmônico k , se suficientemente forte, pode induzir uma transição do estado totalmente localizado para a localização ordinária.

Mostramos que quando a transição é desencadeada pela intensidade de desordem, qualquer valor pequeno de V é capaz de levar o sistema de um estado de superfluidez para um estado localizado. Ainda, mostramos que o emaranhamento satura com o aumento de $|V|$ indicando um estado isolante. Quando comparamos o perfil da entropia em função da intensidade de desordem para valores atrativos ($V < 0$) e repulsivos ($V > 0$), mostramos também que há uma simetria partícula-buraco em relação a concentração crítica.

Estendemos nossa análise para o caso onde a transição SI é desencadeada pela concentração de impurezas. Para esse caso, mostramos que há uma intensidade mínima de V capaz de levar o sistema de um estado de superfluidez para um estado de localização total. Quando esse V não é forte o suficiente, o sistema vai para um estado que chamamos de localização frustrada. Além disso, mostramos que há uma relação bem definida entre a concentração de impurezas e a densidade média do sistema. Discutimos também a ordem da transição em relação ao parâmetro crítico: quando desencadeada por V a transição é de segunda ordem e quando desencadeada por C , de primeira ordem.

Adicionalmente, exploramos a transição SI do ponto de vista da termodinâmica fora-do-equilíbrio. Verificamos que é possível identificar a transição através do trabalho quântico para temperaturas baixas e moderadas e que, na concentração crítica, temos a situação em que melhor se extrai trabalho do sistema.

Finalmente, exploramos a transição metal-isolante quando há apenas interação U ($V = 0$) na transição "metal-isolante de Mott", e observamos que o emaranhamento apresenta um mínimo na densidade crítica $n = 1$ mas que é não-nulo, indicando que a localização é parcial. Em contraste, na presença apenas de desordem V ($U = 0$), na transição metal-isolante de Anderson, o emaranhamento pode ser nulo na concentração crítica, para desordem suficientemente forte, caracterizando a localização total. Vimos também que as transições de Mott e de Anderson apresentam uma única densidade crítica quando separadas e três quando combinadas: uma referente à interação U , outra referente à intensidade de desordem V e a terceira que é referente à competição entre desordem e interação e está relacionada com a densidade efetiva do sistema.

A maior parte dos resultados aqui apresentados já fora publicada em três artigos científicos:

1. G. A. Canella, V. V. França, *Scientific Reports* **9**, 15313 (2019) (93)
2. G. A. Canella, V. V. França, *Physica A* **545**, 123646 (2020) (94)
3. G. A. Canella, V. V. França, *Physical Review B* **104**, 134201 (2021) (95)

Outros dois artigos científicos estão em preparação, contemplando os efeitos de temperatura tanto na transição SI quanto na MI. Como perspectivas futuras, ressaltamos a possibilidade de investigar as transições SI e MI via emaranhamento em sistemas com diferentes topologias de desordem, pois neste trabalho nos limitamos à modelagem de

desordem via impurezas pontuais de mesma intensidade. Um outro sistema interessante de ser explorado é o de "superredes" onde temos modulações periódicas de impurezas. Ou ainda, investigar sistemas que possuem magnetização. Com isso, esperamos que essa tese inspire a comunidade a investigar essas e outras questões e que ajude a contribuir para a área.

REFERÊNCIAS

- 1 RIEDEL, M. F. et al. The european quantum technologies flagship programme, **Quantum Sci. Technol.**, v.2, p. 030501, 2017.
- 2 ACIN, A. et al. The quantum technologies roadmap: a european community view, **New J. Phys.**, v. 20, p. 0802201, 2018.
- 3 ONNES, H. K. The superconductivity of mercury, **Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden**, p. 122b, 1911.
- 4 ONNES, H. K. **Comm. Phys. Lab. Univ. Leiden**, p. 139f, 1914.
- 5 EISENSTEIN, J. Superconducting elements, **Rev. of Mod. Phys.**, v. 26, p. 277, 1954.
- 6 BARDEEN, J.; COOPER, L. N.; SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity, **Phys. Rev.**, v. 108, p. 1175, 1957.
- 7 ANNET, J. F. **Superconductivity, Superfluids and Condensates**. 1. ed. Oxford: Oxford University Press, 2004. 186 p.
- 8 BEDNORZ, J. G.; MULLER, K. A. Possible high- T_C superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. **Z. Phys. B - Cond. Matt.**, v. 64, p. 189, 1986.
- 9 DROZDOV, A. P. et al. Conventional superconductivity at 203 Kelvin at high pressures in the sulfur hydride system. **Nature**, v. 525, p. 73, 2015.
- 10 SACHDEV, S. **Quantum Phase Transitions**. 2. ed. Massachusetts: Cambridge University Press, 2011. 501 p.
- 11 GESSNER, M. et al. Observing a quantum phase transition by measuring a single spin. **EPL**, v. 107, p. 40005, 2014.
- 12 KOH, C. Y.; KWEK, L. C. Entanglement and quantum phase transition of spin glass: A renormalization group approach. **Phys. Lett. A**, v. 378, p. 2743, 2014.

- 13 KOPP, A.; JIA, X.; CHAKRAVARTY, S. Replacing energy by von Neumann entropy in quantum phase transitions. **Ann. of Phys.**, v. 322, p. 1466, 2007.
- 14 HORODECKI, R. et al. Quantum entanglement. **Rev. Mod. Phys.**, v. 81, p. 865, 2009.
- 15 MODI, K. et al. The classical-quantum boundary for correlations: Discord and related measures. **Rev. Mod. Phys.**, v. 84, p. 1655, 2012.
- 16 CAI, X. et al. Topological superconductor to Anderson localization transition in one-dimensional incommensurate lattices. **Phys. Rev. Lett.**, v. 110, p. 176403, 2013.
- 17 ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Phys. Rev.**, v. 109, p. 1492, 1958.
- 18 MOTT, N. F. Metal-insulator transition. **Rev. of Mod. Phys.**, v. 40, p. 677, 1968.
- 19 DUBI, Y.; MEIR, Y.; AVISHAI, Y. Nature of superconductor-insulator transition in disordered superconductors. **Nature**, v. 449, p. 876, 2007.
- 20 LUI, S. et al. Anderson localization in degenerate spin-orbit coupled fermi gas with disorder. **Sci. Rep.**, v. 6, p. 22623, 2016.
- 21 JENDRZEJEWSKI, F. et al. Three-dimensional localization of ultracold atoms in an optical disordered potential. **Nature**, v. 8, p. 398, 2012.
- 22 PASIENSKI, M. et al. A disordered insulator in an optical lattice. **Nature Phys.**, v. 6, p. 677, 2010.
- 23 BILLY, J. et al. Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder. **Nature**, v. 453, p. 891, 2008.
- 24 ROATI, G. et al. Anderson localization of a non-interacting Bose-Einstein condensate. **Nature**, v. 453, p. 895, 2008.
- 25 FALLANI, L. et al. Ultracold atoms in a disordered crystal of light: Towards a Bose glass. **Phys. Rev. Lett.**, v. 98, p. 130404, 2007.

- 26 KOHN, W. Nobel lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals. **Rev. Mod. Phys.**, v. 71, p. 1253, 1999.
- 27 KAPITULNIK, A.; KIVELSON, S. A.; SPIVAK, B. Colloquium: Anomalous metals: Failed superconductors. **Rev. Mod. Phys.**, v. 91, p. 011002, 2019.
- 28 BUCHHOLD, M.; DIEHL, S. ALTLAND, A. Vanishing density of states in weakly disordered weyl semimetals. **Phys. Rev. Lett.**, v. 121, p. 215301, 2018.
- 29 ZIEGLER, K.; SINNER, A. Short note on the density of states in 3D weyl semimetals. **Phys. Rev. Lett.**, v. 121, p. 166401, 2018.
- 30 TEZUKA, M.; GARCIA-GARCIA, A. M. Stability of the superfluid state in a disordered one-dimensional ultracold fermionic gas. **Phys. Rev. A**, v. 82, p. 043613, 2010.
- 31 SACEPE, B. et al. Localization of preformed cooper pairs in disordered superconductors. **Nature Phys.**, v. 7, p. 239, 2011.
- 32 BOUADIM, K. et al. Single- and two-particle energy gaps across the disorder-driven superconductor-insulator transition. **Nature Phys.**, v. 7, p. 884, 2011.
- 33 JAMSHID, M. K.; SATPATHY, S. Mott metal-insulator transition in the doped Hubbard-Holstein model. **Phys. Rev. B**, v. 96, p. 085132, 2017.
- 34 DE FRANCO, C.; TOCCHIO, L. F.; BECCA, F. Metal-insulator transitions, superconductivity, and magnetism in the two-band Hubbard model. **Phys. Rev. B**, v. 98, p. 075117, 2018.
- 35 VITALI, E. et al. Metal-insulator transition in the ground state of the three-band Hubbard model at half filling. **Phys. Rev. B**, v. 99, p. 165116, 2019.
- 36 SUÁREZ-VILLAGRÁN, M. Y. et al. Two-dimensional disordered Mott metal-insulator transition. **Phys. Rev. B**, v. 101, p. 235112, 2020.
- 37 WANG, G. et al. Role of disorder and correlations in the metal-insulator transition in ultrathin SrVO₃ films. **Phys. Rev. B**, v. 100, p. 155114, 2019.

- 38 DI SANTE, D. et al. Disorder-Driven metal-insulator transitions in deformable lattices. **Phys. Rev. Lett.**, v. 118, p. 036602, 2017.
- 39 DOBROSAVLJEVC, V. Typical-medium theory of Mott-Anderson localization. **Int. J. Mod. Phys. B**, v. 24, p. 1680, 2010.
- 40 SEMMLER, D.; BYCZUK, K.; HOFSTETTER, W. Mott-Hubbard and Anderson metal-insulator transitions in correlated lattice fermions with binary disorder. **Phys. Rev. B**, v. 81, p. 155111, 2010.
- 41 BYCZUK, K.; ULMKE, M.; VOLLHARDT, D. Ferromagnetism and metal-insulator transition in the disordered Hubbard model. **Phys. Rev. Lett.**, v. 90, p. 196303, 2003.
- 42 TARNOPOLSKY, G. et al. Metal-insulator transition in a random Hubbard model. **Phys. Rev. B**, v. 101, 205106, 2020.
- 43 TANAKA, A. Metal-insulator transition in the two-dimensional Hubbard model: Dual fermion approach with Lanczos exact diagonalization. **Phys. Rev. B**, v. 99, p. 205133, 2019.
- 44 GEORGES, A. et al. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. **Rev. Mod. Phys.**, v. 68, p. 13, 1996.
- 45 HUBBARD, J. Electron correlations in narrow energy bands. **Proc. R. Soc. London**, v. 276, p. 238, 1963.
- 46 ZAWADZKI, K.; D'AMICO, I.; OLIVEIRA, L. N. Symmetries and boundary conditions with a twist. **Braz. J. Phys.**, v. 47, p. 488, 2017.
- 47 LIEB, E. H.; WU, F. Y. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range , one-band model in one dimension. **Phys. Rev. Lett.**, v. 20, p. 192, 1968.
- 48 WHITE, S. R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. **Phys. Rev. Lett.**, v. 69, p. 2863, 1992.
- 49 CAPELLE, K. et al. Density-functional theory for Hubbard model: numerical results for the Luttinger liquid and the Mott insulator. In: THE

FUNDAMENTALS OF ELECTRON DENSITY, DENSITY MATRIX AND DENSITY FUNCTIONAL THEORY IN ATOMS, MOLECULES AND SOLID STATE, 14., 2003, Dordrecht: Springer, 2003. p. 145.

- 50 LEVINE, I. **Quantum Chemistry**. 7. ed. New York: Pearson Education, 2014.
- 51 BARTLETT, R. L. Coupled-cluster approach to molecular structure and spectra: a step toward predictive quantum chemistry. **J. Phys. Chem.**, v. 93, p. 1697, 1989.
- 52 HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. **Phys. Rev.**, v. 136, p. B864, 1964.
- 53 KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. **Phys. Rev.**, v. 140, p. A1133, 1965.
- 54 FRANÇA, V. V.; CAPELLE, K. Entanglement in spatially inhomogeneous many-fermion systems. **Phys. Rev. Lett.**, v. 100, p. 070403, 2008.
- 55 SILVA-VALENCIA, J.; FRANCO, R.; FIGUEIRA, M. S. Entanglement and the ground state of fermions trapped in optical lattices. **Physica B**, v. 404, p. 3332, 2009.
- 56 FRANÇA, V. V.; D'AMICO, I. Entanglement from density measurements: Analytical density functional for the entanglement of strongly correlated fermions, **Phys. Rev. A**, v. 83, p. 042311, 2011.
- 57 LIMA, N. A. et al. Density functionals not based on the electron gas: local-density approximation for a Luttinger liquid. **Phys. Rev. Lett.**, v. 90, p. 146402, 2003.
- 58 FRANÇA, V. V.; VIEIRA, D.; CAPELLE, K. Simple parametrization for the ground-state energy of the infinity Hubbard chain incorporating Mott physics, spin-dependent phenomena and spatial inhomogeneity. **New J. Phys.**, v. 14, p. 073021, 2012.
- 59 NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum Computation and Quantum Information**. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- 60 FEYNMAN, R. P. Forces in molecules. **Phys. Rev.**, v. 56, p. 340, 1939.

- 61 WILDE, M. M. **Quantum Information Theory**. 1. ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2000.
- 62 FRANÇA, V. V.; CAPELLE, K.; Entanglement in spatially inhomogeneous many-fermion systems. **Phys. Rev. Lett.**, v. 100, p. 070403, 2008.
- 63 AMICO, L. Entanglement in many-body systems. **Rev. of Mod. Phys.**, v. 80, p. 517, 2008.
- 64 BUSCEMI, F.; BORDONE, P.; BERTONI, A. Liener entropy as an entanglement measure in two-fermion systems. **Phys. Rev. A**, v. 75, p. 032301, 2007.
- 65 COE, J.; SUDBERY, A.; D'AMICO, I. Entanglement and density-functional theory: testing approximations on Hooke's atom. **Phys. Rev. B**, v. 77, p. 205122, 2010.
- 66 ABDULLAH, S.; COE, J. P.; D'AMICO, I. Effect on confinement potential geometry on entanglement in quantum dot-based nanostructures. **Phys. Rev. B**, v. 80, p. 235302, 2009.
- 67 BAKR, W. S. et al. A quantum gas microscope for detecting single atoms in a Hubbard-regime optical lattice. **Nature**, v. 462, p. 74, 2009.
- 68 SHERSON, J. F. et al. Single-atom-resolved fluorescence imaging of an atomic Mott insulator. **Nature**, v. 467, p. 68, 2010.
- 69 DUBI, Y.; MEIR, Y.; AVISHAI, Y. Nature of the superconductor-insulator transition in disordered superconductors, **Nature**, v. 449, p. 876, 2007.
- 70 FRANÇA. V. V.; HÖRNDLEIN, D.; BUCHLEITNER, A. Fulde-ferrel-larkin-ovchinnikov critical polarization in one-dimensional fermionic optical lattices, **Phys. Rev. A**, v. 86, p. 033622, 2012.
- 71 LIU, S. et al. Anderson localization in degenerate spin-orbit coupled fermi gas with disorder, **Sci. Rep.**, v. 6, p.1, 2016.
- 72 CAI, X. et al. Topological superconductor to anderson localization transition in one-dimensional incommensurate lattices, **Phys. Rev. Lett.**, v. 110, p. 176403, 2013.

- 73 OSPELKAUS, S. et al. Localization of bosonic atoms by fermionic impurities in a three-dimensional optical lattice, **Phys. Rev. Lett.**, v. 96, p. 180403, 2006.
- 74 SKRZYPCZYK, P.; SHORT, A. J.; POPESCU, S. Work extraction and thermodynamics for individual quantum systems, **Nature Comm.**, v. 5, p. 4185, 2014.
- 75 ZAWADZKI, K.; SERRA, R. M.; D'AMICO, I. Work-distribution quantumness and irreversibility when crossing a quantum phase transition in finite time, **Phys. Rev. Research**, v. 2, p. 033167, 2020.
- 76 OSTERLOH, A.; AMICO, L.; FAZIO, R. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition, **Nature**, v. 416, p. 608, 2002.
- 77 ITS, A. R.; JIN, B-Q.; KOREPIN, V. E. Entanglement in the XY spin chain, **J. Phys. A**, v. 38, p. 2975, 2005.
- 78 KOREPIN, V. E. Universality of entropy scaling in one dimensional gapless models, **Phys. Rev. Lett.**, v. 92, p. 096402, 2004.
- 79 VERSTRAETE, F.; MARTÍN-DELGADO, M. A.; CIRAC, J. I. Diverging entanglement length in gapped quantum spin systems, **Phys. Rev. Lett.**, v. 92, p. 087201, 2004.
- 80 FROMHOLZ, P. et al. Entanglement topological invariants for one-dimensional topological superconductors, **Phys. Rev. B**, v. 101, p. 085136, 2020.
- 81 BALENTS, L. Spin liquids in frustrated magnets, **Nature**, v. 464, p. 199, 2010.
- 82 SMITH, J. et al. Many-body localization in a quantum simulator with programmable random disorder, **Nat. Phys.**, v. 12, p. 907, 2016.
- 83 FRANÇA, V. V.; HÖRNDLEIN, D.; BUCHLEITNER, A. Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov critical polarization in one-dimensional fermionic optical lattices, **Phys. Rev. A**, v. 86, p. 033622, 2012.
- 84 DE PICOLI, T.; D'AMICO, I.; FRANÇA, V. V. Metric-space approach for distinguishing quantum phase transitions in spin-imbalanced systems, **J. Phys.**, v. 48, p. 472, 2018.

- 85 FRANÇA, V. V. Entanglement and exotic superfluidity in spin-imbalanced lattices, **Phys. A**, v. 475, p. 82, 2017.
- 86 MENDES-SANTOS, T.; PAIVA, T.; DOS SANTOS, R. R. Entanglement, magnetism, and metal-insulator transitions in fermionic superlattices, **Phys. Rev. B**, v. 87, p. 214407, 2013.
- 87 SU, D-D.; DAI, X.; TONG, N-H. Local entanglement entropy at the Mott metal-insulator transition in infinite dimensions, **Mod. Phys. Lett. B**, v. 27, p. 1350034, 2013.
- 88 WANG, H.; KAIS, S. Entanglement and quantum phase transition in a one-dimensional system of quantum dots with disorder, **Int. J. Quantum Inform.**, v. 4, p. 827, 2006.
- 89 BRÜNNER, T. et al. Entanglement enhancement in spatially inhomogeneous many-body systems, **Phys. Rev. A**, v. 87, p. 032311, 2013.
- 90 BERKOVITS, R. Entanglement entropy in a one-dimensional disordered interacting system: the role of localization, **Phys. Rev. Lett.**, v. 108, p. 176803, 2012.
- 91 ZHAO, A.; CHU, R-L.; SHEN, S-Q. Finite-size scaling of entanglement entropy at the Anderson transition with interactions, **Phys. Rev. B**, v. 87, p. 205140, 2013.
- 92 FRANÇA, V. V.; D'Amico, I. Entanglement from density measurements: analytical density functional for the entanglement of strongly correlated fermions, **Phys. Rev. A**, v. 83, p. 042311, 2011.
- 93 CANELLA, G. A.; FRANÇA, V. V. Superfluid-insulator transition unambiguously detected by entanglement in one-dimensional disordered superfluids, **Sci. Rep.**, v. 9, p. 15313, 2019.
- 94 CANELLA, G. A.; FRANÇA, V. V. Entanglement in disordered superfluids: the impact of density, interaction and harmonic confinement on the Superconductor-insulator transition, **Phys. A**, v. 545, p. 123646, 2020.

- 95 CANELLA, G. A.; FRANÇA, V. V. Mott-Anderson metal-insulator transitions from entanglement, **Phys. Rev. B**, v. 104, p. 134201, 2021.

APÊNDICE A TRANSIÇÃO SUPERFLUIDO-ISOLANTE

Cálculo do trabalho quântico para sistemas de cadeias $L = 100$

O cálculo do trabalho quântico para cadeias de $L = 6$ sítios foram realizados utilizando os autovalores e autovetores obtidos através da diagonalização exata do sistema. Para os sistemas de $L = 100$ sítios e $T = 0$ utilizou-se uma outra abordagem.

O trabalho quântico é descrito como a diferença de energia entre os estados final e inicial de um sistema,

$$\begin{aligned}\langle W \rangle &= \int dW P(W) \\ &= \langle \psi_f | H_f | \psi_f \rangle - \langle \psi_0 | H_0 | \psi_0 \rangle.\end{aligned}\tag{A.1}$$

Como no processo de *sudden quench* o sistema passa do estado inicial para o final instantaneamente e não há temperatura no sistema, o estado final vai ser igual ao estado inicial,

$$\begin{aligned}\langle W \rangle &= \langle \psi_0 | H_f | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | H_0 | \psi_0 \rangle \\ &= \langle \psi_0 | \hat{T}_f + \hat{U}_f + \hat{V}_f | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | \hat{T}_0 + \hat{U}_0 + \hat{V}_0 | \psi_0 \rangle.\end{aligned}\tag{A.2}$$

Em ambos os protocolos o parâmetro crítico ou foi a concentração de impurezas C ou foi a intensidade das impurezas V . Sendo assim, os termos de energia cinética e interação do estado inicial e final da eq. [A.2](#) são iguais, o que resulta em

$$\begin{aligned}
\langle W \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{V}_f | \psi_0 \rangle - \langle \psi_0 | \hat{V}_0 | \psi_0 \rangle \\
&= \langle \psi_0 | \hat{V}_f - \hat{V}_0 | \psi_0 \rangle \\
&= \left\langle \psi_0 \left| \sum_i v_i^f \hat{n}_i - \sum_i v_i^0 \hat{n}_i \right| \psi_0 \right\rangle \\
&= \sum_i [v_i^f - v_i^0] \langle \psi_0 | \hat{n}_i | \psi_0 \rangle \\
&= \sum_i [v_i^f - v_i^0] n_i
\end{aligned} \tag{A.3}$$