

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Instituto de Química, Araraquara

Departamento de Engenharia, Física e Matemática

---

**Transitando entre Matéria Condensada e  
Informação Quântica**

*Fundamentos, Metodologias e Aplicações*

---

Vivian Vanessa FRANÇA

*Tese apresentada ao Instituto de  
Química, UNESP como parte dos  
requisitos para a obtenção do título de  
Professor Livre Docente.*

Fevereiro, 2022



*Aos meus queridos Emanuel, Júlia e Artur ...*





# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Pesquisa em Fundamentos</b>	<b>9</b>
2.1	Mecânica Quântica via Espaços Métricos . . . . .	9
2.2	Mapeamento local entre Férmions e Spins . . . . .	13
2.3	Teorema Hohenberg-Kohn em Sistemas Discretos . . . . .	20
2.4	Polarização Crítica em Superfluidos Exóticos . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Pesquisa em Desenvolvimento de Metodologias</b>	<b>35</b>
3.1	Funcional da Densidade para Sistemas Dependentes de Spin . . . . .	37
3.2	Funcional da Densidade via Redes Neurais Artificiais . . . . .	42
3.3	Funcional da Densidade para Emaranhamento . . . . .	47
3.4	Modelo de Hubbard para descrição de nanoestruturas . . . . .	54
<b>4</b>	<b>Aplicações em Nanoestruturas, Sólidos e Átomos Frios</b>	<b>65</b>
4.1	Transições de Fase em Superfluidos Exóticos . . . . .	66
4.2	Emaranhamento entre Blocos em Superredes . . . . .	73
4.3	Susceptibilidade como Medida Experimental de Emaranhamento . . . . .	76
4.4	Transições de Fase Quânticas em Sistemas Desordenados . . . . .	80
<b>5</b>	<b>Considerações Finais</b>	<b>93</b>



## 1

# Introdução

Férmions fortemente interagentes estão entre os sistemas físicos mais estudados atualmente e são considerados responsáveis por fenômenos importantes, como por exemplo, supercondutividade a altas temperaturas (em cupratos) e magnetoresistência colossal (em manganitas) [1–3]. Sistemas de átomos fermiônicos fortemente correlacionados podem ser realizados experimentalmente em redes óticas e têm sido investigados intensamente, em particular por atuarem como simuladores quânticos para a compreensão de fenômenos da física da matéria condensada [4–6].

Por outro lado, do ponto de vista teórico, o grande desafio em descrever completamente a matéria, isto é entender todas as suas propriedades, reside justamente em tratar a nível quântico sistemas de muitas partículas interagentes. Embora a função de onda de um dado sistema – e assim qualquer de suas propriedades – possa em princípio ser obtida resolvendo-se a equação de Schrödinger, este método exato é extremamente custoso do ponto de vista computacional e se torna exponencialmente proibitivo com o número de partículas interagentes no sistema.

Um possível caminho para simplificar o tratamento quântico é explorar o conceito matemático de espaços métricos, contido no espaço de Hilbert em mecânica quântica. O espaço de Hilbert combina dois espaços matemáticos, o vetorial e o métrico. O mais comum tem sido explorar propriedades associadas ao espaço vetorial, por exemplo através de combinações lineares das funções de onda, multiplicações por números reais ou complexos. Neste caso, a similaridade entre funções de onda é quantificada pela sobreposição entre elas, via produto escalar. O que fizemos nesta linha de pesquisa mais fundamental [7, 8] (Seção 2.1) foi explorar os conceitos relacionados ao espaço métrico, como a possibilidade de se definir uma distância entre dois dos seus elementos, tal como tem sido investigado em vários contextos e em diferentes sistemas físicos [9–17]

Neste contexto, o modelo de Hubbard [18] também se destaca como um approach alternativo. Trata-se de um modelo simplificado, que descreve aproximadamente os graus de liberdade de carga e de spin de férmions interagentes e itinerantes em uma rede (isto é, com posições discretas

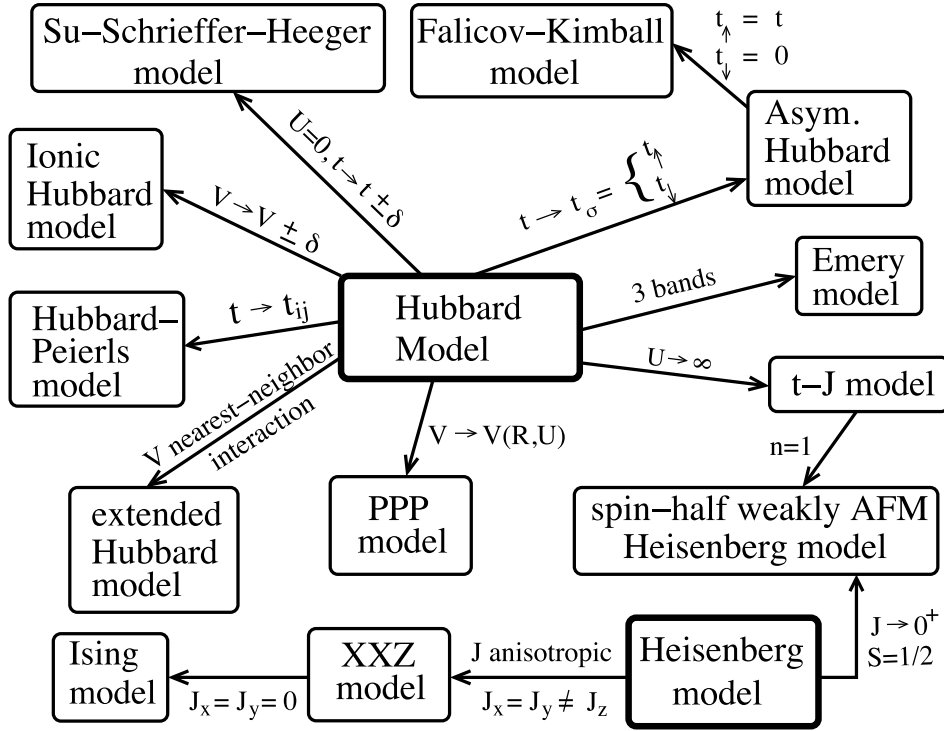


FIGURA 1.1: Modelo de Hubbard como modelo central em Física e Química [19].

nos sítios da rede). Em sua versão mais simples, o modelo de Hubbard apenas inclui interações intra-sítio e itinerância entre sítios vizinhos, com Hamiltoniano

$$\hat{H}^{Hubb} = - \sum_{i\sigma}^L t_i (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + H.c.) + \sum_i^L U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i,\sigma}^L V_i \hat{n}_{i\sigma}, \quad (1.1)$$

onde  $U_i$  é a interação intra-sítio e  $t_i$  o parâmetro de *hopping* entre sítios vizinhos. O potencial externo  $V_i$  pode ser usado para simular heterogeneidades espaciais na cadeia, como impurezas localizadas, potenciais confinantes, superredes, desordem. Aqui  $L$  é o número total de sítios,  $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$  é o operador densidade de partículas com spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  no sítio  $i$ , onde  $n = \langle \hat{n}_\uparrow \rangle + \langle \hat{n}_\downarrow \rangle$  é o fator de preenchimento ou densidade média,  $m = \langle \hat{n}_\uparrow \rangle - \langle \hat{n}_\downarrow \rangle$  a magnetização, e  $0 \leq n \leq 2$  (para modelos de uma única banda: até duas partículas com spins opostos no mesmo sítio) e  $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{i\sigma}$  são operadores fermiônicos de criação e aniquilação respectivamente.

Existem várias maneiras de estender a aplicabilidade do modelo de Hubbard, incluir por exemplo *i*) mais bandas por sítio, *ii*) itinerância entre outros sítios que não apenas os vizinhos, *iii*) interações entre sítios e/ou *iv*) parâmetros dependentes do sítio,  $t_i$  e  $U_i$ . Mas mesmo em sua versão mais simples, o modelo é capaz de capturar os fenômenos mais relevantes da física de muitos corpos [19–29], como o *crossover* de pares de Cooper para superfluido [30] (para  $U < 0$ ,

$m = 0$ ), a transição metal-isolante [22] (para  $U > 0$ ,  $n = 1$ ), supercondutividade a altas temperaturas [21], superfluidez exótica [31] (para  $U < 0$  e  $m \neq 0$ ) e sistemas desordenados [32]. Para  $n = 1$  e  $U \gg t$ , o Hubbard é mapeado no modelo de Heisenberg, usado na descrição de interações magnéticas entre spins, e demonstramos [33] (Seção 2.2) que este mapeamento se mantém inclusive na presença de heterogeneidades espaciais. Mais recentemente mostramos que o modelo de Hubbard e o modelo de Hubbard estendido podem ser usados com boa aproximação para a descrição de emaranhamento em pontos quânticos e nanoestruturas [25,27] (Seção 3.4). Portanto, o modelo de Hubbard desempenha papel central em vários outros modelos importantes em física e química [19] – seja com a escolha de parâmetros específicos ou pela inclusão de termos adicionais em seu Hamiltoniano – como ilustra a Figura 1.1.

Apesar da simplicidade do modelo de Hubbard, sua solução analítica exata é em geral desconhecida – exceto em algumas condições e limites específicos [34] – portanto é necessário recorrer a cálculos numéricos. Para cadeias homogêneas,  $L = \infty$ , pode-se resolver numericamente as integrais de Lieb-Wu [35]. Entretanto, heterogeneidades em escala nanométrica – como bordas, impurezas, interfaces, potenciais periódicos, potenciais confinantes, desordem – são não apenas comuns, mas frequentemente *inevitáveis* em sistemas quânticos complexos. Seja por ocorrência natural ou artificialmente preparadas em nanoestruturas e átomos frios, as heterogeneidades espaciais podem influenciar propriedades óticas, elétricas, magnéticas, de transporte, as transições de fase e o emaranhamento da matéria [36–49], sendo portanto imprescindível incorporá-las na modelagem teórica e assim garantir que as simulações sejam susceptíveis aos setups experimentais e dispositivos reais.

Para cadeias finitas e heterogêneas, podemos usar métodos de diagonalização exata para resolver o modelo de Hubbard, porém limitados quanto ao tamanho da cadeia,  $L \lesssim 15$ . Outra alternativa é via técnicas de grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG) [50], que é aproximadamente exata, podendo resolver cadeias de  $L \lesssim 200$  sítios. Contudo, DMRG é um método custoso: um único cálculo pode facilmente levar horas ou dias, mesmo em clusters de computação de alto desempenho.

Neste contexto, uma ferramenta interessante e poderosa é a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) [51–53]: um cálculo típico de DFT para o modelo de Hubbard heterogêneo leva alguns segundos. Em DFT a densidade de partículas  $n(\mathbf{r})$  de um sistema de  $N$  partículas interagentes é usada como a grandeza central, em vez da função de onda  $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ . Os cálculos de DFT são portanto muito mais simples que os cálculos quânticos baseados na função de onda, pois o problema de tratar uma função  $3N$ -dimensional se reduz à obtenção de uma função tridimensional.

O mapeamento unívoco entre a densidade e a função de onda é garantido pelo teorema de Hohenberg-Kohn [51], inclusive em sistemas discretizados como as cadeias de Hubbard [14] (Seção 2.3). Dentre as consequências do teorema está o fato de que todos os observáveis são funcionais da densidade e, portanto, podem *em princípio* ser obtidos via cálculos de DFT. Entretanto o teorema em si não provê qualquer indicação de como se obter ambos, a densidade do sistema e o funcional da densidade para um dado observável desejado.

A limitação de encontrar a densidade foi rapidamente solucionada através do esquema proposto por Kohn e Sham (KS) [54]. Trata-se de um mapeamento iterativo entre o sistema de muitos corpos interagente e um sistema auxiliar, fictício e não-interagente. Constrói-se o sistema auxiliar com um potencial efetivo – denominado potencial de KS  $v_{KS}$  – de forma a reproduzir a densidade  $n(\mathbf{r})$  do sistema interagente. Porém, como  $v_{KS}$  de forma geral depende da energia de troca e correlação  $e_{XC}$ , e  $e_{XC}$  por sua vez é um funcional da densidade tipicamente desconhecido, cálculos práticos de DFT só são viáveis via aproximações e a performance dos resultados de DFT depende crucialmente das aproximações adotadas.

Por este motivo um ramo muito ativo na comunidade de DFT é o de desenvolvimento e otimização de funcionais da densidade para melhorar a precisão dos cálculos de DFT. Em posse de funcionais da densidade apropriados no limite homogêneo, DFT pode ser aplicada aos sistemas heterogêneos graças a aproximações – locais e não-locais – tanto para a energia de troca e correlação, quanto para o funcional da densidade de qualquer grandeza de interesse. Nossas contribuições neste contexto, incluem o desenvolvimento de funcionais da densidade – analítico [34] (Seção 3.1) e numérico via redes neurais artificiais [55] (Seção 3.2) – para a energia do estado fundamental do modelo de Hubbard, e o desenvolvimento de um funcional da densidade analítico para a entropia linear [45] (Seção 3.3), usada para quantificar emaranhamento.

Emaranhamento é sem dúvida um dos fenômenos mais intrigantes da mecânica quântica. Além de ser um ingrediente importante na teoria de informação quântica [56], estados emaranhados são considerados essenciais para o desenvolvimento de tecnologias quânticas [57]. Emaranhamento tem sido investigado em diversos sistemas físicos, como fótons em cavidades óticas [58], átomos ultrafrios interagindo com luz [59, 60] e em sólidos [49, 61]. Do ponto de vista experimental, vários protocolos têm sido propostos para medidas de emaranhamento [62–69], porém como muitos deles escalam exponencialmente com o tamanho do sistema, ficam restritos a sistemas de poucas partículas. Uma alternativa a este approach é determinar e quantificar emaranhamento em experimentos atuais através de relações intrínsecas do emaranhamento com outras propriedades

físicas cuja medição experimental já esteja bem estabelecida. Este é o caso por exemplo, da susceptibilidade magnética, medida atualmente tanto em átomos frios como em experimentos da matéria condensada [67,70]. Por isso recentemente investigamos o mapeamento entre o emaranhamento e a susceptibilidade magnética em metais, isolantes, superfluidos convencionais e superfluidos exóticos [71] (Seção 4.3).

Apesar do crescente interesse multidisciplinar, a determinação das medidas capazes de quantificar o grau de emaranhamento de um determinado sistema, como entropias e concorrência, não é trivial e em muitos casos é computacionalmente custosa [49]. No modelo unidimensional de Hubbard, contudo, o emaranhamento entre quaisquer dois blocos de sítios [72,73] do estado fundamental é bem definido e quantificado pela entropia de von Neumann e pela entropia linear. As relações de escala entre o emaranhamento de um único sítio e o emaranhamento entre um bloco de sítios tem sido extensivamente exploradas do ponto de vista estatístico [74–80]. Entretanto, uma das questões que permanecia em aberto era o impacto das heterogeneidades espaciais no emaranhamento entre blocos, visto que de forma geral no emaranhamento de um único sítio as heterogeneidades sempre diminuem o grau de emaranhamento do sistema. O que nossos resultados mostraram, contudo, é que para o caso de emaranhamento entre blocos de sítios, existem situações em superredes em que as heterogeneidades *aumentam o grau de emaranhamento* em até 27% em relação aos casos homogêneos [81] (Seção 4.2).

O emaranhamento também tem desempenhado papel central em construir pontes de mão dupla entre a teoria de informação quântica e diferentes áreas, como em física da matéria condensada, de altas energias e de átomos frios [25, 60, 70, 72, 80, 82–90]. Em particular na comunidade da física da matéria condensada, o emaranhamento tem sido considerado uma ferramenta importante para identificar e caracterizar fenômenos críticos, tais como transições de fase quânticas [49, 83, 91–96], incluindo estados exóticos da matéria [97–101], como localização de muitos corpos [98,102], líquidos topológicos de spin [97] e superfluidez Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) [99–101, 103–106].

A fase FFLO, também denominada superfluidez exótica ou heterogênea, é esperada surgir em superfluidos a baixas temperaturas na presença de campos magnéticos externos ou por polarização interna produzida pela população desbalanceada de spin. Sua principal característica é uma quebra espontânea de simetria espacial, que se reflete também em outras propriedades do sistema, como por exemplo a correlação de pares [31, 107]. Esta exótica coexistência entre superfluidez e magnetismo está sob investigação teórica há décadas [31] e atualmente tem sido explorada também em experimentos estado-da-arte em átomos frios [108,109] e supercondutores orgânicos [110].

Apesar disso, ainda não há observação irrefutável da fase FFLO, apenas evidências indiretas.

Do ponto de vista teórico, foram diversos avanços desde sua predição original, graças a métodos computacionais robustos, como Monte Carlo Quântico, teoria de campo médio dinâmico e DMRG [31, 107, 111–113]. DFT entretanto não havia sido aplicada neste contexto e embora houvessem alguns trabalhos que analisassem a relação entre FFLO e emaranhamento, estes eram focados em sistemas gravitacionais [114–116]. Portanto nesta importante linha de pesquisa: *i*) aplicamos cálculos de DFT para explorar um grande regime de parâmetros na fase FFLO [99] (Seção 2.4), o que nos permitiu por exemplo determinar uma expressão analítica para a polarização crítica abaixo da qual o estado FFLO se manifesta, e *ii*) investigamos a relação da fase FFLO com o grau de emaranhamento do sistema [101] (Seção 4.1).

Já as transições de fase quânticas são caracterizadas por mudanças nas propriedades físicas do sistema induzidas por um dos seus parâmetros. A transição pode ser de primeira ordem, caracterizada por uma descontinuidade na primeira derivada da energia em relação ao parâmetro, ou ser mais suave, de segunda ordem ou simplesmente um *crossover* [117]. Idealmente a investigação da transição de fase em um sistema requer um parâmetro de ordem, mas defini-lo e obtê-lo não é trivial na maioria dos casos. Portanto é muito comum usar as variações nas próprias propriedades do sistema – como correlações quânticas e medidas de emaranhamento – para testemunhar e caracterizar as transições de fase [91–94, 101, 118].

Neste contexto, a análise via espaços métricos surge como uma ferramenta matemática poderosa para investigar as transições de fase quânticas. Sistemas que são fisicamente semelhantes (pertencentes à mesma fase) são esperados apresentar menores distâncias entre pares de propriedades (pares de densidades, funções de onda e potenciais) do que sistemas pertencentes a fases diferentes, com comportamentos físicos distintos [7–17]. Em um trabalho recente, aplicamos as métricas para investigar transições quânticas em superfluidos exóticos [100] (Seção 4.1).

O modelo de Hubbard, em particular, possui várias fases distintas, como ilustra a Tabela 1.1. Portanto surgem diversas transições de fase importantes, como por exemplo a transição metal-isolante (MIT) de Mott [119–123], em que fortes interações Coulombianas repulsivas suprimem a itinerância das partículas favorecendo sua localização [124]. No estado localizado, os graus de liberdade de carga são congelados e as interações magnéticas se tornam dominantes. Na ausência de interação, a transição MIT pode ser alternativamente induzida por desordem, a chamada localização de Anderson [125, 126], devido ao espalhamento coerente das impurezas aleatoriamente distribuídas. Já em sistemas com interações efetivas atrativas como em supercondutores, descritos pelo modelo de Hubbard com  $U < 0$ , desordem pode induzir à transição superfluido-isolante



(SIT) [127–129], caracterizada por uma diminuição da fração superfluida [130] e um comportamento não-monotônico da fração condensada com a intensidade da desordem [131].

Importante notar que metais e supercondutores têm características antagônicas às propriedades dos isolantes. Por exemplo, em um supercondutor as interações efetivas atrativas levam a um ordenamento eletrônico de longo alcance, permitindo supercorrentes sem resistência. Em contraste, sistemas localizados (isolantes) não possuem fluxo de carga elétrica. Portanto sistemas da matéria condensada, nanoestruturas e átomos frios exibindo ambas as fases, condutora (ou supercondutora) e isolante, representam um cenário rico com propriedades interessantes e não-convencionais. De modo que a compreensão de MIT e SIT vai além da ciência básica, implica também na compreensão e domínio de metais e supercondutores complexos de grande interesse tecnológico, incluindo por exemplo supercondutores de altas temperaturas (intrinsecamente desordenados [129]), nanofios supercondutores, supercondutores amorfos e gases ultrafrios [129, 132–136].

Recentemente, exploramos uma oportunidade única – via cálculos de DFT para medidas de emaranhamento em cadeias de Hubbard com um funcional da densidade especialmente construído para a entropia linear [45] (Seção 3.3) – de melhor compreender SIT em superfluidos desordenados [137, 138] e MIT em sistemas apenas interagentes (Mott MIT), apenas desordenados (Anderson MIT) e em sistemas com ambos interação e desordem (Mott-Anderson MIT) [139, 140] (Seção 4.4). Localização já havia sido investigada via emaranhamento em metais [32, 141–143], sistemas bosônicos [144–147], misturas Bose-Fermi [148] e spinless férmions [149–151]. Entretanto nenhum destes estudos: *i*) considerou sistemas realmente fermiônicos (com graus de liberdade de carga e spin), *ii*) usou DFT, computacionalmente mais barata (que DMRG e dynamical mean-field theory) permitindo analisar um vasto regime de parâmetros, ou *iii*) encontrou uma inequívoca assinatura das transições no comportamento do emaranhamento (como não-monotonicidade, descontinuidade, saturação, características típicas de uma transição de fase quântica). Além disso, características importantes de MIT e SIT estão em debate, como por exemplo a existência ou não de uma intensidade de desordem mínima para a localização em sistemas 1D e 2D [129, 152–156] e a natureza da transição, se é mais pronunciada ou mais um crossover [130, 157]. Esses fatos garantem tanto a originalidade quanto a relevância do nosso trabalho nessa linha de pesquisa.

Até aqui focamos em contextualizar de forma geral nossas principais linhas de pesquisa (após o doutoramento da Profa. Vivian), apenas permeando nossas contribuições. Nossa atuação, incorporando questões fundamentais, desafios metodológicos e aplicações em sólidos, nanoestruturas e átomos frios, evidencia versatilidade e um intenso trânsito entre áreas distintas, principalmente

TABLE 1.1: Sumário das principais fases do modelo de Hubbard para um dado  $U$ , densidade  $n$  e polarização  $P$ .

	$U > 0$	$U < 0$	
$n \neq 1$	metal	$P=0$	superfluido convencional
$n = 1$	isolante	$P < P_C$	superfluido exótico
		$P > P_C$	normal polarizada

entre a física da matéria condensada e os conceitos da teoria de informação quântica. Nos próximos capítulos, focamos nos detalhes dos principais resultados em fundamentos (Capítulo 2), desenvolvimento de metodologias (Capítulo 3) e aplicações (Capítulo 4). Conclusões e perspectivas são apresentadas no Capítulo 5.

## 2

# Pesquisa em Fundamentos

Neste capítulo apresentamos resultados em pesquisa de fundamentos de mecânica quântica, de sistemas fortemente correlacionados e de superfluidos:

1. *Quantum Mechanics in Metric Space: Wave Functions and Their Densities*  
I. D'Amico, J. P. Coe, V. V. França and K. Capelle, Physical Review Letters **106**, 050401 (2011).
2. *D'Amico et al. Reply: Quantum Mechanics in Metric Space: Wave Functions and Their Densities*  
I. D'Amico, J. P. Coe, V. V. França and K. Capelle, Physical Review Letters **107**, 188902 (2011).
3. *Effect of spatial inhomogeneity on the mapping between strongly interacting fermions and weakly interacting spins*  
V. V. França and K. Capelle, Physical Review B **82**, 134405 (2010).
4. *Uniqueness of density-to-potential mapping for fermionic lattice systems*  
J. P. Coe, I. D'Amico, and V. V. França, EPL **110**, 63001 (2015).
5. *Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov critical polarization in one-dimensional fermionic optical lattices*  
V. V. França, D. Hörndlein, and A. Buchleitner, Physical Review A **86**, 033622 (2012).

## 2.1 Mecânica Quântica via Espaços Métricos

Um dos conceitos fundamentais em mecânica quântica é o espaço de Hilbert, constituído por todos os possíveis estados quânticos de um dado sistema de  $N$  partículas. Matematicamente, o espaço de Hilbert combina dois espaços, o espaço vetorial e o espaço métrico. De forma geral, explora-se as propriedades associadas ao espaço vetorial, como por exemplo via combinações lineares dos seus elementos ou vetores de estado, funções de onda são rotineiramente multiplicadas por números reais ou complexos, e a similaridade entre funções de onda é medida pela

sobreposição entre elas, quantificada pelo produto escalar. Já os aspectos relacionados ao espaço métrico, como a possibilidade de se definir uma distância entre dois dos seus elementos, são menos explorados em mecânica quântica.

Neste trabalho [7, 8] exploramos as propriedades dos espaços métricos de espaços de Hilbert para um número  $N$  fixo de partículas. Propusemos uma distância apropriada entre funções de onda e uma distância apropriada entre densidades de partículas, e investigamos a relação entre essas distâncias no contexto do mapeamento entre densidades e funções de onda do teorema de Hohenberg-Kohn (HK) [51]. Embora o mapeamento de HK seja extremamente não trivial na descrição de coordenadas, encontramos que pode ser bastante simples, monotônico, no espaço métrico. Analisamos três modelos bastante distintos e encontramos que para um vasto regime de parâmetros a relação entre densidade e função de onda é a mais simples possível: linear.

O teorema de Hohenberg-Kohn, pilar da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) [52], estabelece a existência de uma relação unívoca entre a função de onda  $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$  de  $N$  partículas interagentes e a densidade de partícula única  $\rho(r)$ . A simplificação computacional é imensa: substitui-se uma função  $3N$ -dimensional por outra de apenas 3 coordenadas, justificando a popularidade da DFT no tratamento de sistemas quânticos complexos. Embora o teorema HK seja matematicamente provado e garanta uma relação unívoca entre  $\Psi$  e  $\rho(r)$ , o teorema não provê qualquer indicação de *como* é esta relação. Assim, oferecemos uma nova perspectiva ao teorema HK ao analisar distâncias apropriadas para essas duas grandezas,  $\Psi$  e  $\rho(r)$ , em vários sistemas e um vasto regime de parâmetros.

Definimos a distância  $D_\psi(\psi_1, \psi_2)$  entre quaisquer duas funções de onda de um sistema composto por  $N$  partículas interagentes como

$$D_\psi(\psi_1, \psi_2) = \min_{\phi} \tilde{D}_\psi(\psi_1, \psi_2) \quad (2.1)$$

$$= \min_{\phi} \left[ \int |\psi_1(r_1, \dots, r_N) - \psi_2(r_1, \dots, r_N)|^2 dr_1 \dots dr_N \right]^{1/2} \quad (2.2)$$

$$= \left[ \int (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) dr_1 \dots dr_N - 2 \left| \int \psi_1^* \psi_2 dr_1 \dots dr_N \right| \right]^{1/2}. \quad (2.3)$$

onde  $r$  representa coordenadas espaciais e de spin e a fase  $\phi$  é definida por  $\int \psi_1^* \psi_2 dr_1 \dots dr_N = e^{i\phi} \left| \int \psi_1^* \psi_2 dr_1 \dots dr_N \right|$ . Esta distância fora usada anteriormente e se trata de um caso especial da distância de Bures [158] aplicada a estados puros [159]. Importante notar que a desigualdade

triangular é satisfeita

$$D_\psi(\psi_1, \psi_2) \leq D_\psi(\psi_1, \psi_3) + D_\psi(\psi_3, \psi_2), \quad (2.4)$$

e o espaço de todas as funções de onda se torna um espaço métrico.

Note que a minimização em  $\phi$  é crucial para que funções de onda diferindo apenas por uma constante de fase possuam distância nula pela métrica (2.2).

Se adotarmos a convenção de que a função de onda de um sistema de  $N$  partículas é normalizado por  $N$ , a densidade  $\rho(r)$  pode ser escrita como,

$$\rho(r) = \int |\psi(r, r_2, \dots, r_N)|^2 dr_2 \dots dr_N, \quad (2.5)$$

onde  $\int \rho(r) dr = N$ . Definimos então a distância  $D_\rho(\rho_1, \rho_2)$  entre quaisquer duas densidades deste sistema de  $N$  fixo como

$$D_\rho(\rho_1, \rho_2) = \int |\rho_1(r) - \rho_2(r)| dr \quad (2.6)$$

$$= \int \sqrt{|\rho_1(r)|^2 + |\rho_2(r)|^2 - 2\rho_1(r)\rho_2(r)} dr, \quad (2.7)$$

que satisfaz à desigualdade triangular,

$$D_\rho(\rho_1, \rho_2) \leq D_\rho(\rho_1, \rho_3) + D_\rho(\rho_3, \rho_2), \quad (2.8)$$

e portanto o espaço de todas as densidades formam um espaço métrico, mas não um espaço de Hilbert. De fato, as definições (2.2) e (2.6) determinam a geometria dos espaços das funções de onda e das densidades sem usar qualquer conceito do espaço de Hilbert, como produtos escalares ou combinações lineares.

De acordo com a Eq. (2.6), todas as densidades estão em uma esfera de raio  $N$ , centrada na função densidade zero,  $\rho^{(0)}(r) \equiv 0$ , pois  $D_\rho(\rho, \rho^{(0)}) = N$ . Analogamente, da Eq. (2.2) temos que todas as funções de onda de um dado  $N$  estão em esferas de raio  $\sqrt{N}$ , centrada na função de onda zero  $\psi^{(0)} \equiv 0$ . Portanto ambos os espaços, de todas as densidades e de todas as funções de onda, podem ser vistos como esferas concêntricas, com uma estrutura tipo cebola, tal como ilustrado na Fig. 2.1. A soma direta de todos os espaços de Hilbert de um dado  $N$  de partículas é o espaço de Fock. Do ponto de vista das métricas, o espaço de Fock é então estratificado em um número infinito de esferas concêntricas, cada uma representando um espaço métrico de  $N$  partículas.

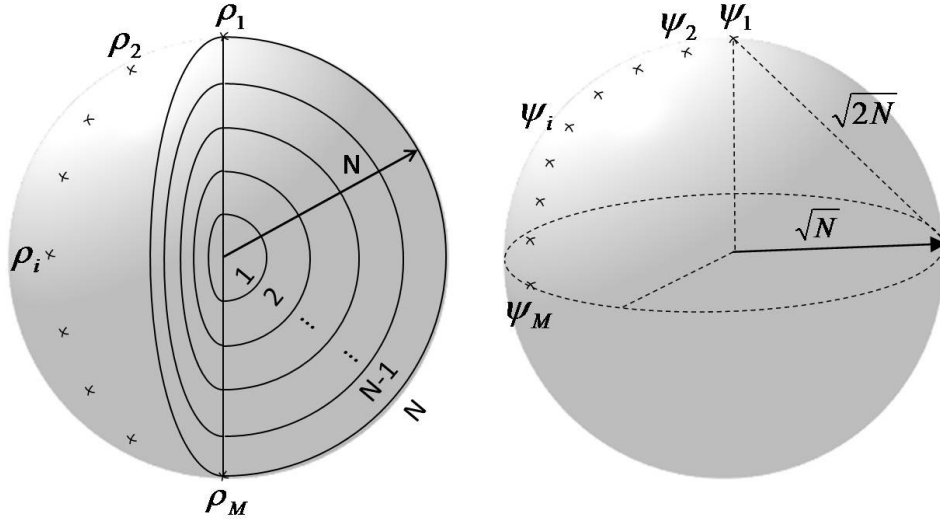


FIGURA 2.1: Ilustração dos espaços métricos para densidades e funções de onda.

A máxima distância entre duas densidades de um dado sistema de  $N$  partículas pode ser deduzida da normalização e da Eq. (2.8),  $\rho_3 = \rho^{(0)}$ :

$$D_\rho(\rho_1, \rho_2) \leq D_\rho(\rho_1, \rho^{(0)}) + D_\rho(\rho^{(0)}, \rho_2) = 2N, \quad (2.9)$$

o que está de acordo com o raio da esfera sendo  $N$ . Podemos ver pela Eq. (2.7) que  $\rho_1(r)\rho_2(r) \geq 0$ , e que o máximo do lado direito ocorre quando  $\rho_1(r)\rho_2(r) \equiv 0$ . Então o produto ser nulo implica que essas distribuições de densidade não se sobrepõe, tal que  $D_\rho^{max} = \int \rho_1(r)dr + \int \rho_2(r)dr = 2N$ .

Também podemos deduzir um limite superior para a distância entre funções de onda de um dado sistema com  $N$  fixo, a partir da Eq. (2.4), fazendo  $\psi_3 = \psi^{(0)}$ :

$$D_\psi(\psi_1, \psi_2) \leq D_\psi(\psi_1, \psi^{(0)}) + D_\psi(\psi^{(0)}, \psi_2) = 2\sqrt{N}, \quad (2.10)$$

em acordo com o raio da esfera sendo  $\sqrt{N}$ . Porém da Eq. (2.3) está claro que a distância máxima é  $\sqrt{2N}$ , obtida para funções de onda não sobrepostas. Ou seja, o limite superior obtido da desigualdade triangular não é alcançado se as distâncias forem obtidas por  $D_\psi$ . Já se as distâncias forem calculadas por  $\tilde{D}_\psi$ , que apropriadamente estabelece distância nula para funções de onda que se diferem apenas por uma constante de fase, então a distância  $2\sqrt{N}$  é alcançada para  $\phi = \pi$ , ou seja para  $\psi$  e  $-\psi$ .

Uma propriedade fundamental do espaço vetorial e muito usada em mecânica quântica é a combinação linear de elementos do espaço, ou seja, podemos somar duas funções de onda e o

resultado é também uma função do espaço vetorial. Contudo as funções de onda do estado fundamental não satisfazem essa propriedade: duas funções de onda de estado fundamental quando somadas, se tornam outra função de onda mas não necessariamente de estado fundamental. Portanto o conjunto de todas as funções de onda de estado fundamental não é um espaço vetorial, não formam um espaço de Hilbert. Entretanto ainda é um espaço métrico e toda a discussão feita neste trabalho permanece aplicada.

De acordo com o teorema HK, cada densidade do estado fundamental,  $\rho^{GS}$ , corresponde a uma única função de onda do estado fundamental,  $\psi^{GS}$ . Como  $D(x, y)$  satisfaz  $D(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$ , o teorema HK implica que as funções de onda de estado fundamental com distâncias não nulas,  $D_\psi(\psi_1^{GS}, \psi_2^{GS}) \neq 0$ , são sempre mapeadas em densidades com distâncias não nulas,  $D_\rho(\rho_1^{GS}, \rho_2^{GS}) \neq 0$ .

Analizamos portanto esse mapeamento entre  $D_\psi$  e  $D_\rho$  numericamente para três diferentes sistemas: o modelo de Hubbard unidimensional, séries de Hélio isoeletrônicas e um sistema de 2 elétrons confinados em potencial parabólico (átomo de Hooke). O teorema HK garante que o gráfico de  $D_\rho$  como função de  $D_\psi$  começa com uma inclinação positiva na origem, onde  $D_\psi = D_\rho = 0$ , e nunca cruza o eixo horizontal novamente. Nossos resultados numéricos, Figura 2.2, apropriadamente captam esse comportamento, mas revelam comportamentos adicionais.

Encontramos para todos os sistemas que a inclinação inicial é menor ou igual a 45 graus, pois como a densidade é um funcional integrado da função de onda, Eq.(2.5),  $D_\rho$  deve ser afetado no máximo tanto quanto  $D_\psi$  por uma variação pequena na função de onda. Contudo, a inclinação permanece positiva para todo o regime de  $D_\psi$ , ou seja, as curvas crescem monotonicamente. Surpreendentemente em alguns regimes encontramos que as curvas crescem linearmente, revelando que nestes casos o teorema HK é o mais simples possível, *linear*: um aumento na distância entre densidades é seguido por um aumento proporcional na distância entre funções de onda associadas àquelas densidades. Este comportamento linear se mantém até valores de  $D_\psi$  que são próximos à distância máxima  $\sqrt{2N}$ , limite em que as funções de onda não se sobrepõe, e uma pequena variação da distância entre funções de onda pode levar a uma grande variação na distância entre densidades.

## 2.2 Mapeamento local entre Férmions e Spins

Neste trabalho [33], combinamos um tratamento numérico com uma análise analítica para prover um mapeamento eficiente entre a física de férmions fortemente interagentes e spins fracamente

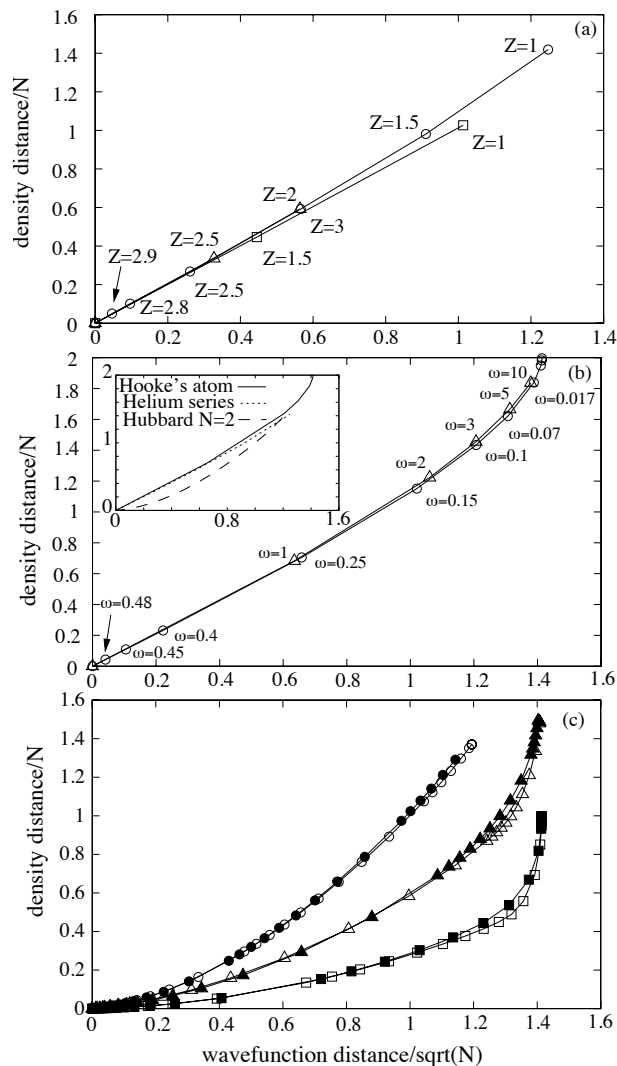


FIGURA 2.2: Distância entre densidades em função da distância entre funções de onda (a) para série de átomos de Hélio (sistema de Referência  $Z = 3$ ); (b) para o átomo de Hooke, referência tem  $\omega = 0.5$ ; (c) para o modelo de Hubbard, referência tem  $\omega = 4$

interagentes.

Na ausência de heterogeneidades espaciais, ou seja no limite termodinâmico, o mapeamento existe e é bem conhecido: para suficientemente forte interação o modelo de Hubbard recai no modelo t-J que, por sua vez, quando semi-preenchido culmina no modelo de Heisenberg com ordenamento antiferromagnético.

Este mapeamento é matemática e fisicamente bem compreendido [160, 161] e tem sido usado em física da matéria condensada de forma rotineira na interpretação de experimentos em sólidos fortemente correlacionados. Contudo, na presença de heterogeneidades – efeitos de tamanho finito, impurezas, superredes, interfaces, desordem – não se conhecia se o mapeamento se mantinha da mesma forma ou se quer se existia.



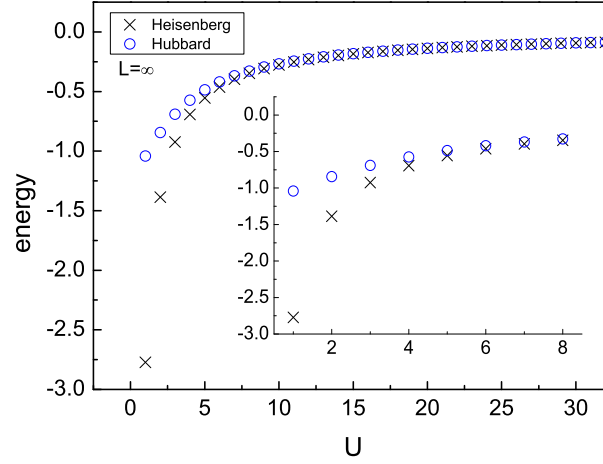


FIGURA 2.3: Energia do estado fundamental por sítio em função da interação para  $L = \infty$ .

Mostramos que o mapeamento em sistemas heterogêneos é mantido da forma *mais local possível*, através da média harmônica das interações de sítios vizinhos. Isso implica que toda a física do mapeamento, de congelamento gradual dos graus de liberdade de carga se tornando spins localizados, independe da geometria e da presença ou ausência de simetria translacional. Mostramos ainda que até mesmo o mapeamento padrão, em sistemas homogêneos, pode não ser quantitativamente preciso para interações  $U$  consideradas fortes ( $U \sim 6t$ ) para aplicações em estados sólidos: apenas para  $U > 20t$ , onde  $t$  é o parâmetro de *hopping*, o mapeamento é eficiente, com desvios de  $\sim 1\%$ . Este regime de interação é muito superior às interações típicas de estado sólido, mas são acessíveis em experimentos de átomos frios.

Para fortes interações o modelo de Hubbard, Eq.(1.1), pode ser expandido em potências de  $t/U$  [160,161]. O termo predominante desta expansão é justamente o modelo t-J,

$$\hat{H}^{tJ} = -t \sum_{i\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + H.c.) + \frac{4t^2}{U} \sum_i \left[ \vec{\hat{S}}_i \cdot \vec{\hat{S}}_{i+1} - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_{i+1}}{4} \right], \quad (2.11)$$

onde  $\vec{\hat{S}}_i$  é o operador de spin meio no sítio  $i$ . Note que este modelo é usualmente o ponto de partida dos estudos de cupratos dopados. Em metais com banda semi-preenchida,  $n = N/L = 1$ , isto é, com número  $N$  de férmons igual ao número de sítios  $L$  da cadeia, o termo de itinerância é suprimido, uma vez que não há sítios vazios, e o modelo t-J se reduz ao modelo de Heisenberg antiferromagnético,

$$\hat{H}^{Heis} = J \sum_i \left[ \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - \frac{1}{4} \right], \quad (2.12)$$

onde a interação entre spins é dada por  $J = 4t^2/U$  e não há flutuações de carga ao longo da cadeia. Portanto o sistema original de férmions itinerantes e fortemente interagentes ( $U/t \gg 1$ ) fora mapeado em um sistema de spin localizados com ordenamento antiferromagnético e fracamente interagentes ( $0 \leq J/t \ll 1$ ).

Para quantificar a taxa em que as flutuações de carga são congeladas e o sistema se torna uma cadeia de spins localizados com fraca interação, quantificamos as energias do estado fundamental de cada modelo, Hubbard e Heisenberg, no limite termodinâmico (homogêneo). Neste limite a energia do estado fundamental por sítio das cadeias de Heisenberg é dada por:

$$e^{Heis}(J) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{E^{Heis}}{L} = -J \ln(2). \quad (2.13)$$

Por outro lado a energia por sítio do estado fundamental do modelo de Hubbard homogêneo em semi-preenchimento ( $n = 1$ ) para  $U/t \rightarrow \infty$  é

$$e^{Hubb}(n = 1, \frac{U}{t} \rightarrow \infty) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{E^{Hubb}}{L} = -\frac{4t^2}{U} \ln(2), \quad (2.14)$$

de modo que os modelos são idênticos para  $J = 4t^2/U$ . Porém para quantificar o mapeamento em valores finitos de  $U/t$ , resolvemos numericamente as integrais de Lieb-Wu [35] obtendo  $e^{Hubb}(n = 1, U)$  em função da interação e comparamos com a energia do modelo de Heisenberg com o  $J$  que o mapeia ao Hubbard,  $e^{Heis}(J = 4t^2/U)$ . Como mostram a Figura 2.3 e a Tabela 2.1, encontramos desvios percentuais entre as energias consideravelmente grandes em valores de interação representativos de cupratos e outros materiais fortemente correlacionados: em  $U = 6t$  as energias dos modelos diferem por  $\sim 10\%$ . Ou seja, as flutuações de carga ainda são significativas e portanto o mapeamento não é quantitativamente preciso neste regime de interação.

Já na presença de heterogeneidades espaciais, tais como observadas em cupratos e em superredes [2,21,92,162–169], os parâmetros que caracterizam o Hamiltoniano se tornam dependentes do sítio. Neste caso, não sabíamos se o efeito seria o mesmo em ambos os modelos, de forma que o mapeamento se preservasse sem modificações. Portanto consideramos o mapeamento Hubbard-Heisenberg em sistemas com diversas heterogeneidades.

Consideramos inicialmente um sistema contendo uma única impureza (ou defeito) localizada em um sítio central da cadeia e caracterizada por uma interação  $U' \neq U$  distinta dos demais sítios.

TABLE 2.1: Desvio percentual relativo entre as energias dos modelos de Hubbard e Heisenberg,  $D(\%) = 100 \frac{e^{Hubb} - e^{Heis}}{e^{Hubb}}$ . Os regimes de interação são tais que  $U = 1$  corresponde a sólidos fracamente correlacionados,  $U = 6$  sistemas fortemente correlacionados e valores superiores são atingidos em átomos resfriados por armadilhas óticas.

$U$	1	6	10	20	50	100	200
$D(\%)$	-166.50	-10.01	-3.78	-0.97	-0.16	-0.04	-0.01

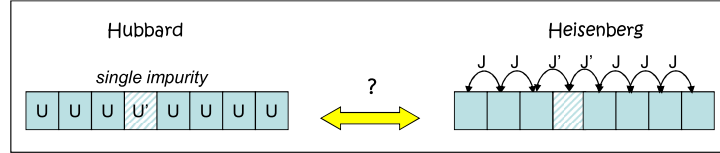


FIGURA 2.4: Ilustração do modelo de Hubbard com uma única impureza  $U' \neq U$  e o modelo de Heisenberg com as interações equivalentes entre sítios vizinhos  $J' \neq J$ .

Note que neste caso enquanto o modelo de Hubbard é afetado localmente, em um único sítio com  $U'$  distinto, na cadeia de Heisenberg essa impureza deve afetar *no mínimo* a conexão  $J'$  entre os dois sítios adjacentes, como ilustra a Figura 2.4. Ou seja, o efeito da impureza local no Hubbard não pode ser local no Heisenberg e, em princípio, pode ser totalmente não-local, afetando o  $J$  de todos os sítios da cadeia.

Refizemos então analiticamente o mapeamento Hubbard-Heisenberg, iniciando com o Hamiltoniano de Hubbard na presença de uma impureza  $U' \neq U$  em um sítio  $k$ ,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{inh}^{Hubb} = & -t \sum_{i\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + H.c.) + U \sum_{i \neq k} \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \\ & + U' \hat{n}_{k\uparrow} \hat{n}_{k\downarrow}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

tomando  $U$  e  $U'$  muito maiores que  $t$ , para obter o modelo t-J,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{inh}^{tJ} = & -t \sum_{i\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + H.c.) \\ & + \frac{4t^2}{U} \sum_{i \neq k} \left[ \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_{i+1}}{4} \right] \\ & + \frac{4t^2}{U'} \left[ \vec{S}_k \cdot \vec{S}_{k+1} - \frac{\hat{n}_k \hat{n}_{k+1}}{4} \right], \end{aligned} \quad (2.16)$$

que pode ser reescrito de modo a extrair da somatória o sítio  $k$ ,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{inh}^{tJ} &= -t \sum_{i\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + H.c.) \\ &+ \frac{4t^2}{U} \sum_{i \neq k,l} \left[ \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - \frac{\hat{n}_i \hat{n}_{i+1}}{4} \right] \\ &+ \frac{4t^2}{U} \left[ \vec{S}_k \cdot \vec{S}_{k+1} - \frac{\hat{n}_k \hat{n}_{k+1}}{4} \right] \\ &+ \frac{4t^2}{U'} \left[ \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} - \frac{\hat{n}_l \hat{n}_{l+1}}{4} \right]. \end{aligned} \quad (2.17)$$

e finalmente tomando  $n = 1$ , temos

$$\begin{aligned} \hat{H}_{inh}^{tJ}(n=1) &= + \frac{4t^2}{U} \sum_{i \neq k,l} \left[ \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - \frac{1}{4} \right] \\ &+ 4t^2 \left( \frac{1}{U} + \frac{1}{U'} \right) \left[ \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} - \frac{1}{4} \right], \end{aligned} \quad (2.18)$$

que pode ser rearranjado na forma

$$H_{inh}^{Heis} = J \sum_{i \neq l, l+1} \left[ \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - \frac{1}{4} \right] + 2J' \left[ \vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} - \frac{1}{4} \right], \quad (2.19)$$

onde  $l$  é um sítio vizinho de  $k$ , isto é  $k = l + 1$ , tal que  $\vec{S}_l \cdot \vec{S}_{l+1} = \vec{S}_k \cdot \vec{S}_{k+1}$ . Note que este resultado tem a forma do Hamiltoniano de Heisenberg com dois defeitos  $J' = 4t^2 / \bar{U}^H$  e interação  $J = 4t^2 / U$  entre os demais sítios, onde  $\bar{U}^H$  é a média harmônica entre  $U$  e  $U'$ ,

$$\bar{U}^H = \frac{2UU'}{U + U'}. \quad (2.20)$$

Essa derivação analítica nos permitiu evidenciar que o mapeamento Hubbard-Heisenberg persiste mesmo na presença de impurezas, com  $J'$  obtido pela média harmônica entre as interações  $U$  e  $U'$ , ou seja, da forma *mais local possível*. Confirmamos numericamente esse resultado de duas formas: *i)* testando outras possíveis médias entre as interações, e *ii)* comparando as energias de sistemas heterogêneos mais complexos, como interfaces e superredes ilustradas na Figura 2.6.

A Fig. 2.5 comprova que apenas a média harmônica descreve corretamente o mapeamento férmions-spin no limite  $U, U' \rightarrow \infty$ . Já a Fig. 2.7 mostra comportamento semelhante para o desvio

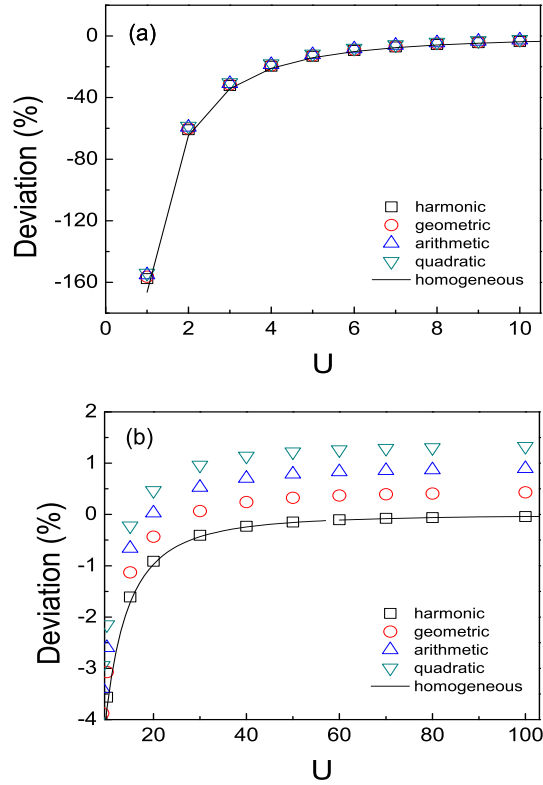


FIGURA 2.5: Desvio percentual relativo entre as energias do estado fundamental do modelo de Hubbard com uma impureza e do modelo de Heisenberg com dois defeitos, obtidas numericamente para  $J' = J(\bar{U})$  com quatro escolhas diferentes para a média  $\bar{U}$ : harmônica  $\bar{U}^H = \frac{2UU'}{U+U'}$ , quadrática  $\bar{U}^Q = \sqrt{\frac{U^2+U'^2}{2}}$ , aritmética  $\bar{U}^A = \frac{U+U'}{2}$  e geométrica  $\bar{U}^G = \sqrt{UU'}$ . Em (a) valores de  $U$  típicos de sólidos, (b) regimes de  $U$  atingidos em átomos frios.  $L = 8$ ,  $N = 8$ , cadeia aberta,  $U' = 3U/2$ .

das energias em todas as geometrias, demonstrando que o mapeamento permanece válido contanto que através da média harmônica. Essa independência com a geometria reflete o caráter local do mapeamento Hubbard-Heisenberg: a essência da física destes sistemas é sensível apenas à vizinha imediata de cada impureza e não da distribuição específica das impurezas ao longo da cadeia.

Esses resultados nos permitiram generalizar a *receita* do mapeamento via média harmônica entre férmions fortemente correlacionados e spins fracamente interagentes com facilidade e precisão para uma ampla gama de heterogeneidades espaciais, incluindo sistemas desordenados, que de forma geral requerem análise estatística de muitas amostras. Note contudo que o processo não se trata da localização de Anderson, induzida por desordem (Seção 4.4), em vez disso neste caso o comportamento de spin (localizado) é fruto da forte interação.

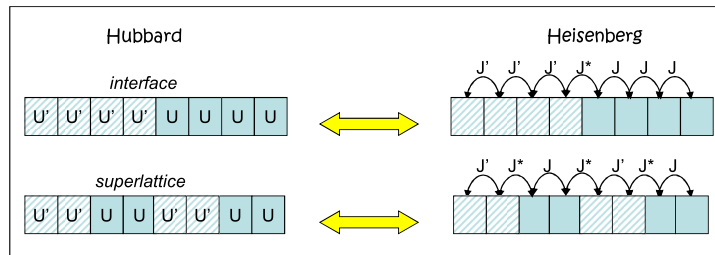


FIGURA 2.6: Ilustração de interfaces e estruturas de superredes no modelo de Hubbard e as interações  $J$ ,  $J'$  e  $J^*$  equivalentes no modelo de Heisenberg.

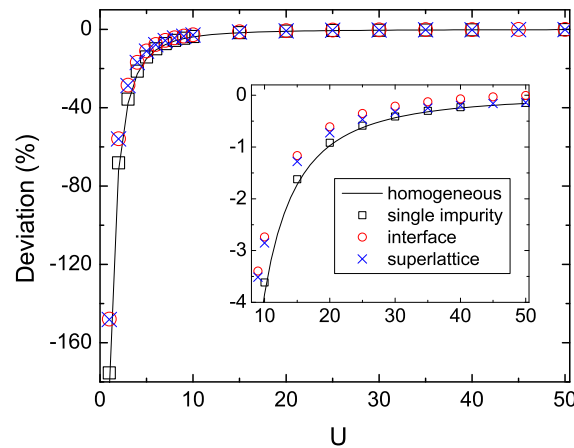


FIGURA 2.7: Desvio percentual relativo entre as energias fundamentais dos modelos de Hubbard e de Heisenberg para os sistemas: homogêneo, com uma única impureza, com uma interface e com estrutura de superrede.  $L = 8$ ,  $U' = 3U/2$ ,  $J' = 4t^2/U'$  and  $J^* = 4t^2/\bar{U}$ , onde  $\bar{U}$  é a média harmônica de  $U$  e  $U'$ .

### 2.3 Teorema Hohenberg-Kohn em Sistemas Discretos

Como vimos na seção anterior, modelos como o Hubbard e o Heisenberg são uma maneira simplificada, porém tratável, de descrever as principais propriedades de sistemas de muitos corpos interagentes. Mapear as partículas em uma rede, negligenciando interações a partir de uma dada ordem, é uma ferramenta bem sucedida e muito explorada em física da matéria condensada e, mais recentemente, tem recebido atenção em cálculos de química quântica, em particular quando as funções de onda de uma única partícula podem ser mapeadas apropriadamente aos sítios da cadeia unidimensional e então técnicas de DMRG (density-matrix renormalization group) [50] são usadas para modelar o sistema [170–172]. Esses sistemas discretos podem ser simulados em experimentos de átomos frios com redes óticas (tanto para bósons, quanto para férmions) [173–175] e, portanto, são de grande interesse como simuladores quânticos e para o desenvolvimento de tecnologias quânticas.

Em contra-partida, a DFT através do teorema de HK, tem sido uma ferramenta poderosa na compreensão de propriedades de materiais e nanoestruturas, permitindo a investigação de tais redes/cadeias heterogêneas [19]. Mas apesar deste sucesso e popularidade da DFT, algumas questões teóricas ainda não estavam resolvidas, incluindo a própria existência de um mapeamento único entre a densidade de partículas do estado fundamental (ou a função de onda) e o potencial externo, quando se trata de sistemas discretos (lattice DFT, L-DFT) [176–178], ou seja, embora seja frequentemente aplicada, havia uma incompletude na base da teoria.

O que fizemos neste trabalho [14] foi justamente provar que para cadeias de férmions finitas a densidade do estado fundamental determina univocamente o potencial externo do sistema, com exceção para os sítios que correspondam aos nós da função de onda e ao caso extremo de que todos os sítios estão totalmente (duplamente) preenchidos. Com este estudo, completamos a correspondência unívoca entre estados fundamentais, suas densidades e o potencial externo, ou seja, completamos a prova do teorema HK base da L-DFT. Embora nossa demonstração seja válida para qualquer cadeia de férmions, ilustramos os resultados aplicando-os em cadeias finitas de Hubbard.

Uma parte do teorema HK para sistemas discretos [176] já havia sido demonstrada: para estados fundamentais não-degenerados a densidade de partículas determina univocamente a função de onda na rede. A partir daqui, demonstramos o mapeamento um-para-um entre o potencial externo e o estado fundamental da rede: dada uma cadeia finita de  $L$  sítios, com número de partículas  $0 < N < 2LM$  em que  $M$  é o número de bandas, o potencial externo é univocamente determinado pela função de onda.

Consideramos inicialmente funções de onda sem nós e redes de uma única banda. Sejam dois diferentes potenciais  $\sum_j v_j$  e  $\sum_j v'_j$  que levam à mesma função de onda  $|\Psi\rangle$ . Então

$$\left( \hat{H}_0 + \sum_j v_j \hat{n}_j \right) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (2.21)$$

e

$$\left( \hat{H}_0 + \sum_j v'_j \hat{n}_j \right) |\Psi\rangle = E' |\Psi\rangle. \quad (2.22)$$

Subtraindo a Eq. 2.22 da Eq. 2.21 temos

$$\sum_j (v_j - v'_j) \hat{n}_j |\Psi\rangle = (E - E') |\Psi\rangle, \quad (2.23)$$

que pode ser reescrita como

$$\sum_j \tilde{v}_j \hat{n}_j |\Psi\rangle = \tilde{E} |\Psi\rangle. \quad (2.24)$$

Iniciamos a análise das possíveis ocupações – uma partícula com spin up ou down, duas partículas ou vazio – dos sítios 1 e 2. Consideramos uma função de onda que possui coeficientes  $|\uparrow\downarrow, S, X\rangle$  e  $|S, \uparrow\downarrow, X\rangle$ , que podem assumir valores bem pequenos, mas não-nulos, onde  $S$  representa a ocupação simples e  $X$  representa alguma configuração das partículas remanescentes nos sítios remanescentes. No modelo de Hubbard, por exemplo, essa situação corresponderia ao caso de  $N > 2$ , excluindo os seguintes casos extremos: *i*) de ocupação completa (dupla ocupação em todos os sítios e todas as bandas), *ii*) polarização completa e *iii*) interação e/ou potencial infinitos.

Temos então

$$\sum_j \tilde{v}_j \hat{n}_j |\uparrow\downarrow, S, X\rangle = (2\tilde{v}_1 + \tilde{v}_2 + k) |\uparrow\downarrow, S, X\rangle \quad (2.25)$$

onde  $k$  inclui os termos devido a  $X$  e

$$\sum_j \tilde{v}_j \hat{n}_j |S, \uparrow\downarrow, X\rangle = (\tilde{v}_1 + 2\tilde{v}_2 + k) |S, \uparrow\downarrow, X\rangle. \quad (2.26)$$

Mas  $|\Psi\rangle$  é uma autofunção de  $\sum_j \tilde{v}_j \hat{n}_j$ , portanto

$$2\tilde{v}_1 + \tilde{v}_2 + k = \tilde{v}_1 + 2\tilde{v}_2 + k \quad (2.27)$$

o que leva a

$$\tilde{v}_1 = \tilde{v}_2. \quad (2.28)$$

O mesmo procedimento pode ser feito para os sítios 2 e 3, e então para os sítios 3 e 4, e assim por diante; de forma que todos os  $\tilde{v}_j$  são iguais, ou seja,

$$\tilde{v}_j = c. \quad (2.29)$$

onde  $c$  é uma constante. Isso significa portanto que  $v_j$  e  $v'_j$  só podem diferir por no máximo uma constante.

Uma prova semelhante pode ser feita considerando  $|\uparrow\downarrow, 0, X\rangle$  e  $|0, \uparrow\downarrow, X\rangle$  ou termos tais como  $|S, 0, X\rangle$  e  $|0, S, X\rangle$ . Seriam o caso por exemplo do modelo de Hubbard com duas partículas ou uma partícula, respectivamente. Para o semi-preenchimento, com  $U \rightarrow \infty$  ou máxima magnetização, então temos apenas ocupação simples e neste caso o potencial não é unívoco, tal como seria para



o modelo de Heisenberg.

Podemos estender essa prova para sistemas com múltiplas bandas considerando termos na forma  $|(B_a) \uparrow\downarrow, (B_b)S, X\rangle$  e  $|(B_a)S, (B_b) \uparrow\downarrow, X\rangle$ , onde escrevemos a ocupação das bandas mais altas ocupadas para os sítios 1 e 2, e  $B_k$  representa alguma ocupação da banda mais baixa em um sítio consistente com o número de partículas. Temos então

$$(2 + n_a)\tilde{v}_1 + (1 + n_b)\tilde{v}_2 + k = (1 + n_a)\tilde{v}_1 + (2 + n_b)\tilde{v}_2 + k \quad (2.30)$$

onde  $n_k$  é a contribuição para a densidade devido a  $B_k$ . Assim  $\tilde{v}_1 = \tilde{v}_2$ , e iterando esse processo para os outros sítios, mostramos que  $\tilde{v}_j = c$  para todos os  $j$ . A prova para  $N = 1$  e  $N = 2$  segue o mesmo caminho.

Para estender a demonstração para funções de onda com nós, consideramos por simplicidade um único nó no sítio 3 (a generalização para mais nós é direta). Realizamos o procedimento para os sítios 1 e 2, em seguida em 2 e 4, etc; ou seja, desconsiderando o sítio com nó, obtemos novamente  $v_j$  e  $v'_j$  apenas diferindo por uma constante para todos os sítios, exceto os com nó. Portanto demonstramos que *a densidade do sistema de fato determina univocamente o potencial praticamente em toda a amostra, a exceção sendo os sítios onde há nós da função de onda*. Porém como os nós significam sítios isolados de uma rede pode-se concluir que em termos práticos, a densidade do estado fundamental determina o potencial na rede.

Para ilustrar a validade desta demonstração, consideramos um Hamiltoniano genérico com um potencial externo  $v_i$ ,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_j v_j \hat{n}_j. \quad (2.31)$$

Dada a função de onda  $|\Psi\rangle$  para este sistema, temos então

$$\langle \Psi | \hat{n}_i \hat{H} | \Psi \rangle = E n_i. \quad (2.32)$$

onde usamos  $n_i = \langle \Psi | \hat{n}_i | \Psi \rangle$ . Em termos dos termos do Hamiltoniano isto implica

$$\langle \Psi | \hat{n}_i \hat{H}_0 | \Psi \rangle + v_i \langle \Psi | \hat{n}_i^2 | \Psi \rangle + \sum_{j \neq i} v_j \langle \Psi | \hat{n}_i \hat{n}_j | \Psi \rangle = E n_i. \quad (2.33)$$

Rearranjando a Eq. (2.33) tal como a Ref. [179],

$$v_i^{(k+1)} = \frac{1}{\langle \Psi^{(k)} | \hat{n}_i^2 | \Psi^{(k)} \rangle} \left( n_i^{target} E^{(k)} - \langle \Psi^{(k)} | \hat{n}_i \hat{H}_0 | \Psi^{(k)} \rangle - \sum_{j \neq i} v_j^{(k)} \langle \Psi^{(k)} | \hat{n}_i \hat{n}_j | \Psi^{(k)} \rangle \right), \quad (2.34)$$

usaremos esta equação para encontrar o potencial que leva à densidade  $n_i^{target}$  a partir de um potencial tentativa  $v_i^{(0)}$ . Este processo é chamado de esquema inverso, pois de forma geral tem-se o potencial e deseja-se (via DFT) obter a densidade.

Usando a identidade

$$\langle \Psi^{(k)} | \hat{n}_i \hat{H}_0 | \Psi^{(k)} \rangle + \sum_{j \neq i} v_j^{(k)} \langle \Psi^{(k)} | \hat{n}_i \hat{n}_j | \Psi^{(k)} \rangle = -v_i^{(k)} \langle \Psi^{(k)} | \hat{n}_i^2 | \Psi^{(k)} \rangle + E^{(k)} n_i^{(k)}, \quad (2.35)$$

reescrevemos a Eq. (2.34) na forma

$$v_i^{(k+1)} = \frac{\left( n_i^{target} - n_i^{(k)} \right) E^{(k)}}{\langle \Psi^{(k)} | \hat{n}_i^2 | \Psi^{(k)} \rangle} + v_i^{(k)}. \quad (2.36)$$

De acordo com a Ref. [179], esta equação é esperada convergir para  $E < 0$ , assim definindo a expressão geral

$$v_i^{(k+1)} = \frac{\left( n_i^{(k)} - n_i^{target} \right) |E^{(k)}|}{\langle \Psi^{(k)} | \hat{n}_i^2 | \Psi^{(k)} \rangle} + v_i^{(k)}. \quad (2.37)$$

Na convergência,  $v_i^{(k+1)} = v_i^{(k)}$  o potencial externo reproduz a densidade alvo via a equação de Schrödinger de muitos corpos. Nosso resultado, Eq. (2.37), é semelhante ao derivado para coordenadas espaciais contínuas [179] *exceto* pela mudança no denominador.

Aplicamos então nosso esquema para uma cadeia finita, com fixo número de partículas e interação finita, como descrita pelo modelo de Hubbard (HM) em uma dimensão,

$$H_{HM} = -t \sum_{i,\sigma} \left( c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + c_{i+1,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) + \tilde{U} \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} + \sum_i v_i \hat{n}_i. \quad (2.38)$$

Adotamos condições de contorno abertas,  $L$  sítios, interação  $U = \tilde{U}/t$  e  $N$  partículas (com população de spin balanceada  $N_\uparrow = N_\downarrow = N/2$ ).

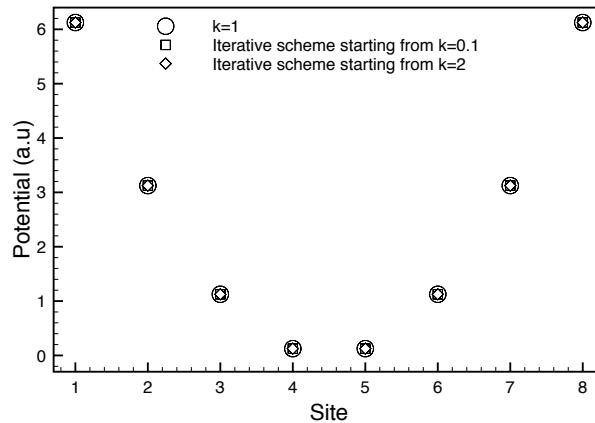


FIGURA 2.8: Potenciais deslocados por constantes encontrados para potenciais harmônicos tentativa com  $k = 0.1$  ou  $k = 2$  em comparação com o potencial exato com  $k = 1$ . Em todos os casos  $L = 8$ ,  $N = 2$  e  $U = 2$ .

Demonstramos que alcançamos o mesmo potencial final (a menos de uma constante), independentemente do potencial inicial. Para o sistema exato usamos o potencial harmônico,  $v_i = \frac{1}{2}k \left( i - \frac{(L+1)}{2} \right)^2$  com  $k = 1$  para gerar a densidade alvo. Aplicamos então o esquema iterativo (2.37) começando com um potencial harmônico com  $k = 2$  e então iniciando com  $k = 0.1$ . A Figura 2.8 mostra que encontramos o mesmo potencial final a menos de uma constante aditiva.

## 2.4 Polarização Crítica em Superfluidos Exóticos

O fenômeno de supercondutividade tem fascinado cientistas de diversas áreas, desde sua descoberta há mais de 100 anos [180,181]. Em sistemas fermiônicos não polarizados, a superfluidez é descrita pela teoria de Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS) [30], em que os férmions sujeitos a uma interação efetiva atrativa compõem pares de Cooper com momento zero. A presença de campos magnéticos fortes e polarização interna, produzida por populações de spin desbalanceadas, pode destruir o mecanismo dos pares BCS e forçar o sistema a uma fase normal polarizada, não superfluida.

Entretanto, de acordo com Fulde e Ferrell (FF) [103] e, de forma independente, com Larkin e Ovchinnikov (LO) [104], haveria um regime de baixa polarização para o qual o fenômeno de superfluidez ainda sobreviveria, fase que tem sido denominada como estado FFLO. Esta exótica coexistência de supercondutividade e magnetismo é predita se manifestar através de uma quebra espontânea de simetria espacial, caracterizada por um parâmetro de ordem oscilante ou heterogêneo na amostra [105], sendo portanto muitas vezes referida também como superfluidez inhomogênea.

Do ponto de vista experimental, as evidências do estado FFLO são indiretas, tanto em sólidos [110] quanto em átomos frios em tubos unidimensionais [106]. Teoricamente, por outro lado, muitas propriedades gerais da fase FFLO já foram compreendidas [105], mesmo com as dificuldades teórica/computacionais de tratar sistemas complexos de muitas partículas interagentes e incluir o confinamento harmônico, necessário para descrever os experimentos estado-da-arte em átomos frios. Mas ainda havia uma importante limitação nos tratamentos teóricos na época em que realizamos esta pesquisa: os diagramas de fase – determinando a polarização crítica máxima para a persistência da fase superfluida – eram determinados de forma empírica, ou seja, através de assinaturas indiretas da fase FFLO obtidas para parâmetros e sistemas específicos, sem fundamentação teórica sólida.

Neste trabalho, derivamos uma expressão para a polarização crítica  $P_C$  abaixo da qual o estado FFLO surge, partindo de considerações gerais e independentes do sistema. Construímos então o diagrama de fases para sistemas finitos não confinados e provemos um mapeamento quantitativo para que este diagrama fosse também aplicado a sistemas harmonicamente confinados, como nos experimentos. Demonstramos analiticamente, e confirmamos numericamente, que  $P_C$  possui um limite superior universal,  $P_C^{max} = 1/3$  para qualquer densidade, interação e intensidade de confinamento harmônico. Este resultado contradizia na época estudos que indicavam a presença da fase FFLO em polarizações muito elevadas [107, 121–123], até  $P_C \sim 0.8$ . Demonstramos, neste mesmo trabalho, que os estudos prévios possuíam uma análise incorreta e que, se corrigido o problema, levavam a  $P_C$  condizentes com nosso *upper bound*.

Consideramos o modelo de Hubbard em uma dimensão, Eq. (1.1), à temperatura zero. Realizamos cálculos de DMRG e de DFT (via aproximação de densidade local, LDA) para obter propriedades do estado fundamental de cadeias finitas e a solução Bethe-Ansatz e uma parametrização então recém proposta (Seção 3.1) [34] para cadeias infinitas.

Inicialmente consideramos as probabilidades de ocupação de cada sítio, cujo espaço de Hilbert é 4-dimensional: vácuo, spins emparelhados (up e down), ocupação simples up e down. Para a fase FFLO as probabilidades principais são a dupla ocupação,

$$w_{\uparrow\downarrow} \equiv \frac{1}{L} \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle = \frac{1}{L} \frac{\partial E_0(n, P, U)}{\partial U}, \quad (2.39)$$

intimamente relacionada à superfluidez, e a probabilidade de spins excedentes (aqui consideramos  $P > 0$ ),

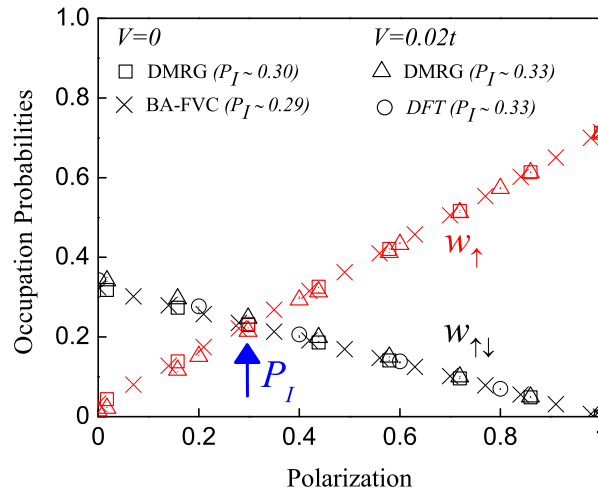


FIGURA 2.9: Probabilidades de ocupação em função da polarização  $P$ :  $w_{\uparrow}$  para ocupação simples da espécie excedente (spin up) e  $w_{\uparrow\downarrow}$  para a dupla ocupação. O ponto de intersecção  $P_I$  coincide para diferentes métodos, para sistemas com ( $V = 0.02t$ ) e sem ( $V = 0$ ) confinamento harmônico para o regime fortemente interagente,  $U = -8t$ , com  $n = 0.7$ .

$$w_{\uparrow} \equiv \frac{1}{L} \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \rangle - w_{\uparrow\downarrow} = \frac{n}{2} [1 + P] - w_{\uparrow\downarrow}, \quad (2.40)$$

associada à fase normal, onde  $E_0(n, P, U)$  é a energia total do sistema no estado fundamental.

Monitoramos essas probabilidades, como apresentamos na Figura 2.9, em função da polarização no regime fortemente atrativo ( $U = -8t$ ): observamos que as probabilidades são independentes da presença ou não do confinamento, já que há uma menor relevância do potencial neste regime de forte interação. Verificamos também uma concordância muito grande entre os diversos métodos com os cálculos de DMRG, o que se justifica pelo fato de que as probabilidades são quantidades médias. Em particular para o ponto de intersecção das probabilidades,  $P_I \equiv P(w_{\uparrow} = w_{\uparrow\downarrow})$ , a tabela 2.2 mostra que os métodos BA-FVC (para sistemas não confinados) e DFT (para confinados harmonicamente) são confiáveis para qualquer densidade e regime de interação, a um custo computacional muito menor que os cálculos de DMRG.

Note entretanto que aparentemente nenhum caráter especial ocorre nas probabilidades ao longo da polarização, parecem variar linearmente com  $P$ . Se este fosse o caso, a susceptibilidade de pares,  $\chi_{pair} \equiv |dw_{\uparrow\downarrow}/dP|$  (ou equivalentemente a susceptibilidade da espécie majoritária,  $\chi_{\uparrow} = |dw_{\uparrow}/dP|$ ) seriam constante em  $P$ , ou seja, não existiria um regime especial de polarização para o qual o mecanismo de pares e a superfluidez fosse favorecida e protegida quanto ao magnetismo.

TABLE 2.2: Polarização crítica  $P_C$  para vários regimes de densidade  $n$  e interação  $U$  em cadeias com e sem confinamento harmônico. Cálculos via DMRG e DFT, para cadeias finitas com  $L = 80$  sítios e condições abertas de contorno, e BA-FVC [34], para cadeias infinitas

	n	Sem confinamento $V = 0$		Confinamento $V = 0.02t$	
		DMRG	BA-FVC	DMRG	DFT
U=-8t	0.2	0.28	0.30	0.32	0.32
	0.5	0.29	0.29	0.33	0.33
	0.7	0.29	0.29	0.33	0.33
	1.0	0.31	0.31	0.33	0.33
U=-4t	0.2	0.17	0.13	0.27	0.26
	0.5	0.19	0.15	0.32	0.33
	0.7	0.21	0.20	0.32	0.33
	1.0	0.27	0.26	0.33	0.33
U=-2t	0.2	0.00	0.00	0.17	0.14
	0.5	0.00	0.00	0.30	0.33
	0.7	0.07	0.00	0.30	0.33
	1.0	0.19	0.18	0.33	0.33

Porém o que vemos na Figura 2.10 é que ambas as susceptibilidades,  $\chi_{pair}$  e  $\chi_{\uparrow}$ , claramente possuem dois comportamentos distintos em função da polarização, com ponto de inflexão justamente em  $P_I$ : para  $P < P_I$  a susceptibilidade de pares diminui com  $P$ , ou seja, o sistema atua contra o aumento da polarização, protegendo o mecanismo de pares, o que é consistente com a fase supercondutora FFLO. Já para  $P > P_I$  os pares desprotegidos se tornam cada vez mais susceptíveis a  $P$ , isto é, o sistema atua em favor do aumento da polarização, característica de uma fase normal, não-superfluida.

Esta proteção ao mecanismo de pares na fase FFLO é feita através da espécie minoritária,  $w_{\downarrow}$  (para  $P > 0$ ): com  $P$  aumentando (para  $N$  fixo), o sistema possui dois canais para *flip* de spins, (I) via estados desemparelhados  $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$  ou (II) via pares  $|\uparrow\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle, |\uparrow\rangle$ . Energeticamente, o canal (I) é favorável, pois só requer a energia da polarização em si, enquanto (II) tem o custo adicional de vencer a interação atrativa de pares. Contudo, como a probabilidade do estado desemparelhado da espécie minoritária é bem pequena (mas finita) para todo o regime de  $P$ , o processo de *flipping* possui sempre contribuições dos dois canais (I) e (II). Como o canal (I) não afeta os pares, quanto maior a contribuição deste canal, determinada pela susceptibilidade  $\chi_{\downarrow} = |dw_{\downarrow}/dP|$ , mais robustos os pares contra  $P$ . Isto é exatamente o que observamos na Fig.2.10b: para  $P < P_I$ ,  $\chi_{\downarrow}$  aumenta com a polarização, enquanto para  $P > P_I$  diminui com  $P$ . Portanto para  $P > P_I$  a superfluidez é suprimida devido ao fato de que a polarização é progressivamente produzida pela quebra de pares, via o canal (II). O estudo quantitativo do papel dos canais de *flipping* de spins na proteção da fase FFLO fora realizado mais tarde [101] (Seção 4.1).

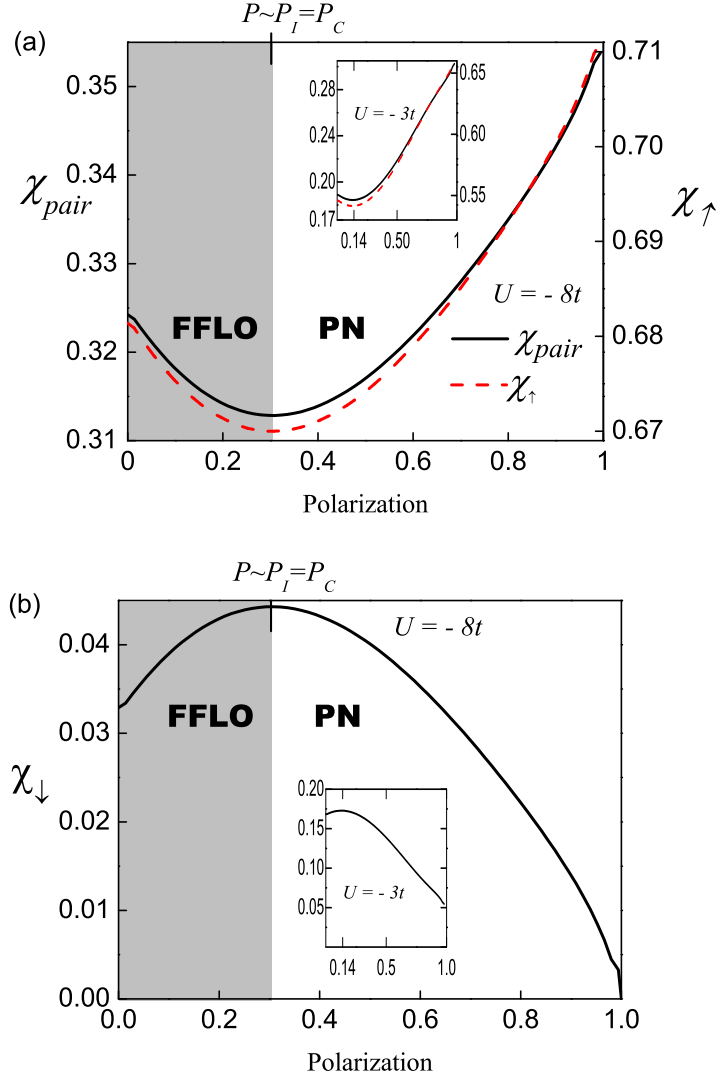


FIGURA 2.10: Susceptibilidade de pares e susceptibilidades de spins desemparelhados para  $n = 0.7$  e  $U = -8t$ , extraídos dos resultados analíticos BA-FVC, com um ponto de inflexão em  $P \approx P_I$ . Esta polarização corresponde à polarização crítica  $P_C$  que delimita a fase superfluida,  $P < P_C$  (FFLO), e a fase normal polarizada e não-superfluida,  $P > P_C$  (PN).

Portanto  $P_I$  tem um significado físico fundamental: corresponde à polarização crítica  $P_C$  que delimita o estado FFLO da fase normal, e é dada por

$$P_C(n, U) = \pm \left[ \frac{4w_{\uparrow\downarrow}(n, P_C, U)}{n} - 1 \right], \quad (2.41)$$

onde fizemos  $w_{\uparrow\downarrow} = w_{\uparrow}$  nas equações (4.3)–(4.2). O sinal da Eq.(4.6) depende de qual é a espécie predominante, spin up (+) ou down (–). A Figura 2.11 mostra o diagrama de fases delimitando as fases FFLO e normal polarizada (PN) para várias densidades. Encontramos que para  $U$  e  $n$  pequenos, a fase FFLO é suprimida: qualquer valor pequeno de polarização é suficiente para induzir diretamente a transição de BCS para PN. Para densidades maiores e fraca interação, a

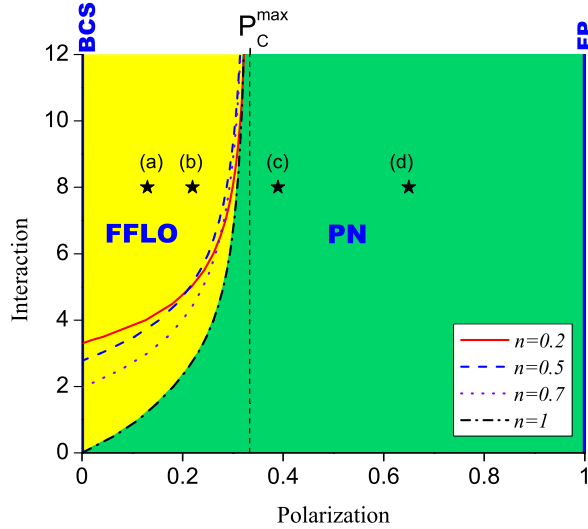


FIGURA 2.11: Diagrama de fases em função da polarização  $P$  e da intensidade da interação atrativa  $|U|/t$ , para cadeias não confinadas. A linha delimitando FFLO e PN, obtida via Eq.(4.6), é mostrada para quatro densidades. A linha vertical tracejada representa o limite superior obtido analiticamente,  $P_C^{max} = 1/3$ .

área FFLO aumenta com  $n$ , enquanto para  $U$  grandes  $P_C$  se torna independente de  $n$ . Isto porque quanto maior a densidade, maior a probabilidade de pares em  $P = 0$ , o que ajuda a manter a superfluidez para maiores polarizações em  $U$  moderado, mas se torna irrelevante para fortes interações.

De fato obtivemos analiticamente o limite superior da polarização crítica,  $P_C^{max}$ , calculando  $w_{\uparrow\downarrow}$ . Aplicando a transformação partícula-buraco para mapear sistemas atrativos e repulsivos [45,185],

$$w_{\uparrow\downarrow}(n, P, U < 0) = \frac{n}{2} [1 - |P|] - w_{\uparrow\downarrow}(n', P', |U|), \quad (2.42)$$

onde  $n' = nP + 1$  e  $P' = (n - 1)/n'$ , vemos que o valor máximo  $w_{\uparrow\downarrow}^{max}(U < 0)$  corresponde ao mínimo de  $w_{\uparrow\downarrow}(|U|)$ . Este é precisamente o caso para  $U \rightarrow -\infty$ : dupla ocupação no sistema repulsivo se anula,  $w_{\uparrow\downarrow}(|U| \rightarrow \infty) = 0$ , enquanto a dupla ocupação no sistema atrativo é máxima,  $w_{\uparrow\downarrow}^{max}(U \rightarrow -\infty) = (n/2)(1 - |P|)$ . Usando esta última equação na fórmula para  $P_C$ , encontramos o limite superior

$$|P_C^{max}| = \frac{1}{3}, \quad (2.43)$$

que é consistente com o diagrama de fases da Fig.2.11 e com nossas observações numéricas para  $U$  grande (Tabela 2.2).



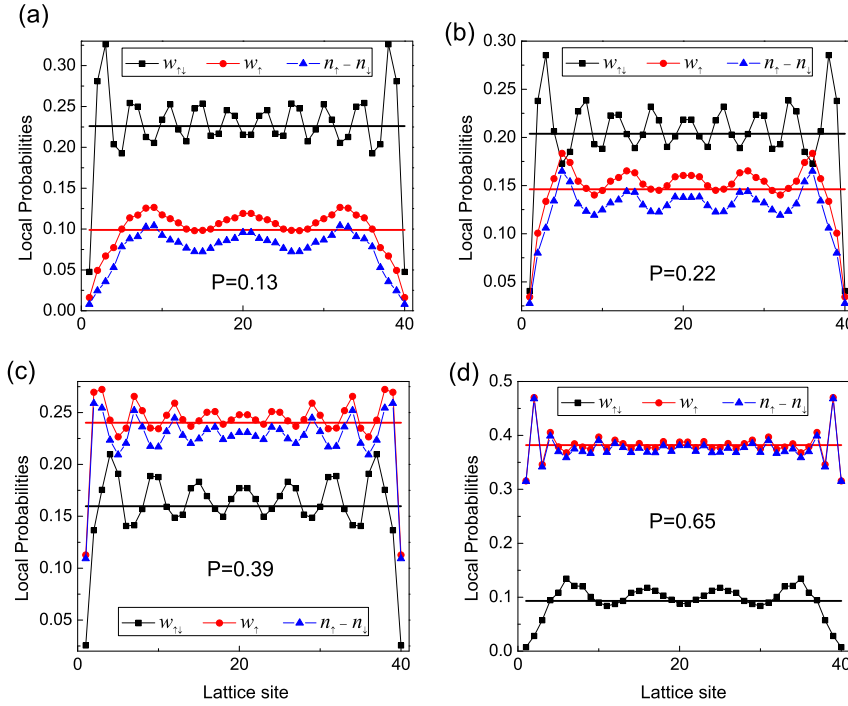


FIGURA 2.12: Evolução dos perfis de magnetização, de  $w_{\uparrow}$  e de  $w_{\downarrow}$  em função de  $P$ : (a), (b) no regime FFLO ( $P < P_C$ ); (c), (d) na fase normal polarizada ( $P > P_C$ ). Linhas sólidas indicam as médias  $w_{\uparrow\downarrow}$  e  $w_{\uparrow}$  da cadeia. Resultados de DMRG para  $L = 40$ ,  $N = 23$ ,  $U = -8t$  e  $V = 0$ . Neste caso  $P_C(n = 0.58, U = -8t) = 0.29$ , e cada painel é marcado – por uma estrela – no diagrama de fase da Fig.2.11.

Note que no limite  $U \rightarrow -\infty$ , a probabilidade da espécie majoritária para  $P > 0$  torna-se

$$\begin{aligned}
 w_{\uparrow}(n, P, U \rightarrow -\infty) &= nP \\
 &= \frac{N}{L} \left( \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N} \right) \\
 &= n_{\uparrow} - n_{\downarrow},
 \end{aligned} \tag{2.44}$$

onde  $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$  é a magnetização. Esta convergência das médias  $w_{\uparrow}$  e  $m$  no limite  $U \rightarrow -\infty$  sugere que no regime fortemente atrativo as propriedades da probabilidade da espécie majoritárias podem ser obtidas através da magnetização local.

De fato verificamos numericamente, na Figura 2.13, a concordância local – isto é, ao longo da amostra – entre  $w_{i,\uparrow}$  e  $m_i$ , para  $U = -8t$ . No regime superfluido,  $P < P_C$ , encontramos que  $w_{\uparrow\downarrow}$  domina toda a cadeia, enquanto os spins desemparelhados são distribuídos de forma heterogênea, com um acúmulo (probabilidade local acima da média) no centro da cadeia. Já no regime normal,  $P > P_C$  vemos o oposto:  $w_{\uparrow}$  prevalece sobre os pares em toda a cadeia, com oscilações do tipo das de Friedel em torno da média, enquanto  $w_{\uparrow\downarrow}$  acumula no centro da cadeia.

Do ponto de vista experimental, átomos ultrafrios constituem sistemas ideais para a detecção de superfluidez exótica [108, 109]. Para sistemas fortemente interagentes ( $|U| \geq 8t$ ), mostramos

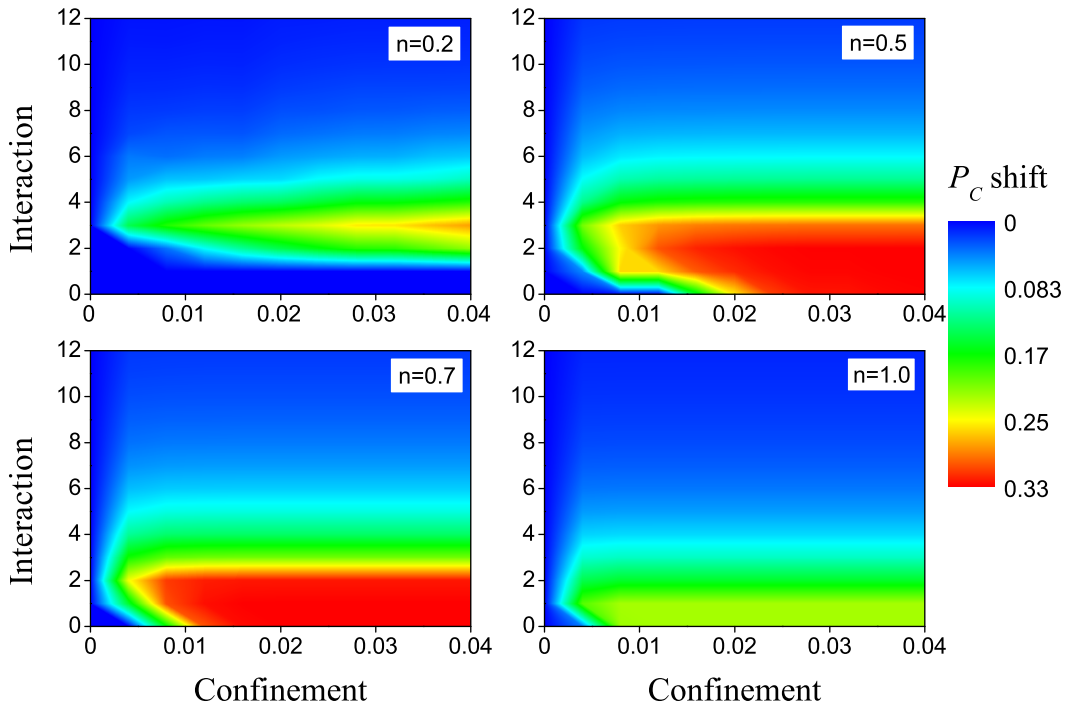


FIGURA 2.13: Mapeamento da polarização crítica do sistema harmonicamente confinado a partir do diagrama de fases do sistema sem confinamento obtidos por dados de DFT.  $P_C(n, U, V) - P_C(n, U, V = 0)$  para diferentes densidades representando o deslocamento em  $P - C$  necessário para que o diagrama de fases da Fig.2.11 seja usado em sistemas confinados com intensidade  $V/t$ .

contudo que o confinamento harmônico produz um deslocamento pouco relevante para a polarização crítica. Portanto o diagrama de fases apresentado na Figura 2.11, construído para sistemas não confinados, pode ser aplicado diretamente a sistemas harmonicamente confinados neste regime de interação. Para interações mais fracas, dependendo da densidade de partículas e do confinamento  $V$ , há um deslocamento em  $P_C$  que não pode ser negligenciado. Portanto, comparando as polarizações críticas de cadeias com e sem confinamento, apresentamos na Figura 2.13 qual deve ser o deslocamento aplicado a  $P_C$  para que o diagrama da Fig. 2.11 possa ser usado em sistemas harmonicamente confinados. Perceba que independente do deslocamento exigido, o polarização crítica continua limitada a  $P_C^{max} = 1/3$  para qualquer densidade, interação e confinamento, ou seja, o limite superior que encontramos é um limite *universal*.

Embora este limite superior seja consistente com o predito originalmente e também com cálculos via Monte Carlo quântico [31], havia uma aparente discrepância entre nossos resultados e estudos em sistemas harmonicamente confinados que reportavam fase FFLO para polarizações críticas muito maiores, até  $P_C \approx 0.8$  [107, 121–123, 182, 183]. Verificamos contudo que a aparente contradição fora apenas um artefato de uma análise inapropriada realizada por tais estudos. As assinaturas da fase FFLO heterogênea foram observadas exclusivamente no centro da armadilha

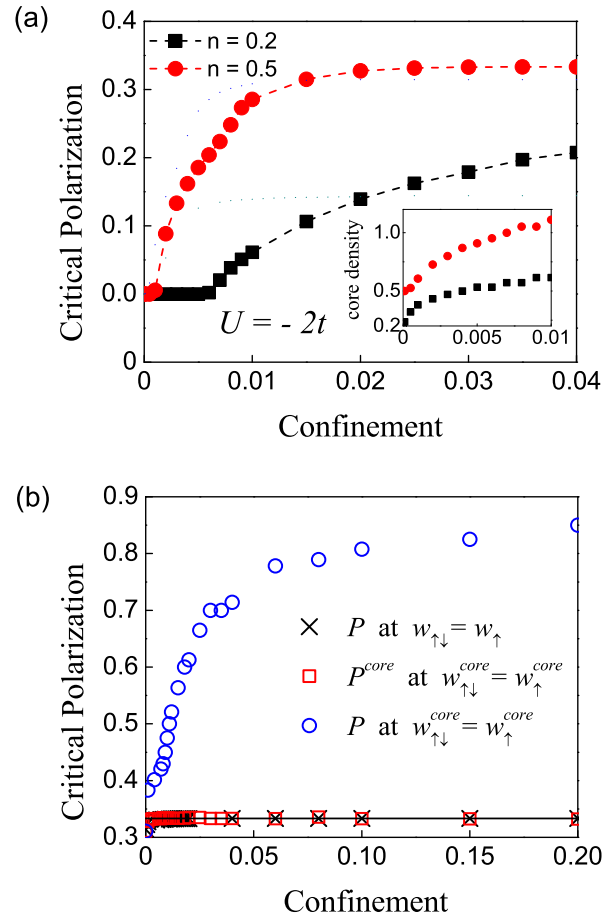


FIGURA 2.14: a) Polarização crítica  $P_C$  em função do confinamento harmônico  $V$ , no regime em que não há FFLO em  $V = 0$ . A medida que  $V$  aumenta, o estado FFLO surge ( $P_C \neq 0$ ). Inset: densidade efetiva no centro da cadeia, como definida na Ref. [183], em unidades de  $n$ , em função de  $V$ . b) Polarização crítica em cadeias confinadas calculadas: i) para toda a cadeia ( $P$  em  $w_{\uparrow\downarrow} = w_{\uparrow}$ ), ii) apenas no centro da armadilha ( $P^{core}$  em  $w_{\uparrow\downarrow}^{core} = w_{\uparrow}^{core}$ ) e iii) para toda a cadeia, mas usando como referência as probabilidades apenas no centro da armadilha ( $P$  at  $w_{\uparrow\downarrow}^{core} = w_{\uparrow}^{core}$ ). A linha sólida indica o limite superior  $P_C^{max} = 1/3$ . Em todos os casos  $L = N = 80$  e  $U = -8t$ .

harmônica, mas foram associadas à polarização global  $P$ , da cadeia como um todo, que contém bordas caracterizadas por uma grande concentração de partículas desemparelhadas, ou seja, bordas não superfluidas. A Figura 2.14 mostra que se a análise for realizada consistentemente para ambas, assinatura e polarização, seja em toda a cadeia ou apenas no centro da armadilha, a polarização crítica satisfaz o limite superior  $P_C < 1/3$ . Note que inclusive nossos resultados, se analisados incorretamente com  $P$  global e probabilidades no centro da armadilha, levam a polarizações artificialmente maiores para  $P_C$ .



## 3

# Pesquisa em Desenvolvimento de Metodologias

A DFT destaca-se entre estes métodos, pois aplicada ao modelo de Hubbard tem sido capaz de tratar e prever muitos dos fenômenos físicos do modelo. Em particular, a aproximação mais simples usada em DFT, a aproximação de densidade local (LDA), que geralmente tem baixa precisão em outros sistemas, para o modelo de Hubbard oferece resultados quantitativamente confiáveis para a maioria das grandezas. A essência da LDA consiste em usar informação (funcionais da densidade) conhecidos para o sistema homogêneo, localmente (em cada sítio) como uma aproximação para os sistemas mais realistas, heterogêneos. De forma geral, conhecido o funcional da densidade para uma grandeza  $X$  no limite homogêneo, ou seja  $X^{hom}(n)$ , a aproximação LDA para tal grandeza no regime inomogêneo  $X^{inh}$  é obtida por:

$$X^{inh} \approx X^{LDA} \equiv \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L X^{hom}(n)|_{n \rightarrow n_i}, \quad (3.1)$$

onde  $n$  é substituída localmente pela densidade  $n_i$  do sítio. Na presença de magnetização na amostra,  $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ , podemos fazer uma aproximação de densidade de spin local (LSDA), dada por

$$X^{inh} \approx X^{LSDA} \equiv \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L X^{hom}(n, m)|_{\substack{n \rightarrow n_i \\ m \rightarrow m_i}}. \quad (3.2)$$

Portanto neste Capítulo apresentamos nossos resultados em pesquisa de desenvolvimento de funcionais da densidade  $X^{hom}(n)$ , metodologia crucial para uso de DFT via LDA em cadeias de Hubbard heterogêneas. Na seção 3.1 apresentamos um funcional da densidade analítico (FVC) para a energia do estado fundamental mais preciso que funcionais anteriores para sistemas não magnetizados e que pode adicionalmente ser usado em sistemas dependentes de spin. Na seção

3.2 apresentamos um funcional da densidade numérico para a energia do estado fundamental obtido via redes neurais artificiais cujo desempenho e custo computacional supera o funcional FVC. Por fim, na seção 3.3, apresentamos um funcional da densidade analítico para o emaranhamento de um sítio com relação ao restante da cadeia. Estes resultados estão contidos nos seguintes artigos:

1. *Simple parametrization for the ground-state energy of the infinite Hubbard chain incorporating Mott physics, spin-dependent phenomena and spatial inhomogeneity*  
V. V. França, D. Vieira, and K. Capelle, *New Journal of Physics* **14**, 073021 (2012).
2. *Artificial neural networks for density-functional optimizations in fermionic systems*  
C. A. Custódio, E. R. Filletti, and V. V. França, *Scientific Reports* **9**, 1886 (2019).
3. *Entanglement from density measurements: Analytical density functional for the entanglement of strongly correlated fermions* V. V. França and I. D' Amico, *Physical Review A* **83**, 042311 (2011).
4. *Hubbard model as an approximation to the entanglement in nanostructures*  
J. P. Coe, V. V. França, and I. D'Amico, *Physical Review A* **81**, 052321 (2010).
5. *Feasibility of approximating spatial and local entanglement in long-range interacting systems using the extended Hubbard model*  
J. P. Coe, V. V. França, and I. D'Amico, *EPL* **93**, 10001 (2011).
6. *Entanglement and position-space information entropy: Hubbard model as an approximation to nanostructure systems*  
J. P. Coe, V. V. França, and I. D'Amico, *J. Phys. Conf. Series* **303**, 012110 (2011).
7. *Approximation of the entanglement in quantum dot chains using Hubbard models*  
J. P. Coe, V. V. França, and I. D'Amico, *J. Phys. Conf. Series* **286**, 012048 (2011).
8. *Testing density-functional approximations on a lattice and the applicability of the related Hohenberg-Kohn-like theorem*  
V. V. França, J. P. Coe, and I. D'Amico, *Scientific Reports* **8**, 664 (2018).

### 3.1 Funcional da Densidade para Sistemas Dependentes de Spin

Neste trabalho [34], propusemos uma parametrização analítica para a energia do estado fundamental do modelo de Hubbard em uma dimensão com maior acurácia em todos os regimes de parâmetros do que expressões anteriores [184] e tendo o diferencial de poder ser aplicada a sistemas dependentes de spin. Usamos este funcional em aproximações de densidade local e exploramos, via DFT, sistemas com impurezas e potenciais confinantes, mostrando que os resultados estão em excelente acordo com outros cálculos independentes de muitos corpos, como DMRG, a uma fração do custo computacional.

Na presença de um potencial externo  $V_i$ , o modelo de Hubbard unidimensional é dado pela Eq.(1.1). Cálculos de DFT com a aproximação LSDA podem ser realizados para este modelo [19], de forma que a energia do estado fundamental do sistema inhomogêneo seja obtida aproximadamente por:

$$E_0^{inh} \approx E_0^{LSDA} \equiv \sum_{i=1}^N e_0^{hom}(n, m, U) \Big|_{\substack{n \rightarrow n_i \\ m \rightarrow m_i}}, \quad (3.3)$$

onde  $e_0^{hom}(n, m, U)$  é a densidade de energia do estado fundamental, funcional de  $n, m$  e dependente da interação  $U$ .

Para o caso não magnetizado, isto é  $m = 0$ , a expressão comumente usada para este funcional é conhecida como parametrização LSOC [184], dada por

$$e_0^{LSOC}(n, U) = -\frac{2\beta(U)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta(U)}\right), \quad (3.4)$$

onde a função  $\beta(U)$  é determinada pela igualdade

$$-\frac{2\beta(U)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{\beta(U)}\right) = -4 \int_0^\infty dx \frac{J_0(x)J_1(x)}{x(1+e^{Ux/2})}. \quad (3.5)$$

Por construção, a LSOC se torna *exata* para  $U \rightarrow 0$  e qualquer  $n$  (onde  $\beta = 2$ ), para  $U \rightarrow \infty$  e qualquer  $n$  (onde  $\beta = 1$ ), e para  $n = 1$  e qualquer  $U$  (onde  $0 \leq \beta \leq 1$ ), e para os demais parâmetros é uma aproximação razoável para a solução numérica de Bethe-Ansatz (BA).

Existem várias vantagens em se usar um *approach* analítico, através de parametrizações, em vez do numérico. Uma delas é a facilidade em si de implementar a LSDA, via uma equação funcional da densidade em vez de muitos dados/tabelas com dados numéricos do modelo homogêneo. Especialmente porque na solução numérica BA não temos liberdade de especificar a densidade

e a magnetização que desejamos, em vez disso determina-se quantidades auxiliares, os limites inferior e superior das integrais BA, e as densidades são obtidas como parte da solução. Torna-se portanto necessário um volume grande de dados, para cobrir todos os valores possíveis das densidades e tornar os resultados de DFT precisos o suficiente.

Expressões analíticas também têm a vantagem de permitir resultados analíticos para grandezas que envolvem derivadas da energia, como susceptibilidade magnética [71], gap de Mott, equações de Euler em redes óticas [185], etc. Entretanto a expressão LSOC possuía sérios problemas e limitações, que foram resolvidos por nossa parametrização FVC:

- A função  $\beta(U)$  na LSOC é independente das densidades de carga e spin. Esse fato é conveniente para que se possa obter  $\beta(U)$  de forma independente, fora do ciclo autoconsistente de DFT, em vez de ter que calculá-lo para todas as iterações até que as densidades convirjam. Entretanto é fisicamente *incorreto*: a energia de correlação deve depender das densidades. Em vez disso a energia LSOC tem uma dependência senoidal com a densidade para todos os  $U$ 's, o que só é correto nos limites  $U = 0$  e  $U \rightarrow \infty$ .
- O gap de Mott obtido via LSOC é *incorretamente* negativo. O gap de Mott,  $E_{gap}$ , pode ser calculado através da diferença entre energias totais [186], o que via LSOC obtém-se

$$E_{gap}^{LSOC}(U) = U + 4 \cos\left(\frac{\pi}{\beta(U)}\right), \quad (3.6)$$

que se torna negativo entre  $U = 0$  e  $U = 2t$ . O gap de Mott deve ser positivo para  $n = 1$  e  $U > 0$ , visto que representa o custo energético da repulsão Coulombiana para acomodar mais de uma partícula no mesmo sítio.

- A LSOC não incorpora magnetização, ou seja, não pode ser aplicada para estudar fenômenos com  $n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$ , como fenômenos dependentes de *i)* spin em sólidos ou *ii)* polarização de estados hiperfinos em átomos aprisionados em redes óticas.

Portanto construímos um novo funcional da densidade, denominado FVC (iniciais para França, Vieira e Capelle), que não apenas resolvesse essas falhas e limitações da LSOC, mas também que fosse mais precisa que a LSOC de forma geral e, ainda continuasse satisfazendo quatro limites exatos conhecidos em função de variáveis físicas relevantes [187], a saber:

1) Para sistemas não interagentes ( $U = 0$ ),

$$e_0(n, m, U = 0) = -\frac{4}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{2}\right). \quad (3.7)$$



2) Para interação infinita ( $U \rightarrow \infty$ ),

$$e_0(n, m, U \rightarrow \infty) = -\frac{2}{\pi} \sin(\pi n). \quad (3.8)$$

3) Para semi-preenchimento sem polarização ( $n = 1, m = 0$ ),

$$e_0(n = 1, m = 0, U) = -4 \int_0^\infty dx \frac{J_0(x)J_1(x)}{x(1 + \exp^{Ux/2})}. \quad (3.9)$$

4) Para máxima magnetização ( $m = n$ ),

$$e_0(n, m = n, U) = -\frac{2}{\pi} \sin(\pi n). \quad (3.10)$$

Outros cuidados importantes também foram tomados na construção do funcional FVC, tais como evitar polinômios de ordens altas (produzem oscilações não físicas), evitar funções especiais não usuais, manter a forma semelhante à LSOC (já implementada em vários grupos).

Todos esses limites/vínculos/cuidados são considerados no funcional FVC, dado por:

$$e_0^{FVC}(n, m, U) = -\frac{2\beta(n, m, U)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta(n, m, U)}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma(n, m, U)}\right), \quad (3.11)$$

onde

$$\beta(n, m, U) = \beta(U)^{\alpha(n, m, U)}, \quad (3.12)$$

$$\gamma(n, m, U) = 2 \exp\left[\frac{\sqrt{U}}{1 - (m/n)^{3/2}}\right], \quad (3.13)$$

e

$$\alpha(n, m, U) = \left[\frac{n^2 - m^2}{n^{15/8}}\right]^{\sqrt[3]{U}}. \quad (3.14)$$

Aqui  $\beta(U)$  é a mesma quantidade usada na LSOC. A equação (3.11) é válida para  $U \geq 0$  e  $n \leq 1$ , mas pode ser estendida para  $n > 1$  e  $U < 0$  via transformações partícula-buraco [185, 186]. E o gap de Mott obtido via FVC é

$$E_{gap}^{FVC}(U) = U + 4 \cos\left(\frac{\pi}{\beta(U)}\right) - \frac{1}{2}\beta(U)U^{1/3} \ln \beta(U) \times \left[-\frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{\beta(U)}\right) + \frac{1}{\beta(U)} \cos\left(\frac{\pi}{\beta(U)}\right)\right]. \quad (3.15)$$

Naturalmente a Eq. (3.11) não é a única parametrização possível. De fato exploramos outras variações, que também satisfaziam os limites e considerações descritos, mas escolhemos esta por

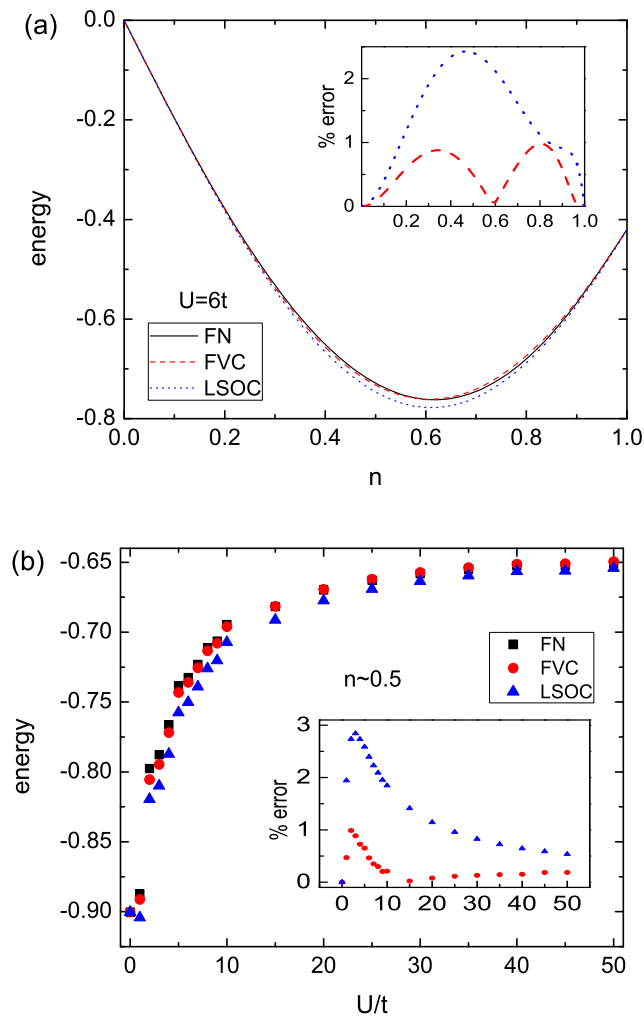


FIGURA 3.1: Energia por sítio do estado fundamental em função da (a) densidade, para  $U = 6t$ ; b) interação, para  $n \sim 0.5$ . Insets: desvio percentual  $100(e^{FVC(LSOC)} - e^{FN})/e^{FN}$  dos resultados numéricos (FN).

desviar da solução BA por menos que os erros típicos da aproximação LSDA para este tipo de sistema: a partir daí, qualquer melhora na forma da parametrização seria indistinguível quando aplicada a sistemas heterogêneos devido aos erros intrínsecos da LSDA.

Na Figura 3.1 apresentamos uma comparação entre a FVC, a LSOC e as soluções numéricas (FN) das integrais de Bethe-Ansatz para  $m = 0$ . Os desvios relativos da FVC em relação a FN são tipicamente menores que 2% e no máximo  $\sim 4\%$ . Esses erros são equivalentes aos erros da LDA (quando usamos BA com FN e comparamos com diagonalização exata), ou seja, a FVC é uma parametrização confiável para cálculos LDA incluindo o regime de interação  $U \gg 6t$ , que não pode ser realizado em sólidos, mas em átomos frios.

Como ilustramos na Figura 3.2, o gap de Mott também foi corrigido com a FVC, que deixou de ser negativo entre  $U = 0$  e  $U = 2t$ , como previa incorretamente a LSOC [186]. Para  $U >$

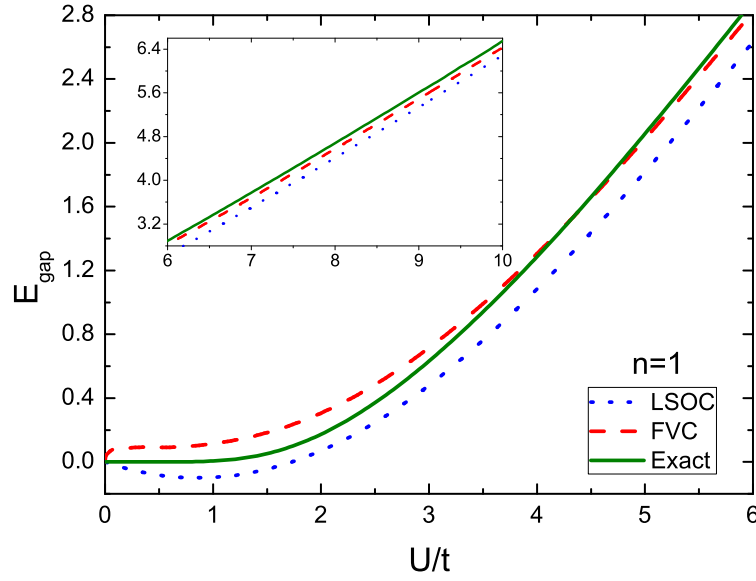


FIGURA 3.2: Gap de Mott  $E_{gap}$  de cadeias infinitas, obtido pela solução numérica das integrais de Bethe-Ansatz, comparado com as previsões analíticas LSOC e FVC.

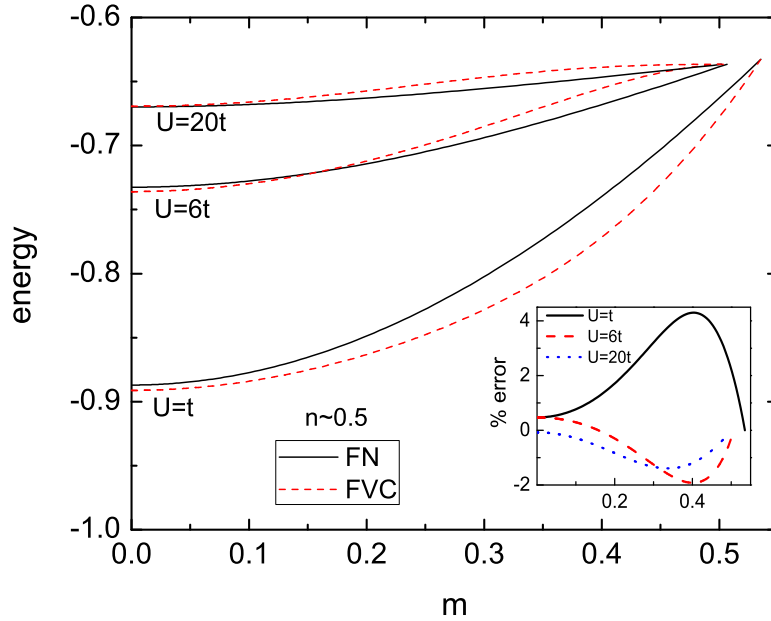


FIGURA 3.3: Energia do estado fundamental por sítio em função da magnetização para  $n \sim 0.5$  e vários valores de  $U$ . Inset: desvio percentual  $100(e^{FVC(LSOC)} - e^{FN})/e^{FN}$ .

$2t$  tanto a LSOC quanto a FVC são positivos, porém a FVC é significativamente mais próxima dos resultados numéricos. Mas note que a FVC também não reproduz apropriadamente o sutil comportamento não-perturbativo para  $U \rightarrow 0$ , apesar do termo logarítmico na Eq. (3.15).

Na Figura 3.3 apresentamos a performance da FVC em sistemas com magnetização. Claramente a dependência do spin de sistemas homogêneos é recuperada via FVC com a mesma precisão que a dependência da carga.

Nas Figuras 3.4 e 3.5 ilustramos a confiabilidade da FVC em cálculos BALSDA para reproduzir os perfis de densidade e magnetização ao longo de cadeias com heterogeneidades espaciais. Na Fig. 3.4 comparamos a BALSDA via FN e via FVC com dados de DMRG para cadeias cuja única heterogeneidade é produzida pela presença de bordas, para cadeia de  $L = 100$  sítios. A energia do estado fundamental deste sistema obtida via BALSDA/FVC desvia-se da energia obtida via DMRG por apenas 0.01%, enquanto a BALSDA/FN produz energia com desvio de 0.64% da energia via DMRG. Os desvios somados para todos os sítios dos perfis de densidade e magnetização também são inferiores entre BALSDA/FVC e DMRG (0.42% para a densidade local e 2.20% para a magnetização local) do que entre BALSDA/FN e DMRG (0.58% para  $n_i$  e 5.86% para  $m_i$ ). Este menor desvio via FVC do que via FN demonstra que esta parametrização em particular se beneficia consideravelmente por cancelamento de erros da LSDA em si. Importante comparar o custo computacional dos métodos: em 32 processadores um cálculo de DMRG típico para estes sistemas dura aproximadamente 17 horas, enquanto os cálculos BALSDA duram aproximadamente 40 segundos.

Na Fig. 3.5 comparamos cálculos de diagonalização exata com BALSDA/FN e BALSDA/FVC para as densidades e magnetizações locais para um sistema mais complexo: confinado harmonicamente com duas curvaturas distintas ( $k = 0.05$  e  $k = 0.5$ ). Dentro da acurácia típica que se espera de aproximações de densidade local para este tipo de sistema, a concordância entre todos os métodos é excelente. As amplitudes das densidades de carga e de spin são superestimadas pelas aproximações locais, o que é consistente com aproximações/sistemas semelhantes estudados anteriormente [188].

## 3.2 Funcional da Densidade via Redes Neurais Artificiais

Neste trabalho [55], propusemos uma maneira alternativa de se obter a energia do estado fundamental do modelo de Hubbard homogêneo, visando sua utilização em aproximações de densidade local em cálculos de DFT com maior precisão do que as parametrizações analíticas discutidas na seção anterior, FVC e LSOC. Para isso construímos um funcional da densidade numérico via redes neurais artificiais (ANN – Artificial Neural Network) [189]. ANN's são modelos computacionais (um tipo de *machine learning*) que se assemelham ao funcionamento do cérebro biológico:

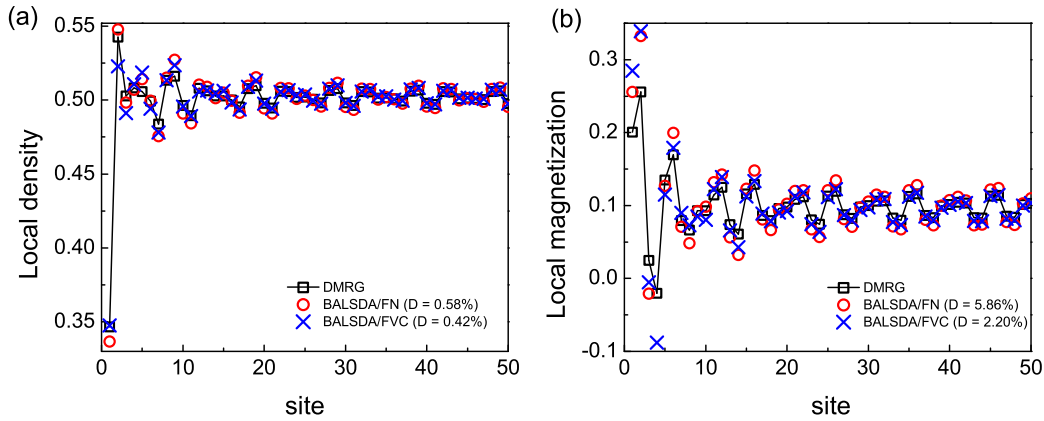


FIGURA 3.4: (a) Perfil de densidade  $n_i$  de uma cadeia aberta com  $L = 100$  sítios,  $N_{\uparrow} = 30$ ,  $N_{\downarrow} = 20$  férmions, e  $U = 4t$ , obtido autoconsistentemente com BALSDA, via solução numérica FN e via FVC, e via cálculos de DMRG. (b) Magnetização local  $m_i$  do mesmo sistema. Desvios percentuais somados em todos os sítios são apresentados em parênteses.

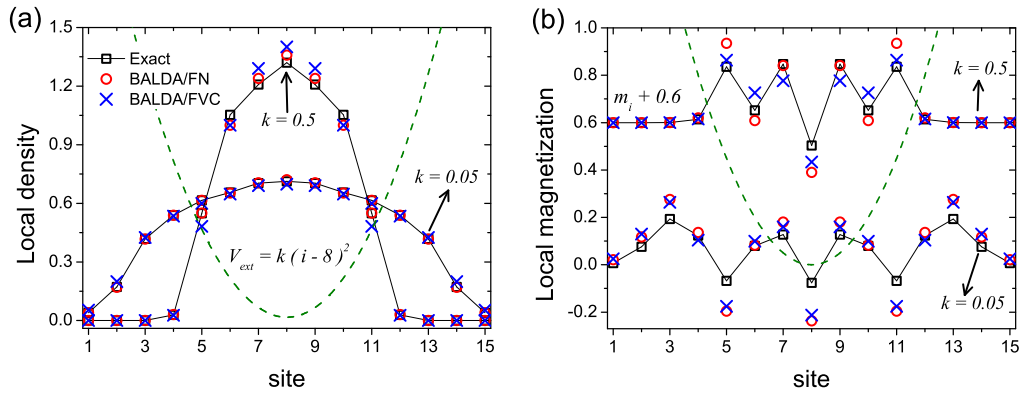


FIGURA 3.5: Sistemas confinados harmonicamente: (a) Perfis de densidade  $n_i$  de cadeias periódicas para duas curvaturas ( $k = 0.05$  and  $k = 0.5$ ).  $L = 15$ ,  $N_{\uparrow} = 4$ ,  $N_{\downarrow} = 3$  e  $U = 4t$ , obtidos autoconsistentemente via BALSDA, com FN e FVC, e via diagonalização exata (Lanczos). (b) Perfis de magnetização  $m_i$  dos mesmos sistemas. O potencial parabólico é ilustrado esquematicamente pela curva tracejada.

podem ser treinadas com conjuntos de dados/informações sobre um determinado sistema e são capazes de aprender durante este processo e em seguida podem generalizar o aprendizado para situações relacionadas porém não apresentadas explicitamente durante o treinamento.

Este tipo de ferramenta tem sido muito explorada em diversas áreas do conhecimento – incluindo neurocomputação, engenharia química, aplicações industriais, medicina, química e física [190–197] para calcular funções matemáticas não-lineares, estimar parâmetros e reconhecer padrões, pois é de fácil implementação e pode atingir resultados muito precisos com cálculos rápidos [198].

Aqui aplicamos conceitos de ANN's para estimar a energia do estado fundamental de férmions interagentes em cadeias homogêneas de Hubbard. Nosso *funcional da densidade neural* apresentou uma excelente performance quando comparado com métodos de muitos corpos independentes:

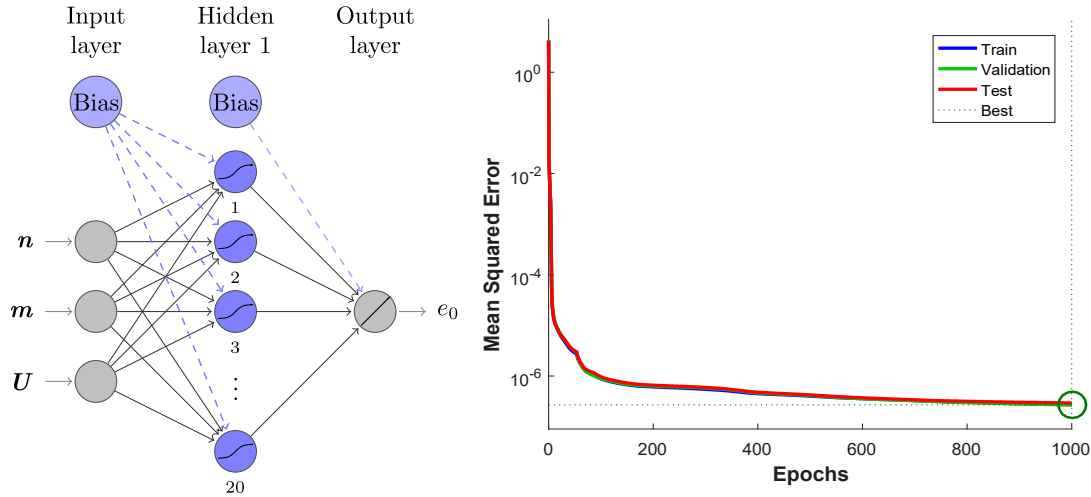


FIGURA 3.6: Estrutura 3-20-1 do funcional ANN Structure of our ANN model e sua performance durante o treinamento com o algoritmo Levenberg-Marquardt [201].

desvia-se de cálculos precisos de DMRG por menos que 0.15% para um vasto regime de interações ( $0 \leq U \leq 10t$ ) e para todos os regimes de densidade e magnetização. O funcional neural portanto é muito mais preciso que as parametrizações LSOC e FVC. Quando usado em aproximações de densidade local em cálculos de DFT para sistemas heterogêneos (finito, com impurezas localizadas e sistemas harmonicamente confinados), o funcional ANN atingiu resultados mais precisos do que outros métodos rápidos de DFT e performance semelhante a métodos mais custosos computacionalmente. Portanto nosso funcional ANN poderia ser aplicado em sistemas mais complexos, tais como superredes [199, 200] e sistemas desordenados [32, 137–140], para os quais os cálculos são não triviais e em geral requer muitas amostras de configurações.

Consideramos cadeias unidimensionais de férmions descritas pelo modelo de Hubbard, Eq.(1.1), com interação intra-sítio  $U$  e termo de *hopping*  $t$  entre sítios vizinhos, onde a densidade de partículas ou fator de preenchimento é  $n = N/L = \langle \hat{n}_\uparrow \rangle + \langle \hat{n}_\downarrow \rangle$ , enquanto a magnetização ou densidade de spin é  $m = \langle \hat{n}_\uparrow \rangle - \langle \hat{n}_\downarrow \rangle$ , em que  $N = N_\uparrow + N_\downarrow$  é o número total de partículas e  $L$  o tamanho da cadeia.

Para o treinamento do modelo neural, usamos 20.891 dados exatos da densidade de energia do estado fundamental do Hubbard,  $e_0^{hom}(n, m, U)$ , obtidos para  $L = \infty$  via solução numérica das integrais de Bethe-Ansatz dentro dos regimes  $0 \leq U \leq 10t$ ,  $0 \leq n \leq 1$  e  $0 \leq m \leq n$ . O treinamento foi realizado com o algoritmo Levenberg-Marquardt [201], em que separamos aleatoriamente o conjunto de dados em três conjuntos: 70% deles para o treinamento em si, 15% para a validação do treinamento e os 15% restante para testar a performance do funcional ANN. Os parâmetros de entrada do nosso modelo são as variáveis  $n$ ,  $m$  e  $U$ , enquanto a saída é a energia do estado

fundamental por sítio,  $e_0^{ANN}(n, m, U)$ , portanto temos um funcional numérico das densidades de carga e spin.

As possíveis topologias da rede são então do tipo: 3 neurônios de entrada,  $\{n, m, U\}$  – um certo número de camadas internas, ocultas, com um dado número de neurônios – um único neurônio de saída,  $\{e_0^{ANN}(n, m, U)\}$ . Estudamos diversas topologias, como por exemplo 3-5-1, 3-10-1 e 3-20-1, com apenas uma camada interna; e 3-12-12-1 e 3-10-10-1, com duas camadas internas. Adotamos o seguinte critério de performance: o erro quadrático médio deveria ser igual ou inferior a  $10^{-6}$ . Esse critério foi satisfeito, após extensivo treinamento, pela topologia 3-20-1 com 1000 épocas (escolhemos parar o treinamento para evitar *over-fitting*, o que poderia afetar a performance da rede neural no processo de generalizar o aprendizado), como mostra a Figura 3.6. Portanto a arquitetura do funcional ANN contém uma camada oculta composta por 20 neurônios, com função de transferência tangente sigmoide, enquanto a camada de saída é formada por um único nó com uma função de transferência linear. A rede neural treinada foi disponibilizada online no Material Suplementar da revista.

Na Figura 3.7 comparamos a performance do funcional ANN com a parametrização FVC em função da densidade para um regime fortemente correlacionado ( $U = 6t$ ) em sistemas não-magnetizados. O comportamento geral dos dois métodos, ANN e FVC, são próximos ao resultado numérico exato FN. Contudo encontramos que os desvios entre ANN e FN ( $\sim 0.1\%$ , veja inset) são menores que entre FVC e FN, que em alguns casos é 10 vezes maior. Esta performance superior do ANN em relação à FVC no regime fortemente interagente é surpreendente, pois é um regime em que a FVC é considerada suficientemente precisa [34].

Na Figura 3.8 comparamos os funcionais para a energia em função da interação para sistemas não-magnetizados. Verificamos que a excelente performance do funcional ANN não se restringe aos sistemas fortemente correlacionados: para  $n \sim 0.5$  o ANN desvia por menos que  $\sim 0.08\%$  para todas as interações entre  $0 \leq U \leq 10t$ , enquanto a FVC tem desvio médio de  $\sim 0.5\%$ .

Na Figura 3.9 comparamos ANN e FVC em função da magnetização para várias interações. Observamos que, enquanto a FVC em alguns casos falha em reproduzir até mesmo qualitativamente o comportamento da energia em função de  $m$ , o funcional ANN descreve apropriadamente a tendência da curva exata. Quantitativamente, os desvios da FVC chegam até a  $\sim 7\%$  (para  $U = 0.5t$ ), enquanto o funcional ANN se mantém confiável, com desvios inferiores a  $0.15\%$ . Também calculamos numericamente a susceptibilidade magnética  $\chi$ , que relaciona-se à energia por  $\chi^{-1} = \partial^2 e / \partial m^2 |_{m=0}$ . Para o caso de  $U = 0.5t$  encontramos  $\chi_{FN} = 0.896$ ,  $\chi_{ANN} = 0.825$  e  $\chi_{FVC} = 1.335$ , ilustrando como a acurácia na energia pode ser propagada a outros observáveis.

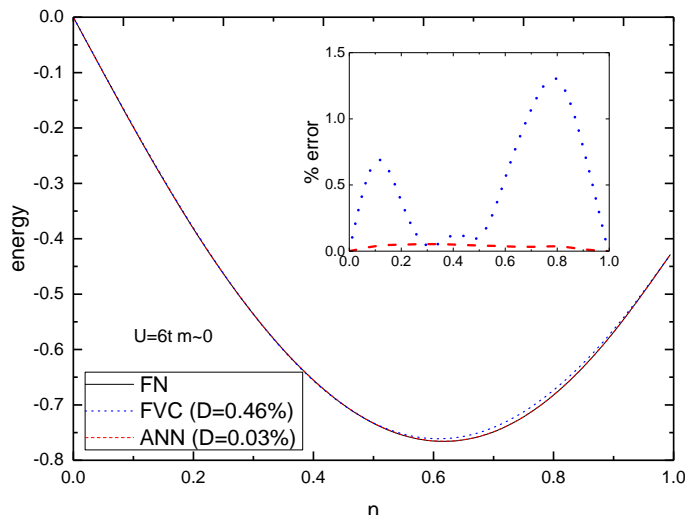


FIGURA 3.7: Energia do estado fundamental por sítio em função da densidade para os funcionais FVC e ANN em comparação com resultados numéricos exatos FN. O inset mostra os desvios percentuais obtidos por  $100 \times |(e_0^{approx} - e_0^{exact}) / e_0^{exact}|$ . Em todos os casos  $U = 6t$ ,  $m \sim 0$  e  $D$  é o desvio percentual médio.

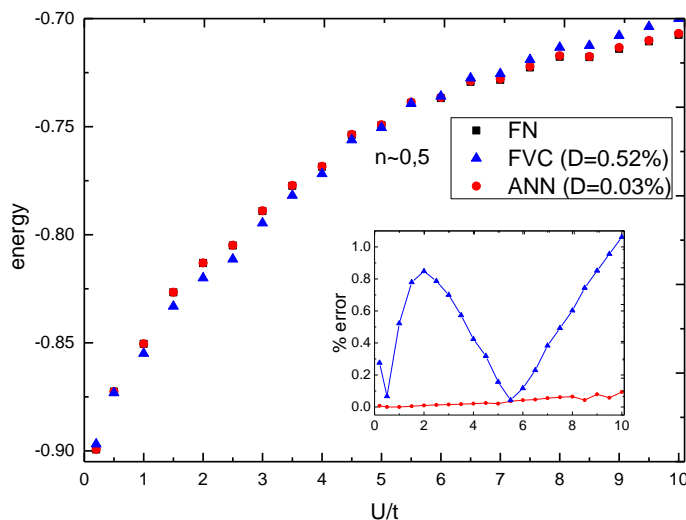


FIGURA 3.8: Energia do estado fundamental por sítio em função da interação  $U$  (em unidades de  $t$ ), para os funcionais FVC e ANN em comparação com resultados numéricos exatos FN. Aqui  $n \sim 0.5$  e  $m \sim 0$ . O inset mostra os desvios percentuais obtidos por  $100 \times |(e_0^{approx} - e_0^{exact}) / e_0^{exact}|$ , enquanto  $D$  é o desvio percentual médio.

Também comparamos o desempenho do funcional ANN em cálculos de DFT via aproximações LSDA em sistemas heterogêneos: *i*) cadeias finitas, *ii*) presença de impureza localizada ( $V_i = V\delta_{i,i_V}$ ) e *iii*) cadeias com confinamento harmônico ( $V_i = k(i - i_0)^2$ ). O potencial harmônico é particularmente relevante para simular experimentos estado-da-arte em férmions ultrafrios em redes óticas.

A Figura 3.10 sumariza os principais resultados destes sistemas heterogêneos, onde comparamos a performance do approach DFT-LSDA – com cada funcional, ANN, FVC e FN – em relação aos cálculos exatos de DMRG. Para cadeias finitas vemos que as oscilações típicas de Friedel [202]



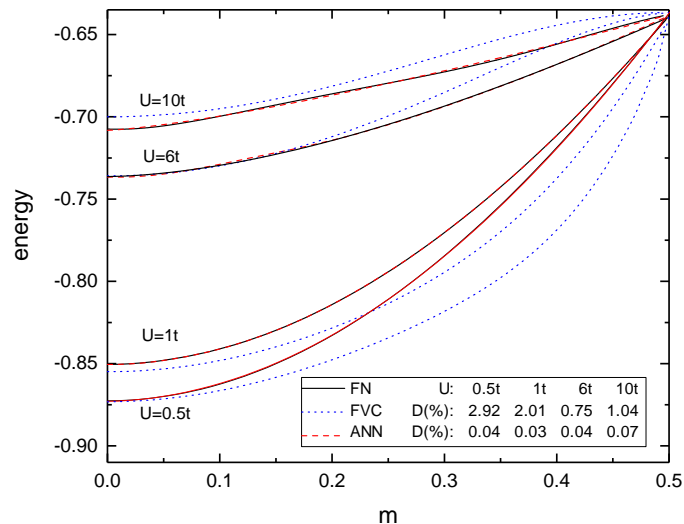


FIGURA 3.9: Energia do estado fundamental por sítio em função da magnetização  $m$ , obtidas via funcionais FVC e ANN em comparação com a solução numérica FN. Aqui  $n \sim 0.5$  e  $D$  é o desvio percentual médio.

nas densidades locais são em geral bem reproduzidas pelos três funcionais. Os desvios percentuais são semelhantes neste caso (ligeiramente maiores para a FVC), porque a cadeia é relativamente grande,  $L = 40$ . Para cadeias menores e/ou presença de potenciais  $V_i$ , como mostram as Figuras 3.10b e 3.10c, fica claro que a FVC é menos precisa que o funcional ANN. Para o caso harmonicamente confinado, Fig. 3.10d, embora os desvios oscilem com a curvatura  $k$  do potencial para todos os métodos, os desvios da FVC são sistematicamente maiores do que FN e ANN. Assim, nossos resultados comprovam que o método ANN tem um bom equilíbrio entre acurácia e custo computacional: o método ANN é duas ordens de magnitude mais rápido que FN e DMRG, e significativamente mais preciso que FVC.

### 3.3 Funcional da Densidade para Emaranhamento

Como apresentamos na Introdução, embora a DFT seja uma teoria formalmente exata, a existência de um mapeamento entre a função de onda e a densidade de partículas em si não determina a *forma* como se dá essa relação. Da mesma forma, o fato de que todos os observáveis são funcionais da densidade não determina os funcionais em si. Portanto para cada grandeza que se queira explorar via DFT, um dos primeiros passos é obter seu funcional da densidade ou então encontrar relações entre esta grandeza e outros funcionais da densidade acessíveis (como a energia) para o sistema de interesse.

Assim, para que possamos investigar o emaranhamento quântico em sistemas descritos pelo

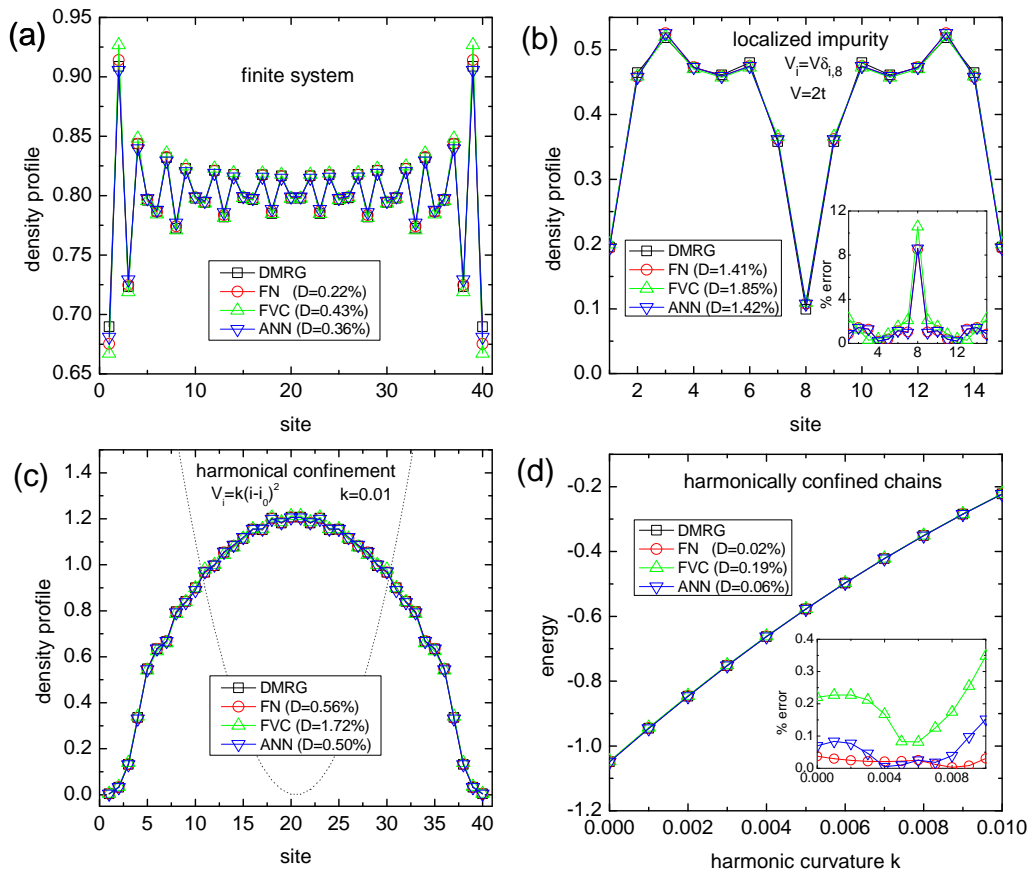


FIGURA 3.10: Perfil de densidade para (a) cadeia finita com  $L = 40$  e  $n = 0.8$ , (b) sistema com uma impureza localizada, com  $L = 15$ , potencial da impureza  $V = 2t$  e  $n = 0.4$ , e (c) sistema confinado harmonicamente com  $L = 40$ , curvatura  $k = 0.01$  e  $n = 0.8$ . (d) Energia do estado fundamental por sítio em função da curvatura  $k$  do confinamento harmônico para  $L = 40$  e  $n = 0.8$ . Em todos os casos adotamos condições de contorno abertas,  $U = 1t$  e  $m \sim 0$ . Resultados são exatos, via DMRG, e aproximados via DFT-LSDA, com um dos funcionais: FN, FVC ou ANN. Os desvios percentuais são calculados por  $100 \times |(e_0^{approx} - e_0^{exact}) / e_0^{exact}|$  e  $D$  é o desvio percentual médio.

modelo de Hubbard via DFT, torna-se essencial explorar funcionais da densidade para as medidas de emaranhamento. Neste trabalho propusemos um funcional da densidade analítico para a entropia linear de um único sítio do modelo de Hubbard unidimensional e homogêneo. Essa grandeza quantifica o grau de emaranhamento entre um dado sítio e o restante  $L - 1$  sítios da cadeia. Mostramos que este funcional é capaz de reproduzir quantitativamente os resultados exatos não apenas em sistemas homogêneos, mas também em sistemas harmonicamente confinados, se o funcional for usado em aproximações de densidade local nos cálculos de DFT. Encontramos que nosso funcional reproduz corretamente vários comportamentos sutis do perfil de densidades, o que implica poder ser usado para cálculos de emaranhamento em experimentos de átomos frios a partir de medidas da densidade local. Além disso, aplicamos também a metodologia em sistemas desordenados: surpreendentemente encontramos que nem sempre a desordem destrói o

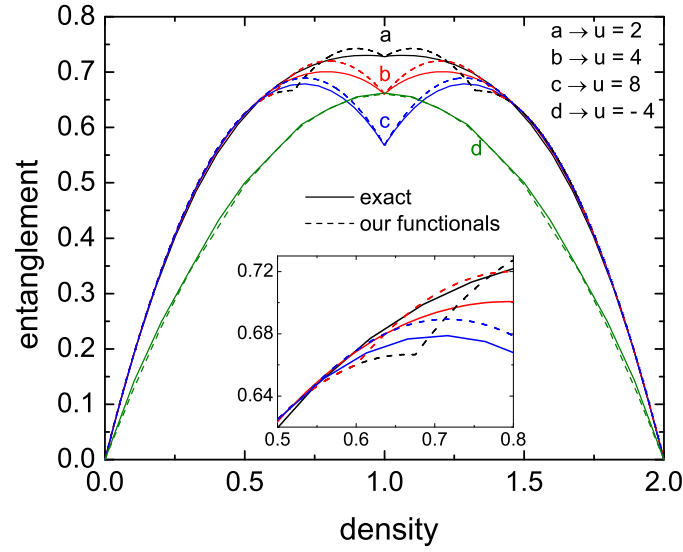


FIGURA 3.11: Emaranhamento de um único sítio em função da densidade para o modelo de Hubbard homogêneo, no limite termodinâmico. Para interações repulsivas ( $u = 2, 4, 8$ ) os resultados exatos (linhas sólidas a, b, c) são comparadas à Eq.(3.22) (linhas tracejadas a, b, c). Para interação atrativa ( $u = -4$ ) os resultados exatos (linha sólida d) são comparados à Eq.(3.25) (linha tracejada d). *Inset*: zoom do painel principal em  $n \approx \alpha(u) + 1/2$ . Os resultados exatos foram obtidos pela Eq.(3.17).

emaranhamento, existem regimes para os quais o grau de emaranhamento permanece praticamente inalterado pela presença de impurezas desordenadas.

Iniciamos com o modelo de Hubbard homogêneo, ou seja, descrito pela Eq.(1.1) com  $u = U/t$ ,  $V = V/t$  e  $t = 1$  idênticos para todos os sítios, de forma que sejam todos equivalentes. O emaranhamento de um único sítio é calculado usando a entropia linear,

$$\mathcal{L}_i = 1 - \text{Tr}(\rho_i^2), \quad (3.16)$$

onde a matriz densidade reduzida do sítio  $i$ ,  $\rho_i = \text{Tr}_B \rho$ , é obtida pelo traço da matriz densidade total  $\rho$  em relação aos demais sítios.

Para o modelo homogêneo  $\rho_i = \text{diag}\{w_\uparrow, w_\downarrow, w_2, w_0\}$ , com  $w_\sigma = \langle \hat{n}_\sigma \rangle - w_2$  a probabilidade de ocupação simples com spin  $\sigma$ ,  $w_2 = \langle \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rangle$  a dupla ocupação, e  $w_0 = 1 - w_\uparrow - w_\downarrow - w_2$  a probabilidade de ocupação nula [72].

Podemos então reescrever a entropia linear de um único sítio do modelo de Hubbard homogêneo em termos das probabilidades de ocupação,

$$\mathcal{L}^{\text{hom}} = 1 - w_\uparrow^2 - w_\downarrow^2 - w_2^2 - w_0^2. \quad (3.17)$$

Para sistemas não-magnetizados, temos

$$w_2 = \frac{\partial e_0(n, u)}{\partial u} \quad (3.18)$$

$$w_{\uparrow} = w_{\downarrow} = \frac{n}{2} - w_2 \quad (3.19)$$

$$w_0 = 1 - n + w_2, \quad (3.20)$$

onde  $e_0(n, u)$  é a energia do estado fundamental por sítio.

Para expressar o emaranhamento *explicitamente* em função da densidade, isto é, para determinarmos o funcional para o emaranhamento, aproximamos a Eq.(3.18). Primeiro, focamos em interações repulsivas e  $n < 1$ . Como não temos uma expressão analítica exata para a energia neste regime, também não temos uma expressão exata para  $w_2$ , exceto em  $n = 1$ , para o qual a solução exata Bethe- Ansatz [35] torna-se

$$w_2(n = 1, u > 0) \equiv \alpha(u) = 2 \int_0^{\infty} \frac{J_0(x)J_1(x)e^{ux/2}}{(1 + e^{ux/2})^2} dx, \quad (3.21)$$

onde  $J_k(x)$  são funções de Bessel de ordem  $k$ .

Para sistemas de baixa densidade a dupla ocupação é extremamente reduzida devido à repulsão Coulombiana, enquanto para densidades altas  $w_2$  torna-se significativa e não pode ser negligenciada. Então consideramos a seguinte aproximação: se  $\mathcal{L}^{hom}(n, u > 0)|_{w_2=0} \geq \mathcal{L}^{hom}(n, u > 0)|_{w_2=\alpha(u)}$ , adotamos  $w_2 \approx 0$ ; caso contrário assumimos a Eq.(3.21) como uma aproximação para  $w_2$ .

Assim podemos reescrever a entropia linear como um funcional da densidade explícito,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{hom}(n, u > 0) \approx & 2n - \frac{3n^2}{2} + \\ & [(4n - 2)\alpha(u) - 4\alpha(u)^2] \Theta(n - \alpha(u) - 1/2), \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde  $\Theta(x)$  é uma função step com  $\Theta(x) = 0$  para  $x < 0$  e  $\Theta(x) = 1$  para  $x \geq 0$ . Estendemos o resultado para  $n > 1$  usando transformação partícula-buraco, substituindo  $n$  por  $2 - n$  na Eq.(3.22).

Para interações atrativas a dupla ocupação não pode ser desprezada e nem mesmo aproximada pelo resultado BA. A extensão de nossa análise para  $u < 0$  pode ser feita, no entanto, através do mapeamento entre as energias dos sistemas repulsivo e atrativo [45],

$$e_0(n, u < 0) \approx \frac{un}{2} + e_0(n = 1, u > 0) \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right), \quad (3.23)$$

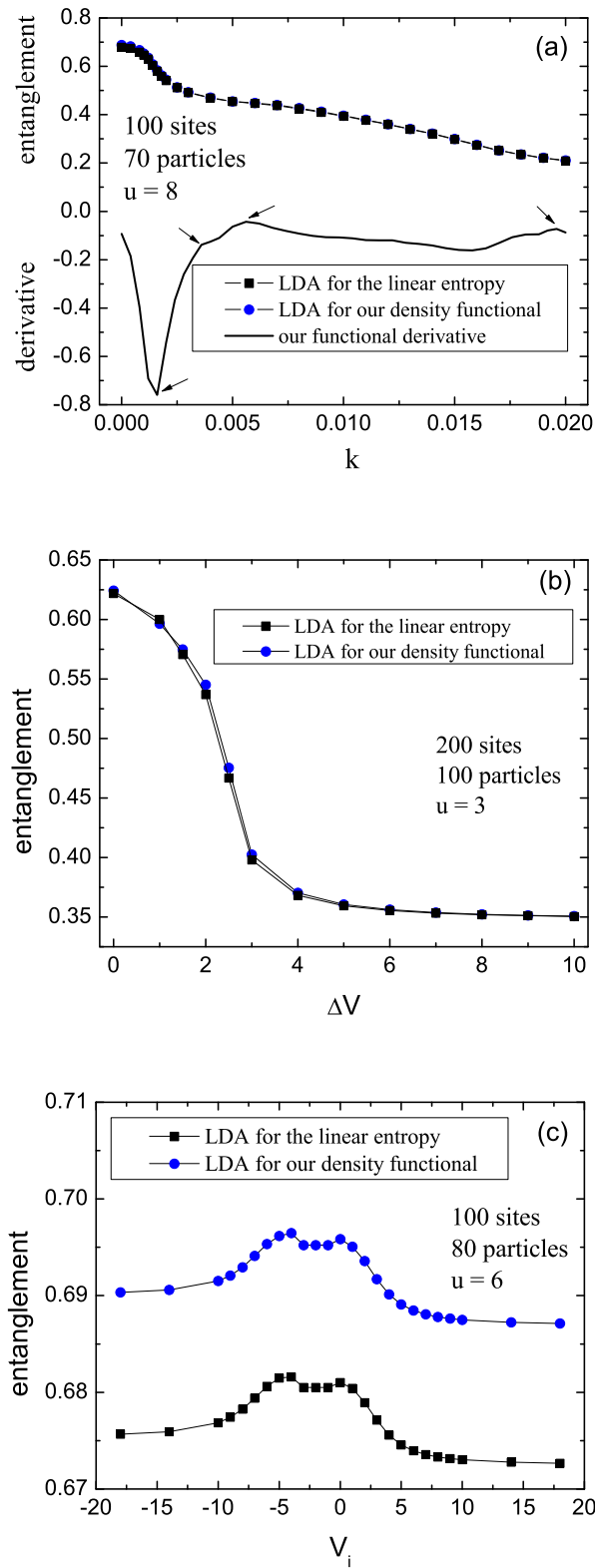


FIGURA 3.12: Emaranhamento de um único sítio a) em função de  $k$ , a curvatura do potencial harmônico  $V_i = k(i - i_0)^2$ , com  $i_0 = L/2 + 1$ ,  $L = 100$ ,  $u = 8$ , e  $n = 0.7$ ; a linha sólida é a derivada  $\partial \mathcal{L}^{LDA} / \partial k$  da Eq.(3.26) com Eq.(3.22) como input e as setas indicam estágios distintos do perfil de densidades; b) em função de  $\Delta V$ , a modulação da superrede com 20 sítios, para  $L = 200$ , 100 partículas e interação  $u = 3$ ; c) em função de  $V_i$ , uma única impureza localizada em  $i = L/2 + 1$ , para  $L = 100$ , 80 partículas e  $u = 6$ .

válido para qualquer densidade. Das Eqs. (4.3) e (3.23) obtém-se

$$w_2(n, u < 0) \approx \frac{n}{2} - \alpha(|u|) \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right), \quad (3.24)$$

e o funcional densidade para o emaranhamento torna-se

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{hom}(n, u < 0) \approx & n - \frac{n^2}{2} + 2\alpha(|u|) \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right) \\ & - 4\alpha^2(|u|) \sin^2\left(\frac{\pi n}{2}\right). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Na Figura 3.14 comparamos nossos funcionais para o emaranhamento, Eq.(3.22) e Eq.(3.25), com o emaranhamento exato Eq.(3.17). A concordância é muito boa, considerando a simplicidade das expressões para os funcionais. Para  $u < 0$  os resultados são muito precisos porque a dupla ocupação é integralmente considerada na Eq.(3.25). Para  $u > 0$  os resultados mostram que a dependência em  $n$  mais relevante para o emaranhamento é levada em conta através das outras probabilidades de ocupação, ou em outras palavras, a principal contribuição da dupla ocupação ao emaranhamento é praticamente independente da densidade, por esta razão a forma simplificada de  $w_2$  adotada na Eq.(3.22) é suficiente para obtenção do emaranhamento com boa precisão. A Fig.3.11 revela que existem intervalos de densidade,  $0 \leq n \lesssim 0.5$  e  $1.5 \lesssim n \leq 2$ , para os quais as interações de muitas partículas não desempenham papel relevante: no sistema homogêneo, até  $n \approx 0.5$  (e para  $n \gtrsim 1.5$  considerando a transformação partícula-buraco), a dupla ocupação é de fato reduzida,  $w_2 \lesssim n^2/4$  ( $w_2 \lesssim (2-n)^2/4$ ).

Mas existe um pequeno intervalo de parâmetros combinados – para  $n \approx \alpha(u) + 1/2$  e  $0 < u \leq 2$  (inset da Fig.3.11) – para os quais nossa aproximação para  $w_2$  é pouco precisa:  $w_2$  se torna mais relevante, pois a interação é menor. Nesta região o erro máximo decai exponencialmente de  $\sim 12\%$  em  $u = 0.5$  para  $4.6\%$  em  $u = 2$ . Considerando que as interações típicas em sólidos fortemente correlacionados são  $u \sim 6$  [124] e que em experimentos de átomos frios a interação pode ser facilmente ajustada (até  $u \sim 200$ ) [203], nosso funcional pode ser usado em muitas situações práticas para estimar o emaranhamento com desvios máximos de  $\sim 3\%$  para qualquer densidade.

A ótima concordância entre nossos funcionais com os resultados exatos mostram que emaranhamento pode ser obtido de forma precisa e *diretamente* de medidas da densidade em experimentos atuais descritos pelo modelo de Hubbard [204,205]. Além disso, o fato de permitirem cálculos mais simples, nosso approach pode ser usado em sistemas mais complexos, tais como sistemas desordenados, como descritos a seguir.

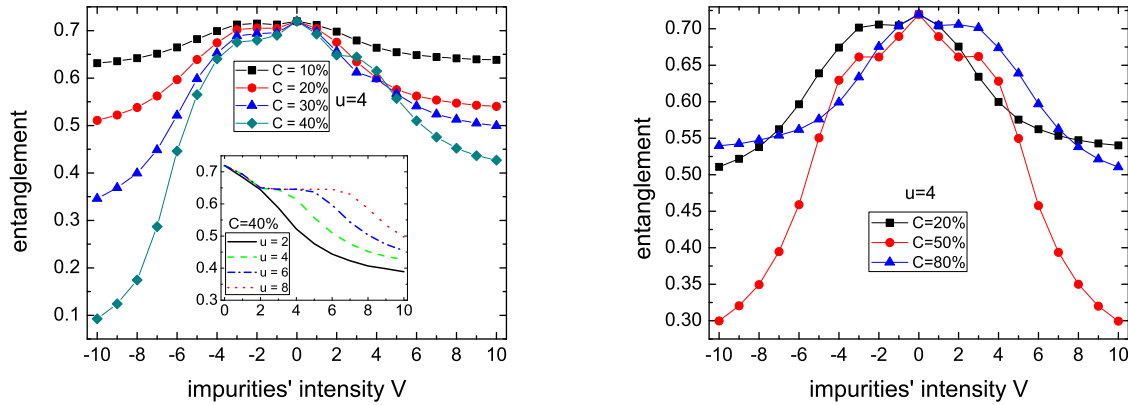


FIGURA 3.13: Emaranhamento médio de um único sítio em relação aos demais sítios de cadeias desordenadas em função da intensidade  $V$  de desordem, para concentrações  $C$  de impurezas aleatoriamente distribuídas. Aqui as cadeias têm 100 sítios, 80 partículas, e  $u = 4$ . *Inset*: emaranhamento em função de  $V$  para  $C = 40\%$  e vários  $u$ .

Para sistemas heterogêneos, usamos o funcional  $\mathcal{L}^{hom}$  como input de aproximações LDA:

$$\mathcal{L}^{inh}(n, u) \approx \mathcal{L}^{LDA}(n, u) = \frac{1}{L} \sum_i^L \mathcal{L}^{hom}(n, u)|_{n=n_i}, \quad (3.26)$$

em que nossos funcionais, Eqs.(3.22) ou (3.25), são calculados localmente no sítio  $i$ , com densidade  $n_i$ , e então tiramos a média entre os  $L$  sítios.

Na Figura 3.12 resumamos os resultados com a LDA com nossos funcionais para sistemas heterogêneos. Na Fig. 3.12a verificamos a performance do método para o potencial harmônico, como em átomos ultrafrios em redes óticas ou em pontos quânticos. A medida que aumentamos o confinamento, o sistema tem transições sutis na densidade e percebe que o emaranhamento médio de um único sítio é capaz de identificar cada uma dessas fases, conforme mostra a derivada do emaranhamento.

Também checamos a performance da metodologia em superredes com modulação periódica  $\Delta V$  no potencial externo (fixo  $u = 3$ ), e a presença de uma única impureza com intensidade  $V_{i=51}$  ( $u = 6$ ), como mostram as Figuras 3.12b e 3.12c, respectivamente. Vemos uma acurácia quantitativa da ordem da acurácia da própria LDA em si: para a superredes os desvios são inferiores a 2%, enquanto para o sistema com uma impureza desvios de 2.2% para toda intensidade de impureza. Estes resultados confirmam que nosso approach pode ser usado inclusive para quantificar experimentalmente o emaranhamento em sistemas heterogêneos a partir de medições da densidade.

Por fim, usamos nosso approach para estudar sistemas desordenados. Esses sistemas possuem a característica de que exigem tratamento estatístico das propriedades, ou seja, é preciso que se faça uma média sobre um grande número de amostras para cada conjunto de parâmetros para

evitar resultados que sejam específicos de uma determinada distribuição de impurezas. Assim por exemplo para gerar um único ponto de emaranhamento para um sistema de 100 sítios, com uma concentração  $C$  de impurezas de intensidade  $V$ , consideramos 100 amostras, de forma que realizamos  $10^4$  cálculos via DFT para cada ponto desta propriedade. Sem dúvida esse tratamento seria proibitivo com métodos mais precisos, porém mais custosos, como DMRG.

Na Figura 3.13 vemos que o emaranhamento é máximo em cadeias sem desordem ( $V = 0$ ) e para  $V < 0$  um platô é observado para  $C \lesssim 70\%$ . Este platô reflete a competição entre a interação repulsiva  $u$  e o potencial atrativo das impurezas  $V$  na transição metal-isolante de Mott [120] induzido por  $n_i = 1$  nos sítios com impurezas. Note que há uma simetria por reflexão em  $V = 0$  para sistemas com  $C$  e  $C' = 100 - C$ , o que reflete a situação em que a transição metal-isolante de Mott é induzido por  $n_i = 1$  nos sítios sem impureza quando  $V > 0$ . Nessas regiões de platô o grau de emaranhamento é praticamente inalterado, ou seja, representam regimes de parâmetros para os quais dispositivos reais podem ter um grau elevado de emaranhamento apesar da presença de impurezas.

### 3.4 Modelo de Hubbard para descrição de nanoestruturas

Nesta linha de pesquisa realizamos vários trabalhos [25, 28, 86] investigando de que forma e com que precisão o modelo de Hubbard pode ser usado para modelar nanoestruturas. Apresentamos a seguir de forma resumida os principais resultados.

Iniciamos analisando a performance do modelo de Hubbard unidimensional, Eq.(1.1), em descrever o emaranhamento entre partículas que estão armazenadas em um fio composto por poços quânticos. Em unidades atômicas, o Hamiltoniano para um sistema de dois elétrons confinados em um fio de poços quânticos é dado por

$$H = \sum_{i=1,2} \left[ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx_i^2} + v(x_i) \right] + C_U f(|x_1 - x_2|), \quad (3.27)$$

onde  $v(x_i)$  modela o fio com poços quadrados idênticos regularmente espaçados, definidos pelas seguintes quantidades:  $M$ , o número de poços,  $w$  a largura de cada poço,  $d$  a largura da barreira entre dois poços consecutivos, e  $v_0$  a profundidade de cada poço. Definimos  $f(x) = \delta(x)$  para modelar a repulsão Coulombiana de contato e definimos  $C_U$  como a intensidade da interação, o que nos permitirá comparar com o modelo de Hubbard.



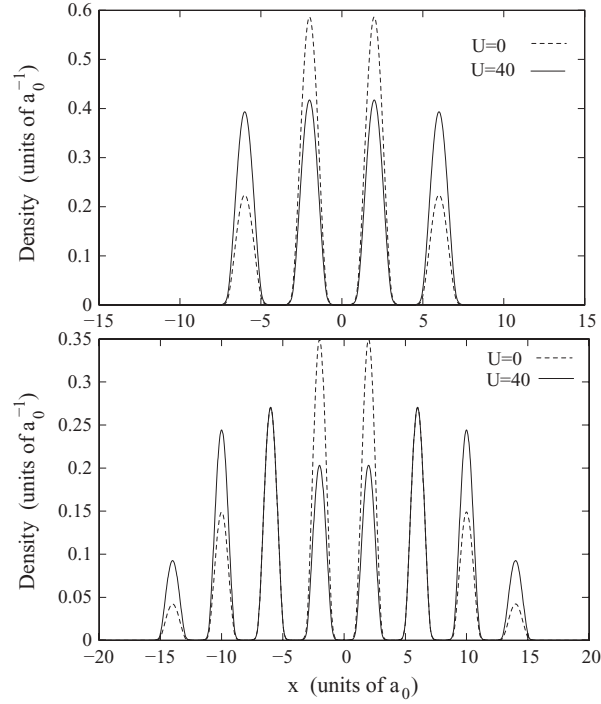


FIGURA 3.14: Densidade eletrônica para  $U = 0$  e  $U = 40$  para  $w = 2a_0, d = 2a_0, v_0 = 10\text{Hartree}$  e potencial com 4 poços (superior) e 8 poços (inferior).

Resolvemos a Eq.(3.27) através da solução da Eq. de Schrödinger independente do tempo via diagonalização exata (consideramos magnetização nula). O emaranhamento considerado aqui é o emaranhamento médio de um único sítio, quantificado pela entropia de emaranhamento ou entropia de von Neumann,

$$S = \frac{1}{M} \sum_i^M S_i, \quad (3.28)$$

onde  $S_i = -\text{Tr} \rho_i \log_2 \rho_i$ , em que  $\rho_i$  é a matriz densidade reduzida do sítio  $i$ , obtida pelo traço da matriz total com relação aos graus de liberdade dos demais sítios (subsistema B):  $\rho_i \equiv \text{Tr}_B \rho$ .

Na Figura 3.14 comparamos a densidade de partículas para o sistema não interagente  $U = 0$  com um sistema fortemente repulsivo  $U = 40$ . Para 4 poços (painel superior), vemos que enquanto o sistema não interagente apresenta claramente densidade maior nos poços mais internos, para  $U = 40$ , devido a forte repulsão Coulombiana, a diferença entre as densidades eletrônicas dos poços internos e externos é muito pequena. Para 8 poços (painel inferior) e  $U = 0$ , novamente os poços mais centrais são preferencialmente ocupados, com pouca densidade nos poços mais externos. Mas ao ligarmos a interação com  $U = 40$  os poços centrais apresentam menor densidade

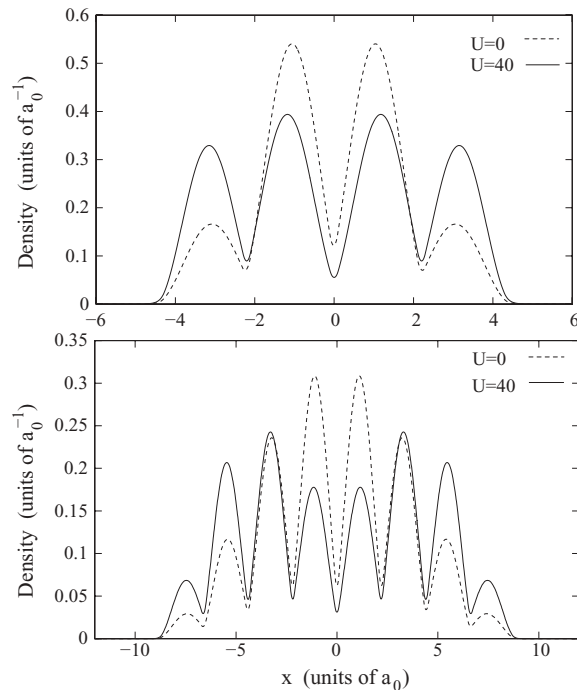


FIGURA 3.15: Densidade eletrônica para  $U = 0$  e  $U = 40$  para  $w = 2a_0, d = 0.2a_0, v_0 = 10$  Hartree e potencial com 4 poços (superior) e 8 poços (inferior).

que os poços vizinhos, para compensar a interação, enquanto os poços mais externos (das bordas) continuam com pouca densidade. Na Figura 3.15 vemos um comportamento semelhante para sistemas de 4 e 8 poços em que a distância entre os poços fora reduzida, de  $d = 2a_0$  para  $d = 0.2a_0$  ( $a_0$  é o raio de Bohr efetivo). A grande diferença neste caso sendo o fato de que na barreira em si entre os poços a densidade de partículas é diferente de zero, mostrando que a densidade eletrônica não fica localizada nos poços. Em todos os casos fica claro de que com uma interação  $U$  idêntica para todos os poços a densidade será heterogênea nos poços. Precisamos então modular a interação Coulombiana.

Na Figura 3.16 comparamos o emaranhamento médio obtido para o modelo de Hubbard com aquele para os sistemas de elétrons nos poços quânticos para  $d = 2a_0, d = 0.2a_0$ , e o caso limite  $d = 0$ . Para 2 poços e  $d = 2a_0$  vemos que o emaranhamento tem comportamento semelhante em função de  $U$  para ambos, poços quânticos (QW) e modelo de Hubbard (HM). Para 4 poços vemos que QW e HM tem emaranhamento não monotônico, mas o máximo ocorrendo para valores de  $U$  ligeiramente diferentes. Para 8 poços os modelos têm emaranhamento praticamente idênticos.

Já para  $d = 0.2a_0$  com 2 poços, a Fig.3.16 mostra que a acurácia se mantém para  $U \leq 8$ , enquanto para interações mais fortes o HM reproduz apenas qualitativamente o emaranhamento

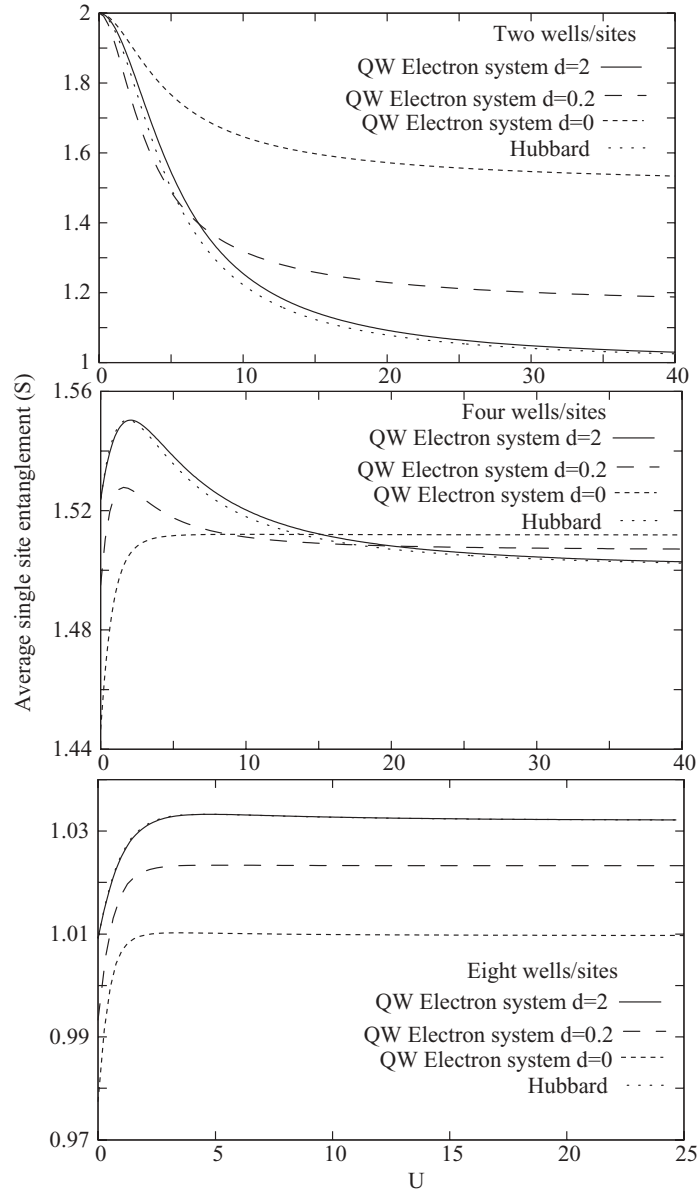


FIGURA 3.16: Emaranhamento médio de um único sítio para o modelo de Hubbard (HM) e para o sistema de elétrons em poços quânticos (QW), com,  $w = 2a_0$ ,  $v_0 = 10 \text{Hartree}$ , variáveis largura da barreira ( $d = 2a_0, d = 0.2a_0$  e  $d = 0$ ) e quantidade de poços distintas: 2 (painel superior), 4 (intermediário) e 8 (inferior).

do QW. Para 4 poços vemos o oposto, HM reproduz qualitativamente o emaranhamento para fortes interações, se tornando menos preciso para baixa interação. Para 8 poços o emaranhamento é recuperado para todos os regimes de interação, com desvios de  $\sim 1\%$ , o que é considerada uma excelente concordância (embora menos idêntico que o caso 8 poços,  $d = 2a_0$  descrito acima).

Nossos resultados mostram portanto que o emaranhamento médio de um único sítio do modelo de Hubbard é uma excelente aproximação para o emaranhamento de um sistema de elétrons com poços quânticos quando os poços são suficientemente separados para coibir densidade eletrônica significativa na região das barreiras em si. Isso porque neste caso os "sítios" do modelo estariam

menos definidos de fato. Mas vemos que a medida que aumentamos o número de poços o modelo de Hubbard fica mais preciso na descrição do sistema de poços até mesmo no caso limite  $d = 0$ . Este resultado sugere que os sítios do modelo de Hubbard poderiam ser interpretados como uma discretização da variável espacial contínua.

Essa análise foi estendida tanto em relação ao modelo de Hubbard, quanto em reação à interação Coulombiana [27]: investigamos a performance do modelo de Hubbard estendido como uma aproximação para o emaranhamento local (entre sítios) e espacial (entre partículas) de uma cadeia unidimensional de nanoestruturas com interações eletrônicas de longo alcance.

Modelamos a interação de longo alcance através de um modelo de potencial Coulombiano 'soft', em comparação com a função delta, de contato. Note que estender a interação para longo alcance é importante para tratar a interação entre partículas de forma mais realista. Determinamos então a acurácia do modelo de Hubbard estendido (EHM) em obter o emaranhamento local e o emaranhamento espacial entre dois férmions em uma cadeia unidimensional de pontos quânticos (QD), cujo Hamiltoniano em unidades atômicas é

$$H_{QD} = \sum_{s=a,b} \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx_s^2} + v(x_s) \right) + C_U f(|x_a - x_b|). \quad (3.29)$$

De forma análoga aos resultados anteriores, resolvemos esta equação via diagonalização exata para sistemas não-magnetizados. Aqui  $v(x_s)$  é também o potencial usado para representar a cadeia de poços quadrados idênticos, cada poço representando um ponto quântico, em que  $M$  é o número de poços,  $d$  a largura da barreira entre poços,  $w$  a largura do poço e  $v_0$  a profundidade do poço.  $C_U$  é definida como intensidade da interação, para facilitar a comparação com  $U$  do HM. Consideramos tanto a interação de contato  $f(|x_a - x_b|) = \delta(x_a - x_b)$ , quanto a de longo alcance [206,207],

$$f(|x_a - x_b|) = \frac{1}{\sqrt{(l^2 + (x_a - x_b)^2)}}, \quad (3.30)$$

frequentemente chamada potencial Coulombiano 'soft'. Aqui usamos  $l = 1a_0$ , onde  $a_0$  é o raio de Bohr efetivo.

Usamos a entropia de von Neumann,  $S_i = -\text{Tr} \rho_i \log_2 \rho_i$ , para quantificar o emaranhamento entre um sítio e os demais da cadeia, contudo escrevemos a matriz densidade reduzida em termos da base de ocupação, em que temos uma matriz diagonal  $4 \times 4$  [72,208],

$$\rho_{\text{red},i} = \text{diag} [P_i(\uparrow\downarrow), P_i(\uparrow), P_i(\downarrow), P_i(0)], \quad (3.31)$$

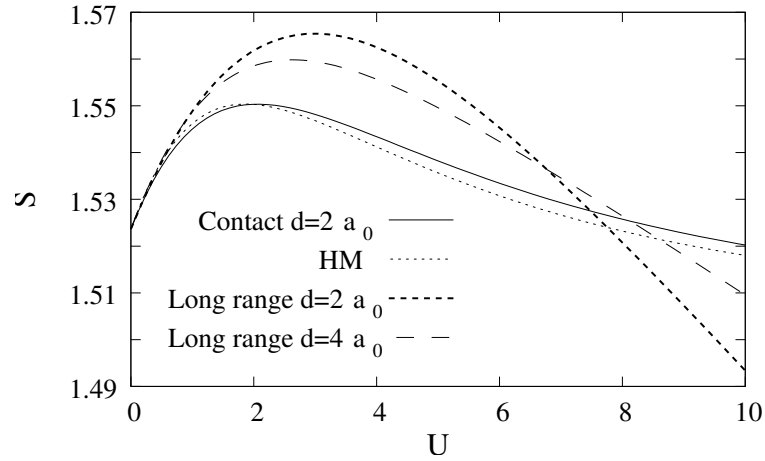


FIGURA 3.17: Emaranhamento médio de um único sítio em função da interação para  $M = 4$ . Modelo de Hubbard (HM) e sistema de quantum dots (QD) para: interação de contato,  $U = 12344C_U$  e  $d = w = 2 a_0$ ; interação de longo alcance,  $U = 17865C_U$  e  $d = w = 2 a_0$ ;  $U = 8.5 \times 10^7 C_U$ ,  $d = 4 a_0$  e  $w = 2 a_0$ . Em todos os QD temos  $v_0 = 10$  Hartree.

onde  $P_i(\alpha)$  são as probabilidades de ocupação dupla ( $\alpha = \uparrow\downarrow$ ), simples ( $\alpha = \uparrow$  ou  $\downarrow$ ; neste caso são idênticas pois não consideramos magnetização), ou nula ( $\alpha = 0$ ) no sítio  $i$ .

Para o modelo de Hubbard estendido (EHM) consideramos o seguinte Hamiltoniano,

$$H_{EHM} = -t \sum_{i,\sigma} \left( \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + \hat{c}_{i+1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \right) + \tilde{U} \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} + \tilde{U}' \sum_{i,\sigma,\sigma'} \hat{n}_{i,\sigma} \hat{n}_{i+1,\sigma'}, \quad (3.32)$$

onde  $\tilde{U}$  e  $\tilde{U}'$  são as interações intra-sítio e inter-sítios respectivamente e  $t$  é o parâmetro de hopping.  $\hat{c}_{i,\sigma}^\dagger$  ( $\hat{c}_{i,\sigma}$ ) são operadores de criação (aniquilação) de férmions com spin  $\sigma$  no sítio  $i$ , e  $\hat{n}_{i,\sigma} = \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma}$  é o operador densidade de partícula. Resolvemos a Eq. (3.32) via diagonalização exata na base de ocupação  $\{|\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |0\rangle\}$  com condições de contorno abertas e densidade  $n = n_\downarrow + n_\uparrow = 2/M$ . Note que para  $\tilde{U}' = 0$  na Eq.(3.32), o HM é recuperado do EHM.

Iniciamos com HM, i.e. Eq.(3.32) com apenas interações intra-sítio ( $\tilde{U}' = 0$ ) para ilustrar a necessidade do EHM. A Fig. 3.17 revela que HM não é uma boa aproximação para QD quando o sistema (com  $d = 2a_0$ ) possui interação de longo alcance: o sistema de longo alcance atinge um máximo de emaranhamento maior e em uma posição diferente de  $U$ . Este resultado demonstra que existem contribuições significativas para a interação além da repulsão intra-sítio.

Na Figura 3.18 observamos que de fato ao incluímos interações inter-sítios no modelo de Hubbard, isto é, via sua versão estendida EHM, o comportamento do emaranhamento em sistemas QD com interações de longo alcance é melhor reproduzido, com interações  $U'$  mais apropriadas residindo no intervalo entre  $0.15U$  e  $0.2U$ . Para interações atrativas, painel inferior da Fig. 3.18,

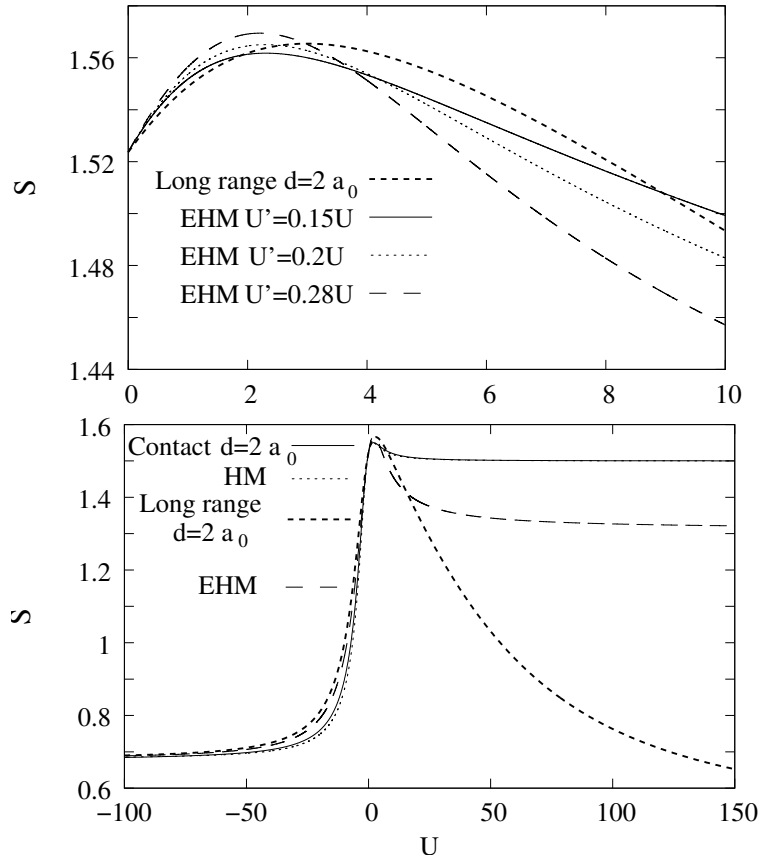


FIGURA 3.18: Emaranhamento médio de um único sítio em função da interação para  $M = 4$ . Painel superior: interação de longo alcance,  $d = w = 2 a_0$ ,  $U = 17865C_U$  e EHM com  $U' = 0.15U$ ;  $U' = 0.2U$  e  $U' = 0.28U$ . Painel inferior: interação de contato,  $d = w = 2 a_0$ ,  $U = 12344C_U$ ; HM; interação de longo alcance,  $d = w = 2 a_0$ ,  $U = 17865C_U$ ; EHM com  $U' = 0.28U$ . Em todos os sistemas QD  $v_0 = 10$  Hartree.

vemos que EHM reproduz o sistema QD com longo alcance razoavelmente bem para todos os valores de  $U$ , tal como HM reproduz o QD com interação de contato. Para interações repulsivas, embora o QD com interação de contato e o HM possuam alguns dos *features* do sistema QD com interação de longo alcance, o emaranhamento médio de um único sítio surgindo das interações de longo alcance é menor para  $U \gtrsim 8$ .

Para interações  $U < 8$  o modelo de Hubbard em geral é usado para descrever sólidos fortemente correlacionados [124], enquanto para interações mais fortes (até  $\sim 150$ ) o modelo de Hubbard pode representar sistemas de átomos frios armadilhados óticamente [203]. A Tabela 3.1 apresenta portanto os valores típicos de  $U$  no sistema QD. Perceba portanto que existem alguns parâmetros típicos de QD, tais como das Refs. [209] e [210], que correspondem aos valores de  $U$  para os quais EHM falha em reproduzir o emaranhamento dos sistemas QD, isso ocorre quando  $d$  é comparável ou maior que  $w$ . Contudo para  $d \gg w$  ambos HM e EHM são uma aproximação adequada para o emaranhamento médio de um único sítio dos sistemas de pontos quânticos.

Também investigamos o emaranhamento espacial [211], ou seja, o emaranhamento entre as

TABLE 3.1: Interação  $U$  estimada para diferentes sistemas QD: do tipo GaAs<sup>(1)</sup> com massa reduzida  $m_{eff} = 0.067m_e$  e constante dielétrica  $\epsilon = 10.9$ ; GaAs<sup>(2)</sup> com  $m_{eff} = 0.067m_e$  e  $\epsilon = 12.1$  [209]; e CdSe com  $m_{eff} = 0.45m_e$  e  $\epsilon = 9.1$  [210]. Para o caso limite  $d = 0$  o sistema é fisicamente um único ponto quântico de largura 44nm, mas conceitualmente corresponde a 4 poços de  $w = 11\text{nm}$  e  $d = 0$ .

Material	Parâmetros QD				Parâmetros com longo alcance			
	$v_0(\text{eV})$	$w(\text{nm})$	$d(\text{nm})$	$l(\text{nm})$	$v_0(\text{Hartree})$	$w(a_0)$	$d(a_0)$	$\sim U$
GaAs <sup>(1)</sup>	1.5	5.5	5.5	2.75	10	2	2	5700
	1.2	6.3	1.9	3.15	10	2	0.6	10
	0.4	11.0	0	5.5	10	2	0	1.2
GaAs <sup>(2)</sup>	1.0	5.0	5.0	3.4	10	1.48	1.48	500
CdSe	0.6	2.0	2.0	1.7	10	1.19	1.19	1000

partículas, relacionadas aos graus de liberdade espaciais (desconsiderando os de spin). Para os sistemas QD a matriz densidade reduzida tem dimensão infinita, e é dada por

$$\rho_{\text{red,spatial}}(x, x') = \int \Psi_{\text{QD}}^*(x, x_\tau) \Psi_{\text{QD}}(x', x_\tau) dx_\tau, \quad (3.33)$$

onde  $\Psi_{\text{QD}}$  é a função de onda do sistema QD. A entropia de von Neumann torna-se então

$$S_{\text{spatial}} = -\text{Tr} \rho_{\text{red,spatial}} \log_2 \rho_{\text{red,spatial}}. \quad (3.34)$$

Consideramos os sistemas QD tanto com interação de contato, quanto de longo alcance, e comparamos com o HM e o EHM com  $M$  sítios. Para calcular o emaranhamento espacial nos modelos HM e EHM transformamos a função de onda desses modelos da base de ocupação para a base de partículas,  $\Psi_{\text{HM (EHM)}}$ . Para o nosso caso, de dois elétrons, temos portanto:

$$\begin{aligned} |0\rangle_1 \dots |\uparrow\downarrow\rangle_i \dots |0\rangle_M &\rightarrow |x_{i,a}\rangle |x_{i,b}\rangle \\ &\otimes \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow_a\rangle |\downarrow_b\rangle - |\downarrow_a\rangle |\uparrow_b\rangle], \end{aligned} \quad (3.35)$$

para estados com sítios duplamente ocupados, e por

$$\begin{aligned} |0\rangle_1 \dots |\uparrow\rangle_i \dots |\downarrow\rangle_j \dots |0\rangle_M &\rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} [ |x_{i,a}\rangle |x_{j,b}\rangle |\uparrow_a\rangle |\downarrow_b\rangle \\ &- |x_{j,a}\rangle |x_{i,b}\rangle |\downarrow_a\rangle |\uparrow_b\rangle ], \end{aligned} \quad (3.36)$$

para estados com sítios com ocupação simples, onde impusemos a antissimetria por troca de partículas. Aqui  $\{x_{i,s}\}$ , com  $i = 1, 2, \dots, M$ , e  $s = a, b$ , representam as  $M$  coordenadas *discretas*

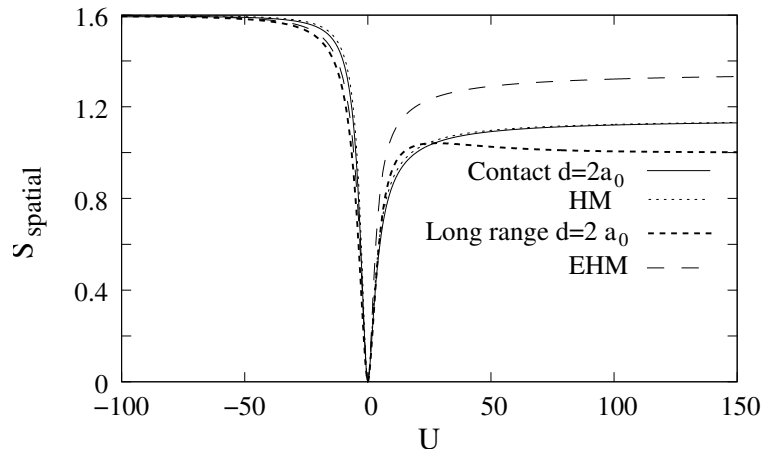


FIGURA 3.19: Emaranhamento espacial em função da intensidade da interação  $U$  para: interação de contato,  $d = w = 2 a_0$ ,  $U = 12344C_U$ ; HM; interação de longo alcance,  $d = w = 2 a_0$ ,  $U = 17865C_U$ ; EHM  $U' = 0.28U$ . Aqui  $v_0 = 10$  Hartree para todos os sistemas QD.

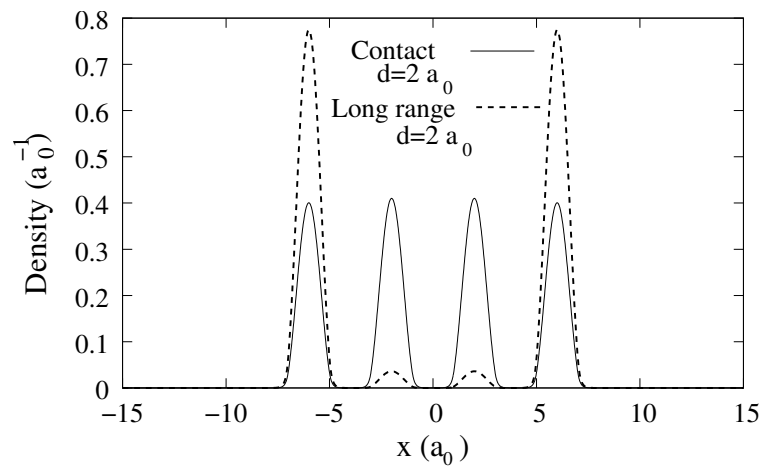


FIGURA 3.20: Perfil de densidades para o sistema QD em  $U = 100$  com  $M = 4$ ,  $d = w = 2 a_0$ ,  $v_0 = 10$  Hartree e interação de contato ou de longo alcance.

possíveis para a partícula  $s$ .

Os resultados da Figura 3.19 mostram uma excelente concordância entre o EHM e o sistema QD para o emaranhamento espacial, em particular para interações atrativas. Da mesma forma HM é uma ótima aproximação para o sistema QD com interação local para todos os regimes de interação. Observamos que o sistema QD com longo alcance tem emaranhamento menor para  $U > 0$  grande do que o sistema QD com interação de contato. Isto ocorre porque a interação de longo alcance afeta mais a densidade de partículas do que a de contato, o que significa que para forte repulsão praticamente toda a densidade reside nos poços mais externos, como comprova a Figura 3.20. Curiosamente, neste regime o EHM é na verdade uma pior aproximação para o sistema QD com longo alcance do que o HM. Isto sugere que o EHM embora incorpore mais correlações devido à interação Coulombiana, não é capaz de alterar substancialmente o perfil de densidades.



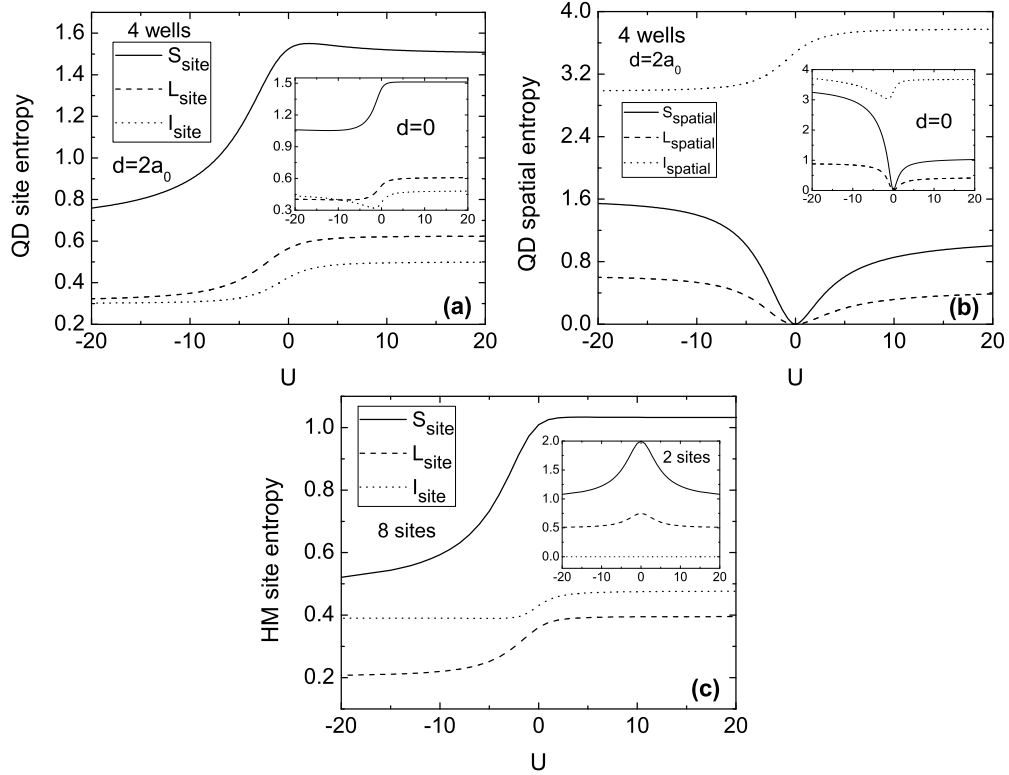


FIGURA 3.21: Entropias linear ( $\mathcal{L}$ ), von Neumann ( $S$ ), e de informação ( $I$ ) em função da interação  $U$ : (a) entropias de um único sítio e (b) entropias espaciais para o sistema QD com 4 poços,  $d = 2a_0$  e  $d = 0$  (insets); (c) entropias de um único sítio para o HM com 8 sítios e 2 sítios (inset).

Do ponto de vista das possíveis definições de emaranhamento, isto é, emaranhamento de quem com quem, e da medida apropriada para quantificar o grau de emaranhamento, investigamos a performance da entropia linear e da entropia de informação em quantificar o grau do emaranhamento médio de um único sítio – tanto do modelo de Hubbard, descrito pela Eq.(3.32) com  $U' = 0$ , quanto de uma cadeia de pontos quânticos, descrita pela Eq.(3.29) – tal qual quantificado pela entropia de von Neumann. No sistema QD também comparamos o emaranhamento espacial quantificado pelas três entropias.

A entropia de von Neumann,  $S = -\text{Tr}[\rho_{\text{red}} \log_2 \rho_{\text{red}}]$ , é a medida apropriada para calcular o emaranhamento bipartido de um estado puro, em que  $\rho_{\text{red}} = \text{Tr}_B |\psi\rangle \langle \psi|$  é a matriz densidade reduzida dos subsistemas. Nosso intuito foi de comparar os resultados com uma grandeza computacionalmente mais simples de se obter, a entropia linear, dada por  $\mathcal{L} = 1 - \text{Tr}[\rho_{\text{red}}^2]$ . Também analisamos a entropia de informação espacial,  $I_{\text{spatial}} = -\int n(x) \log_2 n(x) dx$ , e a entropia de informação de um único sítio,  $I_{\text{site}} = -\frac{1}{M} \sum_i^M n_i \log_2 n_i$ . O grande apelo para essas duas grandezas é o fato de serem dependentes exclusivamente da densidade de partículas.

Como mostram as Figuras 3.21 e 3.22, verificamos que a entropia linear em ambos, QD e HM, reproduz qualitativamente o comportamento da entropia de von Neumann e, portanto, do

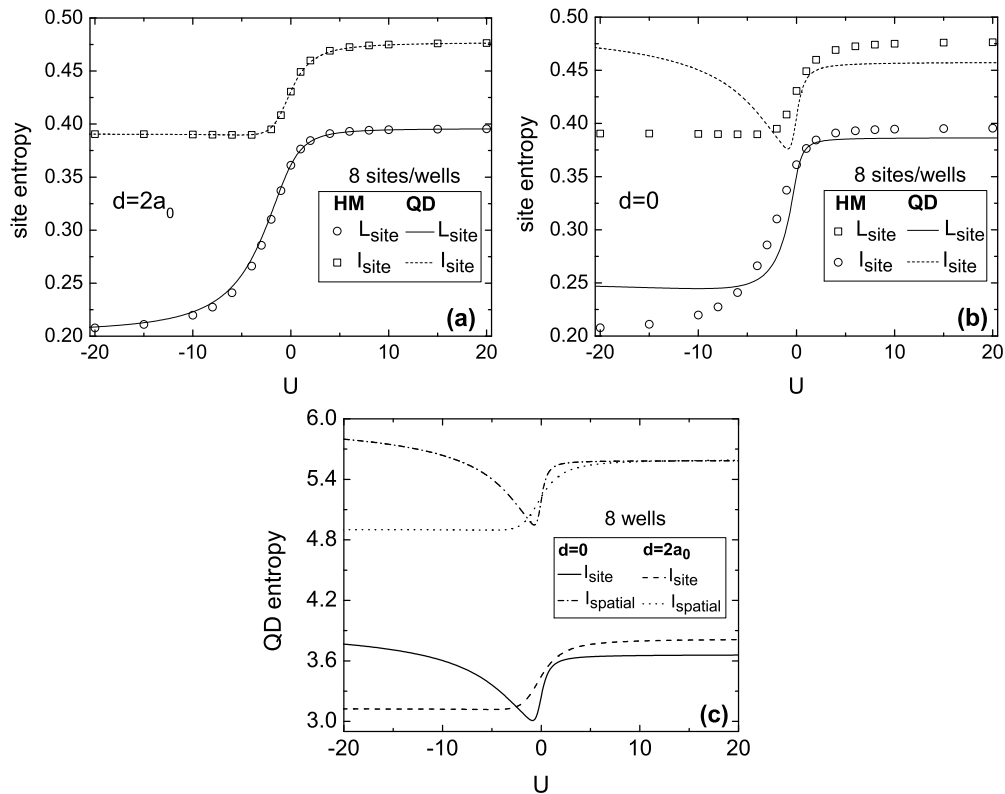


FIGURA 3.22: Entropias linear ( $\mathcal{L}$ ) e de informação ( $I$ ) em função da interação  $U$ : entropias de um único sítio para HM e para o sistema QD com 8 poços, para (a)  $d = 2a_0$  e (b)  $d = 0$ ; (c) entropia de informação espacial e de um único sítio no QD com 8 poços,  $d = 2a_0$  e  $d = 0$ .

emaranhamento. Encontramos que a entropia de informação pode indicar tipos diferentes de emaranhamento no sistema QD, dependendo da largura da barreira  $d$ : para  $d = 2a_0$  é um bom indicador para o emaranhamento médio de um único sítio, enquanto que para  $d = 0$  seu comportamento é mais semelhante ao emaranhamento espacial. Para o HM a entropia de informação descreve de forma geral o comportamento do emaranhamento em função de  $U$  exceto para o caso de apenas 2 sítios. Verificamos que tanto a entropia linear de um único sítio como a entropia de informação no sistema QD com  $d = 2a_0$  podem ser descritas quantitativamente pela entropia equivalente do HM, com grande precisão. Este resultado corrobora portanto nosso estudo acima descrito entre QD e HM para entropia de von Neumann.

## 4

# Aplicações em Nanoestruturas, Sólidos e Átomos Frios

Neste Capítulo apresentamos alguns dos nossos principais resultados da aplicação dos fundamentos e da metodologia desenvolvida para o estudo das propriedades de nanoestruturas, sólidos e átomos frios:

1. *Entanglement and exotic superfluidity in spin-imbalanced lattices*  
V. V. França, *Physica A* **475**, **82** (2017).
2. *Metric-Space Approach for Distinguishing Quantum Phase Transitions in Spin-Imbalanced Systems*  
T. de Picoli, I. D'Amico, and V. V. França, *Brazilian Journal of Physics* **48**, 472 (2018).
3. *Entanglement enhancement in spatially inhomogeneous many-body systems*  
T. Brünner, E. Runge, A. Buchleitner, and V. V. França, *Physical Review A* **87**, 032311 (2013).
4. *Linear mapping between magnetic susceptibility and entanglement in conventional and exotic one-dimensional superfluids*  
D. Arisa and V. V. França, *Physical Review B* **101**, 214522 (2020).
5. *Entanglement in disordered superfluids: the impact of density, interaction and harmonic confinement on the Superconductor-Insulator transition*  
G. A. Canella and V. V. França, *Physica A* **545**, 123646 (2020).
6. *Superfluid-Insulator Transition unambiguously detected by entanglement in one-dimensional disordered superfluids*  
G. A. Canella and V. V. França, *Scientific Reports* **9**, 15313 (2019).

7. *Mott-Anderson Metal-Insulator Transitions from Entanglement*

G. A. Canella and V. V. França, *Physical Review B* **104**, 134201 (2021).

8. *Effects of Temperature and Magnetization on the Mott-Anderson Physics in one-dimensional Disordered Systems* G. A. Canella, K. Zawadzki and V. V. França, arXiv:2202.01557 (2022).

## 4.1 Transições de Fase em Superfluidos Exóticos

Neste trabalho [101] investigamos a relação entre emaranhamento e a superfluidez exótica (FFLO) em redes de férmions desbalanceados em spin descritos pelo modelo de Hubbard. Analisamos quantidades fundamentais para emaranhamento e polarização em sistemas sólidos e derivamos aproximações analíticas para descrever os processos de spin *flipping* no regime FFLO. Encontramos um fenômeno de quebra de pares intenso e abrupto justamente na transição esperada entre a fase FFLO e o regime não superfluido (normal). Verificamos que o emaranhamento é não-monotônico em sistemas que apresentam um regime FFLO, portanto poderia ser usado como uma assinatura da superfluidez exótica.

Consideramos cadeias descritas pelo modelo de Hubbard, para férmions itinerantes e interagentes em uma dimensão, Eq. (1.1), com interações intra-sítio atrativas  $U < 0$  em unidades do parâmetro de hopping  $t$ ,  $P = (N_{\uparrow} - N_{\downarrow})/N$  é a polarização,  $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$  é o número total (fixo) de partículas. Adotamos  $N_{\uparrow}$  como a espécie majoritária, tal que  $P \geq 0$ .

A medida de emaranhamento considerada é o emaranhamento médio de um único sítio do estado fundamental,  $S = \sum S_i/L$ , quantificado pela entropia de von Neumann, que na base de ocupação do modelo é dada por:

$$S_i = -w_{i,\uparrow} \log_2 w_{i,\uparrow} - w_{i,\downarrow} \log_2 w_{i,\downarrow} - w_{i,\uparrow\downarrow} \log_2 w_{i,\uparrow\downarrow} - w_{i,0} \log_2 w_{i,0}, \quad (4.1)$$

onde as probabilidades são [213]

$$w_{\uparrow} = \frac{n}{2}(1 + P) - w_{\uparrow\downarrow} \quad (4.2)$$

$$w_{\downarrow} = \frac{n}{2}(1 - P) - w_{\uparrow\downarrow} \quad (4.3)$$

$$w_0 = 1 - n + w_{\uparrow\downarrow} \quad (4.4)$$

$$w_{\uparrow\downarrow} = \frac{\partial e_0}{\partial U}. \quad (4.5)$$

Aqui  $e_0 \equiv e_0(n, P, U)$  é a energia por sítio do estado fundamental,  $(n, P, U)$  são quantidades locais: densidade de partículas, polarização e interação, respectivamente. A polarização crítica  $P_c$ , que delimita a fase FFLO da fase normal polarizada, é obtida por [99]

$$P_c(n, U) = \pm \left[ \frac{4w_{\uparrow\downarrow}(n, P_c, U)}{n} - 1 \right]. \quad (4.6)$$

Para cadeias finitas com um número fixo de partículas a polarização  $P$  é acrescida através de spin *flips*. Existem dois possíveis canais para o flipping: via estados desemparelhados da espécie minoritária  $|\downarrow\rangle$  (canal I), uma vez que desejamos aumentar  $P > 0$ ; e através de estados duplamente ocupados  $|\uparrow\downarrow\rangle$  (canal II). Neste regime atrativo das interações o canal I é energeticamente mais favorável para spin flips, afinal o canal II é protegido pelo mecanismo de pares. Apesar disso, como a probabilidade  $w_{\downarrow}$  do canal I é muito baixa para  $|U| \gg t$  ( $w_{\downarrow} \sim 0.05$  para  $U = -8t$ ), esperava-se que houvesse a contribuição dos dois canais para sustentar o aumento de  $P$  [99].

Portanto, para *i*) testar essa hipótese dos dois canais, *ii*) quantificar a contribuição de cada canal e *iii*) investigar se os processos de flipping desempenham um papel relevante na transição FFLO-normal, derivamos e analisamos expressões aproximadas analíticas para os dois canais e comparamos com resultados numéricos de DMRG e DFT.

Modelamos o canal I,  $|\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle$ , com a premissa de que  $P$  é produzida apenas com estados desemparelhados, de forma que adotamos  $w_{\uparrow\downarrow}(n, P, U)$  como uma constante em  $P$ . Assim, dados  $n$  e  $U$ , podemos usar a dupla ocupação do superfluido convencional BCS (em  $P = 0$ ) para qualquer  $P$ :  $w_{\uparrow\downarrow} \approx w_{\uparrow\downarrow}^{\text{BCS}} \equiv w_{\uparrow\downarrow}(P = 0)$ . Portanto neste modelo a razão  $w_{\uparrow}/w_{\uparrow\downarrow}$  se torna linear em  $P$  (da Eq.4.2),

$$\text{channel I: } \frac{w_{\uparrow}}{w_{\uparrow\downarrow}} = \left( \frac{w_{\uparrow}}{w_{\uparrow\downarrow}} \right)^{\text{BCS}} + \frac{n}{2w_{\uparrow\downarrow}^{\text{BCS}}} P, \quad (4.7)$$

onde tanto o slope  $n/(2w_{\uparrow\downarrow}^{\text{BCS}})$  quanto o offset

$$\left( \frac{w_{\uparrow}}{w_{\uparrow\downarrow}} \right)^{\text{BCS}} \equiv \frac{w_{\uparrow}(P = 0)}{w_{\uparrow\downarrow}(P = 0)} = \frac{n}{2w_{\uparrow\downarrow}^{\text{BCS}}} - 1, \quad (4.8)$$

são obtidos da energia do estado fundamental do superfluido BCS.

Já para o canal II,  $|\uparrow\downarrow\rangle \rightarrow |\uparrow\rangle, |\uparrow\rangle$ , consideramos que  $P$  seja produzido exclusivamente pelos estados duplamente ocupados e que, portanto, a taxa em que  $|\uparrow\rangle$  aumenta é duas vezes a taxa em que os pares diminuem. Isso significa que  $w_{\uparrow}/w_{\uparrow\downarrow}$  neste canal tem um slope 2 e consideramos

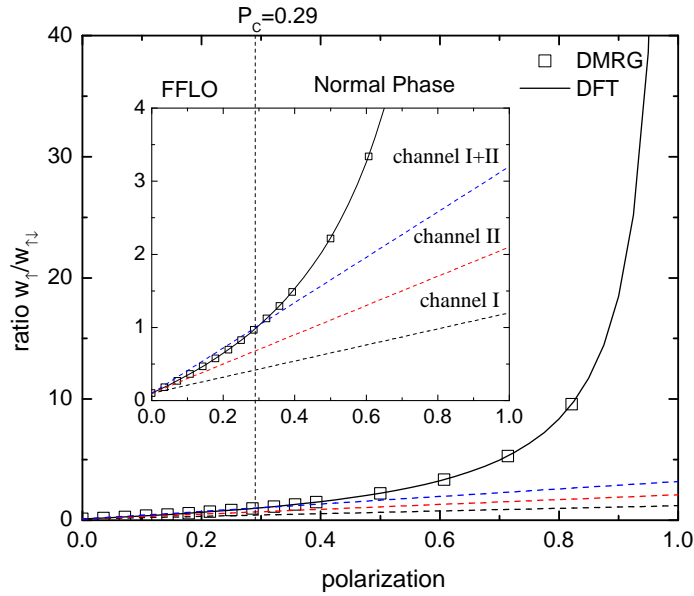


FIGURA 4.1: Razão entre as probabilidades  $w_{\uparrow}/w_{\downarrow}$  em função da polarização  $P$  obtida via DFT-FVC [34] e DMRG para  $L = 80$ ,  $n = 0.7$  e  $U = -8t$ . Aqui  $P_C \approx 0.29$  é indicado pela linha vertical tracejada. Para  $P < P_C$  (ou seja  $w_{\uparrow}/w_{\downarrow} < 1$ ) nosso modelo combinado (channel I+II) descreve apropriadamente o mecanismo de proteção de pares (inset), enquanto para  $P > P_C$  a razão  $w_{\uparrow}/w_{\downarrow}$  desvia abruptamente dos modelos, revelando uma avalanche de quebra de pares, ou seja, além das contribuições mínimas para manter  $P$  aumentando, caracterizando uma fase não superfluida.

como offset a razão no superfluido BCS  $(w_{\uparrow}/w_{\downarrow})^{BCS}$ , assim:

$$\text{channel II:} \quad \frac{w_{\uparrow}}{w_{\downarrow}} = \left( \frac{w_{\uparrow}}{w_{\downarrow}} \right)^{BCS} + 2P. \quad (4.9)$$

Dessa forma, o modelo linear somando as contribuições dos canais I e II tem offset dado pela Eq.4.8 e slope  $2 + n/(2w_{\uparrow\downarrow}^{BCS})$ , ou seja,

$$\text{channel I+II:} \quad \frac{w_{\uparrow}}{w_{\downarrow}} = \left( \frac{w_{\uparrow}}{w_{\downarrow}} \right)^{BCS} + \left( \frac{n}{2w_{\uparrow\downarrow}^{BCS}} + 2 \right) P. \quad (4.10)$$

Na Figura 4.1 comparamos a performance dos nossos canais analíticos com resultados numéricos para  $w_{\uparrow}/w_{\downarrow}$  obtidos DMRG e DFT. Encontramos que o canal I+II provê uma descrição precisa da física no regime FFLO ( $0 < P \leq P_C$ ). Já para  $P > P_C$  a razão de probabilidades diverge abruptamente, tornando-se bem maior que o predito para o canal I+II linear. A linearidade dos modelos é interpretada como uma consequência do mecanismo de pares do regime superfluido: pares são quebrados na menor taxa possível para aumentar  $P$ . Por outro lado, para  $P > P_C$ , há

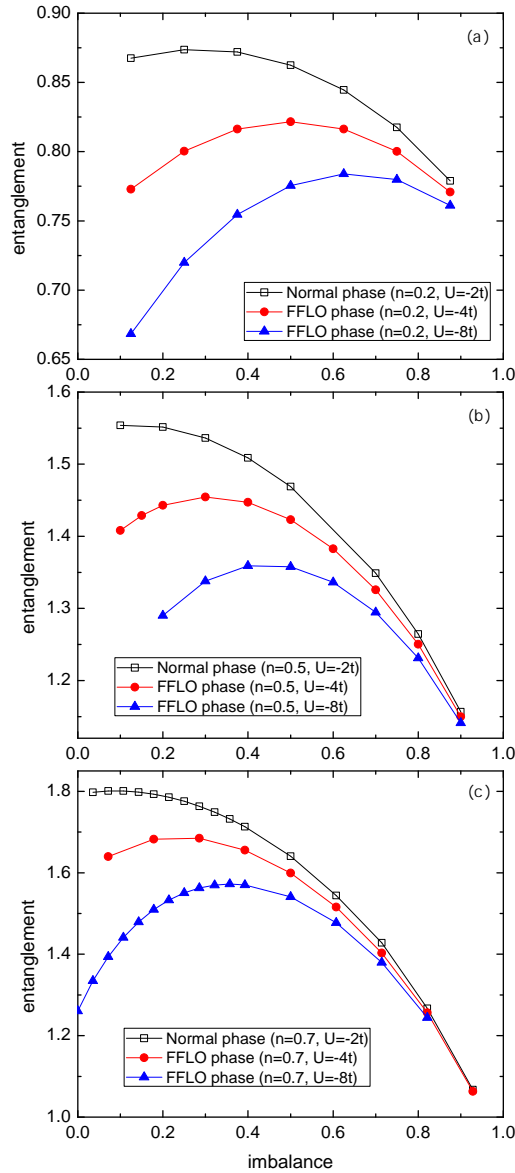


FIGURA 4.2: (Color online) Entanglement as a function of imbalance  $P$  at the normal phase ( $U = -2t$ ) and at the FFLO regime ( $U = -4t$  and  $U = -8t$ ) with filling factor (a)  $n = 0.2$ , (b)  $n = 0.5$ , and (c)  $n = 0.7$ . In all cases entanglement is obtained via DMRG calculations for a chain of size  $L = 80$ .

uma avalanche de quebra de pares que caracterizam a fase normal, não superfluida, ou seja, os pares são quebrados em uma taxa muito maior do que a necessária para sustentar o crescimento linear de  $P$ . Note que este fenômeno ocorre exatamente em  $P = P_C$ , portanto concluímos que os processos de spin flips são responsáveis pelo desaparecimento da fase FFLO.

Na Figura 4.13 apresentamos o emaranhamento médio em função da polarização para sistemas com e sem FFLO [99]. Observamos que para  $n$  fixo o emaranhamento é reduzido no estado FFLO em comparação à fase normal. Também encontramos que o emaranhamento na fase FFLO depende da interação: quanto maior a interação atrativa, menor o grau de emaranhamento.

Atribuímos esse baixo grau de emaranhamento no estado FFLO e para  $|U|$  maior à considerável redução dos graus de liberdade do sistema, causado pelo mecanismo de pares que privilegia  $w_{\uparrow\downarrow}$  e  $w_0$  e fica mais efetivo com maior  $|U|$ . Estes resultados são portanto consistentes com a ideia de que a entropia de emaranhamento incorpora a informação dos graus de liberdade do sistema e portanto desempenha o papel do parâmetro de ordem em supercondutores [114]. Note que o  $P$  para o qual o emaranhamento é máximo não coincide necessariamente com o  $P_C$  pois  $S^{max}$  ocorre no melhor balanço entre as quatro probabilidades de ocupação, enquanto a polarização crítica corresponde ao caso  $w_{\uparrow} = w_{\uparrow\downarrow}$ , independentemente das outras duas probabilidades. Por fim, embora o comportamento do emaranhamento seja específico para a escolha de  $n$  e  $U$ , existe uma tendência geral que o distingue entre as fases normal e FFLO:  $S$  é monotônico com  $P$  para sistemas na fase normal, enquanto é não-monotônico sempre que há a fase FFLO. A não monotonicidade do emaranhamento com a polarização em superfluidos convencionais já havia sido observada [213], naquele caso porém a magnetização era produzida por um campo externo  $h$ . Nosso resultado para superfluidos exóticos nos permite generalizar: a não-monotonicidade do emaranhamento em função de campos magnéticos internos ( $P$ ) ou externos ( $h$ ) é uma *assinatura universal da supercondutividade*.

Analizamos também as transições entre as fases BCS e FFLO, FFLO e normal e normal e totalmente polarizada (FP) via espaços métricos. Usamos a distância entre densidades, proposta anteriormente (Seção 2.1):

$$D(\rho_1, \rho_2) = \frac{1}{2N} \int |\rho_1(r) - \rho_2(r)| dr, \quad (4.11)$$

onde o fator de escala  $2N$  foi adicionado de forma que as distâncias se mantêm entre  $[0, 1]$  facilitando a comparação direta entre sistemas com  $N$  diferentes. Aqui  $\rho_1$  e  $\rho_2$  são as funções densidade de quaisquer dois sistemas, de forma que quanto maior a similaridade entre eles, menor a distância.

Em  $P = 0$  o sistema é esperado ser um superfluido BCS convencional, enquanto em  $P = 1$  um sistema totalmente polarizado (FP). Para valores intermediários de  $P$  há a fase FFLO para  $P < P_C$  e a fase normal polarizada (PN) para  $P > P_C$ . A distância deve ser menor portanto, para sistemas pertencentes à mesma fase do que entre sistemas de fases distintas.



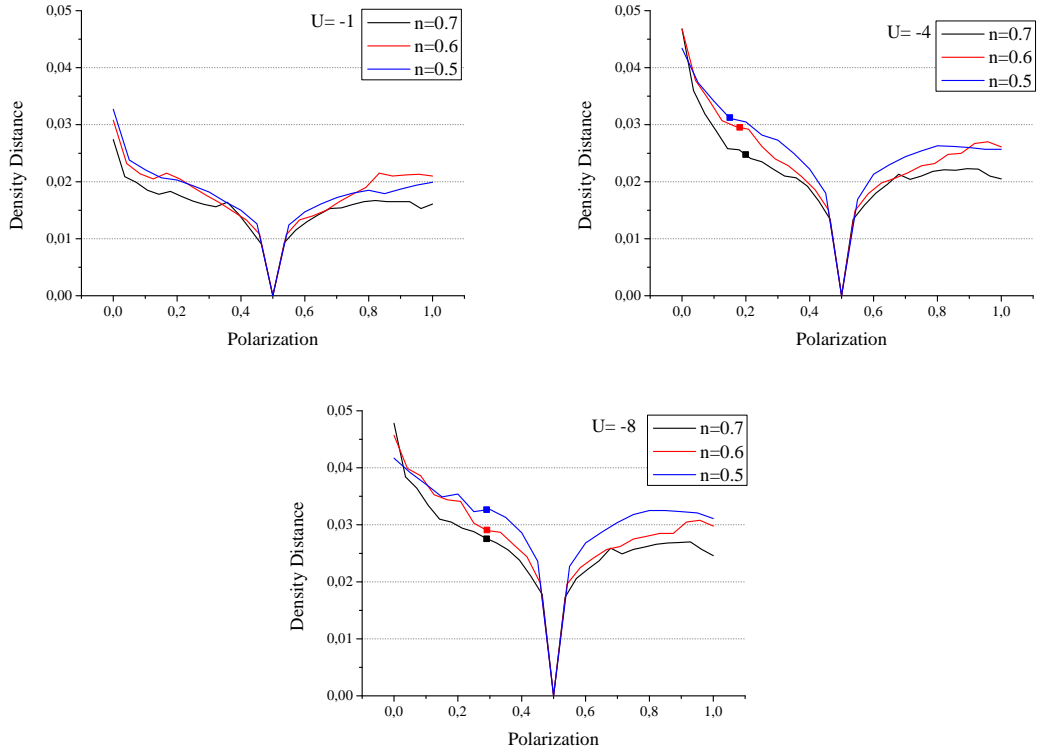


FIGURA 4.3: Distância  $D$  entre densidades em função de  $P$  para sistemas com e sem FFLO. Os quadrados sólidos indicam os  $P_C$  relacionados.

Usamos a polarização central  $P = 0.5$  como referência, ou seja  $\rho_{ref} \equiv \rho_{P=0.5}$  e quantificamos via cálculos de DMRG a distância

$$D(P) = \frac{1}{2N} \int |\rho_P(r) - \rho_{ref}(r)| dr. \quad (4.12)$$

Para sistemas sem a fase FFLO (interações atrativas muito baixas, aqui usamos  $U = -1$ ), o sistema é caracterizado por 3 fases: BCS em  $P = 0$ , normal para  $0 < P < 1$  e totalmente polarizado em  $P = 1$ . Na Figura 4.3 vemos que a distância é essencialmente simétrica em relação à polarização central para  $0.1 \lesssim P \lesssim 0.9$ , confirmando o fato de que não há transições de fase no intervalo  $0 < P < 1$ . Em contraste, vemos uma clara assimetria entre a distância no regime BCS ( $P = 0$ ) e na fase FP ( $P = 1$ ). Quantitativamente a Figura 4.4 revela que a distância na fase BCS é consideravelmente maior do que em qualquer outro  $P > 0$ , incluindo a fase FP ( $P = 1$ ). Isso significa que as fases PN e FP são fisicamente mais próximas entre si do que as fases PN e BCS. Este resultado não é apenas plausível – já que PN e FN são fases magnéticas, enquanto BCS e FFLO são superfluidas – mas é também consistente com resultados anteriores [214, 215], que sugerem que a transição da fase BCS para a fase normal é uma transição de primeira ordem e que a transição PN-FP é de segunda ordem.

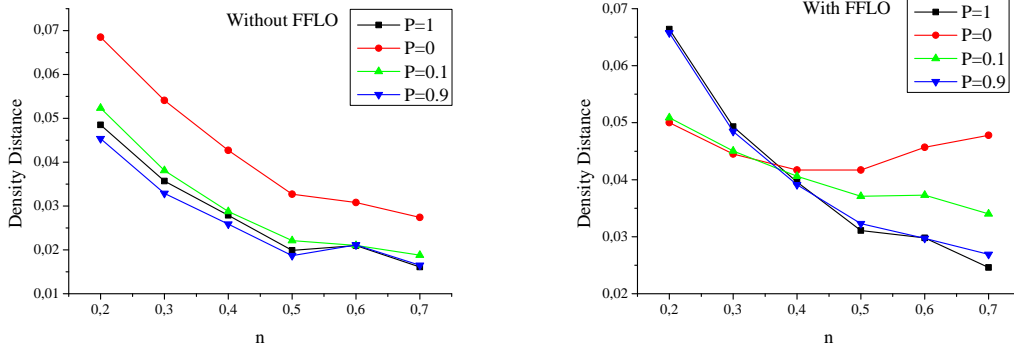


FIGURA 4.4: Distâncias entre densidades em função da densidade média para fase BCS ( $P = 0$ ), PN ( $0 < P < 1$ ) e FP ( $P = 1$ ) para  $U = -1$  (sem FFLO) e BCS ( $P = 0$ ), FFLO ( $0 < P < P_C$ ), PN ( $P_C < P < 1$ ) e FP ( $P = 1$ ) para  $U = -8$  ( $P_C \sim 0.3$ , com FFLO).

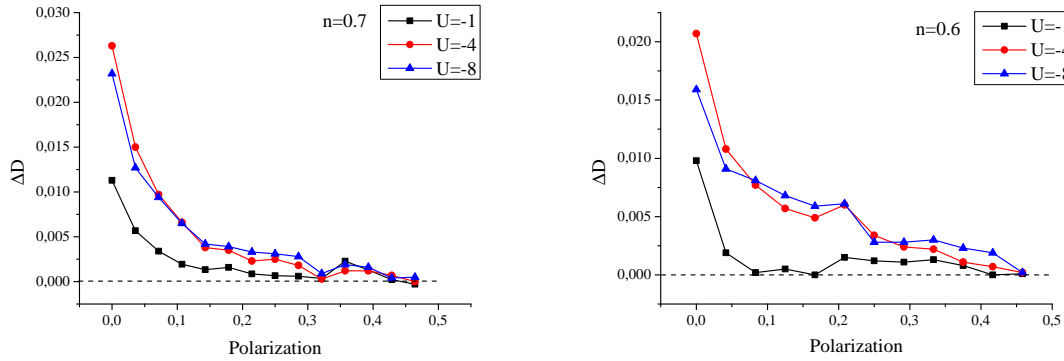


FIGURA 4.5: Diferença entre distâncias equidistantes  $\Delta D(P) \equiv |D(1 - P) - D(P)|$  do ponto central  $P = 0.5$ , em função de  $P$  para sistemas sem FFLO ( $U = -1$ ) e com FFLO ( $U = -4$  e  $U = -8$ ).

Na Figura 4.3 analisamos as distâncias em relação ao ponto central em sistemas com a presença da fase FFLO: encontramos que agora a assimetria aparece não apenas em  $P = 0$ , mas também para  $P > 0$ , comprovando que a métrica é sensível à transição de fase FFLO-PN. A Figura 4.4 mostra que enquanto para  $P > P_C$  ( $P_C \approx 0.3$ ), as distâncias se comportam de forma semelhante com ou sem FFLO, para  $P < P_C$  as distâncias apresentam comportamentos distintos. Quantitativamente, para  $n \gtrsim 0.4$  a fase BCS apresenta as maiores distâncias, seguida pelas distâncias do regime FFLO e então pelas distâncias das fases magnéticas, PN e FP.

Na Figura 4.5 quantificamos a diferença entre distâncias de pontos equidistantes do ponto  $P = 0.5$  de referência,  $\Delta D(P) \equiv |D(1 - P) - D(P)|$ : vemos que  $\Delta D$  é maior para sistemas com FFLO ( $U = -4$  e  $U = -8$ ) do que para sistemas sem FFLO ( $U = -1$ ).  $\Delta D$  nos casos sem FFLO é significativo apenas na transição BCS-PN, enquanto em sistemas com FFLO  $\Delta D$  é significativo também para  $P > 0$ . Estes resultados confirmam similaridades entre a transição BCS-PN e FFLO-PN, sugerindo que a transição FFLO-normal é também de primeira ordem, enquanto a transição PN-FP é de segunda ordem ou apenas um *crossover*.

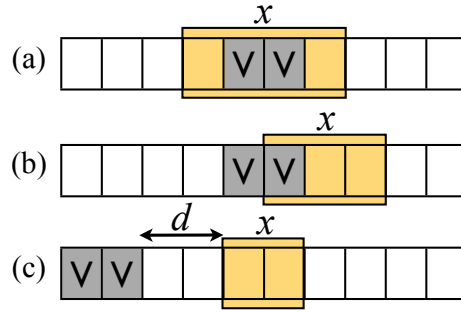


FIGURA 4.6: Ilustração do sistema com duas impurezas ( $V$ ) e os parâmetros relevantes para o bloco  $x$ : impurezas (a) simetricamente distribuídas (2 imp sym); (b) assimetricamente distribuídas (1 imp asym) e (c) a uma distância  $d$  do bloco.

## 4.2 Emaranhamento entre Blocos em Superredes

No que se refere ao grau de emaranhamento em nanoestruturas, uma das evidências na época deste trabalho era de que as heterogeneidades de forma geral destroem o emaranhamento do sistema. Neste trabalho [81], investigamos os efeitos das interfaces em estruturas de superrede no grau de emaranhamento de cadeias fortemente correlacionadas. Encontramos regimes onde o grau de emaranhamento é aumentado (até 27% a mais que o sistema sem impurezas) devido a presença de heterogeneidades. Interpretamos o fenômeno usando conceitos da Teoria do Funcional da Densidade e estabelecemos uma receita geral para a predição das nanoestruturas com elevado grau de emaranhamento.

Consideramos cadeias unidimensionais descritas pelo modelo de Hubbard, Eq.(1.1), com interações  $U$  repulsivas, em unidades do hopping  $t$ , magnetização nula ( $N_{\uparrow} = N_{\downarrow}$ ), com  $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$  o número total de partículas,  $L$  o tamanho da cadeia e  $n = N/L$  a densidade. O emaranhamento entre blocos do estado fundamental entre um conjunto  $x$  de sítios e o restante  $L - x$  é quantificado pela entropia de von Neumann,

$$S_x = -\text{Tr} [\rho_x \log_2 \rho_x], \quad (4.13)$$

onde  $\rho_x = \text{Tr}_{\{L-x\}}[\rho]$  é a matriz densidade reduzida e  $\rho$  é a matriz densidade total, obtida via diagonalização exata (Lanczos). Para um bloco de tamanho fixo  $x$  e condições periódicas de contorno o máximo emaranhamento é dado por [75, 80]:

$$S_{\text{hom}}^{\max}(x, L \rightarrow \infty) = 2 + \log_2[x^{2/3}]. \quad (4.14)$$

Iniciamos a análise em um sistema com 2 impurezas consecutivas, como ilustra a Figura 4.6,

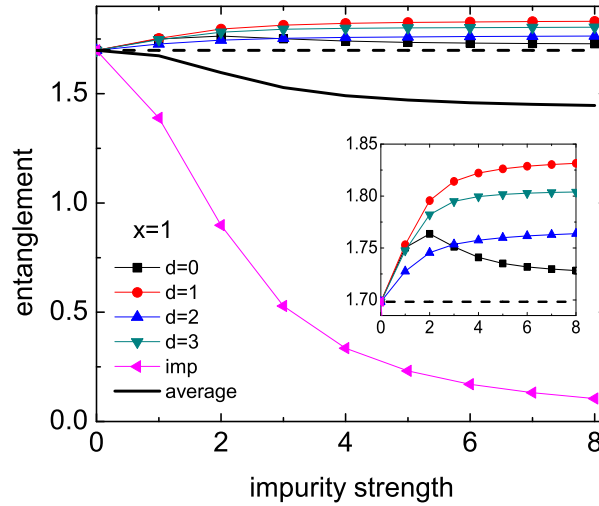


FIGURA 4.7: Emaranhamento de um único sítio ( $x = 1$ ) em função da intensidade  $V/t$  da impureza para o sítio com impureza (imp), para sítios a uma distância  $d$  das impurezas, e a média sobre todas as possíveis bipartições. Aqui  $L = 10$ ,  $N = 6$ ,  $U = 4t$ , e adotamos condições periódicas de contorno.

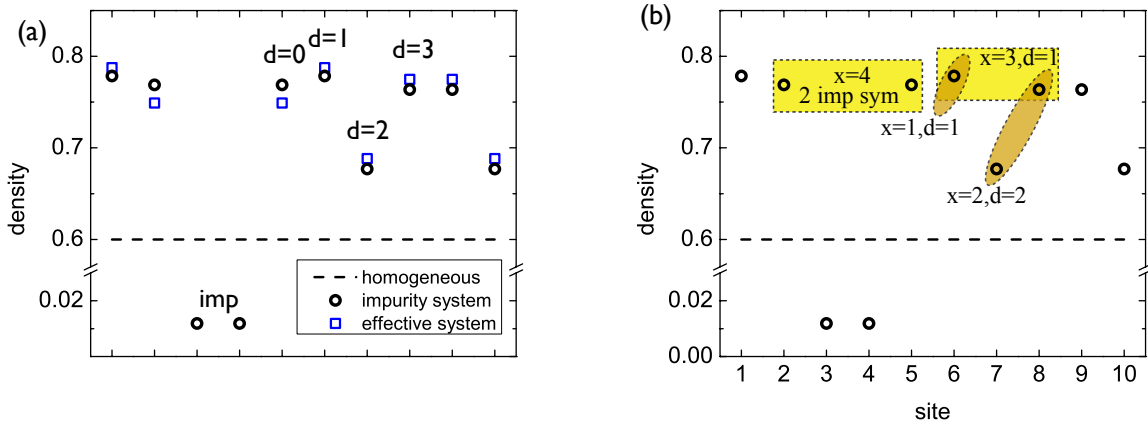


FIGURA 4.8: (a) Perfil de densidades com 2 impurezas (imp) em  $V = 8t$  a uma distância  $d$  das impurezas (círculos) em comparação com o sistema efetivo de  $L = 8$  (2 sítios a menos),  $V = 0$  (quadrados), ambos com condições abertas de contorno. (b) Estimativas das situações de maior grau de emaranhamento para vários  $x$ .

em que os parâmetros relevantes (para condições de contorno periódicas) são a localização das impurezas dentro do bloco  $x$ , se  $x$  contém impurezas ou a distância  $d$  das impurezas. A Figura 4.7 mostra os resultados para emaranhamento de um único sítio em função de  $V$ . Vemos que apenas o emaranhamento entre os sítios de impureza e os demais se anula para  $V \gg t$ , uma vez que neste limite a matriz densidade reduzida torna-se pura ( $\rho_x = \rho_{imp} = |0\rangle\langle 0|$ ). Para o emaranhamento médio sobre todas as possíveis bipartições vemos que o emaranhamento cai com  $V$ , mas satura em um valor finito. Mas o mais surpreendente resultado vem das situações em que os blocos não coincidem com os sítios impuros, como detalha o inset: neste caso o emaranhamento não diminui, ao contrário, é aumentado a medida que aumentamos  $V > 0$ .

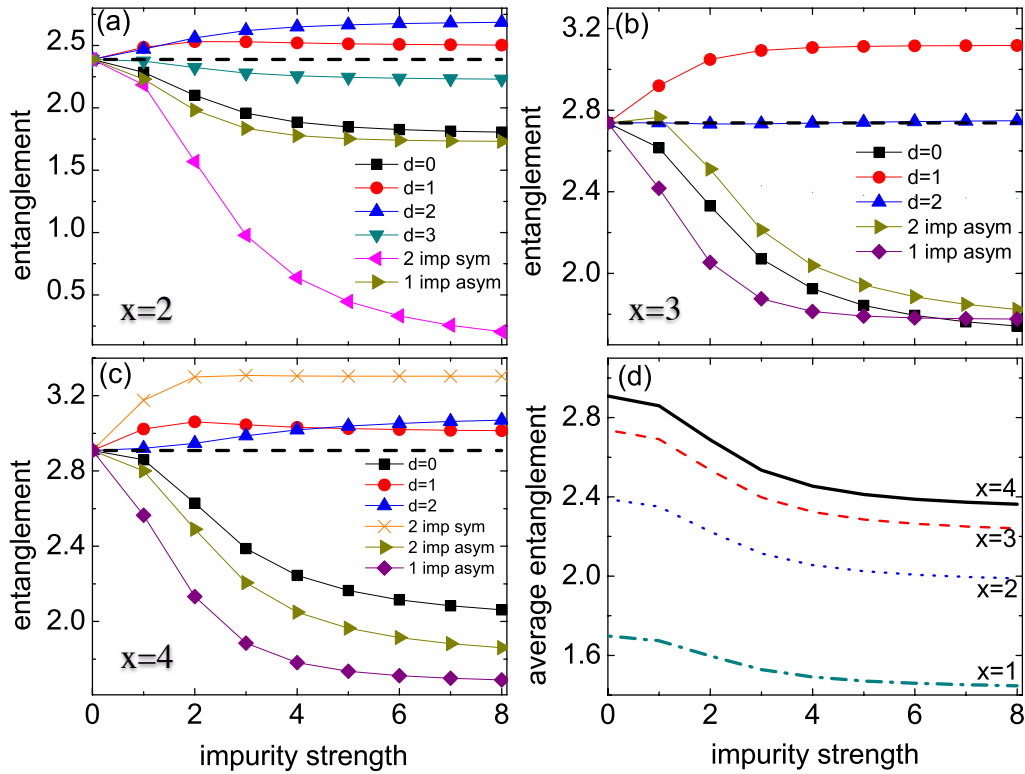


FIGURA 4.9: Emaranhamento entre blocos em função de  $V/t$  para (a)  $x = 2$ , (b)  $x = 3$  e (c)  $x = 4$ , em diferentes distâncias  $d$  e com impurezas distribuídas simetricamente (sym) ou assimetricamente. (d) Emaranhamento médio entre blocos.  $L = 10$ ,  $N = 6$ ,  $U = 4t$  e condições de contorno periódicas.

Esse fenômeno pode ser interpretado em termos de conceitos fundamentais de DFT. Em DFT todos os observáveis são funcionais da densidade do sistema interagente. De forma geral não conhecemos o funcional para as grandezas de interesse, mas no caso do modelo de Hubbard homogêneo, em que todos os sítios são equivalentes e a função densidade é constante  $n$ , o funcional da densidade para a entropia de emaranhamento de um único sítio pode ser obtido da solução Bethe-Ansatz [213]. E analisando este funcional pode-se observar que há um regime de densidades,  $n \lesssim 0.8$  para  $U > 0$ , para o qual o emaranhamento cresce monotonicamente com  $n$ . Para sistemas heterogêneos como o que temos aqui as densidades variam e se tal variação é tal que há uma densidade efetiva mais elevada, o emaranhamento aumenta.

Este é exatamente o caso do nosso sistema, como pode ser confirmado no perfil de densidades da Figura 4.8: as partículas são repelidas dos sítios com impurezas, aumentando a densidade efetiva nos demais  $L - 2$  sítios ( $n^{\text{eff}} = N/(L - 2) > n$ ), levando a graus de emaranhamento maiores que o sistema sem impurezas. Além disso, as demais características observadas para o emaranhamento em função da distância  $d$  podem ser interpretadas em termos de conceitos da

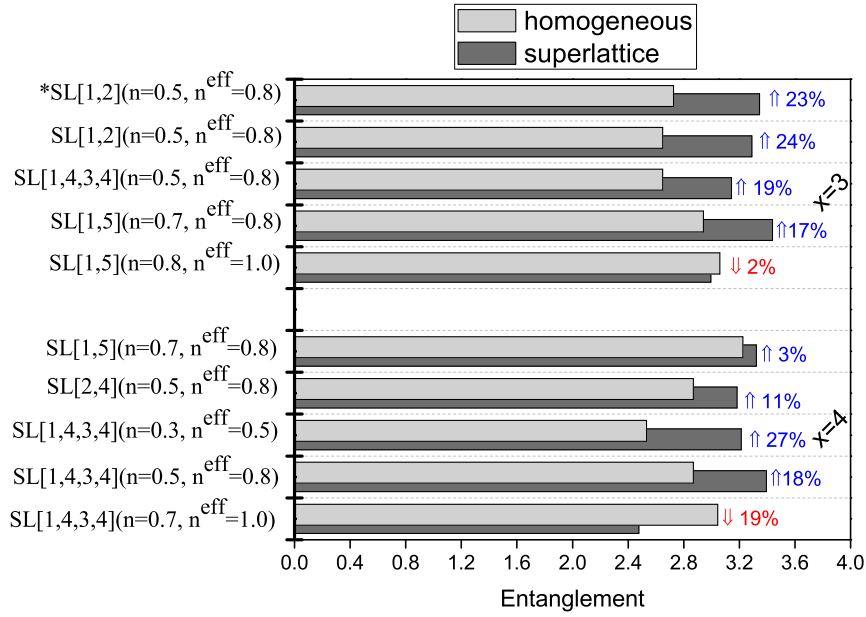


FIGURA 4.10: Emaranhamento para várias SL com  $x = 3$  e  $x = 4$ :  $SL[a, \alpha, b, \beta]$  com período  $[a, \alpha, b, \beta]$ , onde  $a, b$  são sequencia de sítios (camadas) com  $V_i = V$ , enquanto  $\alpha, \beta$  camadas com  $V_i = 0$ . Em todos os casos:  $U = 4t$ ,  $V = 8t$  e condições periódicas de contorno.

lei de escala com a área [61]: temos interface fixa (único sítio), mas o grau de emaranhamento é ponderado pela densidade local nesta interface. Portanto para  $x > 1$ , podemos inferir quais blocos exibirão maior grau de emaranhamento: aqueles com maiores densidades na interface, como ilustra a Figura 4.8b e comprovamos com a Figura 4.9.

Usamos então essas considerações gerais para estimar nanoestruturas do tipo superrede (SL), com potencial periódico  $V_i$ . A Figura 4.10 mostra o emaranhamento SL para blocos com as configurações otimizadas. Para todos os casos em que a densidade efetiva ( $n^{\text{eff}} = N/(L - I)$ ,  $I$  o número total de impurezas) é maior que a densidade média  $n$  (até  $n^{\text{eff}} \sim 0.8$ ), observamos um aumento do emaranhamento da SL em comparação com o caso homogêneo de até 27%.

### 4.3 Susceptibilidade como Medida Experimental de Emaranhamento

Neste trabalho [71] investigamos a relação intrínseca entre emaranhamento e a susceptibilidade magnética em férmions nos regimes metálico, isolante e superfluido (convencional e exótico). Nossa análise revelou que o mapeamento entre emaranhamento e susceptibilidade em superfluidos convencionais (BCS) e exótico (FFLO) é a mais simples possível: *diretamente proporcional*. Foi a primeira vez que tal linearidade entre as grandezas foi reportada e em particular para o caso de superfluidos convencionais, foi possível determinar uma universalidade neste comportamento. A relevância destes resultados consiste no fato de que a susceptibilidade magnética é uma grandeza

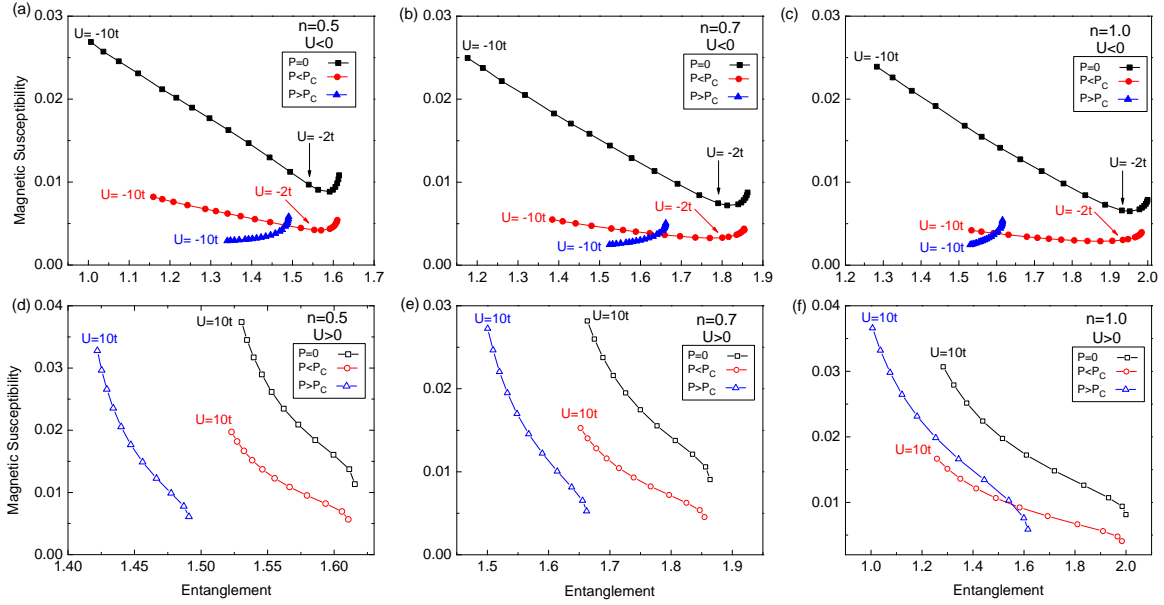


FIGURA 4.11: Susceptibilidade magnética em função do emaranhamento para interações atrativas e repulsivas para  $P = 0$ ,  $P < P_C$  ( $P = 0.1$ ) e  $P > P_C$  ( $P = 0.5$ ), com  $n = 0.5$ ,  $n = 0.7$  e  $n = 1.0$ . As interações inicial e final são indicadas, dados correspondem ao intervalo  $U = -10t$  a  $U = 10t$ , e enfatizamos o ponto  $U = -2t$  para  $0 \leq P < P_C$  que delimita a linearidade observada para  $U \lesssim -2t$ .

mais facilmente medida experimentalmente e, portanto, poderia ser uma medida indireta porém eficiente de quantificar grau de emaranhamento em experimentos atuais da matéria condensada e de átomos frios.

Consideramos o modelo de Hubbard, Eq.(1.1), com densidade  $n = N/L$ , magnetização  $m = n_\uparrow - n_\downarrow$ , que se relaciona com a polarização  $P = (N_\uparrow - N_\downarrow)/N$  por  $m = nP$ . Determinamos o emaranhamento médio de um único sítio pela entropia de von Neumann [49],

$$S_i = -w_{\uparrow,i} \log_2 w_{\uparrow,i} - w_{\downarrow,i} \log_2 w_{\downarrow,i} - w_{2,i} \log_2 w_{2,i} - w_{0,i} \log_2 w_{0,i}. \quad (4.15)$$

Aqui a dupla ocupação  $w_{2,i}$  é dada por

$$w_{2,i} = \frac{\partial e_0(n, m, U)}{\partial U}, \quad (4.16)$$

$w_{\uparrow,i} = n/2 + m/2 - w_{2,i}$  e  $w_{\downarrow,i} = n/2 - m/2 - w_{2,i}$  são as probabilidades de ocupação simples,  $w_{0,i} = 1 - w_{\uparrow,i} - w_{\downarrow,i} - w_{2,i}$  a probabilidade de ocupação nula, e  $e_0(n, m, U) = E_0(n, m, U)/L$  a energia do estado fundamental por sítio. Para evitar a dependência com o sítio específico, analisamos as grandezas médias sobre todos os sítios:  $S \equiv \sum_i S_i/L$  e  $w_2 \equiv \sum_i w_{2,i}/L$ .

Já a susceptibilidade magnética  $\chi$  é obtida numericamente a partir da segunda derivada da energia total  $E_0(n, m, U)$  com relação à magnetização em  $n, U$  fixos,

$$\chi = \left[ \frac{\partial^2 E_0(n, m, U)}{\partial m^2} \right]_{n, U}^{-1}. \quad (4.17)$$

Monitoramos as duas grandezas para um vasto regime de parâmetros, como mostra a Figura 4.11. A característica mais marcante é o fato de que para moderada e forte interação atrativa,  $U \lesssim -2t$  e polarização  $0 \leq P < P_C$ , o mapeamento entre  $\chi$  e  $S$  para qualquer  $n$  é *diretamente proporcional*. O comportamento linear desaparece para  $P > P_C$  e não existe para o regime repulsivo. Para entender esta linearidade analisamos, na Figura 4.12, as grandezas de forma individual em função da interação. Observamos que para qualquer  $P$  e  $n$  o emaranhamento máximo ocorre em  $U = 0$ , decrescendo monotonicamente com  $|U|$ . Isto reflete o fato de que em  $U = 0$  as quatro probabilidades estão em maximamente balanceadas (dados  $n$  e  $m$ ), enquanto à medida que  $|U|$  aumenta surgem restrições nos graus de liberdade por supressão dos estados desemparelhados quando  $U < 0$  e dos estados duplamente ocupados para  $U > 0$ .

Em contraste, encontramos que para interações atrativas  $\chi$  é não monotônica com  $U$ : possui um mínimo em  $U = U_C \sim -2t$  e satura para  $U \rightarrow -\infty$  em valores finitos, tanto para o regime de superfluidez convencional ( $P = 0$ ) quanto para o regime FFLO. A saturação de  $\chi$  em valores finitos é uma assinatura do efeito Meissner em supercondutores [216], devido a coexistência de supercondutividade e ordenamento antiferromagnético. De forma consistente, para o regime normal ( $P > P_C$ ) não há efeito Meissner e  $\chi \rightarrow 0$  para  $U \rightarrow -\infty$ .

Se contudo, nos concentramos na análise de  $S$  e  $\chi$  no regime  $U \lesssim -2t$  e  $0 \leq P < P_C$ , vemos que ambas as grandezas são monotônicas com a interação e com a densidade, inclusive com curvas muito semelhantes para qualquer  $n$ . Portanto o mapeamento linear entre as duas grandezas não se trata de coincidência ou artefato, em vez disso reflete diretamente as similaridades de  $S$  e  $\chi$  na resposta tanto a  $U$  quanto a  $n$ . Consistentemente, para  $U > 0$ , emaranhamento e susceptibilidade magnética respondem à interação e densidade de maneiras distintas e por isso não temos um mapeamento trivial entre as grandezas.

Para chegar em uma relação linear *universal* entre  $S$  e  $\chi$  de superfluidos, primeiramente notamos que enquanto  $\chi$  escala de forma semelhante para as diferentes densidades, a escala de  $S$  varia com  $n$ . Isso reflete o fato de que tanto o mínimo de emaranhamento, para  $U \rightarrow -\infty$ , quanto o emaranhamento máximo, em  $U = 0$ , são funções da densidade. Portanto para fazer



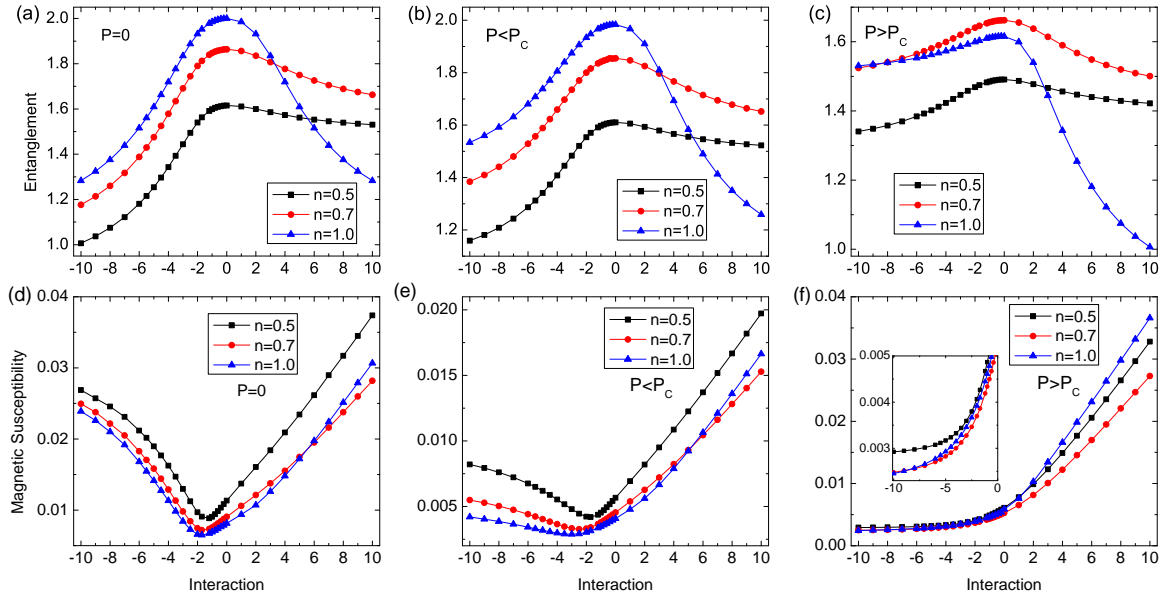


FIGURA 4.12: Emaranhamento e susceptibilidade magnética em função da interação: (a), (d) para  $P = 0$ , (b), (e) para  $P < P_c$  ( $P = 0.1$ ) e (c), (f) para  $P > P_c$  ( $P = 0.5$ ).

o emaranhamento dos sistemas com diferentes densidades comparáveis, re-escalamos o emaranhamento por  $S \rightarrow S - S_{min}$ , onde  $S_{min} \equiv S(n, m = 0, U \rightarrow -\infty)$  é obtido analiticamente da seguinte forma: calculamos a dupla ocupação a partir da energia por sítio do sistema atrativo,  $e_0(n, m = 0, U) = Un/2 - e_0(n, |U|)$ . Como  $e_0(n, |U|)$  se torna independente de  $U$  para  $U \rightarrow -\infty$  [34], encontramos que  $w_2 = n/2$  e, conseqüentemente  $w_\uparrow = w_\downarrow = 0$  e  $w_0 = (1 - n/2)$ , resultando em

$$S_{min}(n) = -\frac{n}{2} \log_2(n/2) - \left(1 - \frac{n}{2}\right) \log_2(1 - n/2). \quad (4.18)$$

A Figura 4.13 mostra que todos os dados de  $\chi$  em função do emaranhamento re-escalado  $S - S_{min}$  se sobrepõem em uma única reta, revelando portanto a universalidade da relação linear entre emaranhamento e susceptibilidade magnética em  $P = 0$ . Portanto através de medidas da susceptibilidade magnética em experimentos de superfluidos atuais descritos pelo modelo de Hubbard, pode-se quantificar o emaranhamento destes sistemas através da fórmula universal

$$S(n, \chi) = S_{min}(n) + \frac{\chi - a}{b}, \quad (4.19)$$

onde  $a = 0.032$  e  $b = -0.029$  são offset e slope do fitting linear da Figura 4.13.

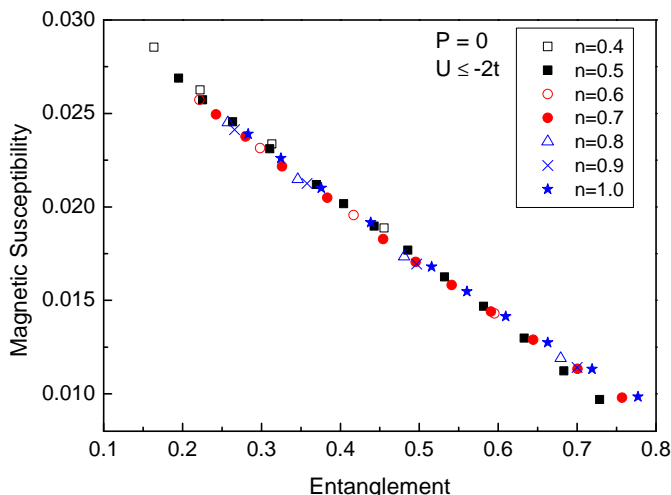


FIGURA 4.13: Mapeamento linear *universal* entre emaranhamento e susceptibilidade magnética em superfluidos convencionais.

#### 4.4 Transições de Fase Quânticas em Sistemas Desordenados

No primeiro trabalho que descrevo [137], investigamos o emaranhamento em superfluidos desordenados para os regimes da transição de superfluido para isolante (SIT). Mostramos que o emaranhamento detecta a transição SIT para todos os parâmetros – intensidade de desordem, concentração de impurezas e densidade de partículas. Encontramos que a SIT não requer uma intensidade de desordem mínima para ser induzida: qualquer pequeno grau de desordem é suficiente para o sistema sofrer a localização de Anderson. Essa transição é suave, contudo, enquanto que a SIT pela concentração de impurezas e pela densidade é de primeira ordem. Nossos resultados mostraram que para desordem suficientemente intensa, um tipo particular de localização surge em uma concentração crítica  $C_C$  ou densidade crítica  $n_C$ : este estado é marcado por emaranhamento nulo e portanto tem sido chamado de estado de localização total.

Consideramos cadeias superfluidas descritas pelo modelo de Hubbard, Eq. (1.1), com interação atrativa  $U < 0$ , inicialmente à temperatura nula. O potencial externo  $V_i$  é usado para simular a desordem, caracterizada por uma certa concentração  $C = (L_V/L) \times 100\%$  de impurezas pontuais [45, 156] de intensidade  $V$ , localizadas aleatoriamente ao longo da cadeia de tamanho  $L$ , de forma que  $L_V$  são os sítios com impurezas e  $L - L_V$  os sítios sem impurezas. Para tratar estatisticamente os resultados consideramos  $M = 100$  amostras para cada conjunto de parâmetros  $(C, V; U, n)$  e portanto as propriedades são as médias sobre as  $M$  amostras. Este tratamento implica uma quantidade de dados imensa, que seria proibitiva com métodos numéricos exatos,

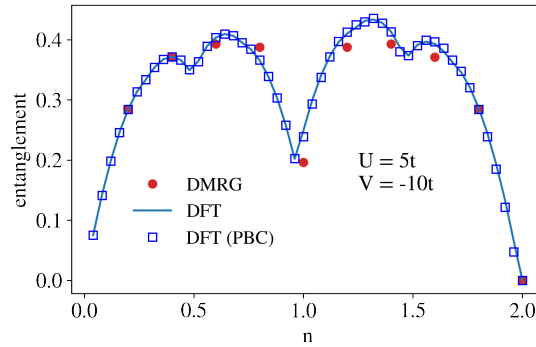


FIGURA 4.14: Emaranhamento obtido via DFT com nosso funcional para a entropia linear (Seção 3.3) – em condições de contorno aberta e periódica (PBC) – em comparação à entropia linear exata de DMRG para um caso típico de sistema desordenado em função da densidade de partículas.

como DMRG. Usamos em vez disso cálculos de DFT com o funcional da densidade que propusemos para a entropia linear, Seção 3.3. A Figura 4.14 mostra a excelente concordância entre os resultados deste approach com DFT com os mais custosos computacionalmente via DMRG.

Quando monitoramos a transição através da intensidade das impurezas em concentrações fixas, Figura 4.15, encontramos que o emaranhamento rapidamente satura com  $V$ :  $\mathcal{L}$  cai  $\sim 50\%$  para apenas  $V = -0.25t$  para qualquer  $C$ . Tal saturação é uma inequívoca assinatura da SIT: o superfluido inicial é transformado em um estado composto por dímeros localizados e fortemente acoplados, com nenhum efeito extra de aumentarmos  $|V|$ . Além disso, a rápida diminuição de  $\mathcal{L}$  para pequeno valor de  $V$  confirma a ausência de uma intensidade de desordem mínima para a SIT: até mesmo uma desordem fraca é capaz de induzir o superfluido para o estado de localização de Anderson.

A Fig. 4.15 também revela que o emaranhamento é não-monotônico com a concentração: para um fixo  $V$ ,  $\mathcal{L}$  diminui com  $C$ , até uma concentração crítica  $C = C_C$  ( $C_C = 40\%$  neste caso), e então aumenta novamente para  $C > C_C$ . Duas características sugerem que este  $C = C_C$  corresponde a um tipo especial de localização: *i*) o fato de que para fraca desordem ( $-3t < V < 0$ ) o emaranhamento se comporta diferente em função de  $V$  quando comparado com os outros  $C$ 's e *ii*)  $C = C_C$  é o único caso onde  $\mathcal{L} \rightarrow 0$  for  $V \rightarrow -\infty$ .

Analisando vários sistemas [138], tal como ilustramos na Figura 4.16 para  $V < 0$  e  $V > 0$ , encontramos que  $C_C$  corresponde à concentração cujo número de pares  $N/2$  é igual ao número de sítios mais favoráveis, isto é, aos  $L_V$  sítios impuros para  $V < 0$ , portanto:

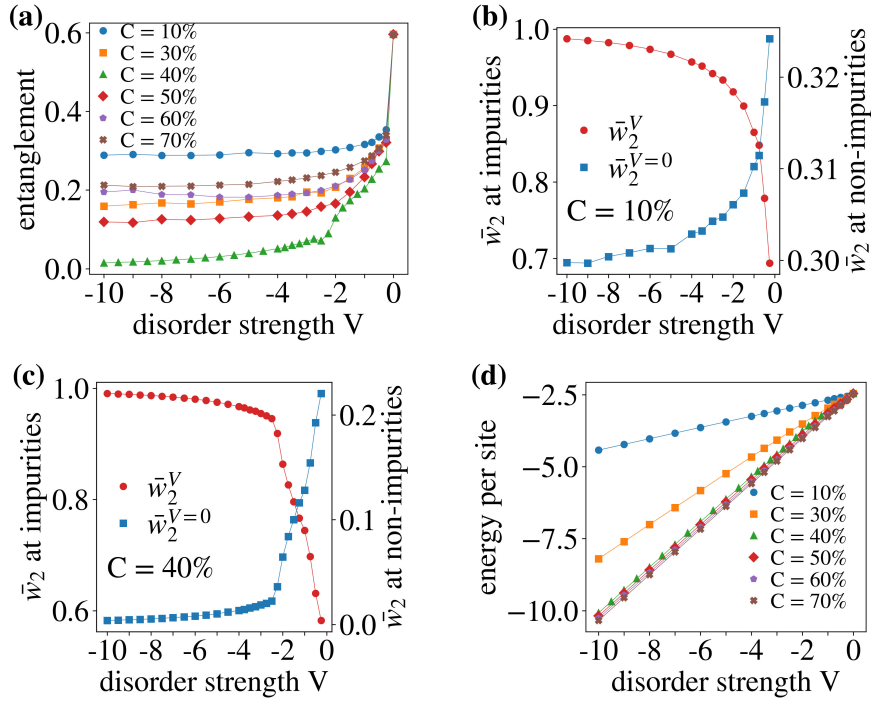


FIGURA 4.15: SIT induzida pela intensidade  $V$  da desordem: emaranhamento  $\mathcal{L}$  (a), dupla ocupação média em sítios impuros ( $\bar{w}_2^V$ ) e puros ( $\bar{w}_2^{V=0}$ ) para  $C = 10\%$  (b) e  $C = 40\%$  (c), e a energia do estado fundamental por sítio (d).

$$\begin{aligned}
 \text{para } V < 0 : \quad \frac{N}{2} &= L_V \\
 \frac{nL}{2} &= \frac{CL}{100} \\
 C_C &= 100 \frac{n}{2}, \tag{4.20}
 \end{aligned}$$

e aos  $L - L_V$  sítios mais favoráveis para  $V > 0$ , de forma que

$$\begin{aligned}
 \text{para } V > 0 : \quad \frac{N}{2} &= L_0 \\
 \frac{nL}{2} &= L - L_V = L - \frac{CL}{100} \\
 C_C &= 100 \left(1 - \frac{n}{2}\right). \tag{4.21}
 \end{aligned}$$

Esta interpretação é confirmada na Fig. 4.15 pelas probabilidades de dupla ocupação médias nos sítios com,  $\bar{w}_2^V = \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle / L_V$ , e sem impurezas,  $\bar{w}_2^{V=0} = \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle / (L - L_V)$ . Portanto

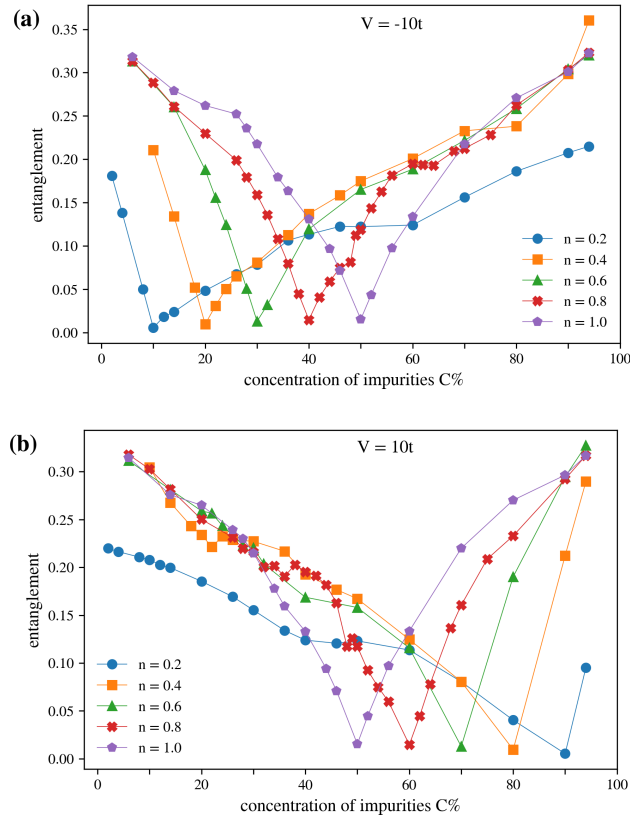


FIGURA 4.16: Emaranhamento de superfluidos desordenados  $\mathcal{L}^{LDA}$  em função da concentração de impurezas  $C$  para (a)  $V = -10t$  e (b)  $V = 10t$  para  $U = -5t$ .

a localização total em  $C_C$ , com um estado bem definido com probabilidade unitária de pares nos sítios mais favoráveis, é caracterizada por  $\mathcal{L} \rightarrow 0$  (para  $|V| \rightarrow \infty$ ), em contraste com a localização ordinária para  $C \neq C_C$  em que  $\mathcal{L}$  satura em valores finitos. Interessante notar que a energia do estado fundamental, na Fig.4.15d, não possui qualquer comportamento especial em função de  $V$ , sugerindo que a SIT desencadeada por  $V$  é de segunda ordem ou apenas um crossover [117] independentemente do tipo da localização, total ou ordinária.

Na Figura 4.17 analisamos o emaranhamento em função da concentração de impurezas para fraca, moderada e forte intensidade de desordem. Encontramos que um mínimo de intensidade de desordem  $V_{min}$  é necessário para a existência da localização total em  $C_C$ , marcada pela súbita não monotonicidade do emaranhamento e por  $\mathcal{L} \rightarrow 0$  para  $V \rightarrow -\infty$ . Para  $|V| < V_{min}$  (neste caso  $V_{min} \sim 3t$ ), observamos um comportamento bem diferente do comportamento do emaranhamento em função de  $C$ : a não monotonicidade não é abrupta, o mínimo de emaranhamento é maior que zero e não ocorre em  $C = C_C = 40\%$ . Este comportamento revela portanto que a localização total é frustrada para  $|V| < V_{min}$ : a intensidade da desordem não é suficiente para localizar totalmente (no espaço real) os dímeros. Esta interpretação é confirmada pelas probabilidades das Figuras 4.17b e 4.17c:  $\bar{w}_2^{V=0}$  é sempre maior que zero para  $V = -t$ .

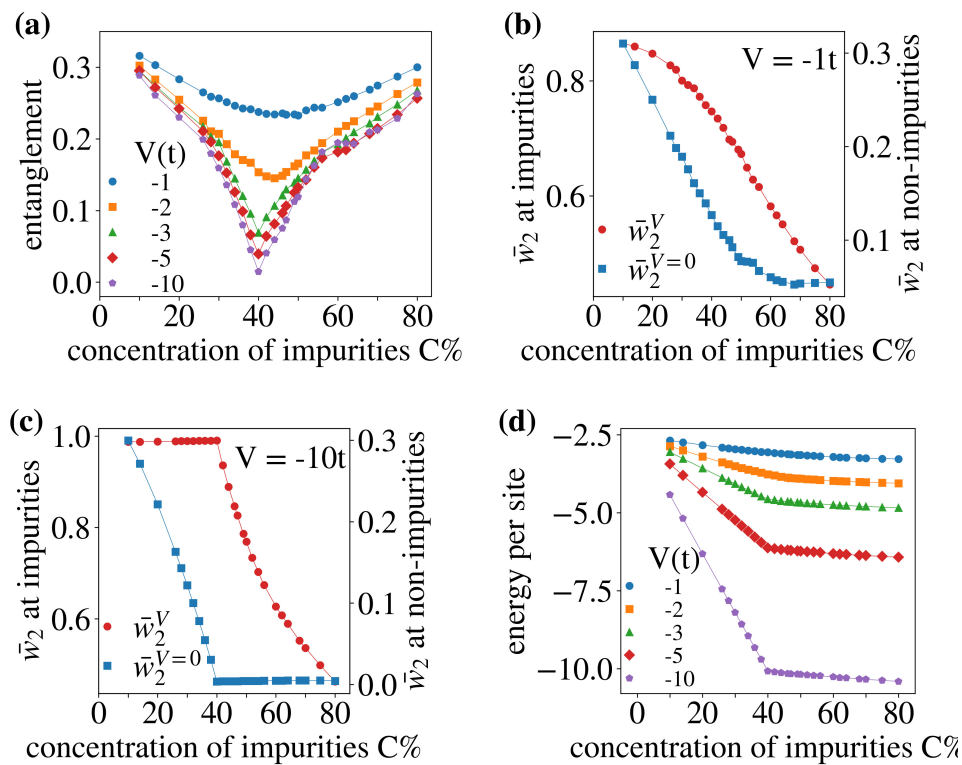


FIGURA 4.17: SIT induzida pela concentração de impurezas  $C\%$ : emaranhamento  $\mathcal{L}$  (a), dupla ocupação média em sítios impuros ( $\bar{w}_2^V$ ) e puros ( $\bar{w}_2^{V=0}$ ) para  $V = -t$  (b) e  $V = -10t$  (c), e a energia do estado fundamental por sítio (d).

Para  $|V| > V_{min}$  a energia do estado fundamental, Fig.4.17d, revela a natureza da transição de localização ordinária para a localização total induzida por  $C$ : a energia tem uma descontinuidade na primeira derivada em  $C = C_C$  assim caracterizando uma transição de fase quântica de primeira ordem [117]. Para  $|V| < V_{min}$  a curva da energia é suave, sem descontinuidade na primeira e na segunda derivada, sugerindo que a transição não ocorre, o que é consistente com a ausência do estado totalmente localizado.

Na Figura 4.18 monitoramos a transição em função da densidade de partículas para desordem fraca e forte. Observamos que para  $V$  suficientemente intenso, todas as características observadas anteriormente em  $C_C = 100(n/2)\%$  são agora encontradas na densidade crítica  $n_C = 2C/100$ : emaranhamento tem uma não monotonicidade abrupta em  $n = n_C$ , o sistema é totalmente localizado em  $n_C$  com  $\mathcal{L} \rightarrow 0$  (para  $V \rightarrow -\infty$ ), e localização ordinária com saturação do emaranhamento em valores finitos,  $\mathcal{L} > 0$ , para  $n < n_C$ . Para fraca desordem  $V = -t$ , nenhuma dessas características é observada, emaranhamento simplesmente diminui monotonicamente com a diminuição da densidade. Isto confirma, portanto, a existência de um mínimo de intensidade de desordem para a qual a localização total é induzida também por  $n$ .

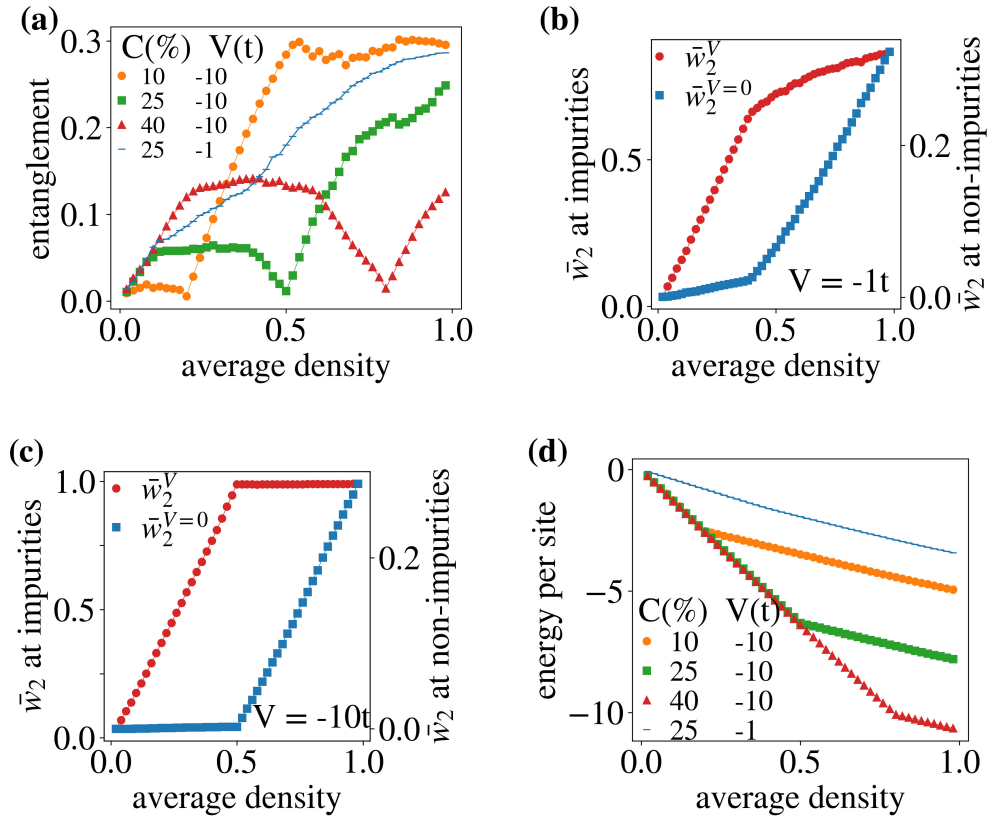


FIGURA 4.18: SIT induzida pela densidade  $n$  de partículas: emaranhamento  $\mathcal{L}$  (a), dupla ocupação média em sítios impuros ( $\bar{w}_2^V$ ) e puros ( $\bar{w}_2^V=0$ ) para  $V = -t$  (b) e  $V = -10t$ (c), e a energia do estado fundamental por sítio (d).

Investigamos também o papel da intensidade da interação atrativa  $U$  na SIT [138]. Poderíamos imaginar que uma interação maior entre as partículas pudesse de alguma forma reforçar ou atenuar a SIT dependendo do interplay entre  $U < 0$  e  $V$ , se competem entre si ( $V > 0$ ) ou se atuam juntos ( $V < 0$ ). Surpreendentemente encontramos que para forte desordem,  $U$  não tem qualquer impacto sobre  $C_C$ , seja para desordem atrativa ou repulsiva: a concentração crítica para a localização total se mantém em  $C_C = 100(n/2)\%$  para  $V \rightarrow -\infty$  e em  $C_C = (1 - n/2)100\%$  para  $V \rightarrow \infty$ .

Para moderada desordem, Fig. 4.19c revela que embora ainda haja um mínimo de emaranhamento em  $C_C$ , o grau de emaranhamento ainda é significativamente maior que zero para fraca interação  $U = -t$ . Assim para desordem moderada há um mínimo de interação,  $U_{min} \sim -3t$  neste caso, necessário para que o sistema atinja o estado totalmente localizado em  $C_C$ . Em contrapartida, para fraca desordem ( $V = -t$ ), como mostra a Fig. 4.19d, até mesmo uma interação extremamente forte, como  $U = -10t$ , não é suficiente para desencadear a transição para o estado totalmente localizado. Isto se deve ao fato de que para  $V$  pequeno os sítios impuros são

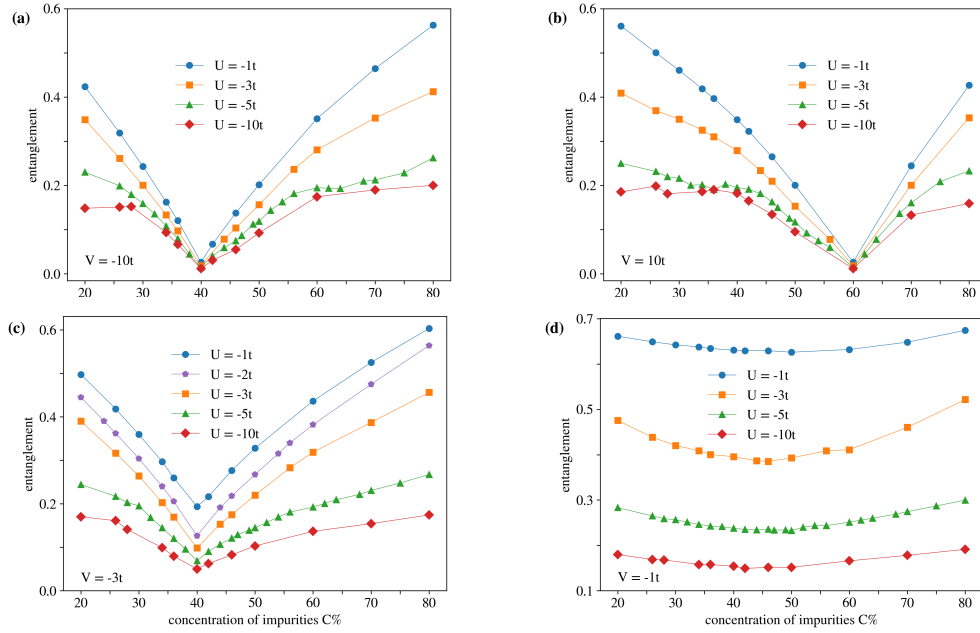


FIGURA 4.19: Emaranhamento em superfluidos desordenados  $\mathcal{L}^{LDA}$  em função da concentração de impurezas  $C$  para forte (a,b), moderada (c) e fraca (d) intensidade de desordem  $V$ . Em todos os casos  $n = 0.8$ .

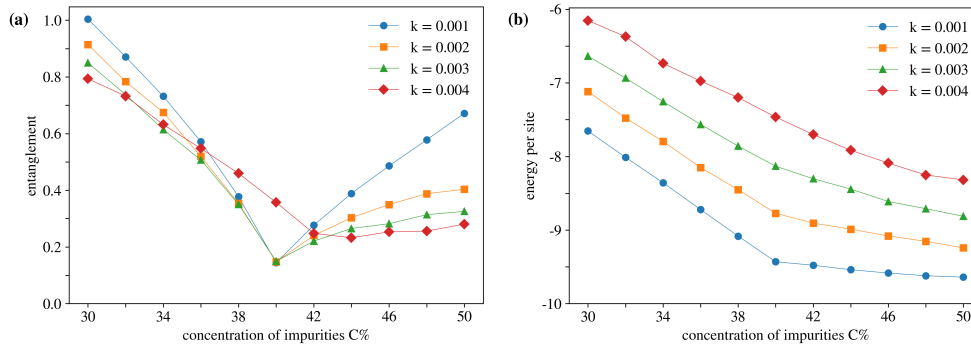


FIGURA 4.20: (a) Emaranhamento em superfluidos desordenados (com  $U = -5t$ ,  $V = -10t$  e  $n = 0.8$ ) e confinados harmonicamente ( $k(i - i_0)^2$ ) e (b) a respectiva energia do estado fundamental por sítio.

praticamente igualmente favoráveis aos dímeros quanto os sítios sem impureza. Todas essas características claramente mostram que  $V$  domina  $U$  quanto ao surgimento do estado totalmente localizado na SIT.

Na Figura 4.20 mostramos o impacto do confinamento harmônico,  $V_i = k(i - i_0)^2$  (com curvatura  $k$ , centrado no sítio  $i_0 = 50.5$  em cadeias com  $L = 100$  sítios) na SIT. Essa análise é essencial para que nossos resultados possam ser usados também em experimentos de átomos frios, onde os átomos são confinados em potenciais harmônicos. Vemos que para  $k \lesssim 0.003$  o sistema ainda atinge o estado de localização total,  $\mathcal{L} \rightarrow 0$  para  $V \rightarrow -\infty$ , na mesma concentração  $C_C = 100(n/2)\%$  (para  $V < 0$ ). Contudo, para confinamentos maiores,  $k > 0.003$ , a assinatura no emaranhamento desaparece: este satura em vez disso em valores finitos,  $\mathcal{L} \sim 0.25$  para  $C$  um



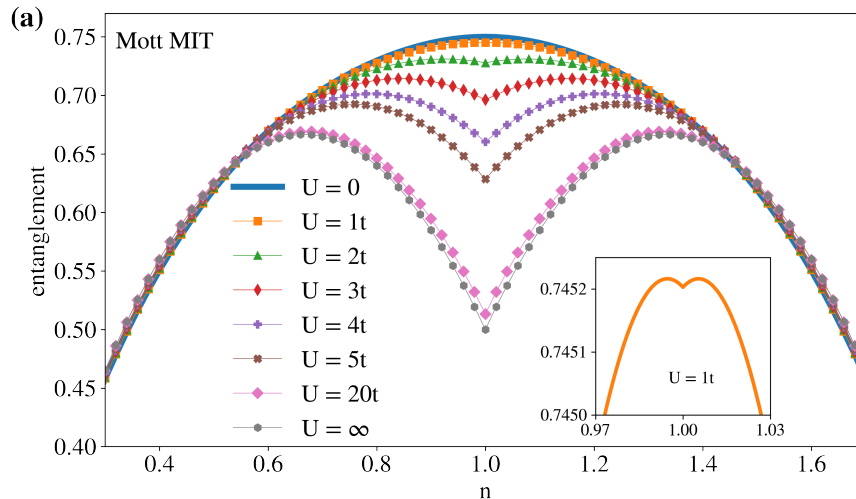


FIGURA 4.21: Emaranhamento  $\mathcal{L}$  em função da densidade de partículas para nanoestruturas interagentes mas não desordenadas (Mott MIT).

pouco maior que  $C_C$ . Isto é confirmado pela energia do estado fundamental, Fig.4.20b, que mostra uma leve assinatura em  $C_C$  para todas as curvas, exceto em  $k = 0.004$ .

Analisamos também, via emaranhamento [139], a transição metal-isolante (MIT) tanto devido a Mott (via interação) quanto devido a Anderson (via desordem). Encontramos que o emaranhamento diminui em relação ao caso *clean* ( $U = 0, V = 0$ ) com um único mínimo em uma certa densidade crítica de Mott e de Anderson quando  $U$  ou  $V$ , respectivamente, é ligado individualmente. Enquanto o mínimo de emaranhamento relacionado à Mott-MIT satura em valores finitos, caracterizando portanto um estado parcialmente localizado; o mínimo relacionado à Anderson-MIT atinge zero para desordem suficientemente forte, caracterizando o estado de localização total. Na presença de ambos, desordem e interação, encontramos: *i*) que a densidade crítica de Mott é deslocada por um fator proporcional à concentração de impurezas, *ii*) a densidade crítica de Anderson é mantida, mas a presença de interação requer uma intensidade maior de desordem para induzir o sistema à localização total, e *iii*) surge uma terceira densidade crítica exclusiva da presença simultânea de desordem e interação, que é associada a uma MIT Mott-like, devido a um fenômeno de densidade efetiva.

Do ponto de vista da modelagem das nanoestruturas, a diferença entre os superfluidos com transição MIT e os metais com transição SIT é que agora usamos o modelo de Hubbard com  $U > 0$ . Todos os demais parâmetros da nanoestrutura,  $n$ ,  $C$  e  $V$  são definidos da mesma forma, e portanto usamos o mesmo approach (Seção 3.3) via DFT.

Inicialmente analisamos o emaranhamento nos dois tipos de MIT isoladamente, ou seja, na Mott MIT que ocorre na presença de  $U > 0$  e  $V = 0$ ; e na Anderson MIT na presença de  $V \neq 0$  e  $U = 0$ . A Figura 4.21, para Mott MIT, mostra que a medida que a interação aumenta,  $\mathcal{L}$  diminui

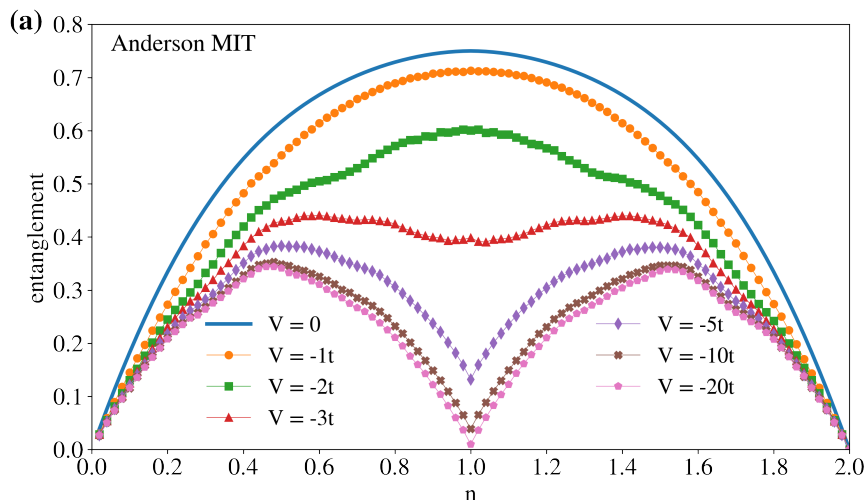


FIGURA 4.22: Emaranhamento  $\mathcal{L}$  em função da densidade de partículas para nanoestruturas desordenadas mas não interagentes (Anderson MIT) para  $C = 50\%$ .

na região em torno de  $n = 1$ . Em particular, para qualquer  $U > 0$ , surge um mínimo local na densidade crítica  $n_C^U = 1$  e este mínimo de emaranhamento fica mais pronunciado ao aumentarmos  $U$ , com saturação em  $\mathcal{L} = 0.5$  para  $U \rightarrow \infty$ . Este mínimo de emaranhamento em  $n_C^U = 1$  é a assinatura da transição Mott MIT [213]: a interação congela os graus de liberdade translacionais com máxima probabilidade de ocupação simples ( $w_\uparrow = w_\downarrow \rightarrow 0.5$ ) e a partir de então aumentar  $U$  não produz qualquer efeito adicional. Este emaranhamento remanescente,  $\mathcal{L}(U \rightarrow \infty) = 0.5$ , é associado aos graus de liberdade de spin, que não estão congelados, assim concluímos que a Mott MIT leva o sistema a um estado parcialmente localizado.

Em contraste, a Figura 4.22 para a transição Anderson MIT mostra que o emaranhamento diminui com a intensidade da desordem para *todas as densidades*. Esta diminuição de emaranhamento caracteriza a localização de Anderson: o sistema é localizado para qualquer  $V > 0$ . A Fig. 4.22 revela também um mínimo de emaranhamento na densidade crítica  $n_C^V = 2C/100$  para  $|V| \gtrsim 3t$ . Este  $n_C^V$  corresponde às nanoestruturas onde o número de sítios impuros com  $V < 0$  (e sítios puros, para  $V > 0$ ) é igual a duas vezes o número de partículas, de forma semelhante ao que observamos antes para SIT. Portanto a queda de  $\mathcal{L}$  em  $n_C^V$  caracteriza a localização total da Anderson MIT: a desordem atrativa congela os graus de liberdade das partículas favorecendo a dupla ocupação nos sítios impuros (para  $V > 0$  favorece a dupla ocupação nos sítios puros, portanto neste caso  $n_C^V = 1 - 2C/100$ ). Mas note que, diferentemente da Mott MIT, a Anderson MIT pode levar o sistema ao estado de localização total se a desordem for suficientemente forte.

Na Figura 4.23 analisamos então o cenário em quem ambos, interação e desordem estão presentes nas nanoestruturas. Vemos que a interação afeta a Anderson MIT: embora a densidade crítica  $n_C^V$  se mantenha, i. e.  $n_C^{V \rightarrow U} = n_C^V = 2C/100$ , a presença de  $U$  requer um potencial de

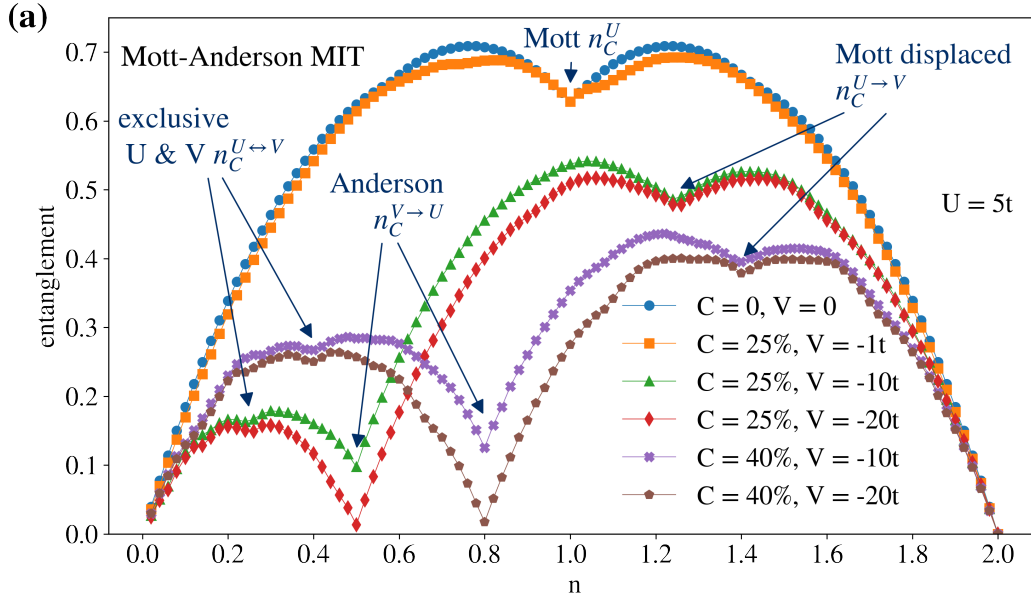


FIGURA 4.23: Emaranhamento em função da densidade para nanoestruturas interagentes e desordenadas (Mott-Anderson MIT).

desordem maior para levar o sistema à localização total (compare o valor do emaranhamento no mínimo Anderson MIT para os casos com  $U > 0$  e  $U = 0$ ). Observamos que baixo grau de desordem ( $V = -1t$ ) praticamente não influencia a Mott MIT, o emaranhamento mínimo é mantido em  $n_C^U = 1$ . Porém, à medida que  $V$  aumenta, surge impacto da desordem na Mott MIT: *i*) o emaranhamento em  $n_C^{U \rightarrow V}$  não é mais limitado a  $\mathcal{L} > 0.5$  (como no caso  $V = 0$ ), já que agora  $V$  contribui congelando também os graus de liberdade de spin, e *ii*) a densidade crítica para a transição de Mott é deslocada para  $n_C^{U \rightarrow V} > 1$ .

Esse deslocamento reflete o fato de que a densidade efetiva nos sítios sem impureza (portanto metálicos),  $n_{V=0}$ , é menor que  $n$ , uma vez que as partículas são atraídas para os sítios impuros ( $V < 0$ ). Assim, a densidade total da nanoestrutura deve ser  $n > 1$  para que a densidade efetiva nos sítios sem impureza seja  $n_{V=0} = 1$  e então tenhamos Mott MIT. Para determinar  $n_C^{U \rightarrow V}$  consideramos que a maioria das partículas acumulam nos  $L_V$  sítios atrativos (até no máximo 2 por sítio, logo  $2L_V$  ao todo), portanto deixando para os  $L - L_V$  sítios restantes apenas  $N - 2L_V$  partículas. Assim a densidade efetiva é dada por  $n_{V=0} \equiv (N - 2L_V)/(L - L_V)$  e a densidade crítica  $n_C^{U \rightarrow V}$  será a densidade média  $n$  para a qual  $n_{V=0} = 1$ . Em termos da concentração de impurezas temos  $n_C^{U \rightarrow V} = 1 + C/100$ , o que concorda com nossos resultados numéricos da Fig.4.23.

Perceba entretanto que um fenômeno semelhante de densidade efetiva igual a 1 deve ocorrer também nos sítios com impureza: para  $V < 0$  suficientemente forte, haverá um valor de densidade média  $n < 1$  para o qual a densidade efetiva nos sítios impuros,  $n_V \equiv N/L_V$ , seja igual a 1, de forma que  $n = N/L < n_V$ . Isto portanto significa que deve haver uma outra densidade

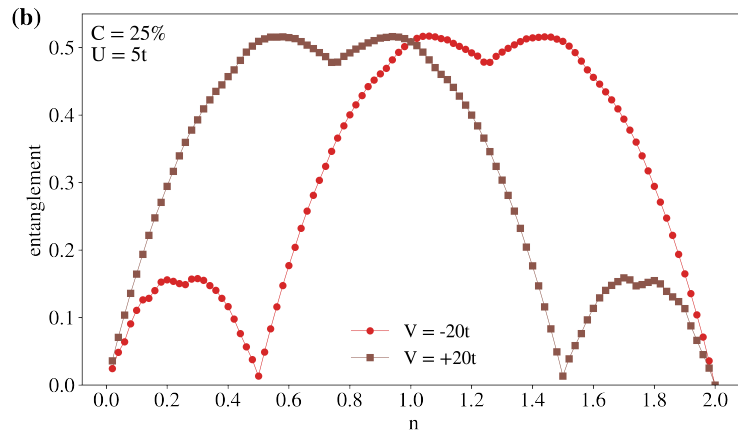


FIGURA 4.24: Simetria partícula-buraco quando mudamos de  $-V$  para  $+V$ : as densidades críticas (Tabela 4.1) podem ser obtidas pela substituição  $n_C \rightarrow \tilde{n}_C = 2 - n_C$ .

TABLE 4.1: Densidades críticas para  $V < 0$ . Para  $V > 0$  basta substituir  $n_C \rightarrow \tilde{n}_C = 2 - n_C$ .

Mott MIT $U > 0, V = 0$	$n_C^U = 1$
Anderson MIT $ V  \gtrsim 3t, U = 0$	$n_C^V = 2C/100$
Mott-Anderson MIT $U > 0,  V  \gtrsim 3t$	$n_C^{U \rightarrow V} = 1 + C/100$ $n_C^{V \rightarrow U} = n_C^V = 2C/100$ $n_C^{U \leftrightarrow V} = C/100$

crítica  $n_C^{U \leftrightarrow V} = C/100$  associada a uma transição MIT *Mott-like* induzida pela desordem. De fato podemos ver em todas as curvas da Fig. 4.23 um mínimo mais suave em  $n_C^{U \leftrightarrow V}$  que estava ausente nos casos clean (só  $U$  ou só  $V$ ) e é uma transição Mott-like MIT.

Enfatizamos que todas as densidades críticas obtidas aqui para  $V < 0$ , como sumariza a Tabela 4.1, podem ser obtidas para  $V > 0$  simplesmente através de uma transformação partícula-buraco, substituindo  $n_C \rightarrow \tilde{n}_C = 2 - n_C$ , como confirmam os resultados numéricos da Figura 4.24.

Nas Figuras 4.25a e 4.25b, mostramos o impacto da temperatura na Anderson e na Mott-like MIT [140]: à medida que a temperatura aumenta, os dois mínimos – em  $C = 100n/2 = 37.5\%$  (Anderson) e em  $C = 100n = 75\%$  (Mott-like) – são atenuados. Os resultados revelam entretanto que a localização de Anderson persiste para temperaturas mais elevadas do que a Mott-like MIT. Porém para  $T = 20$  não existe mais qualquer localização no sistema, uma vez que o emaranhamento torna-se máximo para qualquer concentração.

Finalmente, na Figura 4.25c analisamos o efeito da magnetização  $m = n_\uparrow - n_\downarrow \neq 0$  no mínimo de emaranhamento relacionado à Anderson MIT. Observamos que o mínimo em  $C_C = 100n/2 = 50\%$  para  $m = 0$  é agora dividido em dois mínimos: um em  $C_C = 100n_\uparrow$  e o outro em  $C_C = 100n_\downarrow$ .

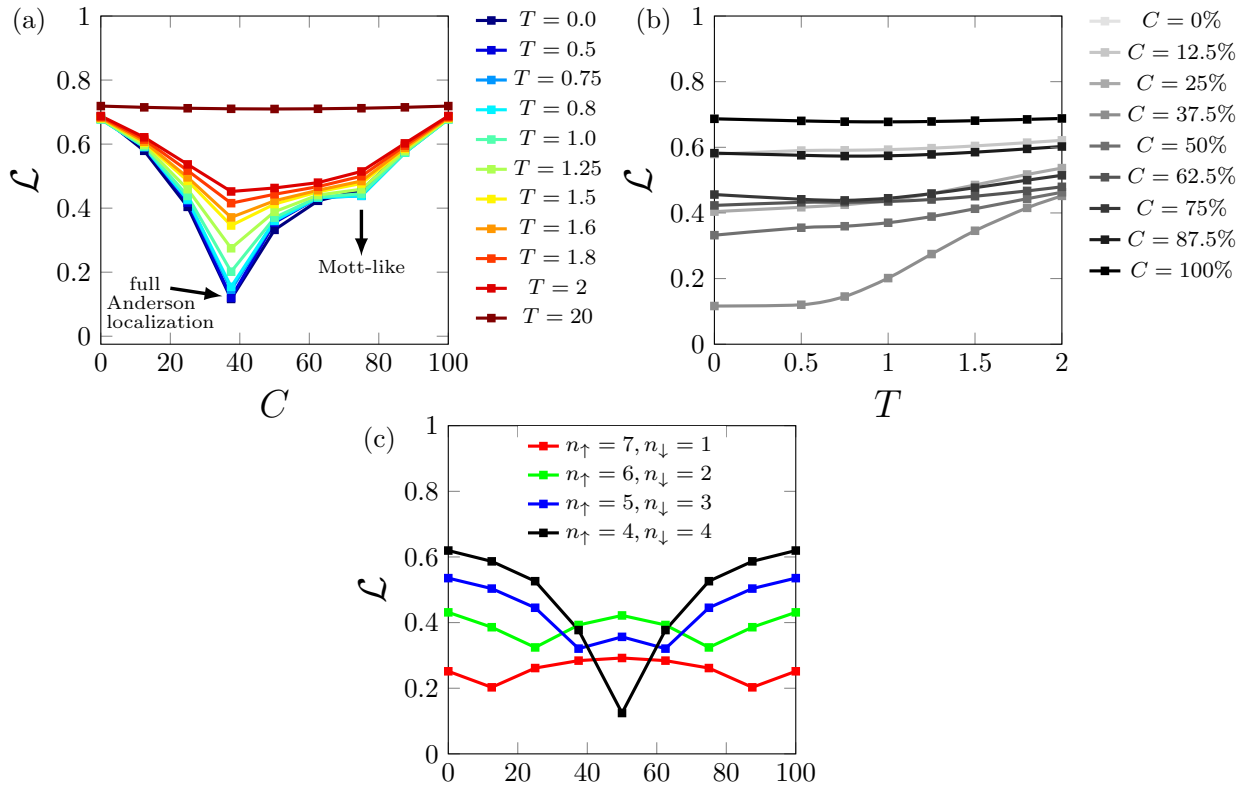


FIGURA 4.25: (a), (b) Emaranhamento para  $n = 0.75$ , várias concentrações e temperaturas. (c) Emaranhamento para várias magnetizações  $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$  para  $n = 1.0$ . Em todos os casos temos dados de diagonalização exata para cadeias pequenas,  $L = 8$ ,  $U = 5t$ ,  $V = -10t$ .

Nossos resultados revelam portanto que há um mínimo para cada uma das espécies (up e down), com densidades críticas  $n_{C,\uparrow} = L_V$  e  $n_{C,\downarrow} = L_V$ . Para o caso não magnetizado esses dois mínimos coincidem em  $n_C = 2L_V$ .



## 5

## Considerações Finais

Encerramos esta síntese crítica e sistemática das nossas principais contribuições com algumas considerações. No doutorado, iniciamos de forma pioneira nossas pesquisas na interface entre a Física da Matéria Condensada e a Teoria de Informação Quântica. Temos desbravado brechas nas paredes que separam as duas áreas do conhecimento em busca de conexões entre conceitos a priori independentes.

Mas é importante enfatizar que esta interface não era *e não se tornou* principal objeto de estudo do orientador de doutorado (Klaus Capelle), tão pouco do supervisor de pós-doutorado (Andreas Buchleitner). Tal fato demonstra nossa originalidade, liderança e independência desde o princípio, que se consolidou nos anos posteriores, com diversos desdobramentos.

Entre eles destacamos o claro movimento da pesquisa, inicialmente focada em fundamentos e questões básicas, para a pesquisa mais aplicada, em desenvolvimento de metodologias e o estudo de propriedades de nanomaterias com potencial para desenvolvimento tecnológico.

Este movimento reflete em parte nossa inserção no Instituto de Química - UNESP, cujos projetos têm tido caráter aplicado e ambicioso visando tecnologias quânticas. Desde a contratação na UNESP, 2013, temos atuado em implantar, motivar e construir pesquisas pioneiras, sólidas e de relevância nesta interface entre conhecimentos.

Nossa relevância científica internacional se evidencia, por exemplo, com o recente convite da *Physics* (revista da American Physical Society, APS) para a redação de um artigo *Viewpoint* (em que experts da área escrevem de maneira acessível resultados recentes) em dinâmica quântica [217].





# Bibliography

- [1] E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
- [2] M. B. Salamon and M. Jaime, Rev. Mod. Phys. **73**, 583 (2001).
- [3] J. Quintanilla and C. Hooley, Physics World **22**, 32 (2009).
- [4] J. I. Cirac and P. Zoller, Science **301**, 176 (2003).
- [5] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, Rev. Mod. Phys. **80**, 885 (2008).
- [6] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii and S. Stringari, Rev. Mod. Phys. **80**, 1215 (2008).
- [7] I. D'Amico, J. P. Coe, V. V. França, and K. Capelle, Phys. Rev. Lett. **106**, 050401 (2011).
- [8] I. D'Amico, J. P. Coe, V. V. França, and K. Capelle Phys. Rev. Lett. **107**, 188902 (2011).
- [9] P. M. Sharp and I. D'Amico, Phys. Rev. B **89**, 115137 (2014).
- [10] V. V. França, J. P. Coe, and I. D' Amico, Sci. Rep. **8**, 664 (2018).
- [11] P. M. Sharp and I. D'Amico, Phys. Rev. A **92**, 032509 (2015).
- [12] P. M. Sharp and I. D'Amico, Phys. Rev. A **94**, 062509 (2016).
- [13] I. Nagy and I. Aldazabal Phys. Rev. A **84**, 032516 (2011).
- [14] J. P. Coe, V. V. França and I. D'Amico, EPL **110**, 63001 (2015).
- [15] Á. Nagy and E. Romera Phys. Rev. A **88**, 042515 (2013).
- [16] A. H. Skelt, R. W. Godby, I. D'Amico, Braz. J. Phys., **48**, 467(2018).
- [17] Simone Marocchi, Stefano Pittalis, and Irene D'Amico Phys. Rev. Materials **1**, 043801 (2017).
- [18] J. Hubbard, Proc. R. Soc London. Series A **276**, 238 (1963).
- [19] Klaus Capelle, Vivaldo L. Campo Jr., Phys. Rep. **528**, 91 (2013).
- [20] H. Tasaki, J. Phys.: Condens. Matter **10** 4353 (1998).
- [21] T. Paiva and R. R. dos Santos, Phys. Rev. B **65**, 153101 (2002); *ibid* **62**, 7007 (2000); **58**, 9607 (1998); Phys. Rev. Lett. **76**, 1126 (1996).
- [22] M. Machida, S. Yamada, Y. Ohashi, and H. Matsumoto, Physica C **445-448**, 90 (2006).
- [23] O. Derzhko, J. Richter, A. Honecker, M. Maksymenko, and R. Moessner, Phys. Rev. B **81**, 014421 (2010).
- [24] J. Fernández-Rossier, J\_J Palacios, Phys. Rev. Lett. **99**, 177204 (2007).
- [25] J. P. Coe, V. V. França, and I. D'Amico, Phys. Rev. A **81**, 052321 (2010).
- [26] O. V. Yazyev, Rep. Prog. Phys. **73**, 056501 (2010).

- [27] J. P. Coe, V. V. França, and I. D'Amico, *EPL* **93**, 10001 (2011).
- [28] J. P. Coe, V. V. França, and I. D'Amico, *J. Phys. Conf. Series* **286**, 012048 (2011).
- [29] T. Mendes-Santos, T. Paiva, R. R. dos Santos, *Phys. Rev. B* **87**, 214407 (2013).
- [30] J. Bardeen, L. N. Cooper, J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **106**, 162 (1957).
- [31] G. G. Batrouni, M. H. Huntley, V. G. Rousseau, R. T Scalettar, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 116405 (2008).
- [32] Vettchinkina, V., Kartsev, A., Karlsson, D., & Verdozzi, C. *Phys. Rev. B* **87**, 115117 (2013).
- [33] V. V. França, K. Capelle, *Phys. Rev. B* **82**, 134405 (2010).
- [34] França, V. V., Vieira, D. & Capelle, K. *New J. Phys.* **14** (2012).
- [35] E. H. Lieb, F. Y. Wu, *Phys. Rev. Lett.* **20**, 1445 (1968).
- [36] R. Inoue, K. Muranaga, H. Takayanagi, E. Hanamura, M. Jo, T. Akazaki, and I. Suemune, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 157002 (2011).
- [37] A. M. Kaiser et al., *Phys. Rev. Lett.* **107**, 116402 (2011).
- [38] M. Lubasch, V. Murg, U. Schneider, J. I. Cirac, and M. C. Banuls, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 165301 (2011).
- [39] S. Trotzky, Yu-Ao Chen, U. Schnorrberger, P. Cheinet, and I. Bloch, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 265303 (2010).
- [40] M. Valiente, M. Küster and A. Saenz, *EPL* **92**, 100001 (2010).
- [41] M. White, M. Pasienski, D. McKay, S. Q. Zhou, D. Ceperley, and B. DeMarco, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 055301 (2009).
- [42] Oleg V. Yazyev, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 037203 (2008).
- [43] André L. Malvezzi, Thereza Paiva, and Raimundo R. dos Santos, *Phys. Rev. B* **66**, 064430 (2002).
- [44] P. Avouris, Z. H. Chen, and V. Perebeinos, *Nature Nanotechnology* **2**, 605 (2007).
- [45] V. V. França, and I. D'Amico, *Phys. Rev. A* **83**, 042311 (2011).
- [46] A. Wagner, C. Bruder and E. Demler, *Phys. Rev. A* **84**, 063636 (2011).
- [47] I. Affleck, N. Laflorencie, and E.S. Sørensen, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504009 (2009).
- [48] E. S. Sørensen, M. S. Chang, N. Laflorencie, and J. Affleck, *J. Stat. Mech.* P08003 (2007).
- [49] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).
- [50] U. Schollwöck, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 2844 (2005).
- [51] Hohenberg, P. & Kohn, W. *Phys. Rev.* **136**, B864-B871 (1964).
- [52] Kohn, W. *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253-1266 (1999).
- [53] Capelle, K. *Braz. J. Phys.* **36**, 1318-1343 (2006).
- [54] Kohn, W. & Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133-A1138 (1965).

- [55] C. A. Custodio, E. R. Filletti, V. V. França, *Scientific Reports* **9**, 1886 (2019).
- [56] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 865 (2009).
- [57] A. Acin et al., *New J. Phys.* **20**, 080201 (2018).
- [58] S. P. Walborn, P. H. Souto Ribeiro, L. Davidovich, F. Mintert, and A. Buchleitner, *Phys. Rev. A* **75**, 032338 (2007).
- [59] D. Porras and J. I. Cirac, *Phys. Rev. A* **78**, 053816 (2008).
- [60] V. V. França, G. A. Prata, *Phys. Rev. A* **75**, 043604 (2007).
- [61] J. Eisert, M. Cramer, and M. Plenio, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 277 (2010).
- [62] K. Kim, M.-S. Chang, S. Korenblit, R. Islam, E. E. Edwards, J. K. Freericks, G.-D. Lin, L.-M. Duan, C. Monroe, *Nature* **465**, 590 (2010).
- [63] P. Jurcevic, B. P. Lanyon, P. Hauke, C. Hempel, P. Zoller, R. Blatt, C. F. Roos, *Nature* **511**, 202 (2014).
- [64] T. Lanting, A. J. Przybysz, A. Yu. Smirnov, F. M. Spedalieri, M. H. Amin, A. J. Berkley, R. Harris, F. Altomare, S. Boixo, P. Bunyk et al, *Phys. Rev. X* **4**, 021041 (2014).
- [65] T. Fukuhara, S. Hild, J. Zeiher, P. Schauss, I. Bloch, M. Endres, C. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 035302 (2015).
- [66] A. J. Daley, H. Pichler, J. Schachenmayer, P. Zoller, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 020505 (2012).
- [67] R. Islam, R. Ma, P. M. Preiss, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, and M. Greiner, *Nature* **528**, 77 (2015).
- [68] T. Brydges, A. Elben, P. Jurcevic, B. Vermersch, C. Maier, B. P. Lanyon, P. Zoller, R. Blatt, C. F. Roos, *Science* **364**, 260 (2019).
- [69] N. Friis, G. Vitagliano, M. Malik, M. Huber, *Nature Rev. Phys.* **1**, 72 (2019).
- [70] P. Hauke, M. Heyl, L. Tagliacozzo, P. Zoller, *Nature Phys.* **12**, 778 (2016).
- [71] D. Arisa and V. V. França, *Phys. Rev. B* **101**, 214522 (2020).
- [72] P. Zanardi, *Phys. Rev. A* **65**, 042101 (2002).
- [73] Mark R. Dowling, Andrew C. Doherty, and Howard M. Wiseman, *Phys. Rev. A* **73**, 052323 (2006).
- [74] J. I. Latorre and A. Riera, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42** 504002 (2009).
- [75] P. Calabrese and J. Cardy, *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504005 (2009).
- [76] S. S. Deng, S. J. Gu, and H. Q. Lin, *Phys. Rev. B* **74**, 045103 (2006).
- [77] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 227902 (2003).
- [78] V. E. Korepin, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 096402 (2004).
- [79] P. Calabrese and J. Cardy, *J. Stat. Mech.* P06002 (2004).
- [80] V. V. França, K. Capelle, *Phys. Rev. A* **77**, 062324 (2008).
- [81] T. Brünner, E. Runge, A. Buchleitner, V. V. França, *Phys. Rev. A* **87**, 032311 (2013).

- [82] Shi-Jian Gu, Ho-Man Kwok, Wen-Qiang Ning, Hai-Qing Lin, *Phys. Rev. B* **77**, 245109 (2008).
- [83] D. Larsson, H. Johannesson, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 196406 (2005); *Phys. Rev. Lett.* **96**, 169906(E) (2006).
- [84] Wen-Long You, Ying-Wai Li, Shi-Jian Gu, *Phys. Rev. E* **76**, 022101 (2007).
- [85] T. Maslowski, N. Sedlmayr, *Phys. Rev. B* **101**, 014301 (2020).
- [86] J. P. Coe, V. V. França, I. D'Amico, *J. Phys. Conf. Series* **286**, 012048 (2011); *J. Phys. Conf. Series* **303**, 012110 (2011).
- [87] J. Ren, G.-H. Liu, W.-L. You, *J. Phys.: Condens. Matter* **27**, 105602 (2015).
- [88] J. Silva-Valencia and A. M. C. Souza, *Phys. Rev. A* **85**, 033612 (2012).
- [89] A. M. Souza, M. S. Reis, D. O. Soares-Pinto, I. S. Oliveira, R. S. Sarthour, *Phys. Rev. B* **77**, 104402 (2008).
- [90] T. Chakraborty, H. Singh, D. Das, T. K. Sen, C. Mitra, *Phys. Letters A* **376**, 2967 (2012).
- [91] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, R. Fazio, *Nature* **416**, 608 (2002).
- [92] A. L. Malvezzi, G. Karpat, B. Çakmak, F. F. Fanchini, T. Debarba, R. O. Vianna, *Phys. Rev. B* **93**, 184428 (2016); M. F. Silva, N. A. Lima, A. L. Malvezzi and K. Capelle, *Phys. Rev. B* **71**, 125130 (2005).
- [93] E. Canovi, E. Ercolessi, P. Naldesi, L. Taddia, D. Vodola, *Phys. Rev. B* **89**, 104303 (2014).
- [94] J. Stasinska, B. Rogers, M. Paternostro, G. De Chiara, A. Sanpera, *Phys. Rev. A* **89**, 032330 (2014).
- [95] G. Canella, V. V. França, *Sci. Rep.* **9**, 15313 (2019); *Physica A* **545**, 123646 (2020).
- [96] P. Fromholz, G. Magnifico, V. Vitale, T. Mendes-Santos, M. Dalmonte *Phys. Rev. B* **101**, 085136 (2020).
- [97] L. Balents, *Nature (London)* **464**, 199 (2010).
- [98] J. Smith, A. Lee, P. Richerme, B. Neyenhuys, P. W. Hess, P. Hauke, M. Heyl, D. A. Huse, and C. Monroe, *Nat. Phys.* **12**, 907 (2016).
- [99] V. V. França, D. Hörndlein, and A. Buchleitner, *Phys. Rev. A* **86**, 033622 (2012).
- [100] T. de Picoli, I. D'Amico, and V. V. França, *Braz. J. Phys.* **48**, 472 (2018).
- [101] V. V. França, *Phys. A* **475**, 82 (2017).
- [102] R. Nandkishore, D. A. Huse, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **6**, 15 (2015).
- [103] P. Fulde, R. A. Ferrell, *Phys. Rev.* **135**, A550 (1964).
- [104] A. I. Larkin, Y. N. Ovchinnikov, *Sov. Phys. JETP* **20**, 762 (1965).
- [105] R. Casalbuoni, G. Nardulli, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 263 (2004).
- [106] Y. Liao, A. S. C. Rittner, T. Paprotta, W. Li, G. B. Partridge, R. G. Hulet, S. K. Baur, E. J. Mueller, *Nature* **467**, 567 (2010).
- [107] D. -H. Kim, J. J. Kinnunen, J. -P. Martikainen, P. Törmä, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 095301 (2011).
- [108] M. W. Zwierlein, A. Schirotzek, C. H. Schunck, W. Ketterle, *Science* **311**, 492 (2006).

- [109] G. B. Partridge, W. Li, R. I. Kamar, Y. Liao, R. G. Hulet, *Science* **311**, 503 (2006).
- [110] H. Mayaffre, S. Krämer, M. Horvatic, C. Berthier, K. Miyagawa, K. Kanoda, V. F. Mitrovic, *Nature Physics* **10**, 928 (2014).
- [111] Jami J Kinnunen, Jildou Baarsma, Jani-Petri Martikainen and Paivi Torma, *Rep. Prog. Phys.* **81**, 046401 (2018).
- [112] K. Byczuk, M. Ulmke, and D. Vollhardt, *Phys. Rev. Lett.* **90** 196403 (2003).
- [113] H. Caldas, M. A. Continentino, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **46**, 155301 (2013).
- [114] X. M. Kuang, E. Papantonopoulou, B. Wang, *JHEP* **05**, 130 (2014).
- [115] A. Dutta, S. K. Modak, *JHEP* **01**, 136 (2014).
- [116] T. Albash, C. V. Johnson, *JHEP* **05**, 79 (2012).
- [117] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press (2011).
- [118] U. Marzolino and T. Prosen, *Phys. Rev. B* **96**, 104402 (2017).
- [119] E. P. Wigner, *Phys. Rev.* **46**, 1002 (1934).
- [120] N. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor & Francis, New York, (1974)
- [121] E. Vitali, H. Shi, A. Chiciak, and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **99**, 165116 (2019).
- [122] C. De Franco, L. F. Tocchio, and F. Becca, *Phys. Rev. B* **98**, 075117 (2018).
- [123] J. M. Kurdestany and S. Satpathy, *Phys. Rev. B* **96**, 085132 (2017).
- [124] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
- [125] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [126] Bulaevskii, L. N. & Sadovskii, M. V. ., *JETP Lett.* , 39 (,). 640(1984)
- [127] Liu, S., Zhou, X.-F., Guo, G.-C. & Zhang, Y.-S. ., *Sci. Rep.* **6**, 22623 (2016).
- [128] Cai, X., Lang, L.-J. & Wang, Y. ., *Phys. Rev. Lett.* **110**, 176403 (2013).
- [129] Dubi, Y., Meir, Y. & Avishai, Y. ., *Nature* **449**, 876-880 (2007).
- [130] Sacépé, B., Dubouchet, T., Chapelier, C., Sanquer, M., Ovadia, M., Shahar, D., Feigel'man, M. & Ioffe, L. ., *Nature Physics* **7**, 239-244 (2011).
- [131] Khan, A., Basu, S. & Tanatar, B. ., *J. Supercond. Nov. Magn.* **26**, 1891-1895 (2013).
- [132] A. Bezryadin, C.N. Lau, M. Tinkham, *Nature* **404**, 971 (2000).
- [133] A.M. Goldman, N. Markovic, *Phys. Today* **51**, 39 (1998). 1063/1.882069.
- [134] L. Snachez-Palencia, M. Lewenstein, *Nature* **6**, 87 (2010).
- [135] J.E. Lye, L. Fallani, M. Modugno, D.S. Wiersma, C. Fort, M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 070401 (2005).
- [136] B. Sundar, B. Gadway, K.R.A. Hazzard, *Sci. Rep.* **8**, 3422 (2018).
- [137] G. A. Canella and V. V. França, *Sci. Rep.* **9**, 15313 (2019).
- [138] G. A. Canella and V. V. França, *Phys. A* **545**, 123646 (2020).

- [139] G. A. Canella and V. V. França, *Phys. Rev. B* **104**, 134201 (2021).
- [140] G. A. Canella, K. Zawadzki and V. V. França, arXiv:2202.01557 (2022).
- [141] Berkovits, R. ., *Phys. Rev. Lett.* , 108 (,). 176803 (2012).
- [142] Zhao, A., Chu, R.-L., & Shen, S.-Q. . *Phys. Rev. B* , 87 (,). 205140 (2013).
- [143] Wang, H. & Kais, S. ., *Int. J. Quantum Inform.* **4**, 827-835 (2006). .
- [144] Laflorie, N. ., *Phys. Rep.* **646**, 1-59 (2016). .
- [145] Goldsborough, A. M. & Römer, R. A. *EPL*. **111** **26004**, 2015 (,).
- [146] Deng, X., Citro, R., Orignac, E., Minguzzi, A. & Santos, L. *New J. of Phys.*. **15** **045023**, 2013 ( ).
- [147] Frérot, I. & Roscilde, T. *Phys. Rev. Lett.*. **116** **190401**, 2016 ( ).
- [148] Albus, A., Illuminati, F., & Eisert, J. *Phys. Rev. A*. **68** **023606**, 2003 ( ).
- [149] Roy, N. and Sharma, A. *Phys. Rev. B*. **97** **125116**, 2018 ( ).
- [150] Ye, B.-T., Han, Z.-Y., Mu, L.-Z., & Fan, H. *Sci. Rep.*. **7** **16668**, 2017 ( ).
- [151] Mondragon-Shem, I., Khan, M., & Hughes, T. L. *Phys. Rev. Lett.*. **110** **046806**, 2013 ( ).
- [152] Kapitulnik, A., Kivelson, S. A. & Spivak, B. *Rev. of Mod. Phys.*. **91** **011002**, 2019 ( ).
- [153] Buchhold, M., Diehl, S. & Altland, A. *Phys. Rev. Lett.*. **121** **215301**, 2018 ( ).
- [154] Pixley, J. H., Huse, D. A. & Das Sarma, S. *Phys. Rev. B*. **94** **121107**, 2016 ( ).
- [155] Ziegler, K., & Sinner, A. *Phys. Rev. Lett.*. **121** **166401**, 2018 ( ).
- [156] Tezuka, M. & Garcia-Garcia, A. M. *Phys. Rev. A*. **82** **043613**, 2010 ( ).
- [157] Bouadim, K., Loh, Y. L., Randeria, M. & Trivedi, N. *Nature Phys.*. **7** **884-889**, 2011 ( ).
- [158] . BuresD. Bures, *Transactions of the American Mathematical Society* **135**, 199 (1969).
- [159] M. Hübner, *Phys. Lett. A* **163**, 239 (1992).
- [160] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer, New York (1994).
- [161] P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, Springer, Heidelberg (1995).

- [162] E. Dagotto, *Science* **309**, 257 (2005).
- [163] A. R. Bishop, S. R. Shenoy, and S. Sridhar, *Intrinsic Multiscale Structure and Dynamics in Complex Electronic Oxides*, World Scientific, New Jersey (2003).
- [164] K. M. Lang, V. Madhavan, J. E. Hoffman, E. W. Hudson, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, *Nature* **415**, 412 (2002).
- [165] S. H. Pan, J. P. O'Neal, R. L. Badzey, C. Chamon, H. Ding, J. R. Engelbrecht, Z. Wang, H. E. Eisaki, S. Uchida, A. K. Gupta, K.-W. Ng, E. W. Hudson, K. M. Lang, and J. C. Davies, *Nature* **413**, 282 (2001).
- [166] D. J. Derro, E. W. Hudson, K. M. Lang, S. H. Pan, J. C. Davis, J. T. Markert, and A. L. de Lozanne, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 097002 (2002).
- [167] N. A. Lima, A. L. Malvezzi and K. Capelle, *Sol. State Com.* **144**, 557 (2007).
- [168] D. Góra, K. J. Rościszewski, and A. M. Oleś, *J. Phys.: Condens. Matter* **10**, 4755 (1998).
- [169] M. Noh, D. C. Johnson, and G. S. Elliott, *Chem. Mater.* **12**, 2894 (2000).
- [170] S. R. White and R. L. Martin, *J. Chem. Phys.* **110**, 4127 (1999).
- [171] A. O. Mitrushenkov, G. Fano, F. Ortolani, R. Linguerri, and P. Palmieri, *J. Chem. Phys.* **6815** (2001).
- [172] G. K.-L. Chan and S. Sharma, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **62**, 465 (2011).
- [173] D. Jaksch and P. Zoller, *Annals of Physics* **315**, 52 (2005).
- [174] I. Bloch, *Nature Physics* **1**, 23 (2005)
- [175] J. Simon, W. S. Bakr, R. Ma, M. Eric Tai, P. M. Preiss, and M. Greiner, *Nature* **472**, 307 (2011)
- [176] K. Schönhammer, O. Gunnarsson, and R. M. Noack, *Phys. Rev. B* **52**, 2504 (1995).
- [177] L.-A. Wu, M. S. Sarandy, D. A. Lidar, and L. J. Sham, *Phys. Rev. A* **74**, 052335 (2006)
- [178] A. Schindlmayr and R. W. Godby, *Phys. Rev. B* **51**, 10427 (1995)
- [179] J. P. Coe, K. Capelle, and I. D'Amico, *Phys. Rev. A* **79**, 032504 (2009)
- [180] K. Onnes, *Commun. Phys. Lab. Univ. Leiden* **120b**, (1911).
- [181] J. Stajic, R. Coontz, and I. Osborne, *Science* **332**, 189 (2011).
- [182] G. Tarnopolsky, C. Li, Darshan G. Joshi, and S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **101**, 205106 (2020).
- [183] A. Tanaka, *Phys. Rev. B* **99**, 205133 (2019).
- [184] N.A. Lima, M.F. Silva, L.N. Oliveira and K. Capelle, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146402 (2003).
- [185] V. L. Campo, Jr. and K. Capelle, *Phys. Rev. A* **72**, R-061602 (2005).
- [186] N. A. Lima, L. N. Oliveira and K. Capelle, *Europhys. Lett.* **60**, 601 (2002).
- [187] F. H. Essler et. al, *The one-dimensional Hubbard model*, Cambridge University Press (2005).
- [188] D. Vieira, H. J. P. Freire, V. L. Campo Jr. and K. Capelle, *J. Magn. Magn. Mater.* **320**, e418 (2007).
- [189] Bishop, C. M. *Neural networks for pattern recognition* (Clarendon Press, 1995).

- [190] Ortega-Zamorano, F., Jerez, J. M., Juárez, G. E. & Franco, L. , *Neural Process. Lett.* **46**, 1-16 (2017).
- [191] Filletti, E. R., Silva, J. M. & Ferreira, V. G., *Adv. Chem. Eng. Sci.* **05**, 317-327 (2015).
- [192] Ramil, A., Lopez, A., Pozo-Antonio, J. & Rivas, T. , *Measurement* **117**, 90-95 (2018).
- [193] Walczak, S. & Velanovich, V., *Decis. Support. Syst.* **106**, 110-118 (2018).
- [194] Balabin, R. M. & Lomakina, E. I. , *J. Chem. Phys.* **131** (2009).
- [195] Brockherde, F. et al. , *Nat. Commun.* **8**, 872 (2017).
- [196] McGibbon, R. T. & Pande, V. S., *J. Chem. Theory Comput.* **9**, 2900-2906 (2013).
- [197] Fletcher, T. L., Davie, S. J. & Popelier, P. L. A., *J. Chem. Theory Comput.* **10**, 3708-3719 (2014).
- [198] Nafey, A. S., *Int. J. Therm. Sci.* **48**, 2264-2270 (2009).
- [199] Zhang, L.-L., Huang, J., Duan, C.-B. & Wang, W.-Z., *Mod. Phys. Lett. B* **29**, 1550208 (2015).
- [200] Wei-Zhong, Z. L.-L., Jin, H., Cheng-Bo, D. & Wang, W.-Z. , *Chin. Phys. B* **24**, 77101 (2015).
- [201] Hagan, M. T. & Menhaj, M. B., *IEEE Transactions on Neural Networks* **5**, 989-993 (1994).
- [202] Vieira, D., Freire, H. J. P., Campo Jr., V. L. & Capelle, K., *J. Magn. Magn. Mater.* **320**. E421-E424 (2008).
- [203] R. Jördens, N. Strohmater, K. Günter, H. Moritz, and T. Esslinger, *Nature* **455**, 204 (2008).
- [204] W. S. Bakr, J. I. Gillen, A. Peng, S. Fölling, and M. Greiner, *Nature* **462**, 74 (2009).
- [205] J. F. Sherson, C. Weitenberg, M. Endres, M. Cheneau, I. Bloch, S. Kuhr, *Nature* **467**, 68 (2010).
- [206] JAVANAINEN J., EBERLY J. H. and SU Q., *Phys. Rev. A* , 38 (1988) 3430.
- [207] ABDULLAH S., COE J. P. and D' AMICO I., *Phys. Rev. B* , 80 (2009) 235302.
- [208] LARSSON D. and JOHANNESSEN H., *Phys. Rev. A* , 73 (2006) 042320.
- [209] BIOLATTI E., D' AMICO I., ZANARDI P. and ROSSI F., *Phys. Rev. B* , 65 (2002) 075306.
- [210] SOTIER F., THOMAY T., HANKE T., KORGER J., MAHAP- ATRA S., FREY A., BRUNNER K., BRATSCHITSCH R. and LEITENSTORFER A., *Nature Phys.* , 5 (2009) 352.
- [211] COE J. P., SUDBERY A. and D' AMICO I., *Phys. Rev. B* , 77 (2008) 205122.
- [212] PEDERSEN J., FLINDT C., MORTENSEN N. A. and JAUHO A. P., *Phys. Rev. B* , 76 (2007) 125323.
- [213] V. V. França, K. Capelle, *Phys. Rev. A* **74**, 042325 (2006).
- [214] S. Pilati, S. Giorgini, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 030401 (2008).
- [215] D. E. Sheehy, L. Radzihovsky, *Ann. of Phys* **322**, 1790 (2007).
- [216] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, Boston (1971).
- [217] V. V. França, *Making Quantum Dynamics Exact* , *Physics* **14**, 60 (2021).