

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE MESQUITA FILHO”
INSTITUTO DE QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM QUÍMICA

TATIANA ROSSAFA PAULETTI

**Sistemas Fortemente Correlacionados: Otimização de Funcionais da
Densidade, Comparação de Metodologias e Medidas de Entropia**

Araraquara

2025

TATIANA ROSSAFA PAULETTI

**Sistemas Fortemente Correlacionados: Otimização de Funcionais da
Densidade, Comparação de Metodologias e Medidas de Entropia**

Versão original

Tese apresentada ao Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Química.

Área de concentração: Química Teórica.

Orientador: Prof^ª. Dr^ª. Vivian Vanessa França

Coorientador: Prof^ª. Dr^ª. Tamiris Trevisan Negri Borges

Araraquara

2025

R827s Rossafa Pauletti, Tatiana
Sistemas Fortemente Correlacionados : Otimização de Funcionais da Densidade, Comparação de Metodologias e Medidas de Entropia / Tatiana Rossafa Pauletti. -- Araraquara, 2025
123 p. : il., tabs.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara
Orientadora: Vivian Vanessa França
Coorientadora: Tamiris Trevisan Negri Borges

1. Estatística Quântica. 2. Funcionais de densidade. 3. Nanomaterias. 4. Física Estatística. 5. Mecânica Quântica. I. Título.

IMPACTO POTENCIAL DESTA PESQUISA

Esta pesquisa de Doutorado, teórico-metodológica, compara sistematicamente medidas de entropia e algoritmos para detecção de transições de fase quânticas e introduz um funcional aprimorado para o modelo de Hubbard 1D em sistemas magnetizados. O trabalho entrega um guia de uso (faixas de validade, sensibilidade, robustez), códigos reproduzíveis e benchmarks públicos que reduzem custo computacional e ampliam o acesso a diagnósticos de fases quânticas em nanomateriais unidimensionais. Espera-se impacto científico, formativo e inovador, com internacionalização (colaborações e divulgação) e inserção regional por meio de minicursos e repositórios abertos. Contribui aos ODS 4 e 9.

POTENTIAL IMPACT OF THIS RESEARCH

This theoretical–methodological PhD research systematically compares entropy measures and algorithms for detecting quantum phase transitions and introduces an improved functional for the 1D Hubbard model in magnetized systems. The work provides a practical user guide (applicability ranges, sensitivity, robustness), reproducible code, and public benchmarks that reduce computational cost and broaden access to quantum-phase diagnostics in one-dimensional nanomaterials. Scientific, educational, and innovation impacts are anticipated, with internationalization (collaborations and dissemination) and regional engagement through short courses and open repositories. The project contributes to SDGs 4 and 9.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA TESE: "Sistemas Fortemente Correlacionados: Otimização de Funcionais da Densidade, Comparação de Metodologias e Medidas de Entropia"

AUTORA: TATIANA ROSSAFA PAULETTI

ORIENTADORA: VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN

COORIENTADORA: TAMIRIS TREVISAN NEGRI BORGES

Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Doutora em Química, pela Comissão Examinadora:

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

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

Prof.^a Dr.^a KRISSIA ZAWADZKI (Participação Virtual)
Departamento de Física e Ciência Interdisciplinar / Instituto de Física - USP - São Carlos

Prof.^a Dr.^a PAULA HOMEM DE MELLO (Participação Virtual)
Centro de Ciência Naturais e Humanas / Universidade Federal do ABC - UFABC - Santo André

Prof.^a Dr.^a THEREZA CRISTINA DE LACERDA PAIVA (Participação Virtual)
Departamento de Física dos Sólidos / Instituto de Física - UFRJ - Rio de Janeiro

Araraquara, 26 de setembro de 2025

Documento assinado digitalmente
 **VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN**
Data: 28/09/2025 17:59:58-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Dados Curriculares

Identificação

Tatiana Rossafa Pauletti

Data de nascimento: 06/07/1994

Nacionalidade: Brasileira

Nome em citações bibliográficas: PAULETTI, T. , PAULETTI, Tatiana

Endereço Profissional

Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Campus de Araraquara, Departamento de Física e Matemática. Endereço: Rua Francisco Degni, 55 - Quitandinha, Araraquara – SP, CEP 14800-900

Currículo

Currículo Lattes: <http://lattes.cnpq.br/4308587833170973>

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-5519-9991>

Formação Acadêmica

2018 - Licenciatura em Química (IQ - UNESP)

2021 - Mestrado em Química (IQ - UNESP)

Produção Bibliográfica

PAULETTI, T.; SILVA, M. A. G.; CANELLA, G. A.; FRANÇA, V. V. Linear entropy fails to predict entanglement behavior in low-density fermionic systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, [S.l.], v. 644, p. 129824, jun. 2024. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2024.129824>.

PAULETTI, T.; SANINO, M.; GIMENES, L.; CARVALHO, I. M.; FRANÇA, V. V. Quantum phase transitions in one-dimensional nanostructures: a comparison between DFT and DMRG methodologies. *Journal of Molecular Modeling*, [S.l.], v. 30. n. 8, jul. 2024. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/s00894-024-06059-z>.

TONIN, Gabriel M.; PAULETTI, Tatiana; SANTOS, Ramiro M. dos; FRANÇA, Vivian V. Ant colony optimization for density functionals in strongly correlated systems. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, [S.l.], v. 36, n. 8, 2025. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.21577/0103-5053.20250098>.

Artigos em fase final de elaboração, com submissão prevista para 2025

- **Pauletti, T.**; Homem-de-Mello, P.; Paiva, T.; França, V.V. Women in Quantum Physics in Brazil: demographics, career profiles, recognition, and leadership. (Submissão em 2025).
- **Pauletti, T.**; Quintino, S.R.M.; França, V.V. Comparison between Typical and von Neumann Entropies as Entanglement Measures in 1D Systems via DFT. (Submissão em 2025).
- **Pauletti, T.**; Tonin, G.M.; Carvalho, I.M.; Negri, T.T.; França, V.V. The Pauletti Functional: Ground-State Energy Parametrization of the 1D Hubbard Model with Improved Magnetic and Response Properties. (Submissão em 2025).
- Sanino, M.; **Pauletti, T.**; França, V.V. Emaranhamento Quântico e a Complexidade na Estrutura da Matéria. (Submetido para publicação na Revista Virtual de Química em julho de 2025).
- Piai, V.E.M.; Sanino, M.; **Pauletti, T.**; Carvalho, I.M.; França, V.V. Extracting Off-Diagonal Information via Single-Site Quantities in the One-Dimensional Extended Hubbard Model at Quarter Filling. (Submissão em 2025).

Participação em Bancas e Orientações

Co-orientações

Supervisão Científica - Lucas Gimenes (IC)

Supervisão Científica - Gabriel Maia Tonin (IC)

Coorientação de TCC - Gabriel Maia Tonin

Projetos de Extensão

01/06/2023 a 31/12/2024 - Experivivência (240h)

O Projeto Experivivência foi oferecido às trabalhadoras terceirizadas da limpeza do Instituto de Química de Araraquara e do Centro de Ciências de Araraquara, com oficinas que abordaram temas como introdução ao uso do computador e ao Windows, edição de textos e planilhas, uso seguro da internet, destinação correta dos resíduos sólidos, estatística elementar, educação financeira, saúde bucal, arte e cultura, além de temas livres. As atividades culminaram na produção de currículos, cadernos de receitas, planilhas de controle de gastos e outros materiais de apoio. Paralelamente às oficinas presenciais, o projeto também desenvolveu uma página no Instagram, onde semanalmente eram publicados conteúdos voltados às participantes, com dicas como liberar espaço no celular utilizando o Google Fotos, aumentar a segurança online, identificar notícias falsas, preparar receitas (rosquinha de pinga, trufas recheadas, entre outras), além de orientações para tirar boas fotos e encontrar receitas. Foram ainda produzidos vídeos multidisciplinares e conteúdos na área de matemática, abordando temas como média, fenômenos aleatórios e determinísticos, funcionamento da Mega-Sena, privacidade na internet, pesquisas eleitorais, elaboração de planilhas de orçamento, uso consciente do cartão de crédito e construção de gráficos setoriais, dentre outros.

Organização de Eventos Científicos

16/04/2025 a 17/04/2025 - Mulheres na Física Quântica

Estágio no Exterior

01/05/2024 a 31/10/2024 - Universidade Pierre e Marie Curie - Laboratoire de Chimie Théorique (CNRS). Orientação: Julia Contreras-Garcia. Bolsa Capes-Print.

Outras Atividades

- Avaliadora no XXXIV Congresso de Iniciação Científica da Unesp - IQ/Araraquara, 29/09/2022
- Avaliadora no XXXV Congresso de Iniciação Científica da Unesp - IQ/Araraquara, 27/09/2023
- Professora Conferencista na disciplina de Física Aplicada à Farmácia (UNESP), 28/04/2022 a 30/06/2022, 38h
- Professora Conferencista na disciplina de Física I para Licenciatura em Química (UNESP), 16/03/2023 a 27/04/2023, 28h
- Professora Conferencista na disciplina de Física Experimental para Licenciatura em Química (UNESP), 15/03/2023 a 26/04/2023, 12h
- Professora pelo Auxílio ao Pós-Graduando para Engenharia de Bioprocessos e Biotecnologia (UNESP), 24/02/2025 a 08/07/2025, 96h

Participação e Apresentação em Eventos Científicos

- Apresentação de Pôster no XXXV Encontro de Física do Norte e Nordeste, 18/10/2021 a 20/10/2021, Online ;
- Apresentação de Pôster na XVII Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, 25/10/2021 a 28/10/2021, Online;
- Apresentação de Pôster no Encontro de Outono da SBF 2022, 10/04/2022 a 14/04/2022, São Paulo ;
- Apresentação de Pôster e Oral no XXXVI Encontro de Física do Norte e Nordeste 2022, 23/11/2022 a 25/11/2022, Fortaleza ;
- Apresentação de Pôster no Workshop Quantum Technologies Meet Density-Functional Theory, 21/11/2022 a 25/11/2022, Natal ;
- Apresentação Oral no XLV Congresso Paulo Leal Ferreira de Física
- Apresentação de Pôster no Workshop on New Horizons in Quantum Correlated Materials, 15/08/2022 a 19/08/2022, São Paulo;
- Apresentação Oral no Workshop Quantum Matter and Entanglement, 31/10/2022 a 01/11/2022, Rio de Janeiro ;

- Apresentação de Pôster no VIII Paraty Quantum Information School and Workshop, 07/08/2023 a 18/08/2023, Paraty;
- Apresentação de Pôster no DFT 2024, 25/08/2024 a 30/08/2024, Paris.

Ao meu esposo, meus pais e minha irmã

Agradecimentos

Primeiramente, gostaria de agradecer a Deus por nunca me abandonar e por sempre me erguer nos momentos de dificuldade.

Ao Instituto de Química de Araraquara, docentes e funcionários, meu muito obrigada pelos últimos 12 anos de aprendizado e carinho. Nunca esperaria que um instituto no qual entrei sem saber nada sobre a vida pudesse me proporcionar tanto crescimento pessoal e profissional.

Ao meu esposo, Igor de Azevedo Vitulli, por todos os momentos que compartilhamos: as noites viradas juntos para que eu tivesse companhia, os abraços em meio aos risos e choros e o incentivo constante que sempre me impulsionou a ir além. Que possamos ter muitos outros momentos felizes para comemorar juntos com nossos gatinhos: Nami, Robin e Sanji.

Em especial, aos meus pais, Selmo Pauletti e Carla Maria Rossafa Pauletti, por todo o carinho, apoio e incentivo durante esses anos. Sem vocês me incentivando e valorizando meus avanços, eu não seria capaz de concluir esta etapa. À minha irmã, Beatriz Rossafa Pauletti, pelas risadas, apoio incondicional e conselhos: você é um grande exemplo para mim.

À minha família, pela paciência e suporte durante todo esse tempo, em especial a Cristina Groner, Maria Paula Groner, Maycon de Oliveira, Carlos Roberto Bergoc, Luciana Groner, Ronaldo Groner, Patricia Terezinha Assme Rossafa, Ana Maria Assme Rossafa Schmidt Poit, Ronaldo Schmidt Poit, Hugo Vitulli, Raíssa Ribeiro, André Vitulli, Marcos Vitulli, Tânia Vitulli, Maria Marina Serafini, Silvia Pauletti e Laucir Vitulli.

À minha orientadora, Vivian Vanessa França, pelos 10 anos de convivência acadêmica. Sua receptividade, paciência e respeito sempre marcaram minha trajetória como um exemplo a ser seguido. Sigo te admirando constantemente, tanto pela forma como enfrenta os desafios acadêmicos com leveza e determinação quanto pela dedicação pessoal como mãe. Muito obrigada por todos esses anos!

À minha coorientadora, Tamiris Trevisan Negri Borges, por toda a dedicação e paciência comigo. Sua calma e seus conselhos me animaram em momentos em que eu não via solução para os desafios que encontrávamos.

Aos meus antigos e novos colegas de laboratório, que sempre me ensinaram lições valiosas tanto na área acadêmica quanto pessoal, ajudando-me a crescer constantemente. Muito obrigada Guilherme Arantes Canella, Caio Custódio, Daniel Arisa Moraes e Silva, Isaac Martins Carvalho, Lucas Gimenes, Marina Heloyse Sanino e Silva, Maria Eduarda Vidal, Gabriel Maia Tonin, Silvio Quintino, Murilo Garcia, Fabio Aleixo Diniz, Fernando Casellato, Ramiro Marcelo dos Santos e Ebiyibo Collins Ouserigha.

Aos meus grandes amigos, que estiveram comigo em toda essa jornada, me aconselhando e compartilhando cada parte dessa trajetória: Guilherme Arantes Canella, Tamiris Cristina Gonçalves Lopes Canella, Maybi Roberta Daminhani e Daniela Vassalo Pereira.

Às minhas queridas Ana Débora Santana Araujo, Deidiana Martins Barbosa, Josefa de Oliveira Silva, Adriana Fernandes, Edleide Maria da Silva, Vilma do Carmo de Jesus Guimarães, Andreia Cristina Guidelli, Sandra Rodrigues dos Santos, Leidiana de Oliveira Barreto, Priscila Aparecida Lopes e Marli da Silva Miranda Gomes, do projeto Experivivência, que trouxeram luz aos meus dias durante o projeto e nos corredores do IQ. Meus singelos agradecimentos pelo trabalho árduo e pela disposição diária no Instituto de Química.

Aos professores e alunos que também participaram do Experivivência: Jorge Capella, Marisa Capella, Sidneia Barrozo, Fábio Chavarette, Érika Capelato, Janaína Fonseca, Ana Carolina Bet, Camila Sampaio, Ana Júliada Mota Carvalho, Giovana Herrera Ribeiro Pereira, Nathalia Garcia de Oliveira. Em especial a Érica Regina Filletti Nascimento por toda a dedicação e cuidado durante todo o projeto!

Peço licença para escrever aqui em outro idioma aos meus amigos que conheci no Capes Print. To Trinidad, Julia Contreras, Andrea, Nico, Diego, Marina, Mary, Jessica, Chiari, Timothée, and Kate — thank you for all the moments we shared in Paris. I am deeply grateful for your warm welcome and for the wonderful memories we created together. I hope to see you all again in the future.

In particular, to Trini, Andrea, Diego, and Julia Contreras — thank you for your patience during our conversations and for all the teachings about an area I had no previous experience. Today, I truly understand how challenging and enriching that experience was.

Não poderia deixar de agradecer a Maison do Brasil pela receptividade e acolhimento em meus 6 meses em Paris, em especial o Fred que sempre me ajudou com tudo. Aos meus colegas maravilhosos que tornaram toda a experiencia mais leve : Gabriela Fontes Mayrinck Cupertino, Amanda Carla Clemente de Oliveira, Sabrina Rodrigues de Melo,

Islayne Barbosa de Sá Gonçalves, Vinícius Ruas Alvarez, Karina Bettega Felipe, Sabrina Rodrigues de Melo, Lucas Alves Tavares, Isadora Peter Furtado, Luan Mattos, Rafael França, Daniel Rodrigues, Roberta Siqueira Mocaiber Dieguez, Patricia Dalla Torre, Carolina Dutra, Jéssica Felizardo, Jessia Stori, Jaiderson dos Santos Gonçalves e Rafael Dalyson dos Santos Souza.

O período de 6 meses em Paris, foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES-Print) – Código de Financiamento 001.

O presente trabalho foi realizado com apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) - processo nº140854/2021 – 5.

“Não temas, o deserto não é o fim, é o começo de uma nova história.”

Resumo

PAULETTI, Tatiana. Sistemas Fortemente Correlacionados: Otimização de Funcionais da Densidade, Comparação de Metodologias e Medidas de Entropia 2025. 123 f. Tese (Doutorado em Química) – Instituto de Química, Química, Universidade Estadual Paulista "Júlio de Mesquita Filho", 2025.

Neste trabalho investigamos a confiabilidade de métodos aproximados na detecção de transições de fase quânticas em sistemas unidimensionais descritos pelo modelo de Hubbard. Realizamos uma comparação entre o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG), praticamente exato mas de alto custo computacional, e a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), de menor custo e elevada escalabilidade. Para o modelo homogêneo mostramos que a DFT apresenta maior precisão para a entropia média de emaranhamento do que para a energia do estado fundamental, que por sua vez supera a performance para o perfil de densidade, e que todos os desvios diminuem com o aumento do tamanho da cadeia. Em cadeias finitas, as discrepâncias mais relevantes surgem próximas ao semipreenchimento devido às oscilações de Friedel, enquanto sob confinamento harmônico a DFT descreve bem fases metálicas, mas falha em fases isolantes, ao passo que a média do emaranhamento evidencia de forma mais clara as transições de fase. Na sequência avaliamos medidas alternativas de emaranhamento, constatando que a entropia linear é inadequada em baixas densidades, podendo levar a diagnósticos incorretos de máximos e mínimos, enquanto a entropia típica se mostrou sensível à perda coletiva de correlações, mas tende a antecipar mínimos críticos e subestimar correlações residuais, sugerindo um papel complementar em relação à entropia média. Por fim, otimizamos os expoentes do funcional da densidade FVC para a energia do modelo de Hubbard para melhorar simultaneamente a energia e sua segunda derivada em relação à magnetização, associada à susceptibilidade magnética. Embora a otimização tenha reduzido o erro médio relativo da energia, os desvios da segunda derivada permaneceram elevados, revelando limitações estruturais do funcional e indicando a necessidade de novas formulações capazes de descrever de forma robusta a susceptibilidade magnética em sistemas unidimensionais.

Palavras-chaves: Teoria do Funcional da Densidade, Grupo de Renormalização da Matriz Densidade, Hubbard 1D, Transições de Fase Quânticas, Funcional da Densidade, Entropia de von Neumann, Entropia Linear, Entropia Típica.

Abstract

PAULETTI, Tatiana. Strongly Correlated Systems: Optimization of Density Functionals, Methodological Comparisons, and Entropy Measures. 2025. 123,pp. Doctoral Thesis (Ph.D. in Chemistry) — Institute of Chemistry, São Paulo State University “Júlio de Mesquita Filho”, 2025.

In this work we investigate the reliability of approximate methods for detecting quantum phase transitions in one-dimensional systems described by the Hubbard model. We compare the Density Matrix Renormalization Group (DMRG), which is nearly exact but computationally demanding, with Density Functional Theory (DFT), which offers lower cost and high scalability. For the homogeneous model we show that the average entanglement entropy provides the most accurate results, followed by the ground-state energy and then the density profile, with deviations decreasing as the chain size increases; in finite chains, the most relevant discrepancies appear near half-filling due to Friedel oscillations, while under harmonic confinement DFT describes metallic phases well but fails in insulating regimes, whereas the averaged entanglement reveals phase transitions more clearly. We then evaluate alternative entanglement measures, finding that the linear entropy is unreliable at low densities and may misidentify maxima and minima, while the typical entropy is highly sensitive to the collective loss of correlations but tends to anticipate critical minima and underestimate residual correlations, indicating a complementary role to the average measure. Finally, we optimized the exponents of the FVC functional to simultaneously improve the ground-state energy and its second derivative with respect to magnetization; although the optimization reduced the relative error of the energy, deviations in the second derivative remained high, exposing structural limitations of the functional and highlighting the need for new formulations capable of robustly describing magnetic susceptibility in one-dimensional systems.

Keywords: Density Functional Theory (DFT), Density Matrix Renormalization Group (DMRG), 1D Hubbard model, Quantum Phase Transitions, Density Functional, von Neumann Entropy, Linear Entropy, Typical Entropy.

Lista de figuras

Figura 1 – Representação esquemática das coordenadas e interações em um sistema de muitos corpos. Os círculos maiores em vermelho representam os núcleos nas posições $\vec{R}_a$ e $\vec{R}_b$, enquanto os círculos menores em azul representam os elétrons, com posições $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$. Os vetores indicam distâncias fundamentais para a construção do Hamiltoniano de muitos corpos, como r_{12} , r_{1a} e R_{ba} . Fonte: Autor (2025).	35
Figura 2 – Representação esquemática do modelo de Hubbard em uma cadeia de L sítios. t_{ij} indica a itinerância (hopping) entre vizinhos, V_{ij} potencial externo e U_i a interação local de Coulomb.	39
Figura 3 – Ciclo auto-consistente de Kohn-Sham. Fonte: Autor.	45
Figura 4 – Captura do emaranhamento quântico pela violação da desigualdade de Bell. (a) Soma bruta das contagens de coincidência registradas em uma única imagem obtida experimentalmente através de quatro filtros de fase em diferentes orientações $\theta_2 = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ$. (b) Imagem já processada, após a varredura de fase, a partir da qual é possível calcular o parâmetro de Bell e constatar a violação direta, mostrando a presença de emaranhamento quântico no sistema. Fonte: Moreau et al., <i>Science Advances</i> , 2019 ^[1]	50
Figura 5 – Representação de um sistema homogêneo de tamanho L , onde não há potencial aplicado.	58
Figura 6 – Desvio percentual médio relativo da energia do estado fundamental, definido na Equação 43, em função do tamanho da cadeia L para um sistema homogêneo finito com interação local repulsiva fixa em $U=2,4,8$. O item (a) corresponde à baixa densidade ($n=0.2$), (b) à densidade intermediária ($n=0.6$) e (c) ao regime de semipreenchimento ($n=1$).	59
Figura 7 – Desvio percentual médio relativo do perfil de densidade, definido na Equação 45, em função do tamanho da cadeia L para um sistema homogêneo finito com interação local repulsiva fixa em $U=2,4,8$. O item (a) corresponde à baixa densidade ($n=0.2$), (b) à densidade intermediária ($n=0.6$) e (c) ao regime de semipreenchimento ($n=1$).	60

- Figura 8 – Perfil de densidade em função da posição ao longo de uma cadeia de 60 sítios. Os símbolos “x” em vermelho correspondem aos resultados obtidos por DFT, enquanto a linha contínua em preto representa o DMRG. Cada coluna apresenta três painéis para diferentes intensidades da interação U : o superior para $U=8$ (forte), o central para $U=4$ (intermediário) e o inferior para $U=2$ (fraco). O item (a) corresponde ao regime de baixa densidade ($n=0.2$), (b) à densidade intermediária ($n=0.6$) e (c) ao semipreenchimento ($n=1$). 61
- Figura 9 – Entropia média de emaranhamento em função do tamanho da cadeia L , variando de 10 em 10 no intervalo de $L=10$ a $L=120$. Os símbolos “x” em vermelho correspondem aos resultados obtidos por DFT, enquanto a linha contínua em preto representa o DMRG. Cada coluna apresenta três painéis para diferentes intensidades da interação U : o superior para $U=8$, o central para $U=4$ (intermediário) e o inferior para $U=2$ (fraco). O item (a) corresponde ao regime de baixa densidade ($n=0.2$), (b) à densidade intermediária ($n=0.6$) e (c) ao semipreenchimento ($n=1$). . . 62
- Figura 10 – Modelo representativo de uma super-rede com configuração 2:7,3:6 e 4:5. Sendo X os locais onde o potencial externo $V \neq 0$ e Y os sítios que possuem potencial nulo, $V = 0$ 64
- Figura 11 – Desvio percentual relativo da energia do estado fundamental em função da interação local U para uma super-rede 2:7 com 90 sítios. A curva azul representa o regime de baixa densidade ($n = 0.2$), a laranja $n = 0.4$, a verde $n = 0.8$ e a preta o semipreenchimento ($n = 1$). O item (a) corresponde ao caso homogêneo ($V = 0$); (b) ao potencial fracamente atrativo ($V = -2$); (c) ao potencial atrativo intermediário ($V = -4$); e (d) ao potencial fortemente atrativo ($V = -10$). 65
- Figura 12 – Perfil de densidade da super-rede na configuração 2:7 com $V = -10$, em função da posição ao longo de uma cadeia de 90 sítios. As curvas em azul correspondem a $n = 0.2$, em laranja a $n = 0.4$, em verde a $n = 0.8$ e em preto ao semipreenchimento ($n = 1$). A intensidade da interação varia em: (a) $U = 0$; (b) $U = 2$; (c) $U = 4$; e (d) $U = 10$ 67

- Figura 13 – Emaranhamento médio da super-rede em função da intensidade da interação coulombiana U para uma cadeia de 90 sítios. As curvas em azul correspondem a $n = 0.2$, em laranja a $n = 0.4$, em verde a $n = 0.8$ e em preto ao semipreenchimento ($n = 1$). O potencial externo aplicado varia de: (a) $V = 0$, caso homogêneo; (b) $V = -2$; (c) $V = -4$; e (d) $V = -10$ 68
- Figura 14 – Modelo representativo da configuração de uma cadeia de tamanho L sobre efeito de um potencial externo quadrático, responsável por caracterizar um confinamento harmônico. 70
- Figura 15 – Desvio percentual relativo da energia do estado fundamental em função do confinamento harmônico k . A curva azul representa o regime de baixa densidade ($n = 0.2$), a vermelha regime intermediário ($n = 0.5$), a preta o regime semi-preenchido ($n = 1$). A intensidade da interação repulsiva varia em: (a) $U = 0$; (b) $U = 2$; (c) $U = 4$; e (d) $U = 8$ 71
- Figura 16 – a) Perfil de densidade para redes confinadas com $L = 100$ sítios, considerando diferentes curvaturas de confinamento k . (b) Entropia de emaranhamento em função da curvatura de confinamento k : média sobre toda a cadeia ($\bar{S}$) e média apenas na cadeia efetiva (sítios centrais com ocupação $n_i > 0.001$, $\bar{S}_{\text{eff}}$). Em ambos os casos, a DFT reproduz os dados do DMRG, mas observa-se que $\bar{S}_{\text{eff}}$ é mais sensível às transições entre fases: (i) metálica, (ii) isolante do tipo Mott, (iii) metálica no centro da cadeia e (iv) isolante de banda no centro da cadeia. 73
- Figura 17 – Emaranhamento por sítio em função da densidade para uma cadeia de Hubbard homogênea no limite infinito, mensurado pela entropia de von Neumann (a) e pela entropia linear (b), para valores de U variando de 0 a 10. No canto inferior direito, um inset destaca o intervalo de densidade entre 0.5 e 0.6, evidenciando a menor sensibilidade da entropia linear e sua tendência incorreta em relação à monotonicidade do sistema. . . . 77

Figura 18 – Emaranhamento para uma cadeia de Hubbard homogênea em função da interação, variando de 0 a 10. calculado tanto pela entropia de von Neumann (linha preta) quanto pela entropia linear (linha azul) via FVC. Os símbolos indicam os resultados obtidos pelo método DMRG para uma cadeia de $L = 120$ sítios: círculos azuis para a entropia de von Neumann e quadrados pretos para a entropia linear. As figuras correspondem a valores fixos de densidade: (a) $n = 0.4$, (b) $n = 0.6$, (c) $n = 0.7$ e (d) $n = 1$	78
Figura 19 – Dupla ocupação em função da densidade para diferentes valores fixos de U	78
Figura 20 – Recuperação do comportamento correto do emaranhamento em função da ordem de expansão da entropia linear, para diferentes densidades. . .	79
Figura 21 – Modelo representativo de um sistema desordenado, no qual os valores de V são distribuídos aleatoriamente ao longo da cadeia. Para cada medida apresentada foram realizados 100 cálculos independentes. . . .	80
Figura 22 – Medida do emaranhamento via entropia linear (preto) e entropia de von Neumann (azul) para um sistema desordenado em função da interação U para valores de $n = 0.2, 0.4, 0.6$ e 0.6 em um regime de potencia externo atrativo (a) $V = -1t$ e (b) $V = -3t$	81
Figura 23 – Emaranhamento médio para uma cadeia finita de $L=36$ e $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 10$, via entropia de von Neumann (azul) e linear (preto) em função da interação repulsiva U . As figuras estão divididas em três estruturas, sendo (a) super-rede 2:7, (b) super-rede 3:6 e (c) super-rede 4:5.	82
Figura 24 – Sistema sob confinamento harmônico, com interação forte $U = 8$, um quarto de preenchimento ($n = 0.5$) e cadeia de $L = 100$ sítios. (a) Perfil de densidade em função do sítio. (b) Perfil de emaranhamento local em função do sítio, calculado via entropia de von Neumann. (c) Emaranhamento médio em função do confinamento k , comparando a entropia típica (laranja) e a entropia média (azul).	84

Figura 25 – Análise comparativa entre a entropia <i>típica</i> e a entropia <i>média</i> para uma super-rede 2:7 com $L = 90$, potencial atrativo $V = -10$ e interação $U = 4$. (a) Perfil de densidade em função do sítio para $n = 0.22, 0.44$ e 1.00 . (b) Entropia de von Neumann local S_{vN} por sítio para os mesmos n . (c) Emaranhamento médio em função de n : média aritmética $\bar{S}$ (azul) e típica $S_{\text{typ}} = \exp\langle \ln S_{vN} \rangle$ (laranja).	86
Figura 26 – Comparação entre entropia média (linhas contínuas) e entropia típica (círculos) em função da concentração de impurezas C para diferentes valores de V . (a) Caso atrativo $U = -5$ (transição superfluido–isolante). (b) Caso repulsivo $U = 5$ (transição metal–isolante de Mott).	88
Figura 27 – Energia total e derivadas de primeira e segunda ordem em função da magnetização para $n \approx 0.2$, $U = 6$ e malha de 200 pontos. Abaixo, ampliamos as regiões onde os picos das derivadas aparecem.	92
Figura 28 – Decomposição da energia em T_s , E_h e E_{xc} para $n \approx 0.2$, $U = 6$	92
Figura 29 – Energia total e derivadas de primeira e segunda ordem em função da magnetização para diferentes tamanhos de malha em m ($200 \leq N_m \leq 1000$) para $n \approx 0.2$, $U = 6$	93
Figura 30 – Comparação entre os dados exatos (preta contínua) e a FVC (vermelha tracejada) para a energia do estado fundamental $e_0(m)$ (a) e a sua segunda derivada d^2e_0/dm^2 (b) em função da magnetização m , para densidade fixa $n = 0.5$. Para diversos valores de U . No caso do BA, d^2e_0/dm^2 é calculado numericamente por ajuste local (mínimos quadrados) aos 40 pontos da tabela, após filtrar a faixa ruidosa $0.05 \leq m \leq 0.11$	94
Figura 31 – Comparação entre a energia do estado fundamental $e_0(m)$ (coluna da esquerda) e a sua segunda derivada d^2e_0/dm^2 (coluna da direita) em função da magnetização m , para densidade fixa $n = 1$. Cada linha corresponde a um valor de U (de cima para baixo: $U = 2, 4, 6, 8$). A curva tracejada vermelha é o funcional FVC (expressão analítica); a curva preta contínua é o “exato numérico” obtido a partir do Bethe–Ansatz (BA). As duas curvas são avaliadas nos mesmos valores de m da tabela do BA; no caso do BA, d^2e_0/dm^2 é calculado numericamente por ajuste local (mínimos quadrados) aos 40 pontos da tabela, após filtrar a faixa ruidosa $0.05 \leq m \leq 0.11$	95

- Figura 32 – Erro médio relativo (EMR) obtido via ACO para diferentes conjuntos de parâmetros P . As combinações de maior dimensionalidade apresentam os melhores desempenhos, em especial P_1, P_2, P_3 e P_1-P_5 101
- Figura 33 – Comparação entre as curvas de energia (a) e segunda derivada (b) para os métodos FVC, Nelder–Mead e ACO-like em diferentes interações U . 102

Lista de tabelas

Tabela 1	– Espaço de parâmetros por cenário ($t = 1$, OBC).	57
Tabela 2	– Desvios percentuais relativos da energia fundamental $D\%(e_0)$, do perfil médio de densidade $\bar{D}\%(n)$ e da entropia média de emaranhamento $D\%(\bar{S})$ para diferentes sistemas 1D no regime $U = 8$. Valores adaptados de ^[2]	74
Tabela 3	– Comparativo entre Nelder–Mead e ACO-like sob as mesmas condições e métrica (EMR).	101
Tabela 4	– Comparação dos métodos de otimização para $U = 3$ e $U = 7$, em $n = 1$, considerando energia (e_0) e segunda derivada (d^2).	103
Tabela 5	– Testes da otimização via ACO-like em diferentes conjuntos de parâmetros e configurações de malha.	103
Tabela 6	– Erro médio relativo (%) para U fixo em $n = 1$ e $n = 0.5$. Em negrito, o menor EMR em cada coluna. Cálculo em malha de 50 pontos equidistantes em $m \in [0.05, 1]$, excluindo $m \in [0.05, 0.11]$	104

Lista de abreviaturas e siglas

PBC	<i>Periodic Boundary Conditions</i> (condições periódicas de contorno).
DMRG	<i>Density Matrix Renormalization Group</i> (grupo de renormalização da matriz densidade).
DFT	<i>Density Functional Theory</i> (teoria do funcional da densidade).
MPS	<i>Matrix Product State</i> (estado de produto de matrizes).
SVD	<i>Singular Value Decomposition</i> (decomposição em valores singulares).
LDA	<i>Local Density Approximation</i> (aproximação da densidade local).
KS	<i>Kohn–Sham</i> (sistema auxiliar não interagente).
ITensor	Biblioteca de redes tensoriais usada nas simulações.
BA	Equações acopladas de Lieb Wu via Bethe-Ansatz
LSOC	Parametrização de Lima–Silva–Oliveira–Capelle para o Hubbard 1D.
FVC	Parametrização de França–Vieira–Capelle para o Hubbard 1D.

Lista de símbolos

N	Número de elétrons.
M_{nuc}	Número de núcleos no sistema.
$\hbar$	Constante de Planck reduzida [J s].
m_e	Massa do elétron [kg].
e	Módulo da carga do elétron [C].
M_a	Massa do núcleo a [kg].
Z_a	Número atômico (carga nuclear) do núcleo a .
$\vec{r}_i$	Vetor posição do elétron i [m]; $i = 1, \dots, N$.
$\vec{R}_a$	Vetor posição do núcleo a [m]; $a = 1, \dots, M_{\text{nuc}}$.
$r_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j $	Distância elétron–elétron [m].
$r_{ia} = \vec{r}_i - \vec{R}_a $	Distância elétron–núcleo [m].
$R_{ab} = \vec{R}_a - \vec{R}_b $	Distância núcleo–núcleo [m].
$ \cdot $	Norma euclidiana de um vetor.
∇_i	Gradiente na coordenada do elétron i ; ∇_i^2 é o Laplaciano.
∇_a	Gradiente na coordenada do núcleo a ; ∇_a^2 é o Laplaciano.
d	Dimensionalidade do espaço físico (tipicamente $d = 3$).
$\mathcal{H}$	Espaço de Hilbert do sistema.
$\otimes$	Produto tensorial entre espaços locais.
M_{grid}	Número de pontos por coordenada da malha espacial.
$(M_{\text{grid}})^{dN}$	Número total de pontos da malha no espaço de configurações de N partículas em d dimensões (total de dN graus de liberdade): $M_{\text{tot}} = (M_{\text{grid}})^{dN}$.

$\hat{H}$	Hamiltoniano total (operador de energia do sistema quântico).
L	Número de sítios da cadeia.
n	Densidade eletrônica média, $n = N/L$.
m	Magnetização (polarização por sítio), $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$.
M	Magnetização total do sistema, $M = N_{\uparrow} - N_{\downarrow}$.
$\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger}, \hat{c}_{i\sigma}$	Criação/aniquilação no sítio i com spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$.
$\hat{n}_{i\sigma}$	Operador número no sítio i (spin σ); $\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}$.
t_{ij}	Amplitude de hopping (itinerância) entre sítios i e j (energia).
U_i	Interação local (on-site) no sítio i ; homogêneo: $U_i = U$.
$V_{i\sigma}$	Potencial externo no sítio i (dependente de σ).
$T_s(n, m)$	Energia cinética efetiva (termo de bandas) na solução BA.
$E_H(n, m)$	Energia de Hartree.
$E_{xc}(n, m, U)$	Energia de troca-correlação.
$e(n, m, U)$	Energia por sítio do estado fundamental.
$E_0(n, m, U)$	Energia total do estado fundamental ($E_0 = L e$).
Δ_c	Gap de carga; em regime de Mott, $\Delta_c \sim U/t$.
k	Quasi-momento (espaço de Brillouin).
λ	Rapidez (parâmetro de spin) na solução BA.
$\rho(k)$	Densidade de estados de carga.
$\sigma(\lambda)$	Densidade de estados de spin.
Q, B	Limites dos superiores de $\rho(k)$ e $\sigma(\lambda)$ (funções de n, m).
$a_n(x)$	Núcleo do BA: $a_n(x) = \frac{1}{2\pi} \frac{2nu}{(nu)^2 + x^2}$.
u	Parâmetro adimensional de interação (Lieb–Wu), $u = U/(4t)$.

$T = 0$	Temperatura nula.
$ \psi\rangle$	Vetor de estado puro no espaço de Hilbert.
$A_i^{\sigma_i}$	Tensor local do MPS no sítio i para o estado físico σ_i .
σ_i	Estado local do sítio i (ex.: 0, $\uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow$).
D	Dimensão máxima de vínculo (bond dimension) do MPS.
<i>sweep</i>	Varredura do DMRG ao longo da cadeia.
$n(\mathbf{r})$	Densidade eletrônica espacial (formulação contínua).
$V(\mathbf{r})$	Potencial externo contínuo.
$E[n]$	Funcional de energia total.
$T[n]$	Termo cinético (exato, em geral desconhecido).
$U[n]$	Termo de interação elétron–elétron no funcional.
$T_s[n]$	Energia cinética do sistema não interagente (Kohn–Sham).
$E_H[n]$	Energia de Hartree (clássica).
$E_{XC}[n]$	Energia de troca–correlação (funcional).
$V_{KS}(\mathbf{r})$	Potencial efetivo de Kohn–Sham: $V + V_H + V_{XC}$.
$\phi_i(\mathbf{r})$	Orbitais de Kohn–Sham.
$W_2, W_\uparrow, W_\downarrow, W_0$	Probabilidades localmente: dupla ocupação, $\uparrow, \downarrow$, vazio.
$e^{\text{LSOC}}(n, U)$	Energia por sítio (LSOC).
$\beta(U)$	Parâmetro implícito do BA em meia-ocupação.
$J_0(x), J_1(x)$	Funções de Bessel (ordens 0 e 1).
$e_0^{\text{FVC}}(n, m, U)$	Energia por sítio (FVC).
$\alpha(n, m, U)$	Expoente que deforma $\beta(U)$ na FVC.
$\gamma(n, m, U)$	Escala do termo $\cos(\pi m/\gamma)$ na FVC.

E_c	Energia de correlação (com $E_{xc} = E_x + E_c$ quando a troca é separada).
ρ	Matriz densidade do sistema; $\rho_A = \text{Tr}_B \rho$ reduzida do subsistema A .
Tr	Traço (e traços parciais Tr_A, Tr_B).
$S(\rho)$	Entropia de von Neumann: $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho)$.
S^{DFT}	Entropia de von Neumann via DFT.
S^{DMRG}	Entropia de von Neumann via DMRG.
S_L	Entropia linear: $S_L = 1 - \text{Tr}(\rho^2)$; $\gamma = \text{Tr}(\rho^2)$ é a pureza.
S_{typ}	Entropia típica (média geométrica de S_{vN} nos sítios).
ρ_{AB}	Estado bipartido em $A \otimes B$.
χ	Susceptibilidade magnética: $\chi = (\partial^2 E_0 / \partial m^2)^{-1} \Big _{m=0}$.
H	Campo magnético externo.
μ	Potencial químico: $\mu = \partial E_0 / \partial N$ (ou $\partial e / \partial n$ no limite termodinâmico).
μ_+, μ_-	Potenciais químicos para adicionar/remover partícula: $E_0(N \pm 1) - E_0(N)$.
Δ	Lacuna (gap) de carga: $\Delta = \mu_+ - \mu_-$.
F	Energia livre (a $T = 0$, $F = E_0$).

Sumário

1	Introdução	31
2	Fundamentos Teóricos	34
2.1	<i>O problema de muitos corpos</i>	34
2.2	<i>O modelo de Hubbard</i>	37
2.3	<i>Solução via Bethe Ansatz</i>	39
3	Metodologia	41
3.1	<i>Métodos Computacionais</i>	41
3.1.1	Grupo de Renormalização da Matriz Densidade - DMRG	41
3.1.2	Teoria do funcional da densidade - DFT	43
3.2	<i>Parametrizações da energia do estado fundamental</i>	46
4	Fenômenos quânticos	49
4.1	<i>Emaranhamento</i>	49
4.1.1	Entropia de von Neumann	51
4.1.2	Entropia Linear	52
4.1.3	Entropia Típica	53
4.2	<i>Susceptibilidade magnética</i>	54
5	Resultados e Discussão	56
5.1	<i>Comparação entre DFT e DMRG em transições de fase quântica em nanoestruturas unidimensionais</i>	56
5.1.1	Cadeias homogêneas finitas	57
5.1.2	Super-redes	63
5.1.3	Confinamento Harmônico	69
5.2	<i>Análise das entropias: von Neumann, Linear, Típica</i>	74
5.2.1	von Neumann vs. Linear	75
5.2.2	von Neumann vs Típica	83
5.3	<i>Parametrização da energia do estado fundamental</i>	89
5.3.1	Malhas de Bethe Ansatz	91
5.3.2	Limitações da FVC frente à solução de Bethe ansatz	93

5.3.3	A otimização: Algoritmos utilizados	96
5.3.4	Estratégia de otimização: resultados e impacto do FVC nas curvas .	100
6	Conclusão	106
	Referências¹	108
	 APÊNDICES	 118
	Apêndice A – Derivadas: Emaranhamento e Susceptibilidade	119

¹ De acordo com a Associação Brasileira de Normas Técnicas. NBR 6023.

1 Introdução

A combinação entre simplicidade formal e riqueza fenomenológica caracteriza o modelo proposto em 1963 por John Hubbard, conhecido como *modelo de Hubbard* [3]. Desde então, ele se tornou uma referência central na física da matéria condensada, amplamente utilizado para investigar sistemas unidimensionais (e bidimensionais) fortemente correlacionados. Sua relevância decorre do fato de descrever ao menos qualitativamente fenômenos fundamentais, como superfluidos [4, 5, 6], supercondutividade não convencional [7, 8, 9, 10], marcadores topológicos [11], *além de ser simulado com átomos frios em redes ópticas* [12, 13, 14, 15], desordem [16, 17, 18], transições de Mott [19, 20, 21, 22] e transições de fase quântica [23, 24, 2].

Com o avanço das pesquisas, o modelo extrapolou o campo teórico e vem sendo aplicado de forma consistente em contextos experimentais, com grau de aplicabilidade que depende da plataforma/material estudado. Hoje, serve de base para interpretar resultados em sistemas reais, como gases ultrafrios em redes ópticas unidimensionais [25, 26], fios quânticos [27], nanotubos de carbono [28, 27], cadeias de cupratos [29] e materiais orgânicos quase unidimensionais [30, 31]. Assim, consolidou-se como ferramenta indispensável para teoria e experimentação em sistemas de baixa dimensão.

Apesar do poder descritivo, o modelo de Hubbard 1D apresenta desafios. No caso homogêneo, pode ser resolvido exatamente por meio das integrais acopladas de Lieb–Wu [32] (via *Bethe Ansatz* [33]). Entretanto, cenários mais realistas — envolvendo desordem [34], confinamentos harmônicos [2] ou super-redes [35] — escapam dessa abordagem exata e exigem metodologias complementares.

Entre essas metodologias, destacam-se a Teoria do Funcional da Densidade (DFT) [36, 37] e o Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG) de interações de curto alcance [38, 39]. O DMRG é hoje considerado praticamente exato para sistemas unidimensionais, dada sua alta acurácia na descrição de correlações e transições de Mott [12, 40]. Contudo, seu custo computacional pode ser elevado: dependendo do tamanho da cadeia e dos detalhes da implementação, as simulações podem demandar de horas a dias.

Métodos aproximados de menor custo, como a DFT, são cruciais. Embora exata em princípio, a DFT depende do funcional de troca e correlação; na prática, usa-se suas aproximações, permitindo tratar em minutos super-redes, cadeias com confinamento

harmônico e sistemas desordenados. Por isso, estudos comparativos entre DMRG e DFT ajudam a calibrar o compromisso entre acurácia e escalabilidade na detecção de transições de fase quânticas [2].

O modelo de Hubbard estabelece uma estrutura teórica clara para o estudo de correlações eletrônicas, e os esforços em torno de sua exploração convergem para um objetivo comum: compreender fenômenos quânticos cuja origem está na presença de correlações eletrônicas sem análogo clássico. Entre os indicadores de transições de fase em sistemas unidimensionais, destacam-se a suscetibilidade magnética^[41, 42], o potencial químico^[43, 44] e, em especial, o emaranhamento quântico^[45, 46] — um dos fenômenos mais investigados atualmente.

O emaranhamento quântico é um recurso central da física/química quântica. Por definição emaranhamento é a propriedade pela qual dois subsistemas quânticos (A e B, por exemplo) permanecem correlacionados em diferentes graus, de modo que a medida em um deles fornece imediatamente informações sobre o outro, independentemente da distância que os separa [47]. Este fenômeno vem sendo demonstrado experimentalmente há décadas em testes de Bell e protocolos de informação quântica. Em 2019, obteve-se a primeira imagem direta de correlações do tipo Bell com fótons, que destacou-se como um marco ilustrativo do emaranhamento [1].

Para tornar explícita a presença de emaranhamento (em estados puros ou próximos do fundamental, isto é, a baixas temperaturas), empregamos quantificadores complementares: (i) a entropia de von Neumann [48, 47], padrão para emaranhamento bipartido; (ii) a entropia linear [49], que mede mistura/pureza; e (iii) a entropia típica [50, 51], baseada em médias geométricas que destacam o comportamento típico em presença de desordem. Em conjunto, elas oferecem análises complementares da estrutura de correlações quânticas.

Diante disso, é crucial escolher a medida de emaranhamento adequada ao problema. Em linhas gerais, a entropia de von Neumann é considerada uma medida rigorosa por capturar com precisão a mistura quântica da matriz densidade reduzida, no entanto seu termo logarítmico gera desafios numéricos. Já a entropia linear é uma aproximação mais simples, associada à pureza do estado reduzido, mas que também pode ser obtida como primeiro termo da expansão de Taylor da von Neumann^[52]. A entropia típica caracteriza o comportamento local em sistemas desordenados e fortemente correlacionados, e é inspirada na média geométrica (ou típica) da densidade local de estados (LDOS)^[53, 54]. Diante dessas opções, colocam-se questões centrais: *Todas são capazes de capturar o emaranhamento*

global e local de um sistema? As aproximações e médias preservam sua sensibilidade às transições de fase quânticas, em especial ao emaranhamento?

Para responder a essas questões, é preciso entender como os cálculos são realizados na prática. Embora a DFT seja poderosa, sua eficácia depende criticamente da qualidade das parametrizações empregadas no funcional de troca e correlação e na energia do estado fundamental, responsáveis por recuperar resultados exatos (por exemplo, a partir de Lieb–Wu) e por viabilizar derivadas analíticas da energia, associadas a observáveis como: potencial químico ($\partial e/\partial n$), emaranhamento ($\partial e/\partial U$) e suscetibilidade magnética ($\partial^2 e/\partial m^2$). Contudo, parametrizações consagradas, como a FVC (França–Vieira–Capelle)^[55], embora reproduzam com boa fidelidade a energia e o emaranhamento, enfrentam limitações estruturais — por exemplo, a dificuldade em recuperar corretamente a curvatura da energia em diferentes regimes de magnetização. Aprimorar esses funcionais é, portanto, passo essencial para tornar a DFT realmente confiável no estudo de sistemas heterogêneos unidimensionais magnetizados e para aproximar, de modo consistente, medidas experimentais e previsões teóricas.

Esta tese estrutura-se em três estudos:

(i) comparar sistematicamente DMRG e DFT em cenários representativos (homogêneos, com confinamento e com super-redes), mapeando regimes de validade e limites de cada método, e avaliando em especial a sensibilidade das medidas de emaranhamento para a captura de transições de fase;

(ii) avaliar medidas alternativas de emaranhamento — entropia linear e entropia típica — confrontando-as com a entropia de von Neumann média em cadeias do modelo de Hubbard, a fim de mapear regimes de validade e de falha em função de preenchimento e interação, quantificar impactos na identificação de máximos/mínimos e no diagnóstico de transições de fase, e oferecer critérios práticos para a escolha da métrica adequada;

(iii) construir e otimizar um novo funcional de densidade para o modelo de Hubbard 1D magnetizado, calibrado para reproduzir com alta fidelidade a energia em função da magnetização e recuperar o comportamento de suas derivadas.

Por fim, apresentaremos as conclusões finais.

2 Fundamentos Teóricos

2.1 O problema de muitos corpos

Um dos maiores desafios da mecânica quântica é o problema de muitos corpos interagentes^[56]. Ele decorre da enorme complexidade de sistemas compostos por diversas partículas interagindo entre si, o que torna impraticável determinar a função de onda completa a partir da equação de Schrödinger^[46, 57].

A Figura 1 mostra, de forma esquemática, partículas distribuídas no espaço, como ponto de partida para a descrição de sistemas de muitos corpos interagentes. Nela observamos interações repulsivas entre elétrons (esferas azuis, nas posições $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$) e entre núcleos (esferas vermelhas, nas posições $\vec{R}_a$ e $\vec{R}_b$), além de interações atrativas entre elétrons e núcleos. Em princípio, essas interações são mediadas pela força de Coulomb, que decai com o quadrado da distância entre as partículas. Uma descrição consistente, porém, requer o uso da mecânica quântica, que introduz restrições fundamentais — como o princípio de exclusão de Pauli. Como elétrons são férmions de spin 1/2, a função de onda total é assimétrica sob troca de duas partículas, por consequência, dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico. No espaço real, esse comportamento se manifesta como um "buraco de troca" para elétrons com mesmo spin — mesmo na ausência de potencial Coulombiano, a dupla ocupação é suprimida (chamada de pressão de Fermi). Já elétrons de spin opostos podem ocupar a mesma região espacial. Essa construção é descrita pelos determinantes de Slater^[58] que formalizam a antissimetrização e originam termos de troca em Hartree-Fock e a troca-correlação na Teoria do Funcional da Densidade^[59, 60, 37, 61].

A formulação quântica dessas contribuições leva ao Hamiltoniano de muitos corpos, que representa matematicamente a soma das energias envolvidas e constitui um ponto de partida para o estudo das propriedades eletrônicas da matéria.

O Hamiltoniano $\hat{H}$ é o operador que descreve a energia total do sistema, que pode ser escrito como:

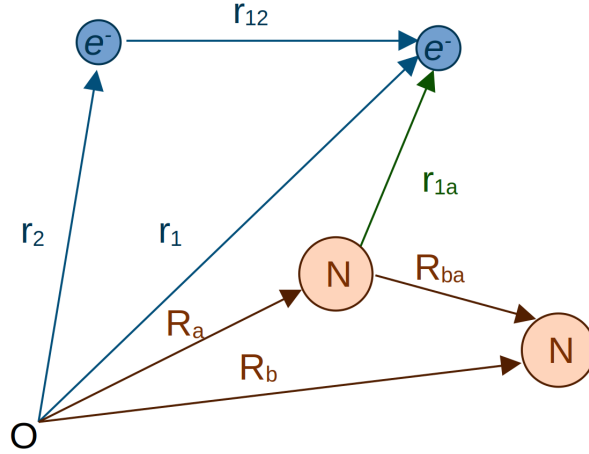


Figura 1 – Representação esquemática das coordenadas e interações em um sistema de muitos corpos. Os círculos maiores em vermelho representam os núcleos nas posições $\vec{R}_a$ e $\vec{R}_b$, enquanto os círculos menores em azul representam os elétrons, com posições $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$. Os vetores indicam distâncias fundamentais para a construção do Hamiltoniano de muitos corpos, como r_{12} , r_{1a} e R_{ba} . Fonte: Autor (2025).

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & \underbrace{\sum_{a=1}^{M_{nuc}} \left(-\frac{\hbar^2}{2M_a} \nabla_a^2 \right)}_{\text{energia cinética dos núcleos}} + \underbrace{\sum_{a=1}^{M_{nuc}-1} \sum_{b=a+1}^{M_{nuc}} \frac{Z_a Z_b e^2}{|\vec{R}_a - \vec{R}_b|}}_{\text{repulsão núcleo-núcleo}} - \underbrace{\sum_{a=1}^{M_{nuc}} \sum_{i=1}^N \frac{Z_a e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_a|}}_{\text{atração elétron-núcleo}} \\
 & + \underbrace{\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 \right)}_{\text{energia cinética dos elétrons}} + \underbrace{\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}}_{\text{repulsão elétron-elétron}}
 \end{aligned} \tag{1}$$

onde:

- M_a : massa do núcleo a ;
- Z_a : número atômico (carga nuclear) do núcleo a ;
- m_e : massa do elétron;
- e : módulo da carga do elétron;
- ∇^2 : operador Laplaciano que atua sobre a coordenada espacial indicada.

O Hamiltoniano acima não apenas evidencia a complexa rede de interações entre as partículas, mas também determina, por meio da equação de Schrödinger, a função de onda de muitos corpos que descreve os estados quânticos possíveis do sistema — isto é, o conjunto de estados fundamentais e excitados acessíveis segundo sua estrutura de energia. No caso idealizado de partículas livres, não há interações. Cada partícula pode ser descrita separadamente, e a função de onda total é apenas o produto das funções de cada uma

delas^[57]. Já em sistemas reais, as interações ligam as partículas entre si. A função de onda então depende de todas as coordenadas ao mesmo tempo e não pode mais ser fatorada, refletindo as correlações do sistema.

Uma consequência direta desse acoplamento é que a função de onda passa a habitar um espaço de alta dimensionalidade. Para N partículas em d dimensões, ela depende de dN variáveis. Do ponto de vista computacional, representar essa função exige discretizar cada coordenada em uma malha ou base, o que leva a um número de pontos que cresce como M_{grid}^{dN} , onde M_{grid} é o número de pontos por dimensão. Por exemplo, 100 partículas em três dimensões requerem uma função definida em $\mathbb{R}^{300}$. Embora essa formulação seja bem definida matematicamente, do ponto de vista numérico ela é inviável: discretizar cada coordenada em apenas M pontos levaria a M_{grid}^{300} valores a serem armazenados. Assim, mesmo valores modestos de N resultam em requisitos de memória e processamento que crescem exponencialmente com o número de partículas, já que cada nova coordenada adiciona uma dimensão ao espaço de estados. Isso torna impraticável a solução direta da equação de Schrödinger para sistemas reais, que tipicamente envolvem da ordem de 10^{24} partículas (número de avogrado)^[56, 62, 63, 64].

Além do tratamento contínuo da função de onda, é útil explicitar a noção de espaço de Hilbert: um espaço vetorial complexo com produto interno definido positivo e completo, no qual os estados quânticos são vetores. Esse espaço pode ser infinito (por exemplo, $L^2(\mathbb{R})$ nas representações contínuas de posição ou momento; os vetores $|x\rangle$ e $|p\rangle$ são autovetores generalizados que geram decomposições do estado) ou finito quando o sistema é descrito por um número finito de graus de liberdade. Em muitas aplicações recorre-se a modelos de rede, que aproximam o sistema por um conjunto discreto de sítios (posições cristalinas ou orbitais relevantes), resultando em um espaço de Hilbert de dimensão finita para redes finitas, ou infinita porém enumerável no limite de rede infinita.

Para ilustrar, consideremos primeiro o caso mínimo em que cada sítio possui apenas dois números quânticos possíveis, correspondentes ao spin local $\uparrow$ ou $\downarrow$. Nesse cenário, uma cadeia de dez sítios já gera $2^{10} = 1024$ estados de base. Em sistemas fermiônicos, porém, a descrição local precisa incluir também o número de partículas (carga), além do spin. Cada sítio é então caracterizado por dois números quânticos: o número de ocupação ν e o spin s_z . Isso resulta em quatro estados locais distintos: vazio ($\nu = 0$), ocupado com spin $\uparrow$ ($\nu = 1, S_z = +1/2$), ocupado com spin $\downarrow$ ($\nu = 1, S_z = -1/2$) e duplamente ocupado ($\nu = 2$). Nesse caso, uma cadeia de dez sítios possui $4^{10} \approx 10^6$ estados de base. Esse

exemplo ilustra como a incorporação de novos números quânticos na descrição aumenta significativamente a dimensão do espaço de Hilbert e, conseqüentemente, a complexidade do problema de muitos corpos.

Diante dessa dificuldade, adotamos modelos efetivos que projetam a dinâmica no setor de baixa energia, dispensando graus de liberdade que pouco afetam as correlações eletrônicas (exemplo, graus nucleares explícitos, múltiplas bandas altas, acoplamentos fracos). Vale destacar, que isso, em geral, não reduz a dimensão do espaço de Hilbert do modelo resultante: no Hubbard fermiônico de uma banda, o espaço possui 4^N estados e um autoestado arbitrário pode exigir essa dimensão completa; tampouco há garantia de compressão por MPS com pequena dimensão de enlace. O ganho está em capturar a física relevante com menos parâmetros e escalas controladas. Em regimes específicos, projeções adicionais podem restringir o subespaço efetivo (exemplo, o modelo $t-J$ no limite $U \gg t$), mas isso é uma hipótese extra. Na próxima seção, enfocamos o paradigma mais influente para esses sistemas: o modelo de Hubbard [65, 57, 66].

2.2 O modelo de Hubbard

A teoria de bandas descreve com sucesso muitos sólidos, tratando os elétrons como quase independentes e incorporando as interações apenas de forma perturbativa. Essa abordagem, no entanto, falha em materiais fortemente correlacionados, como aqueles que envolvem orbitais d de metais de transição ou orbitais f de terras raras^[67], nos quais a repulsão de Coulomb local desempenha um papel determinante. Para lidar com esse cenário, o modelo de Hubbard foi concebido como uma descrição minimalista^[3, 68, 69]. Nesses sistemas, os estados eletrônicos podem ser representados de duas formas complementares: como ondas estendidas pela rede cristalina (estados de Bloch) ou como orbitais localizados no espaço real (funções de Wannier)^[70, 12]. Enquanto os primeiros são adequados para descrever elétrons itinerantes, os segundos oferecem uma aproximação viável quando as interações de curto alcance são relevantes. No Hamiltoniano completo da Eq. (1), essa interação está incluída no termo $\sum_{i<j} e^2/|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$, cujo potencial decai apenas como o inverso da distância $1/r$, caracterizando uma força de longo alcance. Em sólidos, no entanto, os efeitos de blindagem^[71] reduzem fortemente esse alcance, tornando a contribuição local

dominante. Nessa linguagem, cada orbital de Wannier pode ser visto como um sítio da rede, no qual os elétrons interagem localmente por meio do parâmetro U .

A sobreposição entre orbitais vizinhos permite que os elétrons tunelam entre sítios i e j , dando origem ao termo de hopping t_{ij} . Esse termo resulta da energia cinética dos elétrons e da interação com os núcleos já presentes no Hamiltoniano fundamental de muitos corpos (Equação 1), que em um cristal se traduzem no potencial periódico e na formação de bandas. No modelo de Hubbard, essa contribuição é representada de forma efetiva pela aproximação tight-binding em orbitais de Wannier. A competição entre a itinerância (t_{ij}) e a interação local (U) fornece a estrutura essencial do modelo.

O Hamiltoniano do modelo de Hubbard pode então ser expresso como:

$$\hat{H} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} V_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (2)$$

onde $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ e $\hat{c}_{i\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação de elétrons com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ no sítio i , em que $V_{i\sigma}$ descreve potenciais externos atuando sobre a densidade locais $\hat{n} = \hat{n}_{i\downarrow} + \hat{n}_{i\uparrow}$. (Figura 2 para uma visão esquemática de como os termos do modelo descrevem a dinâmica do sistema).

O elemento central do modelo de Hubbard é a interação local U , que pode assumir caráter repulsivo ou atrativo^[67]. No regime repulsivo ($U > 0$), o termo U reproduz de maneira simplificada a repulsão coulombiana entre elétrons: a dupla ocupação de um orbital localizado ou sítio da rede acarreta um custo energético, e em semipreenchimento essa penalização pode abrir uma lacuna de energia (normalmente chamado de gap) da ordem $\Delta_c \sim U/t$ nas excitações de carga, caracterizando um isolante de Mott^[72] — fenômeno que não pode ser explicado pela teoria de bandas. Em contraste, no regime atrativo ($U < 0$), não se trata de inverter a interação de Coulomb e postular uma atração fundamental entre elétrons. O que o modelo descreve é uma interação efetiva atrativa, local, que pode emergir de forças mediadoras. O movimento de um elétron deforma a rede cristalina e cria um potencial que pode atrair outro elétron, de modo que ambos passam a se comportar como se interagissem por uma força atrativa efetiva. Esse mecanismo está na base da formação de pares de Cooper e do surgimento de estados coletivos de supercondutividade (ou superfluidez, no caso atrativo).

No âmbito do modelo de Hubbard, a competição entre o hopping t e a repulsão local U , em presença de potenciais externos V homogêneos ou heterogêneos, permite descrever uma ampla gama de *fases e transições de fase quânticas* relevantes — incluindo

supercondutividade não convencional [7, 8], superfluidez [4], e isolantes de Mott (cuja transição metal–isolante a $T=0$ é um caso particular de transição de fase quântica) [19].

Para capturar *desordem* e outros fenômenos além do Hubbard homogêneo, é necessário *estender* o Hamiltoniano com termos explícitos (exemplo., energias locais aleatórias ε_i , interações de vizinhos V_1, V_2 , ou acoplamentos adicionais), o que amplia o escopo para marcadores topológicos [11], física de átomos frios em redes ópticas [12, 13], e fenômenos induzidos por desordem [16], entre outros [23, 24, 2].

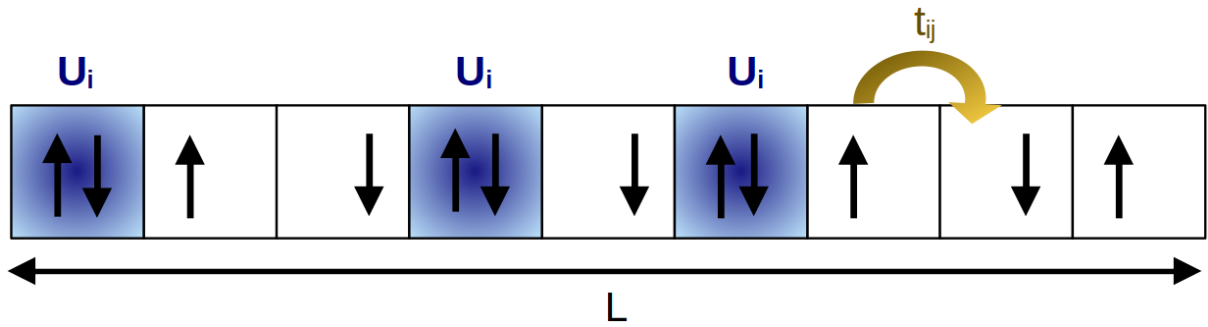


Figura 2 – Representação esquemática do modelo de Hubbard em uma cadeia de L sítios. t_{ij} indica a itinerância (hopping) entre vizinhos, V_{ij} potencial externo e U_i a interação local de Coulomb.

2.3 Solução via Bethe Ansatz

Em sistemas homogêneos - isto é, com parâmetros uniformes e potencial externo nulo - o modelo de Hubbard unidimensional admite uma solução exata pelo Bethe Ansatz^[33, 32]. Essa solução considera o limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$), com hopping entre primeiros vizinhos, condições de contorno periódicas (PBC, sigla do inglês *Periodic Boundary Conditions*) e temperatura nula ($T = 0$).

A relevância dessa solução vai além do interesse formal: nesta tese, a malha gerada pelas equações de Lieb–Wu será utilizada para a otimização do funcional proposto. Assim, o Bethe Ansatz fornece um referencial exato contra o qual métodos aproximativos podem ser calibrados.

A solução de Lieb–Wu parte da hipótese de espalhamento fatorável, em que o estado quântico é descrito como uma superposição de ondas planas caracterizadas por

números quânticos bem definidos. Com isso, o problema de muitos corpos é reduzido a um conjunto de equações integrais acopladas para as densidades de carga e spin:

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} + \cos k \int_{-B}^B a_1(\sin k - \lambda) \sigma(\lambda) d\lambda, \quad (3)$$

$$\sigma(\lambda) = \int_{-Q}^Q a_1(\lambda - \sin k) \rho(k) dk - \int_{-B}^B a_2(\lambda - \lambda') \sigma(\lambda') d\lambda', \quad (4)$$

em que $\rho(k)$ é a densidade de estados de carga no espaço de quasimomentos k , $\sigma(\lambda)$ é a densidade de estados de spin, Q e B são os limites de integração, e os núcleos $a_n(x)$ são definidos como:

$$a_n(x) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{2nu}{(nu)^2 + x^2}. \quad (5)$$

A partir da resolução dessas equações obtêm-se expressões analíticas para quantidades físicas importantes, como a energia cinética T_s , a energia de Hartree E_H e a energia total do estado fundamental E_0 :

$$T_s[n, m] = -\frac{4}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{2}\right), \quad (6)$$

$$E_H[n, m] = \frac{U}{4}(n^2 - m^2), \quad (7)$$

$$E_0(n, m, U) = T_s[n, m] + E_H[n, m] + E_{xc}[n, m, U]. \quad (8)$$

Apesar de sua elegância, a solução de Lieb–Wu apresenta limitações conhecidas^[32, 12]:

- Aplica-se apenas a sistemas homogêneos, com t e U constantes e potencial externo nulo ($V_i = 0$);
- Requer o limite termodinâmico ($N, L \rightarrow \infty$) com densidade fixa N/L ;
- Depende da integrabilidade, garantida apenas em cadeias unidimensionais com espalhamento fatorável e condições periódicas de contorno;
- Não contempla efeitos de bordas abertas, impurezas ou potenciais externos, que quebram a simetria translacional.

Mesmo com essas restrições, a solução de Lieb–Wu continua sendo uma referência teórica central. Ao longo desta tese, ela será utilizada como base para a construção e calibração do funcional proposto, permitindo validar resultados aproximados a partir de dados exatos^[12, 73].

3 Metodologia

3.1 Métodos Computacionais

A descrição de sistemas de muitos corpos eletrônicos exige o uso de técnicas numéricas capazes de lidar com a complexidade do espaço de Hilbert. Entre os diversos métodos existentes, dois se destacam pela complementaridade: o *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG)^[74] e a Teoria do Funcional da Densidade (DFT)^[75]. O DMRG é um método variacional de alta precisão, particularmente adequado para sistemas unidimensionais e fortemente correlacionados, permitindo acessar o estado fundamental com controle sistemático sobre o erro de truncamento. Já a DFT tornou-se uma das principais ferramentas em física e química, ao possibilitar o estudo de sistemas de grande porte com custo computacional reduzido, ainda que dependendo da qualidade dos funcionais de troca e correlação adotados. Nesta seção, apresentamos a formulação básica desses métodos, bem como parametrizações específicas do modelo de Hubbard em uma dimensão, utilizadas ao longo desta tese.

3.1.1 Grupo de Renormalização da Matriz Densidade - DMRG

O *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG) foi introduzido por White nos anos 1990^[38, 39], inspirado em ideias do grupo de renormalização de Wilson^[76], como um esquema variacional que realiza truncagens ótimas do espaço de Hilbert selecionando os auto-estados de maior peso da matriz densidade reduzida de bipartições sistema. Revisões abrangentes da formulação original e de suas primeiras aplicações podem ser encontradas em^[77].

Posteriormente, o método foi reinterpretado na linguagem de Estados de Produto de Matrizes (MPS, sigla do inglês)^[74, 78, 79]. A ideia central é que, em vez de armazenar a função de onda completa — cujo número de coeficientes cresce exponencialmente com o tamanho do sistema —, pode-se reescrevê-la de forma compacta como um MPS. Mais precisamente, a função de onda de um sistema unidimensional com L sítios pode ser representada como

$$|\psi\rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} A_1^{\sigma_1} A_2^{\sigma_2} \cdots A_L^{\sigma_L} |\sigma_1 \sigma_2 \cdots \sigma_L\rangle, \quad (9)$$

onde σ_i rotula o estado físico do sítio i [por exemplo, $\sigma_i \in \{0, \uparrow, \downarrow, \uparrow\downarrow\}$ no modelo de Hubbard] na base formada pelos estados $|\sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_L\rangle$.

Essa decomposição surge ao aplicar sucessivamente a Decomposição em Valores Singulares (SVD) à função de onda, vista como um grande tensor. Em cada bipartição da cadeia, a SVD separa os graus de liberdade locais do sítio em relação ao restante do sistema, introduzindo um índice de vínculo cujo tamanho corresponde ao número de valores singulares retidos. O parâmetro D , chamado de Dimensão Máxima de Vínculo, é justamente o limite máximo permitido para esses índices, ou seja, o número de “canais de correlação” que podem atravessar a fronteira entre duas partes da cadeia.

No caso extremo $D = 1$, cada tensor $A_i^{\sigma_i}$ se reduz a um número (um escalar), de modo que a função de onda total é simplesmente o produto dos estados locais de cada sítio. Nesse limite, não há correlação entre os sítios, e o estado descrito é puramente clássico, equivalente a um estado de produto sem estrutura quântica coletiva.

Quando $D > 1$, os índices de vínculo começam a codificar correlações entre diferentes partes do sistema. Por exemplo, já com $D = 2$ é possível descrever superposições coerentes de estados locais em que aparecem correlações quânticas não triviais entre blocos da cadeia. À medida que D cresce, aumenta-se o espaço de correlações representável, permitindo capturar desde correlações de curto alcance até estruturas de longo alcance mais complexas.

No limite $D \rightarrow \infty$, a representação em MPS torna-se exata, capaz de descrever qualquer estado quântico. Na prática, entretanto, a lei de área^[80] garante que, em sistemas unidimensionais com interações de curto alcance e gap de energia, a quantidade de correlação entre duas partes da cadeia permanece aproximadamente constante, independentemente do tamanho L . Isso implica que valores moderados de D já são suficientes para representar esses estados com alta precisão. Essa propriedade explica por que o DMRG se consolidou como o método de referência para sistemas unidimensionais: a função de onda pode ser descrita de forma compacta e controlada, permitindo simulações de cadeias muito longas com custo computacional moderado — em contraste com a diagonalização exata, cujo custo cresce exponencialmente com L .

O cálculo no DMRG começa a partir de uma função de onda inicial que respeita as simetrias do modelo, como conservação de número de partículas ou de magnetização. A otimização é realizada por meio de varreduras (*sweeps*) ao longo da cadeia: em cada passo, um ou dois sítios são selecionados, enquanto o restante do sistema é mantido fixo. Nesse subespaço reduzido, resolve-se um problema de autovalor efetivo que atualiza a função

de onda local. Em seguida, uma decomposição em valores singulares (SVD) reorganiza a informação, descartando os componentes de menor peso e controlando o *erro descartado*, de modo que a dimensão de vínculo nunca ultrapasse o valor máximo D . Esse procedimento é repetido sucessivamente até percorrer toda a cadeia.

Ao final de cada varredura, a energia e o erro descartado são monitorados, e o processo se repete até que critérios de convergência sejam satisfeitos (tipicamente, variações de energia menores que 10^{-8}). Em sistemas críticos (gapless), o crescimento mais acentuado das correlações pode demandar dimensões de vínculo maiores, mas o método segue sendo muito mais eficiente do que a diagonalização exata, permitindo simulações de cadeias longas com alta precisão.

Na prática, utilizamos a biblioteca `ITensor`^[81] como infraestrutura básica de redes tensoriais, que fornece construções padrão de MPS e operações sobre ele, além de rotinas elementares de DMRG. Entretanto, a maior parte das implementações empregadas neste trabalho foi desenvolvida especificamente no grupo de pesquisa, seguindo o desenvolvimento matemático detalhado em^[74, 82], de modo a adaptar e expandir essas ferramentas para as necessidades do problema investigado.

3.1.2 Teoria do funcional da densidade - DFT

Desde a década de 1990, a DFT consolidou-se como uma das principais ferramentas em física, química e ciência dos materiais, especialmente no estudo de problemas de muitos corpos. Sua popularidade decorre da capacidade de descrever sistemas cada vez mais complexos com custo computacional relativamente baixo, em comparação a métodos de alta exatidão, como o DMRG. No entanto, o desempenho da DFT está fortemente vinculado à escolha do funcional de troca e correlação, o que pode resultar em superestimações ou subestimações das energias calculadas, dependendo das aproximações adotadas.

A DFT derivou do trabalho desenvolvido por Hohenberg e Kohn^[37] e, posteriormente, por Kohn e Sham^[36], que demonstraram que a energia do estado fundamental E_0 pode ser obtida a partir da densidade eletrônica. A base desse método é fundamentada em dois teoremas. O primeiro teorema estabelece que a densidade eletrônica $n(r)$ determina unicamente o potencial externo $V(r)$ e, portanto, o estado fundamental do sistema:

$$n(r) \rightarrow V(r) \rightarrow E_0. \quad (10)$$

Assim, a energia do estado fundamental é uma função única da densidade eletrônica^[75]. O segundo teorema afirma que existe um funcional da densidade $E[n(r)]$ — que atinge seu valor mínimo para a densidade do estado fundamental — definido por:

$$E[n] = T[n] + U[n] + \int V(r)n(r)dr, \quad (11)$$

onde $T[n]$ é a energia cinética, $U[n]$ a interação entre elétrons e o último termo a interação com o potencial externo.

Para construir um método prático, Kohn e Sham introduziram um sistema auxiliar não interagente com a mesma densidade do sistema real, de modo que a energia total pode ser escrita como

$$E[n] = T_S[n] + E_H[n] + E_{XC}[n] + V[n], \quad (12)$$

onde $T_S[n]$ é a energia cinética do sistema não interagente, $E_H[n]$ a energia de Hartree e $E_{XC}[n]$ o funcional de troca e correlação^[83]. A minimização leva às equações de Kohn-Sham com o potencial efetivo

$$V_{KS}(r) = V(r) + V_H(r) + V_{XC}(r). \quad (13)$$

A aproximação mais simples para E_{XC} é a aproximação da densidade local (LDA)^[36, 84], definida como

$$E_{XC}^{LDA}[n(r)] = \int \varepsilon_{XC}^{hom}[n(r)] d^3r, \quad (14)$$

onde ε_{XC}^{hom} é a energia de troca e correlação por partícula de um gás de elétrons homogêneo. A LDA é particularmente adequada para sistemas em que a densidade varia lentamente no espaço, como sólidos cristalinos.

A solução das equações de Kohn-Sham exige um procedimento iterativo, conhecido como ciclo autoconsistente, ilustrado na Figura 3. Inicia-se com uma densidade tentativa $n(r)$, calcula-se o potencial $V_{KS}(r)$ e resolve-se a equação de Kohn-Sham para obter novos orbitais $\phi_i(r)$ e uma nova densidade $n(r)$. Esse processo é repetido até que a diferença entre densidades sucessivas seja menor que uma tolerância predefinida, caracterizando a convergência^[85, 83].

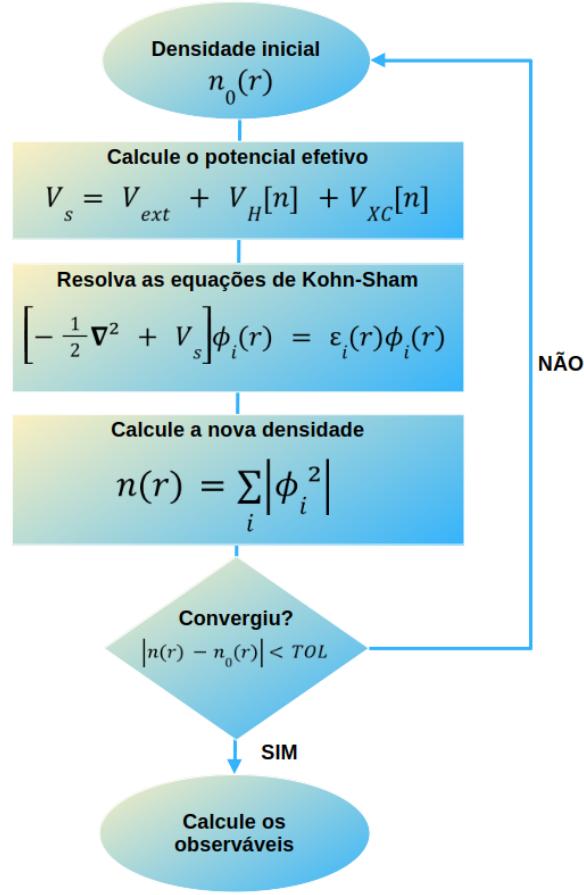


Figura 3 – Ciclo auto-consistente de Kohn-Sham. Fonte: Autor.

No caso do modelo de Hubbard, a LDA apresenta desvios da ordem de 1% para medidas de emaranhamento médio, mostrando-se eficiente. Entretanto, para cadeias homogêneas é necessário recorrer à solução numérica das integrais de Lieb-Wu (Equação 3), o que motiva o uso de parametrizações desenvolvidas a partir dessa solução^[55].

A partir do teorema de Hellmann-Feynman^[86], a probabilidade de dupla ocupação pode ser obtida pela derivada da energia fundamental por sítio e_0 em relação ao parâmetro de interação U :

$$W_2 = \frac{\delta e_0}{\delta U}. \quad (15)$$

As demais probabilidades seguem como

$$W_{\uparrow} = \frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{\delta U} + \frac{M}{2}, \quad W_{\downarrow} = \frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{\delta U} - \frac{M}{2}, \quad W_0 = 1 - n + \frac{\delta e_0}{\delta U}, \quad (16)$$

onde $M = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ é a magnetização do sistema.

Essas relações permitem calcular diretamente as entropias via DFT. Neste trabalho utilizamos duas parametrizações para a energia do modelo de Hubbard unidimensional,

LSOC e FVC, ambas baseadas na solução exata de Lieb-Wu, que serão discutidas nas subseções seguintes.

3.2 Parametrizações da energia do estado fundamental

Com mais de 3.910.000 de artigos e trabalhos publicados^[87], a teoria do funcional da densidade sustenta grande parte da estrutura eletrônica atual, além de desempenhar papel central na ciência dos materiais e na química quântica. Conforme discutido na seção anterior, a DFT resolve o problema de muitos corpos a partir da introdução do termo de troca e correlação (E_{XC}), que neste trabalho é aproximado pela LDA. O desenvolvimento mais popular da LDA utiliza o gás de elétrons interagente como sistema de referência. Entretanto, nesta subseção apresentaremos dois funcionais de densidade que partem de um referencial distinto: a solução exata do modelo de Hubbard unidimensional via Bethe Ansatz.

Aproximação LSOC (Lima, Silva, Oliveira e Capelle)

O funcional LSOC (nome dado devido às letras iniciais de seus desenvolvedores) implementa o modelo de Hubbard unidimensional (Equação 2), construindo um LDA baseado na solução exata de Bethe Ansatz (BA) de Lieb e Wu [Equação 3) e (Equação 4)]. Sua construção explícita e simples embute as correlações de um líquido de Luttinger presentes no modelo de Hubbard em uma dimensão, da mesma forma que a LDA embute nele correlações do líquido de Fermi presentes no gás de elétrons^[88]. Assim, o funcional LSOC parte de uma parametrização para a energia total por sítio:

$$e^{\text{LSOC}}(n, U) = \frac{-2\beta(U)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta(U)}\right), \quad (17)$$

onde $\beta(U)$ é um número independente que é determinado para qualquer valor de U por:

$$\frac{-2\beta}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{\beta}\right) = -4 \int_0^\infty \frac{J_0(x)J_1(x)}{x [1 + \exp(Ux/2)]} dx, \quad (18)$$

em que J_0 e J_1 são as funções de Bessel de ordem zero e primeira ordem, respectivamente. O lado direito da Equação 18 corresponde à expressão exata do Bethe Ansatz para a energia total na metade do preenchimento. Estes parâmetros são pré-determinados de forma que, ao resolver a Equação 17 para $n = 1$, a equação torna-se exata.

No LSOC, podemos calcular analiticamente os limites da Equação 17 nos casos $U = 0$ e $U \rightarrow \infty$, em que $\beta = 2$ e $\beta = 1$, respectivamente. Assim, podemos destacar que a Equação 17 é exata para os seguintes casos limites: para um sistema não interagente, $U = 0$:

$$e_0(n, m, U = 0) = -\frac{4}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{2}\right), \quad (19)$$

para um sistema de interação infinita, $U \rightarrow \infty$:

$$e_0(n, m, U \rightarrow \infty) = -\frac{2}{\pi} \sin(\pi n), \quad (20)$$

no sistema semi-preenchido, sem magnetização ($n = 1, m = 0$):

$$e_0(n = 1, m = 0, U) = -4 \int_0^\infty \frac{J_0(x) J_1(x)}{x [1 + \exp(Ux/2)]} dx, \quad (21)$$

e, por fim, quando o sistema possui máxima magnetização ($n = m$):

$$e_0(n, m = n, U) = -\frac{2}{\pi} \sin(\pi n). \quad (22)$$

Este funcional demonstra que a precisão da energia total LDA é tipicamente da ordem de alguns por cento, e muito melhor perto do cruzamento e dos limites nos quais a equação representa exatamente os dados de referência homogênea subjacentes ($U = 0$, $U \rightarrow \infty$, $n = 1$). Ao contrário dos métodos tradicionais, a qualidade da LDA não se deteriora à medida que U aumenta, e o esforço computacional associado a isso é o de diagonalizar um sistema não iterativo.

No entanto, quando o número de ocupação do local chega a $n = 1$, o ciclo autoconsistente associado à equação de Kohn–Sham do modelo de Hubbard não necessariamente converge.

O caso homogêneo $n = 1$ (metade do preenchimento) marca a transição metal-isolante de Mott, associada à abertura de uma lacuna no espectro de energia. Outro problema aparece em sistemas heterogêneos, onde a convergência para o limite termodinâmico é lenta.

Em particular, em U pequeno a expressão LSOC para E_c possui uma descontinuidade derivada, mas o intervalo de Mott resultante é negativo, prevendo efetivamente que o estado de Mott é um metal em vez de um isolante.^[88]

Aproximação FVC (França, Vieira, Capelle)

A FVC^[55] surgiu com a proposta de aperfeiçoar o funcional LSOC, em especial no tratamento do problema do gap de Mott e do sistema não magnético, conforme descrito pelas equações abaixo:

$$-\frac{2\beta(U)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{\beta(U)}\right) = -4 \int_0^\infty \frac{J_0(x)J_1(x)}{x(1+e^{Ux/2})} dx. \quad (23)$$

onde $\beta(U)$ é o parâmetro dependente da interação U , $J_0(x)$ e $J_1(x)$ são funções de Bessel de primeira ordem zero e um, U representa a interação no modelo de Hubbard, e n é o preenchimento eletrônico.

$$e_0^{\text{FVC}}(n, m, U) = \frac{-2\beta(n, m, U)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta(n, m, U)}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma(n, m, U)}\right), \quad (24)$$

onde

$$\beta(n, m, U) = \beta(U)^{\alpha(n, m, U)}, \quad (25)$$

$$\gamma(n, m, U) = 2 \exp\left[\frac{\sqrt{U}}{1 - (m/n)^{3/2}}\right], \quad (26)$$

$$\alpha(n, m, U) = \left(\frac{n^2 - m^2}{n^{15/8}}\right) \sqrt{U}. \quad (27)$$

- É mais precisa que a LSOC em casos sem magnetização;
- Corrige o problema do gap de Mott;
- Pode ser utilizada para a descrição de fenômenos envolvendo magnetização.

Entretanto, a FVC perde precisão à medida que a interação diminui. Além disso, recentemente observamos em nosso grupo de pesquisa que as derivadas da energia FVC não são suficientemente precisas. Considerando a importância de grandezas oriundas justamente das derivadas da energia em relação aos parâmetros do sistema, como a magnetização, torna-se essencial o desenvolvimento de um novo funcional da densidade capaz de corrigir essas deficiências da FVC.

4 Fenômenos quânticos

Neste capítulo apresentamos as grandezas quânticas utilizadas para caracterizar sistemas fermiônicos correlacionados. Abordamos o *emaranhamento*, com diferentes medidas baseadas em entropias, como ferramenta para quantificar correlações quânticas além das clássicas. Em seguida, tratamos da *susceptibilidade magnética*, que expressa a resposta do sistema a campos externos e indica a estabilidade de fases magnéticas. Essas quantidades, calculadas tanto via DMRG quanto via DFT, servem como diagnósticos centrais para distinguir regimes metálicos, isolantes e magneticamente ordenados no modelo de Hubbard.

4.1 Emaranhamento

Uma das propriedades mais notáveis da mecânica quântica, o emaranhamento é resultado da aplicação do princípio da superposição a sistemas compostos. Historicamente, em 1935 foi discutido no paradoxo EPR (Einstein–Podolsky–Rosen)^[45] e por Schrödinger^[89], que introduziu o termo em alemão *Verschränkung* (emaranhamento)^[90, 35]. Sua demonstração experimental existe há décadas, por exemplo via testes de Bell. Em 2019, Moreau et al.^[1] apresentaram o primeiro registro visual dessas correlações: a violação de uma desigualdade de Bell reconstruída diretamente de imagens de coincidência em campo completo (Figura 4). Trata-se de um marco visual e metrológico^[91, 92, 93, 94], que conecta fundamentos (desigualdades de Bell) a técnicas modernas de imagem.

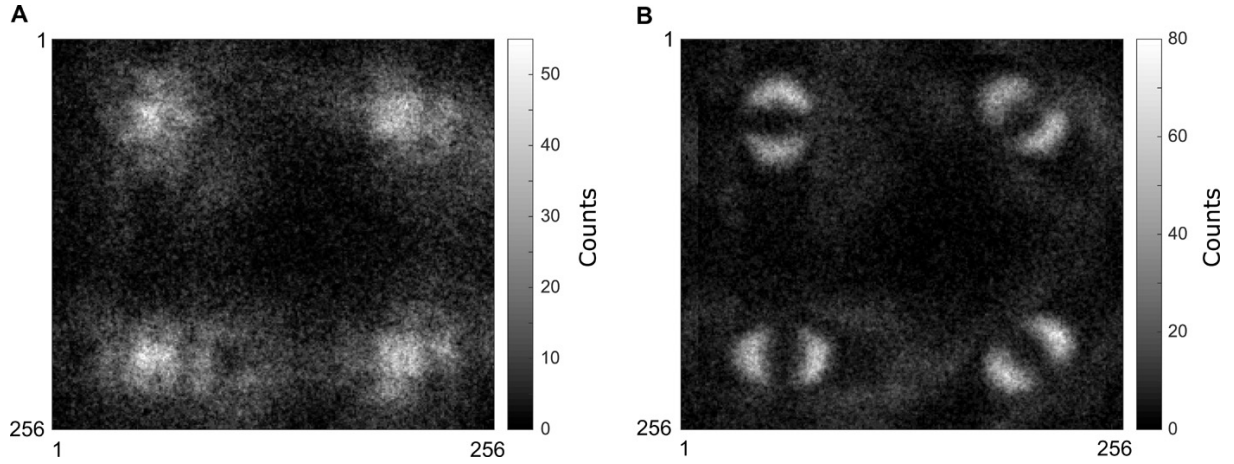


Figura 4 – Captura do emaranhamento quântico pela violação da desigualdade de Bell. (a) Soma bruta das contagens de coincidência registradas em uma única imagem obtida experimentalmente através de quatro filtros de fase em diferentes orientações $\theta_2 = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ$. (b) Imagem já processada, após a varredura de fase, a partir da qual é possível calcular o parâmetro de Bell e constatar a violação direta, mostrando a presença de emaranhamento quântico no sistema. Fonte: Moreau et al., *Science Advances*, 2019^[1].

Para compreender teoricamente o conceito de emaranhamento, recorreremos à noção de matriz densidade, associada à função de onda do sistema. Na mecânica quântica, um sistema pode estar em um estado puro, descrito por um vetor $|\psi\rangle$ no espaço de Hilbert, cuja matriz densidade é

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (28)$$

Mais geralmente, quando o sistema se encontra em uma mistura estatística de estados $\{|\psi_i\rangle\}$ com probabilidades p_i , fala-se em estado misto, representado por

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad p_i \geq 0. \quad \sum_i p_i = 1. \quad (29)$$

A matriz densidade resume toda a informação estatística disponível do sistema. Dado um observável físico representado por um operador $\hat{O}$ — como a densidade local de elétrons $\hat{n}_i$ ou a dupla ocupação $\hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow}$ no modelo de Hubbard — o valor esperado é obtido por

$$\langle O \rangle = \text{Tr}(\rho O). \quad (30)$$

Os elementos diagonais de ρ correspondem às probabilidades de ocupação, enquanto os elementos fora da diagonal refletem as *coerências quânticas*, responsáveis por superposição e interferência.

Quando o sistema é composto por várias partes, podemos considerar apenas uma delas construindo a chamada matriz densidade reduzida, obtida por traço parcial sobre os demais graus de liberdade. É nesse ponto que surge a conexão com o paradoxo EPR: mesmo que o estado global de duas partículas esteja em um estado puro, cada subsistema isolado pode ser descrito por um estado misto. Intuitivamente, isso significa que, localmente, as medidas apresentam estatísticas aleatórias, mas, quando os dois sistemas são medidos em conjunto, aparecem correlações perfeitas que não podem ser explicadas por probabilidades clássicas. Esse contraste entre aleatoriedade local e correlação global é a marca distintiva do emaranhamento.

4.1.1 Entropia de von Neumann

Uma vez estabelecido o papel da matriz densidade na descrição de subsistemas, a próxima etapa é quantificar o emaranhamento. A medida mais amplamente utilizada para isso é a entropia de von Neumann, que estende o conceito de entropia de Shannon ao contexto quântico. Definida por

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho), \quad (31)$$

ela se anula para estados puros e cresce com o grau de mistura de ρ . No caso de sistemas compostos, aplica-se essa definição à matriz densidade reduzida de uma partição: se $S(\rho_A) = 0$, não há emaranhamento; se $S(\rho_A) > 0$, os subsistemas estão emaranhados^[47, 35].

No caso desta tese, aplicamos a definição de entropia de von Neumann à matriz densidade reduzida de um único sítio da cadeia de Hubbard. Esse subsistema local possui quatro estados possíveis — vazio, $\uparrow$, $\downarrow$ e $\uparrow\downarrow$ — que aparecem como probabilidades nos elementos diagonais da matriz densidade reduzida descrita na base de ocupação. Intuitivamente, o caráter probabilístico vem do fato de que o sítio não está fixo em uma dessas configurações, mas sim descrito por uma distribuição de probabilidades entre elas. A entropia de von Neumann quantifica justamente o grau dessa incerteza: ela se anula se apenas um estado é ocupado com probabilidade unitária, e cresce quando várias configurações contribuem de forma significativa. Assim, essa medida captura, de forma probabilística, a presença de correlações quânticas no nível de um único sítio da cadeia.

Via DFT, essa quantidade pode ser expressa como^[35]:

$$\begin{aligned}
S^{DFT} = & - \left(\frac{\delta e_0}{\delta U} \right) \log_2 \left(\frac{\delta e_0}{\delta U} \right) \\
& - \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{\delta U} + \frac{m}{2} \right) \log_2 \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{\delta U} + \frac{m}{2} \right) \\
& - \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{\delta U} - \frac{m}{2} \right) \log_2 \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{\delta U} - \frac{m}{2} \right) \\
& - \left(1 - n + \frac{\delta e_0}{\delta U} \right) \log_2 \left(1 - n + \frac{\delta e_0}{\delta U} \right), \tag{32}
\end{aligned}$$

onde $\delta e_0/\delta U$ é a derivada da energia do estado fundamental em relação à interação U , n é a densidade eletrônica local e m a magnetização.

De forma equivalente, via DMRG a entropia S_{vN} pode ser calculada diretamente a partir dos elementos diagonais da matriz densidade reduzida de um sítio:

$$\begin{aligned}
S^{DMRG} = & - w_2 \log_2 w_2 - w_{\uparrow} \log_2 w_{\uparrow} \\
& - w_{\downarrow} \log_2 w_{\downarrow} - w_0 \log_2 w_0, \tag{33}
\end{aligned}$$

onde w_2 , $w_{\uparrow}$, $w_{\downarrow}$ e w_0 correspondem, respectivamente, às probabilidades de dupla ocupação, de ocupação com spin- $\uparrow$, de ocupação com spin- $\downarrow$ e de o sítio estar vazio.

Além de seu interesse fundamental, o emaranhamento é um recurso para informação e comunicação quântica e um marcador útil em matéria condensada; por exemplo, quantificadores de emaranhamento ajudam a identificar transições de fase quânticas em modelos fortemente correlacionados, como o Hubbard unidimensional^[90, 35]. Há diversas métricas para quantificá-lo (entropias de von Neumann e de Rényi, concorrência, negatividade, entre outras). Neste trabalho enfatizamos três: entropia de von Neumann, entropia linear e entropia típica, detalhadas nas subseções seguintes.

4.1.2 Entropia Linear

A entropia linear é uma medida alternativa e simplificada para quantificar a mistura de estados em sistemas quânticos. Sua formulação foi introduzida por Fano em 1957^[49] ao descrever estados via matrizes densidade, onde destacou a importância de medidas de informação associadas ao grau de pureza do estado quântico.

Ao contrário da entropia de von Neumann, que se estabeleceu como uma medida canônica do emaranhamento em sistemas bipartidos puros, a entropia linear é dada como o

primeiro termo da expansão em série de Taylor da entropia de von Neumann^[35], podendo ser formalmente definida como:

$$S_L(\rho) = 1 - \text{Tr}(\rho^2), \quad (34)$$

onde ρ é a matriz densidade do sistema.

Esta grandeza está diretamente relacionada à pureza do estado, $\gamma = \text{Tr}(\rho^2)$. Para estados puros, $\gamma = 1$ e, portanto, $S_L = 0$, indicando ausência de emaranhamento. Já para estados mistos maximamente desordenados, γ assume valores mínimos e S_L atinge seu valor máximo, refletindo a completa perda de informação sobre o sistema.

As propriedades provenientes da entropia linear são similares às da entropia de von Neumann, sendo suas principais características:

- É uma medida não negativa e se anula para estados puros, tal como a entropia de von Neumann.
- Não é estritamente aditiva, o que limita seu uso em certas análises formais de correlações quânticas.
- Sua interpretação física está fortemente associada à noção de pureza, funcionando como indicador eficiente da presença de emaranhamento.

Em nosso estudo, a entropia linear é calculada via métodos DFT, onde:

$$S_L = 1 - \left[\left(\frac{\delta e_0}{\delta U} \right)^2 + \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{\delta U} + \frac{m}{2} \right)^2 + \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{\delta U} - \frac{m}{2} \right)^2 + \left(1 - n + \frac{\delta e_0}{\delta U} \right)^2 \right], \quad (35)$$

e no método DMRG via:

$$S_L = 1 - (w_2^2 + w_{\uparrow}^2 + w_{\downarrow}^2 + w_0^2). \quad (36)$$

4.1.3 Entropia Típica

Originada do estudo de sistemas quânticos desordenados e fortemente correlacionados, a entropia típica é uma resposta às limitações das medidas tradicionais baseadas em médias aritméticas. Historicamente, Dobrosavljevi e colaboradores desenvolveram esta medida pela teoria típica média (TMT, em inglês *Typical Medium Theory*), cujo objetivo era descrever corretamente a localização de Anderson e sua competição com a correlação eletrônica [50, 54, 51].

A entropia típica pode ser matematicamente definida como a média geométrica da entropia de von Neumann calculada em cada subsistema. Esta medida é sensível às flutuações locais e se anula no regime localizado devido à sua definição logarítmica, sendo assim também considerada como um parâmetro de ordem^[54].

Matematicamente, podemos descrever a entropia típica como:

$$S_{\text{typ}} = \exp \left[\frac{1}{L} \sum_i \ln (S_{vn}(i)) \right], \quad (37)$$

onde $S_{vn}(i)$ representa a entropia de von Neumann associada ao subsistema formado pelo sítio i , e L é o número total de sítios do sistema.

Dentre as diversas aplicações, a entropia típica tem como principais alvos^[50, 54, 51]:

- a identificação da transição de Anderson, onde $S_{\text{typ}} \rightarrow 0$;
- o estudo da competição entre interação eletrônica (Mott) e desordem (Anderson) em modelos como o Anderson–Hubbard;
- a análise de sistemas de férmions em redes ópticas com desordem binária;
- a construção de mapas de fase que distinguem entre regiões metálicas, isolantes de Mott e isolantes de Anderson.

4.2 Susceptibilidade magnética

A susceptibilidade magnética é a grandeza que quantifica a resposta de um material a um campo externo. Seu estudo remonta a 1934, quando medidas com ímãs permanentes já distinguiam materiais diamagnéticos e paramagnéticos. Décadas depois, técnicas quantitativas permitiram estimativas precisas mesmo em amostras com respostas muito fracas^[41].

Macroscopicamente, a definição é dada por

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}, \quad (38)$$

com M a magnetização e H o campo aplicado.

No quadro teórico itinerante, iniciado por Stoner (1938)^[42], a estabilidade magnética está ligada à curvatura da energia em função da magnetização. Nesse contexto, a susceptibilidade é escrita como

$$\chi^{-1} = \left. \frac{\partial^2 E}{\partial m^2} \right|_{m=0}, \quad (39)$$

avaliada no ponto $m = 0$, correspondente ao estado paramagnético. Como discutido por Mohn^[44], o sinal dessa derivada determina: (i) estabilidade paramagnética quando positivo; (ii) divergência crítica quando nulo; e (iii) ferromagnetismo espontâneo quando negativo.

No modelo de Hubbard^[3] unidimensional em $T = 0$, a magnetização é definida pelo desequilíbrio de spins

$$M = N_{\uparrow} - N_{\downarrow}, \quad (40)$$

e a susceptibilidade mede a resposta do estado fundamental frente a uma quebra infinitesimal da simetria de spin pelo grupo matemático das rotações de spin, SU(2 do inglês *Special Unitary group of degree 2*). Como essa simetria preserva $m = 0$ na ausência de campo, a susceptibilidade corresponde à rigidez do sistema contra polarização de spin. A solução exata de Lieb e Wu^[32] fornece a energia fundamental $E(n, m, U)$, a partir da qual se escreve

$$\chi = \left(\frac{\partial^2 E}{\partial m^2} \right)^{-1} \bigg|_{m=0}. \quad (41)$$

Neste trabalho, utilizamos os funcionais analíticos aqui investigados que reproduzem os resultados da solução de Lieb–Wu no limite unidimensional. Esse funcional expressa a energia $E(n, m, U)$ em termos de densidade n , magnetização m e interação U , com auxílio de funções auxiliares α, β, γ . A susceptibilidade magnética é então calculada por

$$\chi(n, U) = \frac{1}{\frac{\partial^2 E(n, m, U)}{\partial m^2} \big|_{m=0}}. \quad (42)$$

As expressões analíticas das derivadas encontram-se no Apêndice A.

5 Resultados e Discussão

5.1 Comparação entre DFT e DMRG em transições de fase quântica em nanoestruturas unidimensionais

Buscando compreender as vantagens e desvantagens de métodos aproximados como a DFT (no funcional LDA) na detecção de transições de fase quânticas em sistemas unidimensionais, foi considerado três cenários: (i) sistemas homogêneos, em que as únicas heterogeneidades decorrem das condições de contorno abertas (OBC — Open Boundary Conditions); (ii) super-redes, simuladas por um potencial com modulação periódica; e (iii) confinamento harmônico, simulado por um potencial quadrático.

Cabe destacar que tanto os códigos de DMRG quanto os de DFT foram desenvolvidos pelo grupo de pesquisa. Além disso, o código DMRG utiliza a linguagem vetorial via Itensor, o que proporciona melhor desempenho em comparação a métodos matriciais tradicionais. As simulações foram realizadas em um computador pessoal (Acer Nitro AN517-54) equipado com processador Intel Core™ i5-11400H de 11^a geração, 8 GB de RAM DDR4, armazenamento SSD de 1,3 TB, gráficos integrados Intel UHD (TGL GT1) e sistema operacional Ubuntu 24.04.2 LTS (kernel Linux 6.14.0-28-generic).

Para garantir consistência, utilizamos o mesmo conjunto de pontos em todas as comparações entre DFT e DMRG, impondo critérios de convergência equivalentes e uma tolerância de 10^{-8} na energia, que para a DFT são ciclos de até 10001 iterações, enquanto para a DMRG aplicamos um campo de fixação locais nas extremidades da cadeia com o objetivo de melhorar a convergência, com 100 a 800 sweeps por cálculo. Os resultados apresentados encontram-se publicados na Journal of Molecular Modeling^[2].

Consideramos sistemas com condições de contorno abertas (OBC), adotando $t = 1$ como unidade de energia. Foram analisadas densidades médias $n = N/L$ em torno dos regimes metálico e de semipreenchimento, explorando valores de U que abrangem desde o fraco até o forte acoplamento. A Tabela 1 resume os parâmetros empregados em cada cenário e os intervalos explorados.

Tabela 1 – Espaço de parâmetros por cenário ($t = 1$, OBC).

Sistema	L	$n = N/L$	U	V_i
Homogêneo	10–100	0.2, 0.6, 1.0	0.2, 4, 8, 10	$V_i = 0$
Super-redes	90	0.2, 0.4, 0.8, 1.0	0–10	$V \in \{0, -2, -4, -10\}$, com configuração degrau do tipo X:Y, sendo X sítios com impureza aplicados e Y sítios com $V = 0$, na estrutura 2:7, 3:6 e 4:5
Confinamento	100	0.2, 0.5, 1	0.2, 4, 8	$V_i = k(i - L/2)^2$, com $k \in \{0.002, 0.005, 0.015, 0.035\}$.

As grandezas comparadas foram:

1. Energia do estado fundamental por sítio, e_0 ;
2. Perfis de densidade $\{n_i\}$;
3. Entropia média de emaranhamento, $\bar{S}$.

Para quantificar as diferenças, definimos os desvios percentuais relativos:

$$D\%(e_0) = \frac{|e_0^{\text{DFT}} - e_0^{\text{DMRG}}|}{|e_0^{\text{DMRG}}|} 100 \quad (43)$$

$$D\%(\bar{S}) = \frac{|\bar{S}^{\text{DFT}} - \bar{S}^{\text{DMRG}}|}{\bar{S}^{\text{DMRG}}} 100 \quad (44)$$

$$\overline{D\%}(n) = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{|n_i^{\text{DFT}} - n_i^{\text{DMRG}}|}{n_i^{\text{DMRG}}} 100 \quad (45)$$

onde a média é realizada na Equação 45 apenas nos M sítios com ocupação não desprezível definida por $n_i \geq 0.0001$, de modo a evitar amplificação artificial dos desvios.

5.1.1 Cadeias homogêneas finitas

Sistemas homogêneos podem ser entendidos como a simulação de um material puro, sem a presença de impurezas ou potenciais externos. Embora, à primeira vista, possam parecer de menor relevância, desempenham papel central na avaliação de métodos aproximados como a DFT. No caso do modelo de Hubbard unidimensional, que serve de base para a LDA implementado no código de DFT, por exemplo, os resultados podem ser obtidos de forma exata pelo método de Bethe Ansatz, nas integrais de Lieb-Wu^[32, 33], o que

torna esse sistema uma referência fundamental. Como ilustrado na Figura 5 considera-se um potencial externo nulo, de modo que restam apenas a cinética eletrônica e a interação local U . Assim, a análise do sistema homogêneo fornece um ponto de partida valioso para prever o comportamento do método em contextos mais complexos.



Figura 5 – Representação de um sistema homogêneo de tamanho L , onde não há potencial aplicado.

Iniciamos nossa primeira análise na Figura 6, que descreve o desvio percentual relativo da energia do estado fundamental em função do tamanho L da cadeia para diferentes densidades, considerando interações repulsivas de intensidade fraca ($U = 2$), intermediária ($U = 4$) e forte ($U = 8$).

Em todos os casos, observa-se um decréscimo monotônico do erro à medida que a cadeia aumenta. Esse comportamento decorre dos efeitos de borda: cadeias menores sofrem maior influência das oscilações de Friedel^[95], que afetam a distribuição eletrônica; em cadeias maiores essas oscilações são progressivamente minimizadas, de modo que o interior do sistema domina sobre as bordas, tornando os efeitos de contorno desprezíveis. Isso justifica por que a aproximação LDA se torna exata no limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$).

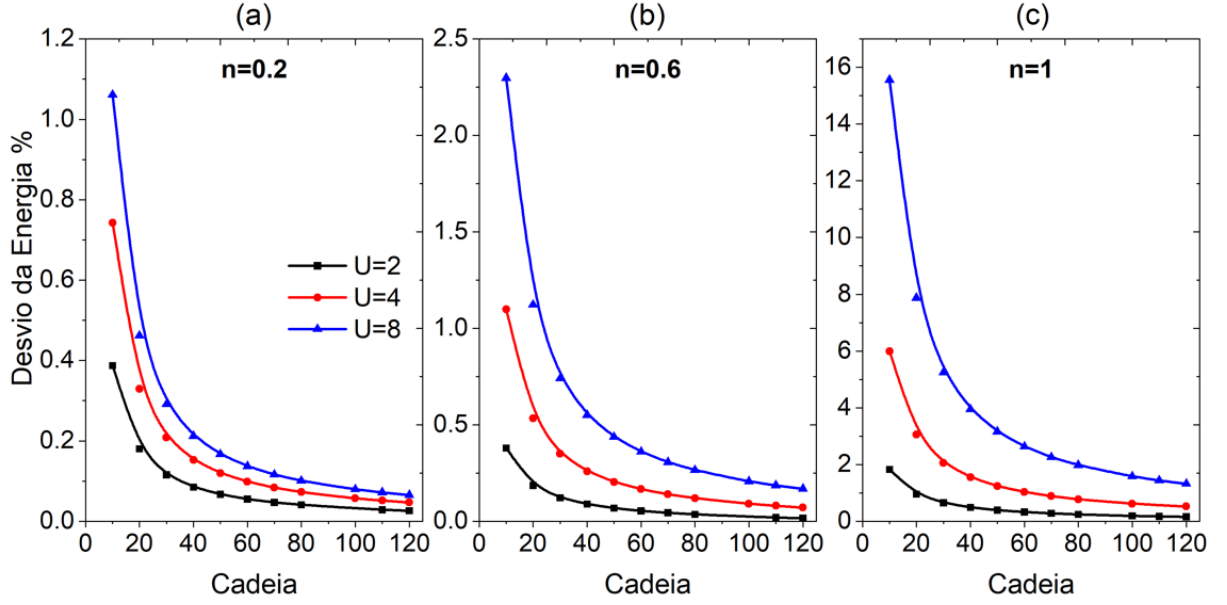


Figura 6 – Desvio percentual médio relativo da energia do estado fundamental, definido na Equação 43, em função do tamanho da cadeia L para um sistema homogêneo finito com interação local repulsiva fixa em $U=2,4,8$. O item (a) corresponde à baixa densidade ($n=0.2$), (b) à densidade intermediária ($n=0.6$) e (c) ao regime de semipreenchimento ($n=1$).

Ao analisarmos a dependência com a densidade, notamos que, para valores baixos ($n = 0.2$ e 0.6), os desvios de energia permanecem inferiores a 2.5% mesmo em cadeias pequenas, refletindo o cancelamento de erros locais: regiões em que a densidade é superestimada compensam aquelas em que é subestimada. Nesse regime, entretanto, podemos observar no desvios do perfil de densidade dados na Figura 7 erros mais acentuados, já que as oscilações de Friedel são mais intensas em baixas densidades e não são corretamente reproduzidas pela LDA. Como a LDA utiliza apenas a densidade local para aproximar a energia de correlação, falha em capturar efeitos não locais, como as oscilações induzidas por bordas abertas ou por impurezas.

Por outro lado, no regime semi-preenchido ($n = 1$), a situação se inverte: as oscilações de Friedel são suprimidas, o que torna a DFT extremamente precisa na descrição da densidade local. Porém, a competição entre o preenchimento unitário, a interação U — que suprime a dupla ocupação e conduz ao regime de Mott — e os efeitos de borda em cadeias finitas torna o sistema altamente correlacionado, resultando em grandes desvios na energia em cadeias pequenas (erros que podem superar 15% para $U = 8$ e $L = 10$). Ainda assim, para $L \geq 60$, o erro cai para valores inferiores a 2%, evidenciando que a

DFT reproduz de modo progressivamente mais preciso a energia à medida que a cadeia se aproxima do limite termodinâmico.

Outra forma de avaliar o desempenho da DFT é através do desvio percentual relativo do perfil de densidade em função do tamanho L da cadeia, como mostrado na Figura 7.

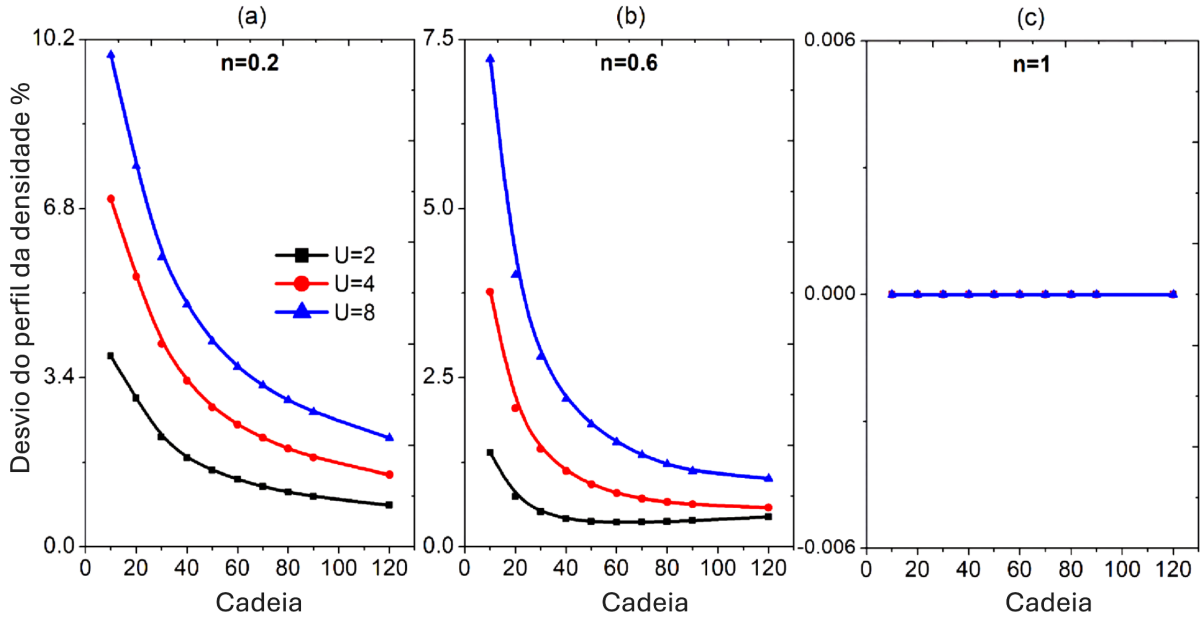


Figura 7 – Desvio percentual médio relativo do perfil de densidade, definido na Equação 45, em função do tamanho da cadeia L para um sistema homogêneo finito com interação local repulsiva fixa em $U=2,4,8$. O item (a) corresponde à baixa densidade ($n=0.2$), (b) à densidade intermediária ($n=0.6$) e (c) ao regime de semipreenchimento ($n=1$).

Ao contrário do que foi observado para a energia em $n = 1$, os maiores erros nos perfis de densidade ocorrem em baixas densidades, como $n = 0.2$, mesmo em situações em que a energia global do sistema é bem descrita. Isso evidencia o efeito das oscilações de Friedel, que se intensificam em baixas densidades e não são corretamente capturadas pela LDA. A Figura 7 reforça esse ponto, mostrando que, à medida que U aumenta e a densidade diminui, o desvio nos perfis de densidade cresce, refletindo a perda de precisão da DFT na descrição desses efeitos.

Como destaque adicional para o efeito das oscilações de Friedel, apresentamos a Figura 8. Observa-se que, para baixas densidades e interações repulsivas fortes, a DFT perde precisão na descrição do sistema: o perfil de densidade é subestimado em certos

sítios e superestimado em outros, evidenciando a incapacidade da aproximação local de reproduzir corretamente as oscilações induzidas pelas bordas.

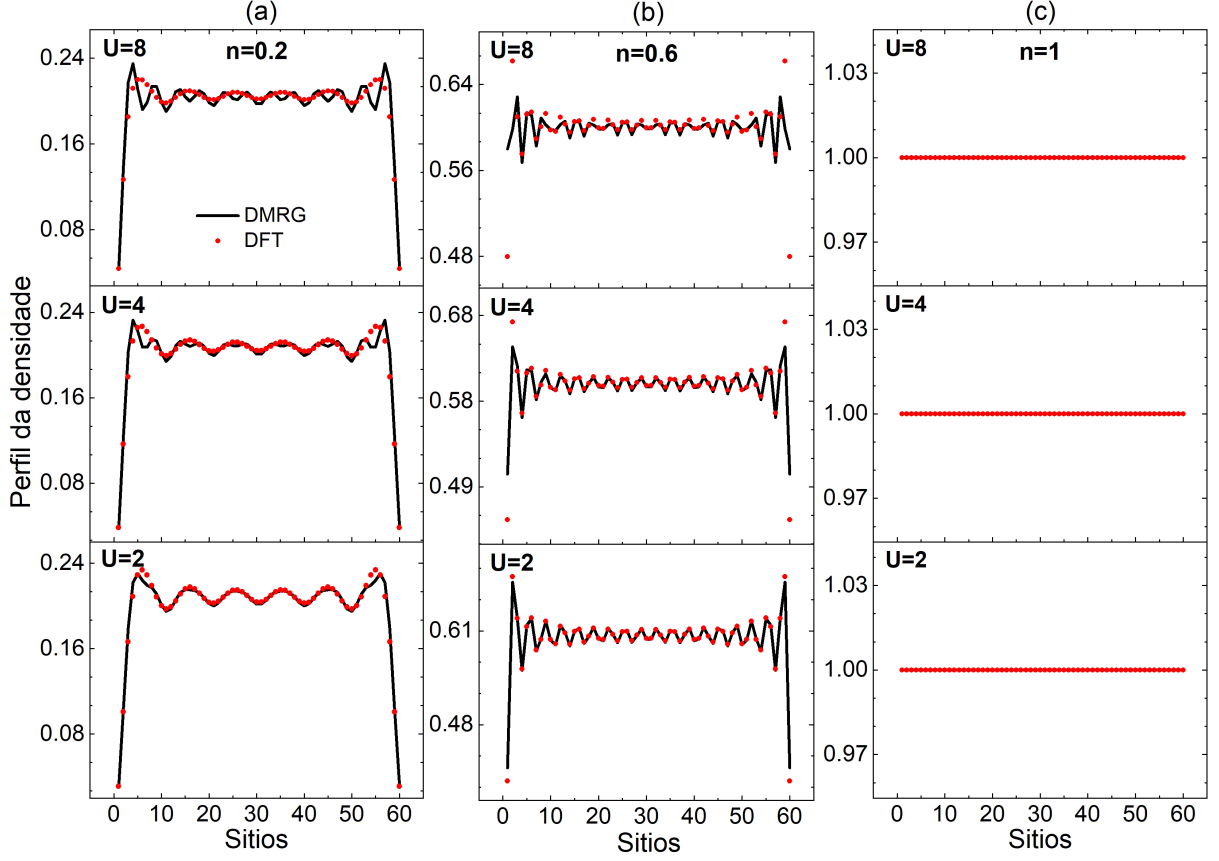


Figura 8 – Perfil de densidade em função da posição ao longo de uma cadeia de 60 sítios. Os símbolos “x” em vermelho correspondem aos resultados obtidos por DFT, enquanto a linha contínua em preto representa o DMRG. Cada coluna apresenta três painéis para diferentes intensidades da interação U : o superior para $U=8$ (forte), o central para $U=4$ (intermediário) e o inferior para $U=2$ (fraco). O item (a) corresponde ao regime de baixa densidade ($n=0.2$), (b) à densidade intermediária ($n=0.6$) e (c) ao semipreenchimento ($n=1$).

Nas figuras apresentadas, notamos que, mesmo quando o perfil de densidade apresenta inconsistências significativas, a energia global permanece bem descrita. Esse resultado decorre do cancelamento de erros locais: regiões em que a densidade é superestimada compensam aquelas em que é subestimada, levando a uma boa concordância no valor total de energia. Esse efeito é particularmente pronunciado em baixas densidades, o que explica por que a energia é bem reproduzida pela DFT enquanto os perfis de densidade exibem desvios mais acentuados.

Por fim, consideramos a entropia média de emaranhamento em função do tamanho da cadeia, apresentada na Figura 9. Observa-se que a DFT apresenta ótimo desempenho em regimes de baixa densidade, para todos os valores da interação repulsiva. Com o aumento da densidade, a precisão diminui, tanto em função de U quanto de n .

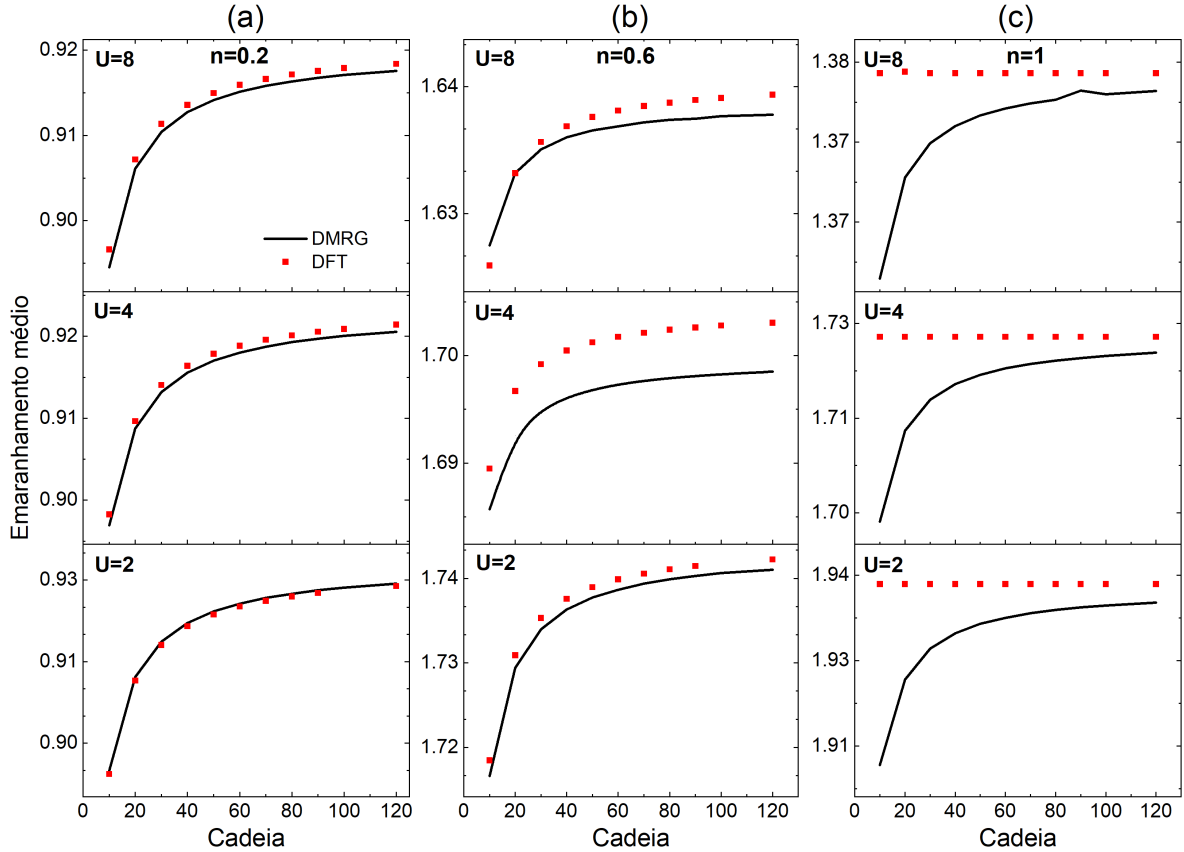


Figura 9 – Entropia média de emaranhamento em função do tamanho da cadeia L , variando de 10 em 10 no intervalo de $L=10$ a $L=120$. Os símbolos “x” em vermelho correspondem aos resultados obtidos por DFT, enquanto a linha contínua em preto representa o DMRG. Cada coluna apresenta três painéis para diferentes intensidades da interação U : o superior para $U=8$, o central para $U=4$ (intermediário) e o inferior para $U=2$ (fraco). O item (a) corresponde ao regime de baixa densidade ($n=0.2$), (b) à densidade intermediária ($n=0.6$) e (c) ao semipreenchimento ($n=1$).

Ainda assim, os desvios permanecem pequenos, sendo o maior valor observado de apenas 1.73%, o que indica um bom comportamento da DFT mesmo em regimes mais desafiadores do sistema homogêneo. Esse resultado pode ser entendido pelo mesmo mecanismo discutido no perfil de densidade: a superestimação em alguns sítios e a subestimação em

outros se compensam, de modo que a entropia média — que é um funcional da densidade — permanece próxima ao valor de referência.

Assim, a entropia comumente utilizada para caracterizar transições de fase, pode ser utilizada junto à DFT, uma vez que o método demonstrou ser suficientemente preciso para caracterizar transições de fase quânticas em cadeias homogêneas.

5.1.2 Super-redes

No tópico anterior, discutimos a eficiência da DFT em descrever sistemas homogêneos para capturar transições de fase. No entanto, esse tipo de sistema não corresponde a nenhum material real, já que, na prática, todos os sólidos apresentam impurezas. Mais do que inevitáveis, as impurezas são frequentemente exploradas para manipular propriedades físicas e químicas dos materiais.

Nesta subseção, tratamos da DFT para um sistema com potencial externo ligado, ou seja consideramos um tipo específico de impureza aplicada ao sistema através do potencial externo, que dá origem ao que chamamos de super-rede. A impureza é introduzida por meio de uma função degrau com modulação periódica, responsável por gerar modulações periódicas em blocos de 9 sítios. Diferentemente das oscilações de Friedel, discutidas no tópico anterior, que emergem como resposta do sistema, essa periodicidade decorre diretamente da modulação imposta pelo potencial externo, dependendo da proporção entre sítios com potencial nulo e sítios com potencial diferente de zero que se deseja implementar no sistema, como observado na Equação 46:

$$v_{i\sigma} = \begin{cases} V, & \text{se } i \in X \\ V_0. & \text{se } i \in Y \end{cases} \quad (46)$$

onde X representa os sítios com potencial V e Y os sítios com potencial nulo, com a restrição do tamanho do bloco $X + Y = 9$. Essa estrutura periódica se repete por blocos ao longo da cadeia, definindo a super-rede.

Neste trabalho, analisamos três variações dessa configuração: (i) 2:7; (ii) 3:6; e (iii) 4:5, como observado na Figura 10. Em todos os casos, definimos uma célula unitária de 9 sítios, cuja configuração se repete ao longo da cadeia de comprimento L .

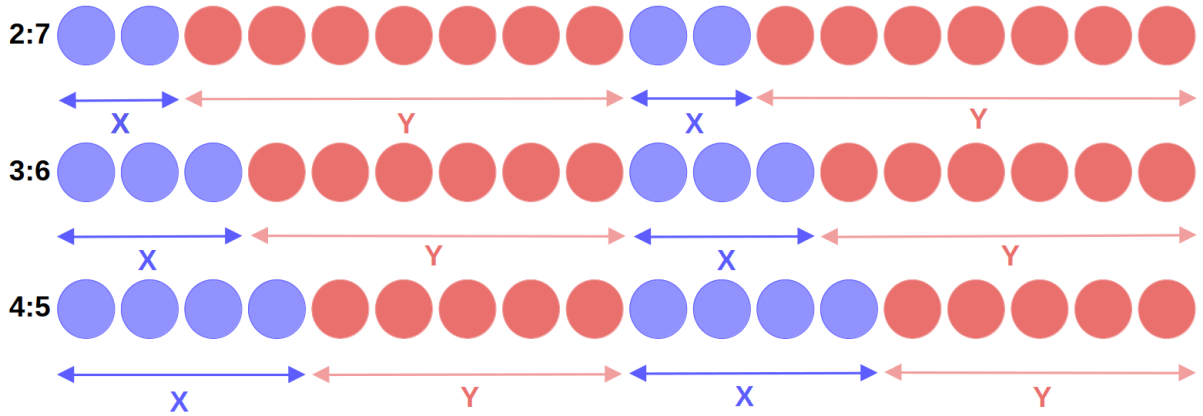


Figura 10 – Modelo representativo de uma super-rede com configuração 2:7,3:6 e 4:5. Sendo X os locais onde o potencial externo $V \neq 0$ e Y os sítios que possuem potencial nulo, $V = 0$.

Os gráficos apresentados a seguir concentram-se na super-rede do tipo 2:7 com $L = 90$, enquanto as demais configurações (3:6 e 4:5) são consideradas apenas para fins comparativos em cadeias de 36 sítios.

A Figura 11 mostra o desvio relativo percentual da energia do estado fundamental em função da interação U , para densidades fixas em $n = 0.2, 0.4, 0.8$ e 1. Iniciamos nossas análises pela Figura 11(a), onde o potencial V é nulo em toda a cadeia, com o objetivo de estabelecer um comparativo com o caso da super-rede. Observa-se que o desvio percentual cresce de forma sistemática com o aumento de U e de n , o que era esperado. De fato, na ausência de um potencial externo modulador, o sistema reduz-se ao caso homogêneo ($V = 0$), já discutido na subseção anterior, em que os efeitos de borda e as oscilações de Friedel são dominantes em cadeias finitas.

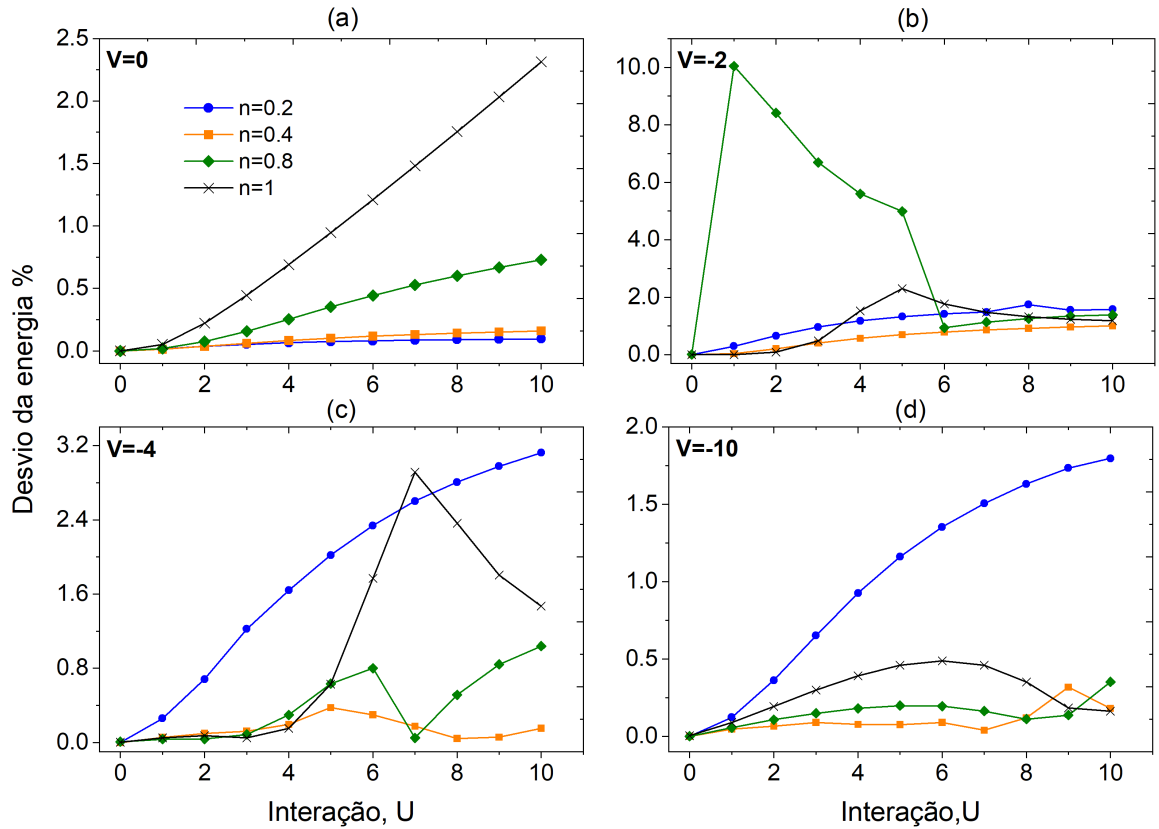


Figura 11 – Desvio percentual relativo da energia do estado fundamental em função da interação local U para uma super-rede 2:7 com 90 sítios. A curva azul representa o regime de baixa densidade ($n = 0.2$), a laranja $n = 0.4$, a verde $n = 0.8$ e a preta o semipreenchimento ($n = 1$). O item (a) corresponde ao caso homogêneo ($V = 0$); (b) ao potencial fracamente atrativo ($V = -2$); (c) ao potencial atrativo intermediário ($V = -4$); e (d) ao potencial fortemente atrativo ($V = -10$).

Ao introduzirmos potenciais atrativos periódicos para diferentes densidades, como ilustrado na Figura 11, notamos que, à medida que a interação aumenta, o desvio segue a tendência do sistema homogêneo e, em geral, também cresce. Ainda assim, a DFT apresenta bom desempenho em reproduzir a energia do estado fundamental. Essa conclusão se apoia no fato de que as curvas, em geral, aumentam com U e V , mas permanecem pequenas nos regimes analisados, com a maioria apresentando desvios $D \leq 3\%$.

Em alguns casos, por exemplo em $V = -4$ e $n = 1$ (Figura 11(c)), observamos um comportamento não monótono, reflexo da competição entre U e V que redistribui a ocupação entre sítios de impureza e sítios com impureza nula, podendo indicar regiões de

Mott locais. Outro exemplo aparece na Figura 11(b), com um pico localizado em $n = 0.8$ e $U \approx 1$, seguido de queda rápida.

Esses resultados são corroborados pela análise do perfil de densidade do sistema em função do sítio. Na Figura 12(a), observamos bom desempenho da DFT em reproduzir a distribuição espacial de densidade. Em um sistema não interagente ($U = 0$) com potencial atrativo ($V = -10$), a densidade concentra-se predominantemente nas regiões onde o potencial é aplicado, para todas as densidades fixas.

Ao introduzirmos uma interação repulsiva ($U > 0$), como nas Figura 12(b)–(d), nota-se que, para baixas densidades ($n = 0.2$ e 0.4), o sistema ainda tende a ocupar preferencialmente os sítios de impureza (onde $V < 0$). À medida que aumentamos o número de elétrons — e, portanto, a densidade do sistema para $n = 0.8$ e $n = 1$ —, os sítios de impureza tornam-se totalmente ocupados ($n_i = 2$), e os elétrons remanescentes passam a povoar os sítios com impureza nula.

Para interações de intensidade intermediária a alta, observa-se uma competição entre V e U que promove uma redistribuição de carga ao longo da cadeia, levando a ocupações significativamente menores que 2 já em $n = 0.4$. À medida que U se intensifica, a dupla ocupação nos sítios de impureza é cada vez mais desfavorecida, como na Figura 12(d), caracterizando regiões de isolante de Mott locais (com $n_i \leq 1$ nos sítios de impureza).

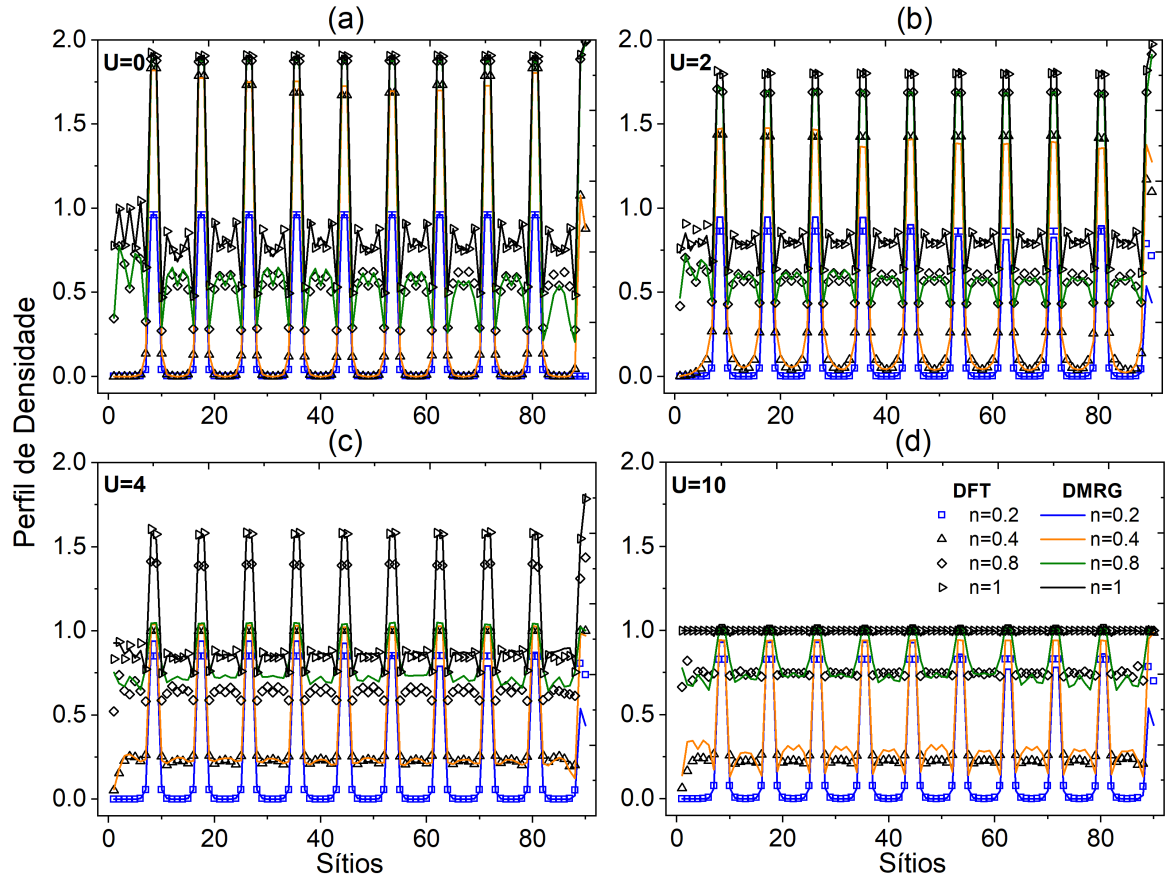


Figura 12 – Perfil de densidade da super-rede na configuração 2:7 com $V = -10$, em função da posição ao longo de uma cadeia de 90 sítios. As curvas em azul correspondem a $n = 0.2$, em laranja a $n = 0.4$, em verde a $n = 0.8$ e em preto ao semipreenchimento ($n = 1$). A intensidade da interação varia em: (a) $U = 0$; (b) $U = 2$; (c) $U = 4$; e (d) $U = 10$.

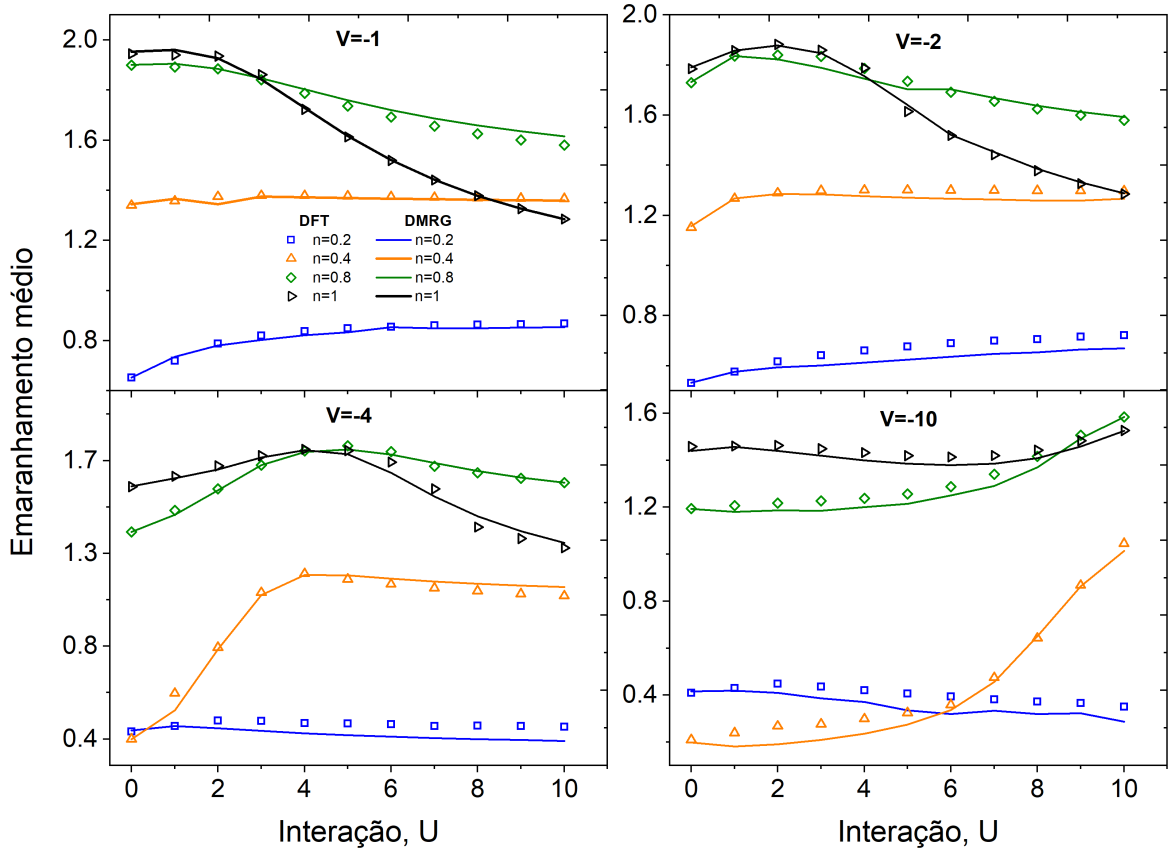


Figura 13 – Emaranhamento médio da super-rede em função da intensidade da interação coulombiana U para uma cadeia de 90 sítios. As curvas em azul correspondem a $n = 0.2$, em laranja a $n = 0.4$, em verde a $n = 0.8$ e em preto ao semipreenchimento ($n = 1$). O potencial externo aplicado varia de: (a) $V = 0$, caso homogêneo; (b) $V = -2$; (c) $V = -4$; e (d) $V = -10$.

A Figura 13 apresenta a entropia média de emaranhamento em função da interação U , para diferentes densidades médias ($n = 0.2, 0.4, 0.8, 1$) e valores do potencial da super-rede ($V = 0, -2, -4, -10$), comparando DFT e DMRG. No caso homogêneo ($V = 0$), a DFT reproduz com boa precisão as curvas de referência ao longo de U . Essa boa concordância decorre, em parte, de um cancelamento de erros locais: calculamos a entropia de sítio único s_i e reportamos a média $\bar{s} = \frac{1}{L} \sum_i s_i$; embora s_i possa ser superestimada em alguns sítios e subestimada em outros, esses desvios tendem a se compensar na média.

Ao introduzirmos potenciais atrativos na cadeia, como em $V = -2$ e $V = -4$, o problema torna-se mais desafiador. A modulação espacial da densidade intensifica efeitos não locais que a LDA não captura plenamente, e surgem discrepâncias mais visíveis, sobretudo em baixas densidades ($n = 0.2$ e 0.4). Nesses regimes, a DFT costuma suavizar a resposta: não reproduz integralmente a curvatura com U e, por vezes, superestima os

valores da entropia à medida que a interação cresce. Para densidades mais altas ($n = 0.8$ e $n = 1$), a concordância permanece razoável, ainda que a resposta da DFT seja, em geral, mais suave do que a do DMRG.

Para um potencial atrativo forte ($V = -10$), essas limitações tornam-se ainda mais evidentes nas baixas densidades, com diferenças acentuadas em relação ao DMRG e uma evolução com U que não reflete por completo a correlação eletrônica do sistema. Já em densidades elevadas, a DFT continua a produzir valores próximos aos de referência, embora tenda a suavizar a dependência em U e nem sempre acompanhe a curvatura exibida pelo DMRG.

Em conjunto, os resultados mostram que a DFT é altamente confiável para descrever a entropia média em sistemas homogêneos e em regimes de alta densidade, independentemente da intensidade da interação. Entretanto, sua precisão diminui em super-redes moduladas e em regimes de baixa densidade, nos quais os efeitos não locais e a correlação eletrônica desempenham papel central, levando a uma subestimação sistemática da entropia de emaranhamento.

5.1.3 Confinamento Harmônico

Assim como as super-redes, os osciladores harmônicos constituem excelentes candidatos para a análise comparativa de métodos como DMRG e DFT, uma vez que apresentam um potencial externo capaz de aprisionar os elétrons em um poço parabólico, resultando na aparição de muitas fases quânticas. Um exemplo é representado na Figura 14. Essa configuração faz desse sistema um representante realista de diferentes cenários físicos, com aplicações em simulações de experimentos com gases de átomos frios — como os realizados com átomos de rubídio ou lítio^[96, 25] —, na descrição de elétrons confinados em pontos quânticos (quantum dots)^[97] e no estudo de fônons ou vibrações moleculares^[98].

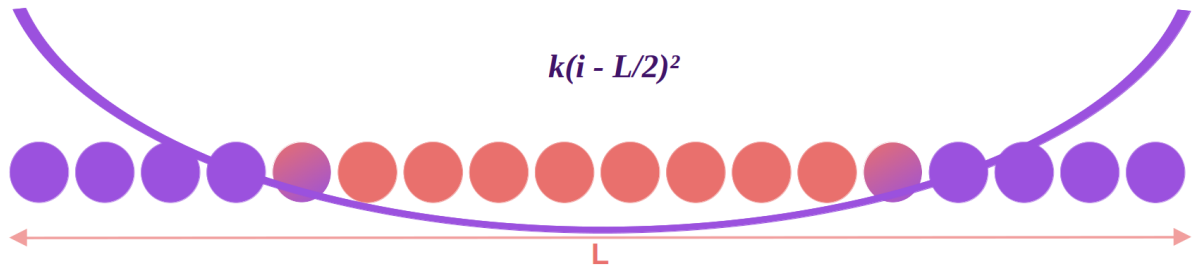


Figura 14 – Modelo representativo da configuração de uma cadeia de tamanho L sobre efeito de um potencial externo quadrático, responsável por caracterizar um confinamento harmônico.

Para simular o confinamento harmônico é necessário aplicar sob o sistema um potencial parabólico responsável por criar um poço quântico, dada pela equação abaixo:

$$V_i = k(i - L/2)^2 \quad (47)$$

A Figura 15 mostra o desvio percentual relativo da energia em função da intensidade do confinamento parabólico para diferentes densidades médias ($n = 0.2, 0.5, 1$) e interações repulsivas ($U = 0.2, 4, 8$). No regime não interagente ($U = 0$), observa-se que os desvios são praticamente nulos em todas as densidades, evidenciando que a LDA reproduz com alta precisão o comportamento do sistema harmonicamente confinado sem correlações eletrônicas. À medida que a interação cresce para valores intermediários ($U = 2$ e $U = 4$), surgem flutuações no erro, sobretudo para $n = 1$, indicando que a competição entre o confinamento e as correlações eletrônicas predispõem a DFT a erros locais. No regime fortemente correlacionado ($U = 8$), essa tendência se intensifica - os desvios alcançam valores superiores a 4% em semipreenchimento, refletindo a incapacidade da aproximação local de capturar as fortes correlações presentes no regime de Mott sob confinamento. Por outro lado, para densidades mais baixas ($n = 0.2$ e $n = 0.5$), o desvio permanece pequeno mesmo em interações mais fortes, mostrando que a DFT continua fornecendo resultados confiáveis. Dessa forma, a figura revela que o confinamento parabólico é bem descrito pela DFT em regimes de baixa densidade, mas evidencia suas limitações em sistemas fortemente correlacionados próximos ao semipreenchimento.

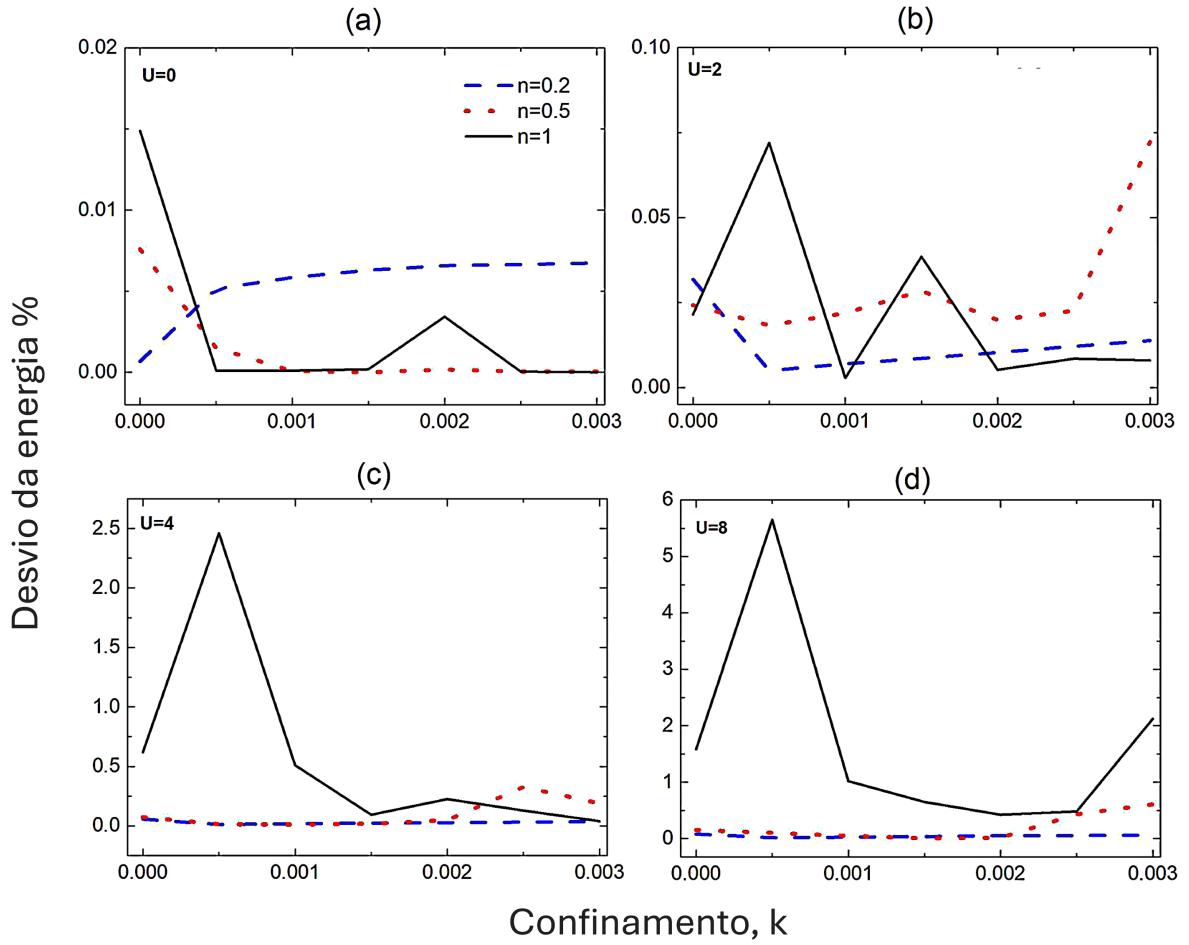


Figura 15 – Desvio percentual relativo da energia do estado fundamental em função do confinamento harmônico k . A curva azul representa o regime de baixa densidade ($n = 0.2$), a vermelha regime intermediário ($n = 0.5$), a preta o regime semi-preenchido ($n = 1$). A intensidade da interação repulsiva varia em: (a) $U = 0$; (b) $U = 2$; (c) $U = 4$; e (d) $U = 8$.

Na Figura 16 nota-se o efeito do confinamento harmônico em uma cadeia fortemente correlacionada ($U = 8$, $n = 0.5$), dividida entre o perfil de densidade Figura 16(a) e a entropia média de emaranhamento Figura 16(b). Ao analisarmos a Figura 16(a), observamos que, à medida que a intensidade do confinamento k aumenta, o sistema atravessa diferentes regimes: (i) em confinamentos fracos, a densidade é relativamente homogênea no centro da cadeia (fase metálica com $n_i < 1$ em toda a cadeia efetiva); (ii) com o aumento de k , surgem platôs de ocupação característicos do regime de Mott no centro ($n_i \cong 1$), cercados por regiões menos densas; (iii) para k ainda maior, o núcleo torna-se metálico de alta densidade ($n_i > 1$ no centro); e (iv) em confinamentos fortes, consolida-se um isolante de banda, com $n_i \cong 2$ no centro da cadeia e $n_i \cong 0$ nas bordas da cadeia. A DFT acompanha

qualitativamente essa evolução observada no DMRG, mas tende a suavizar as transições entre domínios de densidade: especificamente, as bordas dos platôs nas interfaces do platô Mott-like (ii) aparecem menos nítidos, a largura do platô e da região central mais densa (iii) pode sair ligeiramente deslocada, e o núcleo próximo a $n_i = 2$ (iv) é menos “plano” do que no DMRG — esses são os comportamentos que justificam dizer que a DFT suaviza as transições.

Já a Figura 16(b) mostra a entropia média de emaranhamento em função de k , com uma redução sistemática à medida que o confinamento cresce. Aqui empregamos a entropia de von Neumann de um sítio. Com logaritmo em base 2, o intervalo teórico é

$$0 \leq S_{\text{vN}} \leq \log_2 4 = 2, \quad (48)$$

pois a matriz reduzida local vive no espaço 4-dimensional $\{|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |2\rangle\}$. Assim, $S_{\text{vN}} \approx 2$ sinaliza um estado local maximamente misto ($w_0 \approx w_\uparrow \approx w_\downarrow \approx w_2 \approx 1/4$), típico de regiões metálicas com fortes flutuações de número e spin. Já $S_{\text{vN}} \approx 0$ indica um estado local puro/desemaranhado, como no vácuo das bordas em que o estado predominante é de sítios vazios ($n_i \simeq 0$) ou no núcleo do isolante de banda, em que a dupla ocupação é garantida ($n_i \simeq 2$). Em termos das fases da Figura 16, observa-se: (i) decaimento monotônico de $\bar{S}$ para k pequeno (metal de baixa densidade, flutuações moderadas); (ii) um mínimo local quando se forma o platô associado ao Mott no centro (flutuações de carga suprimidas e dupla ocupação com baixa probabilidade); (iii) um máximo local quando o centro volta a ser metálico com $n_i > 1$ (retorno de flutuações locais e maior mistura dos quatro estados); e (iv) novo decaimento rumo ao isolante de banda, onde o estado local se aproxima de $|2\rangle$ no núcleo e de $|0\rangle$ nas bordas (reduzindo a mistura e, portanto, S_{vN}). A DFT descreve corretamente essa tendência global e a ordenação dos extremos, mas frequentemente apresenta curvas mais suaves e valores ligeiramente maiores do que o DMRG em k intermediários.

Na Tabela 2 é possível observar um breve resumo quantitativo dos desvios relativos para a energia, perfil de densidade e entropia média nos diferentes casos estudados - homogêneo, super-rede e confinamento harmônico. Através destes dados notamos uma hierarquia de acurácia da DFT no caso homogêneo e a perda de universalidade em sistemas modulados.

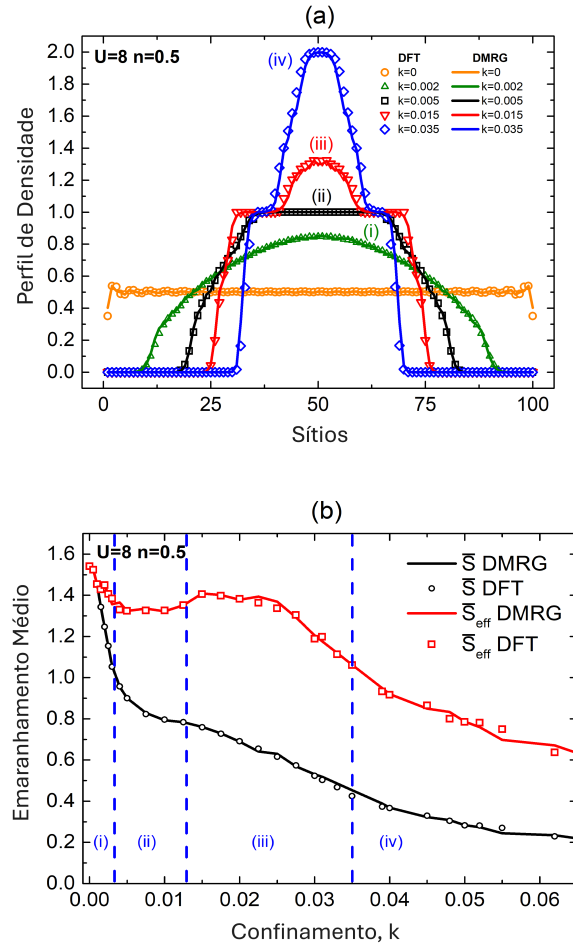


Figura 16 – a) Perfil de densidade para redes confinadas com $L = 100$ sítios, considerando diferentes curvaturas de confinamento k . (b) Entropia de emaranhamento em função da curvatura de confinamento k : média sobre toda a cadeia ($\bar{S}$) e média apenas na cadeia efetiva (sítios centrais com ocupação $n_i > 0.001$, $\bar{S}_{\text{eff}}$). Em ambos os casos, a DFT reproduz os dados do DMRG, mas observa-se que $\bar{S}_{\text{eff}}$ é mais sensível às transições entre fases: (i) metálica, (ii) isolante do tipo Mott, (iii) metálica no centro da cadeia e (iv) isolante de banda no centro da cadeia.

A hierarquia dos desvios relativos é clara para o sistema homogêneo, onde:

$$D\%(\bar{S}) < D\%(e_0) < \bar{D}\%(n), \quad (49)$$

Nota-se que a entropia de emaranhamento médio é uma grandeza bem descrita pelo método DFT, seguido da medida da energia do estado fundamental e por fim, do perfil de densidade (apresentando os maiores desvios)

Tabela 2 – Desvios percentuais relativos da energia fundamental $D\%(e_0)$, do perfil médio de densidade $\bar{D}\%(n)$ e da entropia média de emaranhamento $D\%(\bar{S})$ para diferentes sistemas 1D no regime $U = 8$. Valores adaptados de^[2].

	GS energy $D\%(e_0)$	Density profile $\bar{D}\%(n)$	Entanglement $D\%(\bar{S})$
<i>Homogeneous</i>			
$L = 10$	2.30	3.09	0.43
$L = 50$	0.44	0.88	0.14
$L = 100$	0.21	0.28	0.11
<i>Superlattices</i>			
SL 2 : 7	1.14	12.05	2.56
SL 3 : 6	1.85	9.60	1.35
SL 4 : 5	1.51	17.19	2.92
<i>Harmonic confinement</i>			
Metal (i), $k = 0.002$	0.01	2.77	0.16
Mott-like insulating (ii), $k = 0.005$	0.12	3.20	0.02
Metal (iii), $k = 0.015$	0.01	3.15	0.20
Band insulator (iv), $k = 0.035$	0.04	13.20	6.62

Em super-redes e no confinamento harmônico, notamos que a hierarquia deixa de ser universal. A relação entre os desvios $D\%(\bar{S})$, $D\%(e_0)$ e $\bar{D}\%(n)$ depende da estrutura da super-rede ($X : Y$) e da intensidade do confinamento (k). Um comportamento comum observado é a perda de precisão da DFT à medida que aumentamos o número de impurezas, sob o confinamento a fase metálica é melhor descrita, enquanto no regime de Mott ou isolante de banda sua acurácia cai. Podemos citar como exemplos onde é possível notar essa hierarquia, o regime de $U = 8$: no sistema homogêneo com $L = 100$ obtém-se $D\%(e_0) = 0.21\%$, $\bar{D}\%(n) = 0.28\%$ e $D\%(\bar{S}) = 0.11\%$; já em uma super-rede 2 : 7 os desvios crescem para 1, 14%, 12, 05% e 2, 56%, respectivamente; enquanto no confinamento harmônico, indo do regime metálico ($k = 0.002$) ao isolante de banda ($k = 0.035$), os valores passam de $D\%(e_0) = 0.01\%$, $\bar{D}\%(n) = 2, 77\%$ e $D\%(\bar{S}) = 0.16\%$ para 0.04%, 13, 20% e 6, 62%, respectivamente.

5.2 Análise das entropias: von Neumann, Linear, Típica

Atualmente, a entropia de von Neumann é amplamente reconhecida como a principal medida para quantificar o emaranhamento quântico em estados puros e bipartidos. No entanto, medidas alternativas — como a entropia linear, a entropia típica — também têm sido empregadas, o que levanta a questão: essas métricas são igualmente capazes

de capturar o emaranhamento quântico de forma confiável? São todas capazes de captar transições de fase quânticas com mesma sensibilidade?

Em trabalho recente^[52], investigamos a relação entre a entropia linear e a de von Neumann, demonstrando de forma detalhada as limitações de medidas aproximadas como a entropia linear. Nesta seção, retomaremos essa discussão e a ampliaremos e analisando também os comportamentos das entropias típica. Parte desses resultados é inédito e será apresentado aqui em caráter preliminar.

5.2.1 von Neumann vs. Linear

Como introduzido na seção de fundamentos, a entropia de von Neumann foi originalmente definida como uma generalização da entropia de Shannon da informação clássica para o contexto da mecânica quântica, sendo adequada para quantificar o grau de desordem ou incerteza em um estado quântico puro e bipartido representado por uma matriz densidade (Equação 31).

Essa entropia depende do logaritmo da matriz densidade. Neste caso específico – sistema bipartido – procuramos caracterizar o emaranhamento entre subsistemas. O que implica em um cálculo computacionalmente custoso devido a função logarítmica ser aplicada de forma matricial, necessitando diagonalizar a matriz da densidade para obter seus autovalores e em seguida analisar. Em sistemas de muitos corpos este cálculo é considerado computacionalmente mais custoso devido a dimensão $2^N \times 2^N$, onde N são os qubits. Ao observar esse comportamento notamos que rapidamente esse cálculo torna-se inviável, pois o custo da diagonalização se escala rapidamente. Apesar desse custo, é justamente o que garante que a entropia de von Neumann capture informações de ordem mais alta sobre a distribuição de probabilidades quânticas. Essa complexidade motivou o emprego de medidas alternativas, como a entropia linear (Equação 34), que elimina a presença do logaritmo ao se basear apenas na pureza do sistema, obtida pelo traço da matriz densidade ao quadrado. Além da vantagem prática, a entropia linear também pode ser interpretada como a primeira ordem da expansão de Taylor da entropia de von Neumann, o que levou à crença de que ambas apresentariam comportamento qualitativamente equivalente em diversos regimes físicos.

Nesta seção, investigaremos até que ponto a entropia linear pode ser utilizada como substituta da entropia de von Neumann na quantificação do emaranhamento quântico em sistemas unidimensionais de férmions fortemente correlacionados descritos pelo modelo de Hubbard. A análise será dividida em três casos: (i) comparamos S_v (Equação 31) e L (Equação 34) em regimes homogêneos, (ii) analisamos o efeito de modulações periódicas (super-redes) e (iii) o efeito de sistemas com desordem.

5.2.1.1 Homogêneo

Iniciamos nossa análise considerando um sistema homogêneo de cadeia infinita. Ao aplicar a parametrização da energia FVC (Equação 24), fazemos o sistema tender ao limite termodinâmico, o que nos permite utilizar os valores exatos do Bethe Ansatz (Equação 3) para esse regime. Dessa forma, os dados tornam-se exatos, livres de efeitos de aproximação numérica.

Na Figura 17(a), apresentamos a entropia de von Neumann — medida de emaranhamento de sítio único — em função da densidade eletrônica para valores fixos de U entre 0 e 10. Observa-se um comportamento não-monotônico: o emaranhamento cresce no regime metálico à medida que a densidade aumenta, seguido de uma diminuição quando a densidade se aproxima do semipreenchimento ($n = 1$). Esse comportamento reflete a transição metal-isolante de Mott caracterizada pela supressão da dupla ocupação e de sítios vazios.

Na Figura 17(b), o mesmo comportamento qualitativo é observado quando o emaranhamento é calculado via entropia linear. Entretanto, nota-se que, quantitativamente, a entropia linear é menos sensível a esse fenômeno. No inset, percebe-se que, enquanto a entropia de von Neumann distingue claramente diferentes intensidades de interação, a entropia linear só reproduz esse mesmo comportamento a partir de densidades mais altas ($n \geq 0.6$).

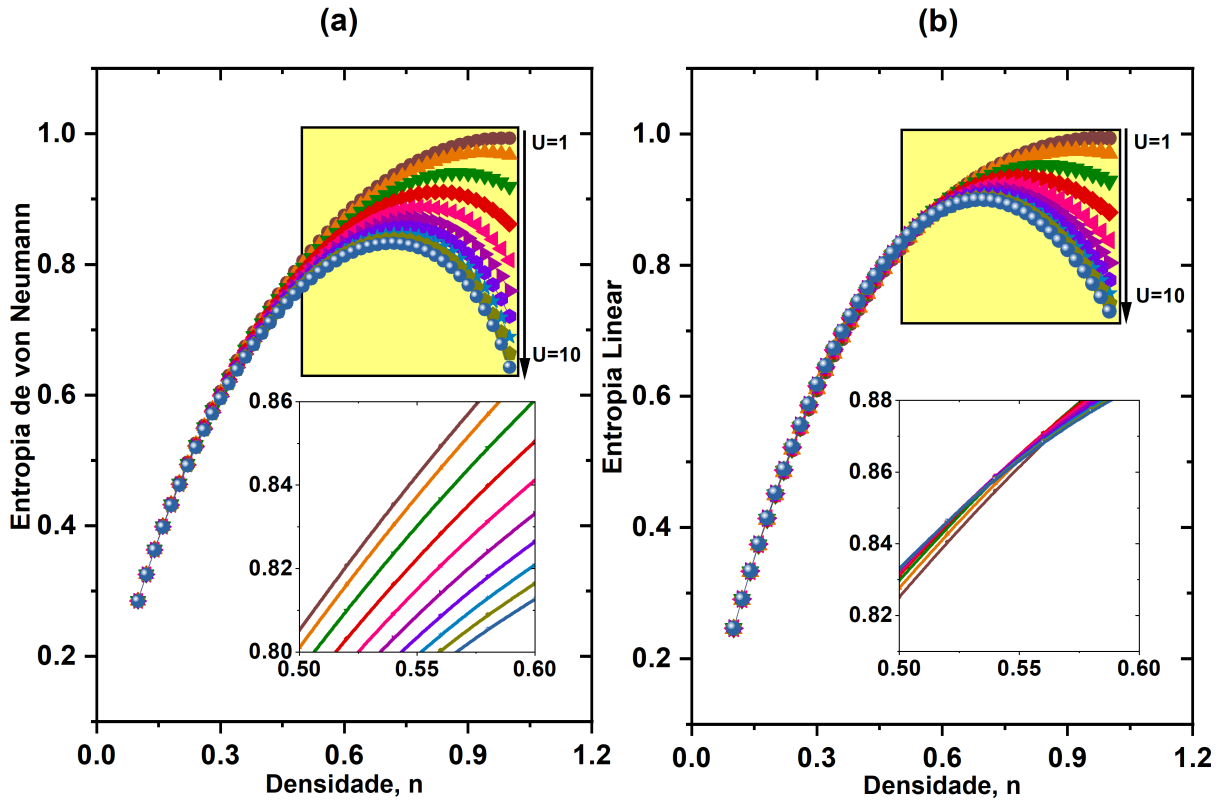


Figura 17 – Emaranhamento por sítio em função da densidade para uma cadeia de Hubbard homogênea no limite infinito, mensurado pela entropia de von Neumann (a) e pela entropia linear (b), para valores de U variando de 0 a 10. No canto inferior direito, um inset destaca o intervalo de densidade entre 0.5 e 0.6, evidenciando a menor sensibilidade da entropia linear e sua tendência incorreta em relação à monotonicidade do sistema.

Na Figura 18, observamos um comportamento bem estabelecido na teoria: na ausência de interação local ($U = 0$), o sistema atinge o valor máximo de emaranhamento, que passa a decrescer monotonicamente à medida que U aumenta, pois a interação favorece a ocupação desemparelhada e reduz a mistura dos estados locais. Esse comportamento é capturado pela entropia de von Neumann em todos os regimes, em especial em $n = 1$ (semipreenchimento), onde a queda é mais abrupta devido à formação do isolante de Mott.

Por outro lado, a entropia linear apresenta falhas nesse aspecto em baixas densidades ($n < 0.6$), nas quais a medida exibe um crescimento indevido da curva, prevendo um comportamento oposto ao esperado. Apenas para $n > 0.6$ nota-se uma aproximação qualitativa ao comportamento correto, mas, ainda assim, seu desempenho torna-se menos sensível novamente em regimes de interação forte ($U > 5$).

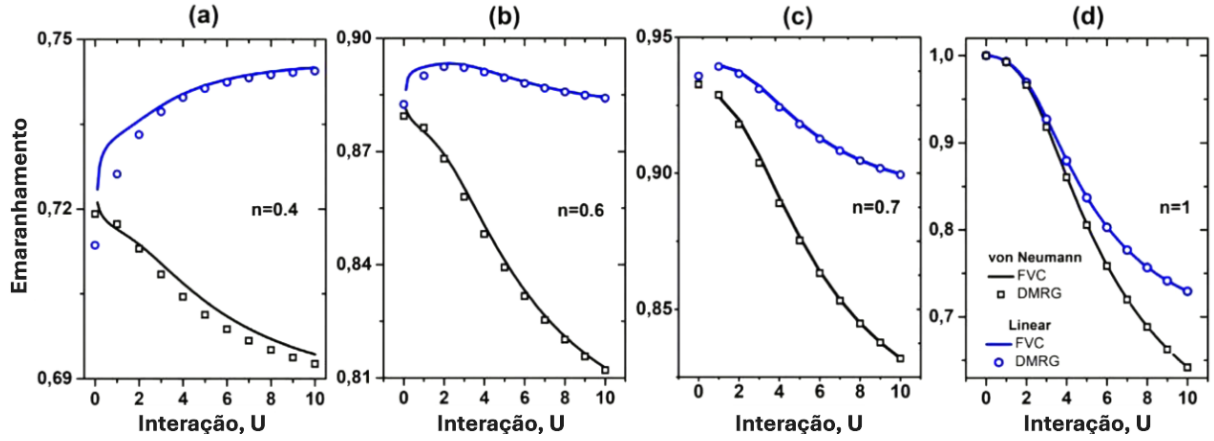


Figura 18 – Emaranhamento para uma cadeia de Hubbard homogênea em função da interação, variando de 0 a 10. calculado tanto pela entropia de von Neumann (linha preta) quanto pela entropia linear (linha azul) via FVC. Os símbolos indicam os resultados obtidos pelo método DMRG para uma cadeia de $L = 120$ sítios: círculos azuis para a entropia de von Neumann e quadrados pretos para a entropia linear. As figuras correspondem a valores fixos de densidade: (a) $n = 0.4$, (b) $n = 0.6$, (c) $n = 0.7$ e (d) $n = 1$.

Uma forma de compreender a origem dessa diferença entre as medidas de emaranhamento é analisar a probabilidade de dupla ocupação. Na Figura 19, apresentamos a dupla ocupação em função da densidade para valores fixos de U entre 0 e 10. Observa-se que, em baixas densidades, a cadeia é mais diluída, de modo que a contribuição de duplas ocupações tende a zero, tornando-se praticamente insensível à intensidade de U .

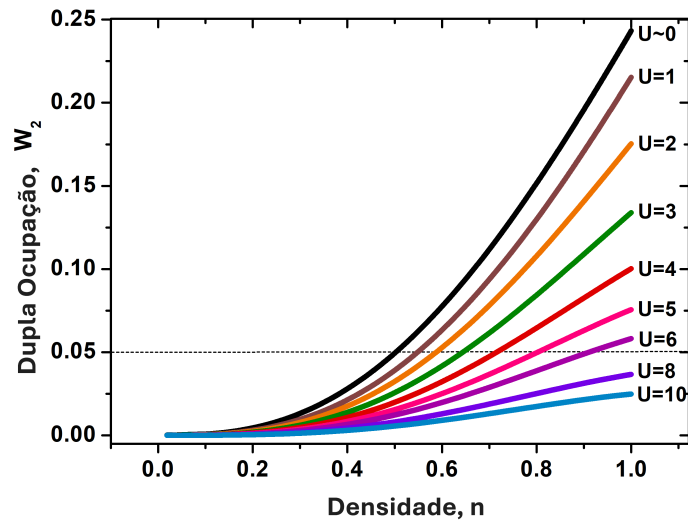


Figura 19 – Dupla ocupação em função da densidade para diferentes valores fixos de U .

Nesses casos, os termos logarítmicos da entropia de von Neumann tornam-se particularmente relevantes, enquanto a entropia linear permanece com valores muito pequenos, perdendo assim a capacidade de reproduzir o real emaranhamento do sistema. Uma forma de verificar em que ordem de aproximação tais contribuições passam a ser recuperadas é analisar termos de ordem mais alta da expansão. Na Figura 20, observamos que, para uma densidade $n = 0.5$, o comportamento correto só é recuperado a partir da sexta ordem, enquanto que para $n = 0.2$ isso ocorre apenas na vigésima quinta ordem da expansão.

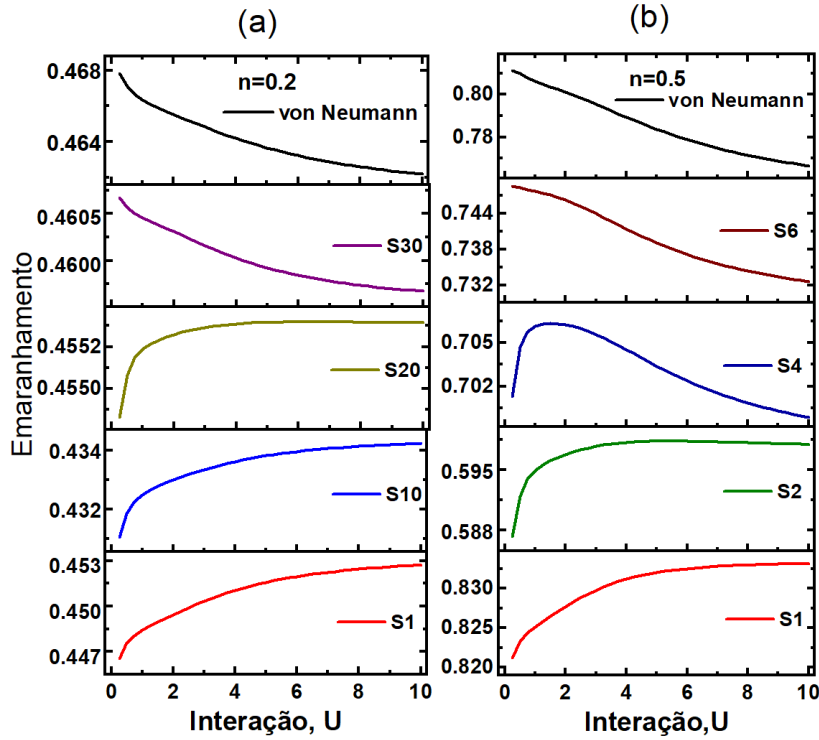


Figura 20 – Recuperação do comportamento correto do emaranhamento em função da ordem de expansão da entropia linear, para diferentes densidades.

Esse resultado mostra que, em regimes de baixa densidade, a aproximação pode levar a conclusões equivocadas, um suposto comportamento não monofônico e consequentemente, a identificação incorreta de transições de fase quânticas. Portanto, a equivalência qualitativa entre a entropia linear e a de von Neumann não pode ser assumida de maneira geral, especialmente em sistemas de baixa densidade e com interações fortes.

5.2.1.2 Super-rede e Desordem



Figura 21 – Modelo representativo de um sistema desordenado, no qual os valores de V são distribuídos aleatoriamente ao longo da cadeia. Para cada medida apresentada foram realizados 100 cálculos independentes.

No caso das cadeias de Hubbard com desordem, foi introduzido impurezas pontuais (V) randômicas, onde para cada nova amostra gerada, ocasiona uma nova configuração distinta de impurezas distribuídas pela rede. Assim, para cada grupo de parâmetros é necessário um conjunto mínimo de pelo menos 100 amostras.^[34, 99]

Os resultados mostram que, em baixas densidades ($n \leq 0.4$), tanto a von Neumann quanto a linear capturam corretamente o aumento do emaranhamento induzido pela competição entre desordem e interação. No entanto, quando a densidade cresce, a diferença entre as medidas reaparece: a von Neumann revela um comportamento não monótono (a entropia aumenta até um máximo e depois satura), enquanto a linear é menos sensível a esse efeito. Por exemplo, para $n = 0.4$, a linear ainda não consegue reproduzir a não monotonicidade. Para $n = 0.6$, já acompanha a tendência, mas de forma mais suave.

Um aspecto interessante é que, ao aumentar a intensidade da desordem, a linear melhora seu desempenho e se aproxima da von Neumann em todos os regimes de densidade. Isso é atribuído ao fato de que, em desordem forte, a distribuição de partículas se torna altamente heterogênea: os sítios de impureza atrativa ficam mais populados e os demais tendem a esvaziar. Assim, mesmo que a densidade média seja baixa, localmente há regiões de alta ocupação que colocam o sistema em regimes onde a entropia linear é mais confiável.

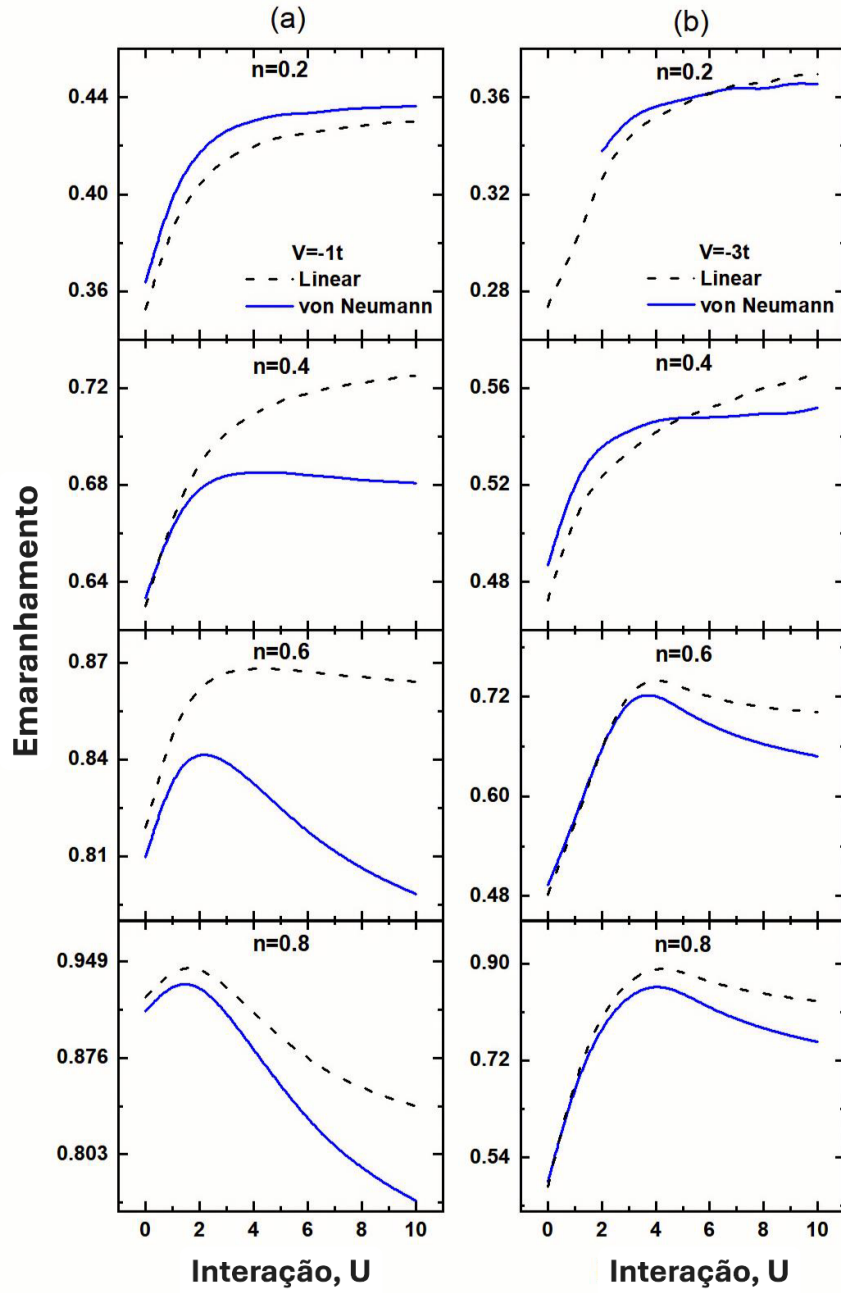


Figura 22 – Medida do emaranhamento via entropia linear (preto) e entropia de von Neumann (azul) para um sistema desordenado em função da interação U para valores de $n = 0.2, 0.4, 0.6$ e 0.8 em um regime de potencia externo atrativo (a) $V = -1t$ e (b) $V = -3t$

No caso das super-redes, investigamos cadeias com potenciais periódicos, compostas por blocos de sítios com e sem impurezas, formando estruturas X:Y, como observado na Figura 10. Os cálculos, realizados via DMRG, mostram que a entropia linear novamente falha em regimes de potencial fraco. Nesses casos, a von Neumann exibe uma variação não monótona com a interação U , enquanto a linear não consegue capturar esse comportamento.

Contudo, à medida que o potencial periódico aumenta, ou quando há maior equilíbrio entre regiões com e sem impurezas (isto é, $X \approx Y$), as duas entropias passam a se tornar qualitativamente semelhantes. Esse resultado é interpretado de forma análoga ao caso da desordem: o potencial forte faz com que o perfil de densidade local se afaste da densidade média, levando o sistema a regimes onde a entropia linear consegue recuperar melhor o comportamento da von Neumann.

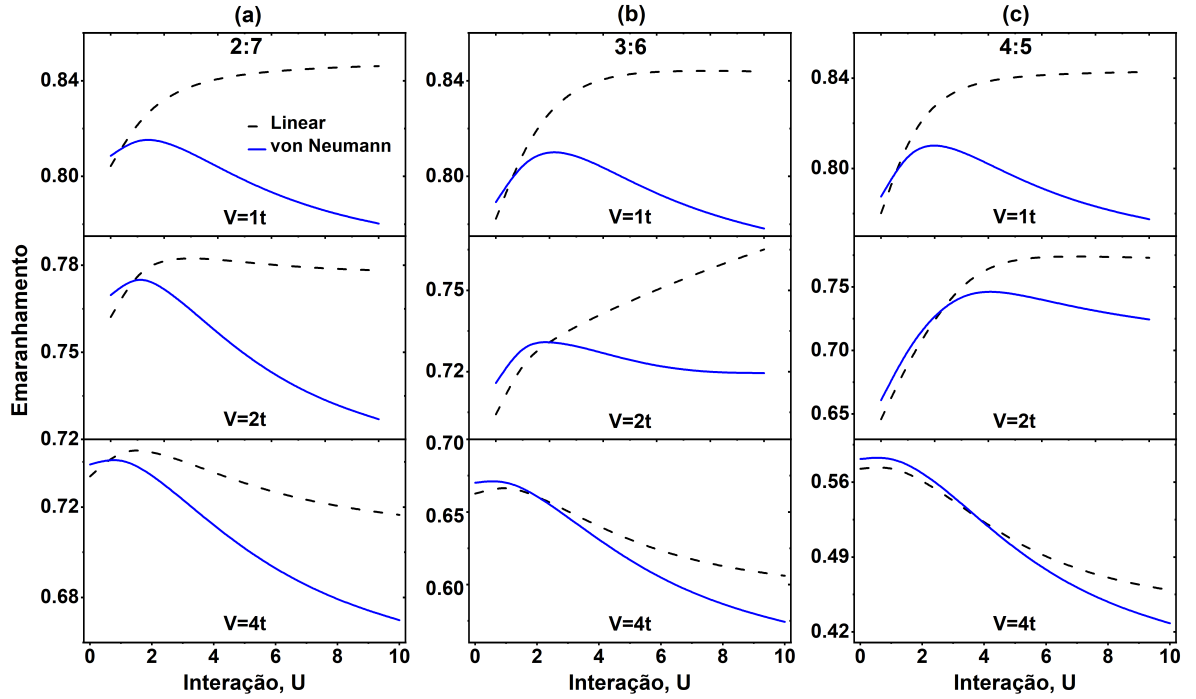


Figura 23 – Emaranhamento médio para uma cadeia finita de $L=36$ e $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 10$, via entropia de von Neumann (azul) e linear (preto) em função da interação repulsiva U . As figuras estão divididas em três estruturas, sendo (a) super-rede 2:7, (b) super-rede 3:6 e (c) super-rede 4:5.

Portanto nossos resultados demonstram de forma inequívoca que a utilização da entropia linear como substituta direta da entropia de von Neumann para quantificação de emaranhamento em sistemas fermiônicos deve ser feita com extrema cautela. Embora a entropia linear ofereça vantagens computacionais e analíticas, a análise de cadeias de Hubbard homogêneas, desordenadas e moduladas em super-redes mostrou que sua confiabilidade depende fortemente do regime físico considerado.

Nos sistemas homogêneos, constatou-se que a entropia linear falha qualitativamente em reproduzir o comportamento esperado do emaranhamento em baixas densidades ($n \leq 0.6$), chegando a inverter a tendência de variação com a interação de Coulomb U .

Esse resultado é particularmente preocupante, pois pode levar a previsões incorretas acerca de estados de máximo e mínimo emaranhamento, além de interpretações equivocadas de transições de fase quânticas, como a de Mott metal–isolante. Somente para densidades mais altas ($n > 0.6$) a entropia linear consegue recuperar, ainda que parcialmente, a descrição qualitativa fornecida pela von Neumann, deteriorando-se novamente em interações fortes.

No caso das cadeias desordenadas, a entropia linear apresentou desempenho variável: em densidades baixas, continuou menos sensível que a von Neumann, mas à medida que a intensidade da desordem aumentou, a linear passou a reproduzir melhor os resultados. Isso se deve ao fato de que, em regimes de forte desordem, o perfil de densidade local se afasta significativamente da densidade média, deslocando o sistema para condições em que a entropia linear é mais robusta. De maneira análoga, para as super-redes observou-se que, em potenciais periódicos fracos, a linear falha em capturar a não monotonicidade do emaranhamento com U . Entretanto, em potenciais mais fortes ou em arranjos com maior equilíbrio entre sítios impuros e não impuros, a aproximação qualitativa entre as duas medidas é recuperada.

Esses achados colocam em evidência que a entropia linear não é universalmente equivalente à entropia de von Neumann, e que seu uso indiscriminado pode comprometer análises de sistemas fortemente correlacionados. Além disso, reforçam o papel do modelo de Hubbard como um valioso laboratório teórico para investigar não apenas a física do emaranhamento em diferentes regimes, mas também para testar a consistência de diferentes medidas de correlação quântica.

5.2.2 von Neumann vs Típica

Nos tópicos anteriores, investigamos sistemas com confinamento harmônico, modulações periódicas e desordem, utilizados para avaliar o desempenho de diferentes métodos (DMRG vs. DFT)^[2] e distintas medidas de emaranhamento (entropia linear e entropia de von Neumann)^[2]. Partindo desses mesmos sistemas, apresentamos aqui análises preliminares comparando a entropia típica com a média aritmética ($\bar{S}$)

A motivação para essa comparação vem da própria concepção da chamada entropia típica: sabe-se que médias aritméticas podem superestimar ou subestimar o emaranhamento global, especialmente em casos como o confinamento harmônico, em que apenas poucos

sítios apresentam correlações significativas. Para contornar esse viés, a literatura propõe a utilização da média geométrica — a entropia típica — como medida mais representativa do comportamento global e como indicador sensível do início da localização [50, 54, 51, 53]. O objetivo desta seção é, portanto, investigar se a entropia típica de fato se mostra mais sensível na caracterização de transições de fase quânticas nesses sistemas.

5.2.2.1 Confinamento harmônico

Nossa primeira análise considera um sistema sob confinamento harmônico com interação forte $U = 8$ e um quarto de preenchimento $n = 0.5$, mostrado na Figura 24.

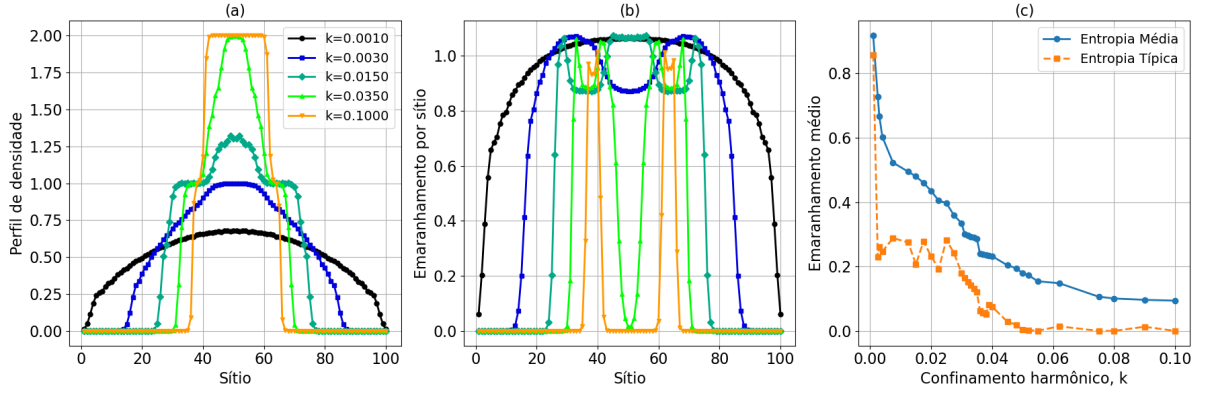


Figura 24 – Sistema sob confinamento harmônico, com interação forte $U = 8$, um quarto de preenchimento ($n = 0.5$) e cadeia de $L = 100$ sítios. (a) Perfil de densidade em função do sítio. (b) Perfil de emaranhamento local em função do sítio, calculado via entropia de von Neumann. (c) Emaranhamento médio em função do confinamento k , comparando a entropia típica (laranja) e a entropia média (azul).

Na Figura 24(a), o perfil de densidade ao longo da cadeia indica que, para $k \approx 0$ (curva preta), os elétrons se distribuem de forma relativamente uniforme, com exceção das bordas, onde o potencial é forte e há uma significativa redução na densidade de partículas, há uma distribuição razoavelmente homogênea de partículas. Já a Figura 24(b) mostra que o emaranhamento da von Neumann por sítio é elevado na região central ($S_{vN} > 1$), refletindo um estado altamente correlacionado, isto é, de caráter metálico.

À medida que o confinamento aumenta, o sistema se reorganiza: para $k = 0.015$, os elétrons já se concentram em uma região mais central, enquanto as bordas tornam-se vazias, levando a emaranhamento torna-se muito pequeno nessas regiões. O centro,

entretanto, mantém flutuações e, se considerado como uma cadeia efetiva, apresenta ainda caráter metálico. Para confinamentos mais fortes ($k \gtrsim 0.035$), a densidade no centro cresce até atingir $n = 2$, situação em que o emaranhamento local cai a zero. Diferentemente das bordas vazias, aqui o colapso ocorre pelo congelamento dos estados devido à dupla ocupação completa, caracterizando um isolante de banda. Dessa forma, as Figura 24(a) e (b) evidenciam uma sequência de regimes: de metálico estendido, passando por uma fase intermediária metálica restrita ao centro, até o isolante de banda no limite de confinamento intenso.

A Figura 24(c) apresenta a evolução do emaranhamento médio em função de k , comparando a média aritmética e a média geométrica (típica). Ambas decaem com o aumento do confinamento, mas de maneira distinta: a entropia média diminui gradualmente, enquanto a entropia típica cai de forma abrupta.

Interpretamos essa diferença pelo fato de a média geométrica ser fortemente influenciada por valores muito pequenos, basta uma fração significativa de sítios apresente $\bar{S}(i) \approx 0$ para que a entropia típica colapse rapidamente. Fisicamente, entendemos que a típica atua como um parâmetro de ordem coletivo, na qual reflete o comportamento da maioria dos sítios, e não de poucos ainda fortemente emaranhados. Já a entropia média, por considerar igualmente máximos e mínimos, mantém valores intermediários e registra algum sinal de correlação mesmo em $k = 0.1$, quando ainda há sítios com emaranhamento residual.

Portanto, embora a entropia típica seja concebida como métrica mais sensível para detectar em sistemas desordenados, nossos resultados preliminares mostram que ela também pode suprimir informações relevantes sobre regiões ainda emaranhadas em sistemas com confinamento harmônico. Portanto, podemos entendê-la não como uma ferramenta completa, mas como uma informação complementar, onde a típica marca a perda de emaranhamento da maior parte da cadeia, enquanto a média evidencia os sítios mais correlacionados.

5.2.2.2 Super-rede

Para verificar se a conclusão discutida no caso do confinamento harmônico se mantém em outros tipos de sistemas, analisamos uma super-rede periódica do tipo 2:7,

com comprimento $L = 90$, potencial atrativo $V = -10$ e interação $U = 4$, mostrada na Figura 25.

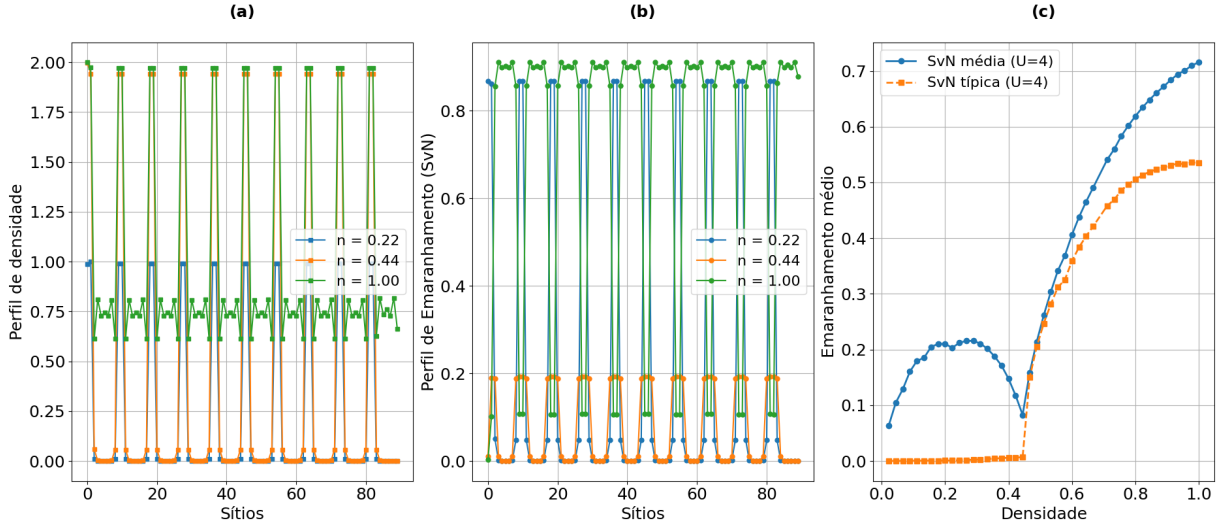


Figura 25 – Análise comparativa entre a entropia *típica* e a entropia *média* para uma super-rede 2:7 com $L = 90$, potencial atrativo $V = -10$ e interação $U = 4$. (a) Perfil de densidade em função do sítio para $n = 0.22$, 0.44 e 1.00 . (b) Entropia de von Neumann local S_{vN} por sítio para os mesmos n . (c) Emaranhamento médio em função de n : média aritmética $\bar{S}$ (azul) e típica $S_{\text{typ}} = \exp(\ln S_{vN})$ (laranja).

Na Figura 25(a), para $n = 0.22$ observamos forte concentração de elétrons nos sítios de potencial atrativo, enquanto os sítios neutros permanecem quase vazios. Esse comportamento é esperado: em baixa densidade os portadores ocupam preferencialmente os locais energeticamente favoráveis, neste caso os sítios atrativos ($V = -10$). Para $n = 0.44$ (um quarto de preenchimento) os poços atrativos ficam praticamente saturados ($n_i \approx 2$) e o excedente de elétrons passa a ocupar os sítios neutros. Já em $n = 1.00$ (semipreenchimento), a ocupação torna-se mais distribuída: as regiões atrativas permanecem quase totalmente preenchidas, enquanto os sítios de potencial nulo passam a receber uma fração significativa da densidade, resultando em emaranhamento local intermediário nesses sítios.

No painel Figura 25(b), o efeito aparece no emaranhamento por sítio. Para $n = 0.22$, observam-se máximos no emaranhamento S_{vN} nos sítios atrativos, enquanto os sítios neutros — quase desocupados — exibem $S_{vN} \approx 0$. Em $n = 0.44$, a proximidade com a dupla ocupação ($n_i \simeq 2$) nos sítios atrativos suprime as flutuações e, consequentemente, reduz S_{vN} nessas posições, ao passo que os sítios neutros, agora parcialmente ocupados, apresentam valores intermediários. Para $n = 1.00$, a distribuição mais homogênea de

densidade ao longo da cadeia leva a um S_{vN} do sistema como um todo a valores mais altos, exceto em regiões com probabilidade de dupla ocupação altas, onde o emaranhamento permanece baixo. Esse comportamento é compatível com o máximo de S_{vN} ocorrer para ocupações intermediárias, quando as probabilidades por sítio estão mais misturadas.

O painel (c) resume esse comportamento: a entropia média cresce com n ao longo do intervalo considerado, sendo sensível a regiões com emaranhamento baixo, enquanto a típica fica suprimida em densidades baixas/moderadas — pois dá peso muito grande aos sítios com $S_{vN} \approx 0$ — e só então passa a acompanhar a média quando o emaranhamento se torna mais distribuído pelo sistema. Essa diferença ressalta a sensibilidade da medida típica à presença de regiões pouco emaranhadas, ao custo de subestimar correlações remanescentes.

Ao compararmos com a entropia típica, notamos um contraste importante: como essa medida ressalta fortemente os sítios com emaranhamento nulo, ela colapsa para valores próximos de zero em densidades $n < 0.5$, mesmo quando ainda existem regiões localmente correlacionadas. Apenas após esse regime a entropia típica começa a crescer, capturando o emaranhamento médio do sistema. Essa diferença destaca as penalizações da entropia típica, tornando-a mais sensível à presença de regiões localizadas, mas ao custo de subestimar os sinais de correlação remanescentes.

5.2.2.3. Sistemas desordenados

Nossa última análise está relacionada a sistemas com impurezas pontuais de intensidade V_i , investigando tanto o regime superfluido em $V = 0, U < 0$ quanto o metálico em $V = 0$ e $U > 0$. Seguindo a definição de Canella (2021)^[34], a concentração de impurezas é dada por

$$C = \frac{L_v}{L} \times 100 \quad (50)$$

onde L_v é o número de sítios com impurezas ($V \neq 0$) e L o comprimento total da cadeia.

A Figura 26 apresenta a comparação entre a entropia média e a entropia típica para cadeias desordenadas, em função da concentração de impurezas C . Para cada ponto de concentração foram rodadas 100 realizações independentes de cadeias com $L = 100$.

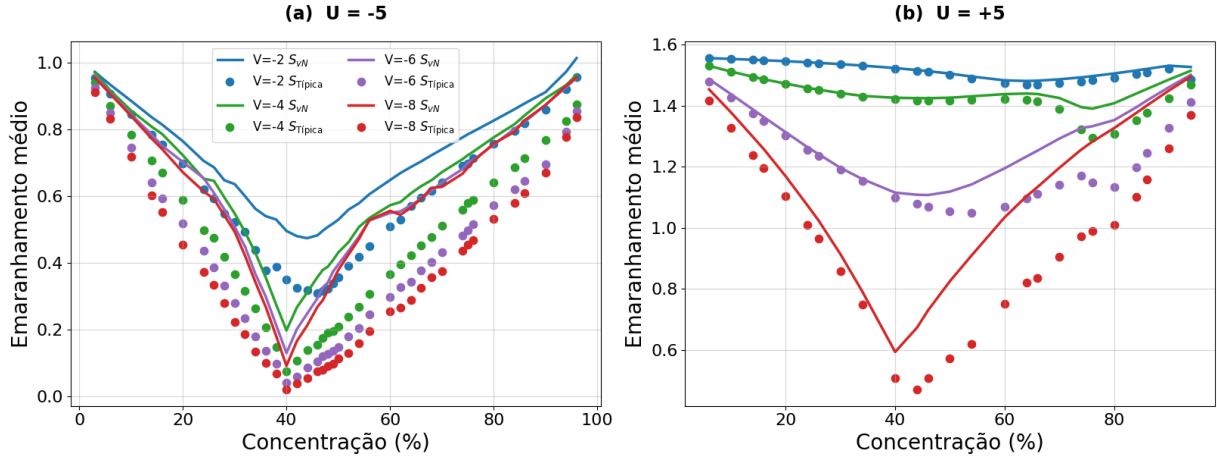


Figura 26 – Comparação entre entropia média (linhas contínuas) e entropia típica (círculos) em função da concentração de impurezas C para diferentes valores de V . (a) Caso atrativo $U = -5$ (transição superfluido–isolante). (b) Caso repulsivo $U = 5$ (transição metal–isolante de Mott).

No caso atrativo ($U = -5$), mostrado na Figura 26(a), associado à transição superfluido–isolante, observa-se que para desordem moderada ($|V| \gtrsim 4$) há uma queda abrupta do emaranhamento em torno de $C \approx 40\%$, indicando o ponto crítico de localização. Já para valores mais fracos de desordem ($|V| < 4$), a transição não é completa: o sistema ainda exibe delocalização parcial dos pares, caracterizando a chamada localização frustrada^[34, 100].

Por outro lado, no regime repulsivo ($U = 5$), ilustrado na Figura 26(b), a física é dominada pela competição entre o isolante de Mott e a localização de Anderson. Aqui, a supressão do emaranhamento só se torna evidente para valores de desordem mais fortes ($|V| \gtrsim 8$). Além disso, nota-se a presença de uma inflexão em altas concentrações de impurezas ($C \sim 80\%$), associada a um regime Mott-like, conforme discutido em trabalhos anteriores^[34, 100, 101].

Ao comparar o desempenho das duas entropias na Figura 26(a), notamos que ambas possuem comportamentos semelhantes, no entanto, a entropia típica (símbolos) possui uma queda mais abrupta em $C = 40\%$ trazendo todas as curvas antecipadas, em comparação a entropia média (linhas contínuas) para esse mínimo. O que nos faz questionar, será que isso de fato é uma sensibilidade da típica em detectar pontos críticos ou é apenas efeito de penalizações que excluem correlações residuais? Uma medida que pode nos dar uma direção é o emaranhamento local do sistema, no entanto realizar o emaranhamento local

para a desordem é utilizar a média. Com isso, alternativas ainda estão em discussão para qual seria a melhor ferramenta para dar este entendimento do sistema.

Na Figura 26(b), observamos o mesmo fenômeno, no entanto agora notamos um leve deslocamento do mínimo em $C = 40\%$ na entropia típica com relação a entropia média, outros vales também aparecem mais destacados no caso de $V = -6$ e $V = -4$, especificamente.

Resumidamente, nossos resultados preliminares concluem que a comparação entre a entropia de von Neumann e a entropia típica revela um quadro ambíguo, por um lado, a típica mostra-se de fato mais sensível à presença de desordem e ao surgimento de regimes localizados, colapsando rapidamente quando uma fração significativa dos sítios perde correlação. Por outro lado, essa mesma sensibilidade pode atuar de outro modo: correlações residuais em regiões localmente emaranhadas deixam de ser capturadas. Deste modo, nossos resultados preliminares sugerem que as duas medidas não são excludentes, mas sim complementares. Enquanto a von Neumann evidencia a persistência de emaranhamento em domínios restritos, a típica marca de maneira mais clara a transição coletiva para regimes localizados. Demonstrando que a utilização conjunta de ambas pode oferecer uma caracterização mais robusta das transições de fase em sistemas correlacionados e desordenados.

5.3 Parametrização da energia do estado fundamental

No estudo da matéria condensada, no que se refere ao cálculo da energia, os funcionais analíticos disponíveis encontram considerável dificuldade, em particular quanto a obtenção de derivadas da energia em relação à magnetização e outros parâmetros do sistema. Com isso, é de extrema importância desenvolver um funcional que seja capaz de obter com precisão a energia para então ao ser implementado na DFT torne possível investigar, com mais precisão, a relação entre a susceptibilidade magnética e emaranhamento de forma analítica em diversos regimes. Além disso, a possibilidade de se investigar transições de fase quânticas em sistema mais próximos ao cotidiano, heterogêneos complexos, como por exemplos superfluidos exóticos será um grande avanço na área. No trabalho apresentado nesta seção temos como objetivo central otimizar o funcional FVC, mantendo sua estrutura original, mas modificando os expoentes (P1,P2,P3,P4 e P5) de

suas expressões, de modo a aprimorar seu desempenho em sistemas magnetizados, como observado na equação abaixo,

$$e_0^{\text{NOVO}}(n, m, U) = \frac{-2\beta(n, m, U)}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta(n, m, U)}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma(n, m, U)}\right), \quad (51)$$

onde

$$\gamma(n, m, U) = 2 \exp\left[\frac{U^{P1}}{1 - (m/n)^{P2}}\right], \quad (52)$$

$$\beta(n, m, u) = \beta(U)^{\alpha(n, m, U)} \quad (53)$$

$$\alpha(n, m, U) = \left(\frac{n^{P3} - m^{P3}}{n^{P4}}\right) U^{P5}, \quad (54)$$

sendo, os parâmetros $P1, P2, P3, P4$ e $P5$ os parâmetros alvos da otimização.

Essa escolha se justifica pelo fato da FVC reproduzir de maneira satisfatória a energia em sistemas não magnetizados, porém suas derivadas apresentam limitações quando aplicado a situações em que a magnetização desempenha papel relevante.

Para atingir esse objetivo, é necessário compreender não apenas a forma analítica do funcional de referência, mas também o conjunto de dados utilizados como base na parametrização. Além disso, faz-se imprescindível analisar a consistência e as limitações numéricas desses dados, de modo a assegurar que a otimização ocorra sobre dados numéricos confiáveis.

Tendo como conjunto de referencia as malhas de magnetização, densidade (n), interação (U) e energia (E_{Tot}) obtidas via integrais de Lieb Wu^[32]. Utilizamos para fins comparativos de performance o funcional FVC, onde será possível observar a performance da otimização através dos parâmetros da FVC.

Vale destacar que todos os dados obtidos no presente projeto foram realizadas em um computador pessoal (Acer Nitro AN517-54) equipado com processador Intel Core™ i5-11400H de 11^a geração, 8 GB de RAM DDR4, armazenamento SSD de 1,3 TB, gráficos integrados Intel UHD (TGL GT1) e sistema operacional Ubuntu 24.04.2 LTS (kernel Linux 6.14.0-28-generic).

A seguir, descrevemos em detalhe o procedimento de geração das tabelas de referência via Bethe Ansatz e discutimos as dificuldades numéricas encontradas nesse processo.

5.3.1 Malhas de Bethe Ansatz

Antes de qualquer procedimento de otimização, é necessário assegurar a consistência dos dados numericamente exatos, de modo a garantir que constituam uma referência confiável. Para esse fim, utilizamos um código implementado anteriormente pelo Prof. Dr. Vivaldo Campos Jr., UFSCar, cujo objetivo é calcular os valores das integrais acopladas de Lieb–Wu para sistemas magnetizados. A geração dos dados foi organizada em três etapas sucessivas, cada uma produzindo tabelas intermediárias:

1. Tabela LDA: para cada valor fixo de U , geramos uma tabela inicial com magnetização nula ($m = 0$), contendo a variação da densidade eletrônica n (200 pontos) e os correspondentes valores de E_{xc} , $\partial E_{xc}/\partial n$ e $\partial E_{xc}/\partial U$.
2. Tabela LSDA: a partir da tabela anterior, realizamos, para cada densidade n , uma varredura em magnetização no intervalo $m \in [0, n]$, obtendo os valores de E_{xc} (energia de troca e correlação), $V_{xc}^\uparrow$ (derivada parcial da E_{xc} em relação a $n_\uparrow$) e $V_{xc}^\downarrow$ (derivada parcial da E_{xc} em relação a $n_\downarrow$). Nesta etapa, o número de pontos da malha em m foi de 200, resultando em uma malha final de aproximadamente 40 mil pontos por valor de U . Adicionalmente, conduzimos uma varredura em n e m com resoluções de 200, 250, 500 e 1000 pontos, atingindo uma malha de até 200 mil pontos por U fixo.
3. Tabela Energia: com base nas tabelas LSDA, calculamos separadamente as energias

$$T_s = -\frac{4}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{2}\right), \quad (55)$$

$$E_h = \frac{U}{4} (n^2 - m^2), \quad (56)$$

e, por fim, a energia total

$$E_{\text{total}} = T_s + E_h + E_{xc}. \quad (57)$$

Esse procedimento resultou na construção da tabela final utilizada para a otimização do funcional da densidade.

Durante a análise dessas tabelas, identificamos picos anômalos em algumas curvas de E_{total} , como ilustrado na Figura 27.

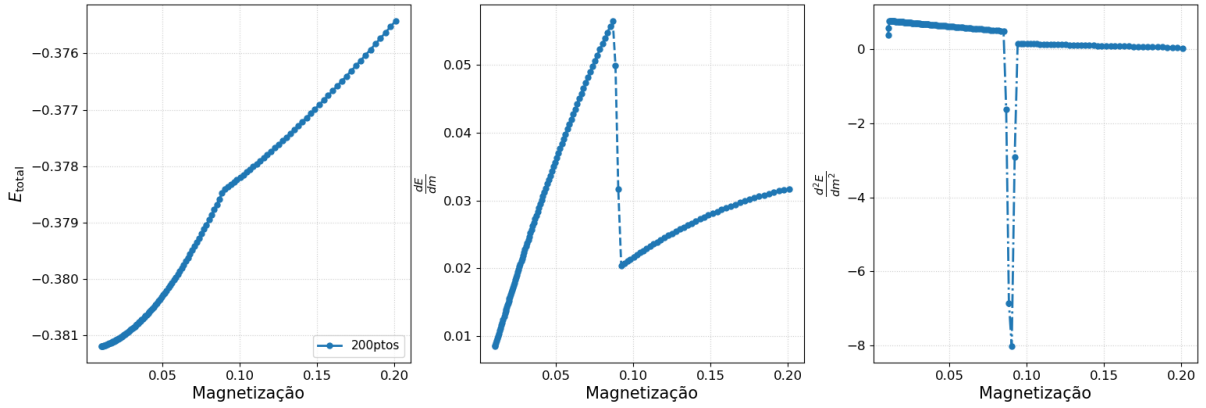


Figura 27 – Energia total e derivadas de primeira e segunda ordem em função da magnetização para $n \approx 0.2$, $U = 6$ e malha de 200 pontos. Abaixo, ampliamos as regiões onde os picos das derivadas aparecem.

Para identificar a origem desses picos, plotamos as energias (T_s , E_h , E_{xc}), conforme mostrado na Figura 28. Enquanto T_s e E_h apresentaram comportamento suave em todo o intervalo de m , tanto em suas energias quanto em suas derivadas, o termo de troca e correlação E_{xc} exibiu oscilações localizadas — em especial, é possível ver estes picos mais claramente em sua segunda derivada.

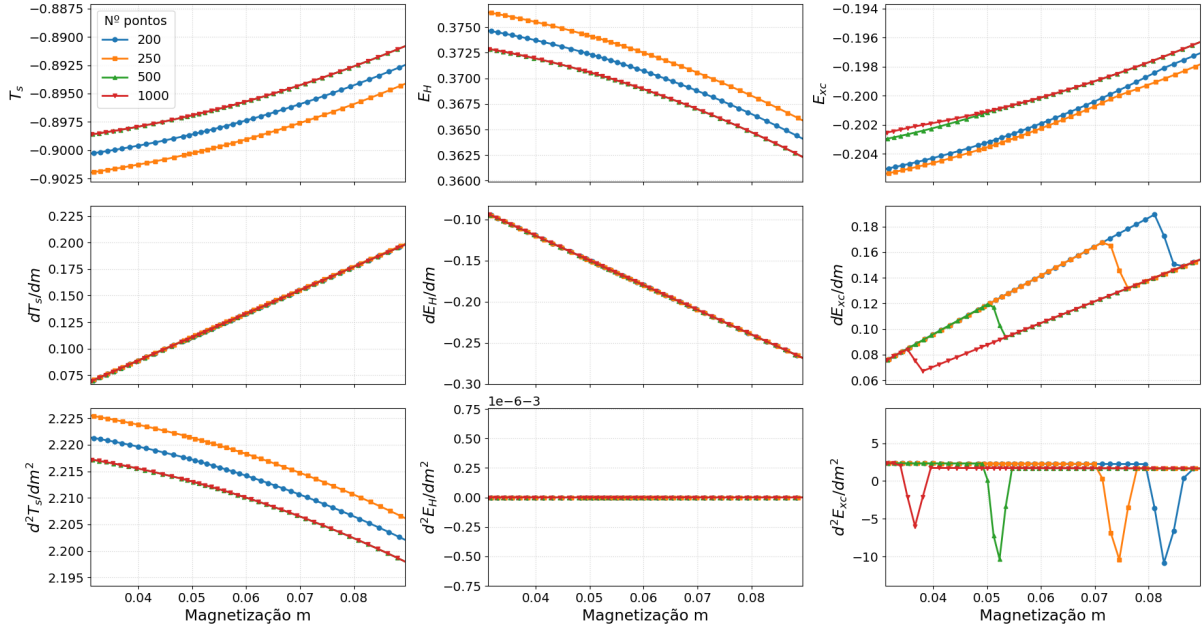


Figura 28 – Decomposição da energia em T_s , E_h e E_{xc} para $n \approx 0.2$, $U = 6$.

Testes adicionais, apresentados na Figura 29, confirmaram que o refinamento da malha de magnetização (de 200 até 1000 pontos) desloca os picos tanto na primeira quanto

na segunda derivada, indicando que se tratam de artefatos numéricos de discretização que em um determinado conjunto deixa de existir.

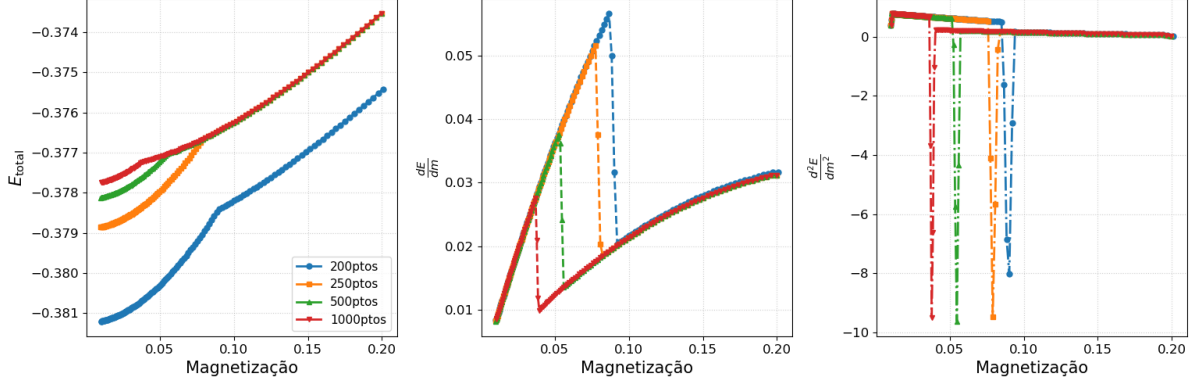


Figura 29 – Energia total e derivadas de primeira e segunda ordem em função da magnetização para diferentes tamanhos de malha em m ($200 \leq N_m \leq 1000$) para $n \approx 0.2$, $U = 6$.

Apesar de identificarmos tais artefatos, optamos por prosseguir com os dados disponíveis. A geração de malhas ainda mais refinadas em todo o intervalo de U seria inviável do ponto de vista computacional, demandando meses de cálculo em máquinas convencionais — os únicos recursos disponíveis na época. Além disso, realizamos testes comparativos em otimizações com e sem a presença dos picos, cujos resultados serão apresentados na discussão do desempenho do funcional.

Vale destacar, por fim, que também conduzimos uma investigação complementar utilizando, de um lado, a malha original completa e, de outro, uma malha construída com pontos equidistantes entre si. Essa análise adicional permitiu avaliar a robustez dos resultados frente a diferentes estratégias de discretização.

5.3.2 Limitações da FVC frente à solução de Bethe ansatz

Como a LSOC é restrita ao caso não-magnetizado ($m = 0$), ao estudar sistemas com magnetização ($m \neq 0$) comparamos a FVC à solução exata obtida via Bethe ansatz, descrita nas figuras como exato numérico. Na Figura 30 e Figura 31 mostramos, para diferentes densidades n , a energia do estado fundamental por sítio $e_0(m)$ (painéis à esquerda) e sua respectiva segunda derivada d^2e_0/dm^2 (painéis à direita).

Na Figura 30(a) observamos a energia em função da magnetização para um sistema no regime de um quarto de preenchimento, onde a FVC reproduz a tendência global de $e_0(m)$, mas já se observa um desvio sistemático de concavidade: a curva FVC sofre uma mudança de concavidade, cruzando inclusive a curva exata. A análise da segunda derivada da energia FVC revela boa aproximação com a exata para valores baixos de e médios de m , mas para m suficientemente grande há mudança no sinal, indicando a mudança da concavidade. Esse efeito ocorre para m cada vez menor, à medida que a interação aumenta. Esse comportamento é um reflexo da curva da energia FVC ter sido forçada a satisfazer a condição exata em $n = m$.

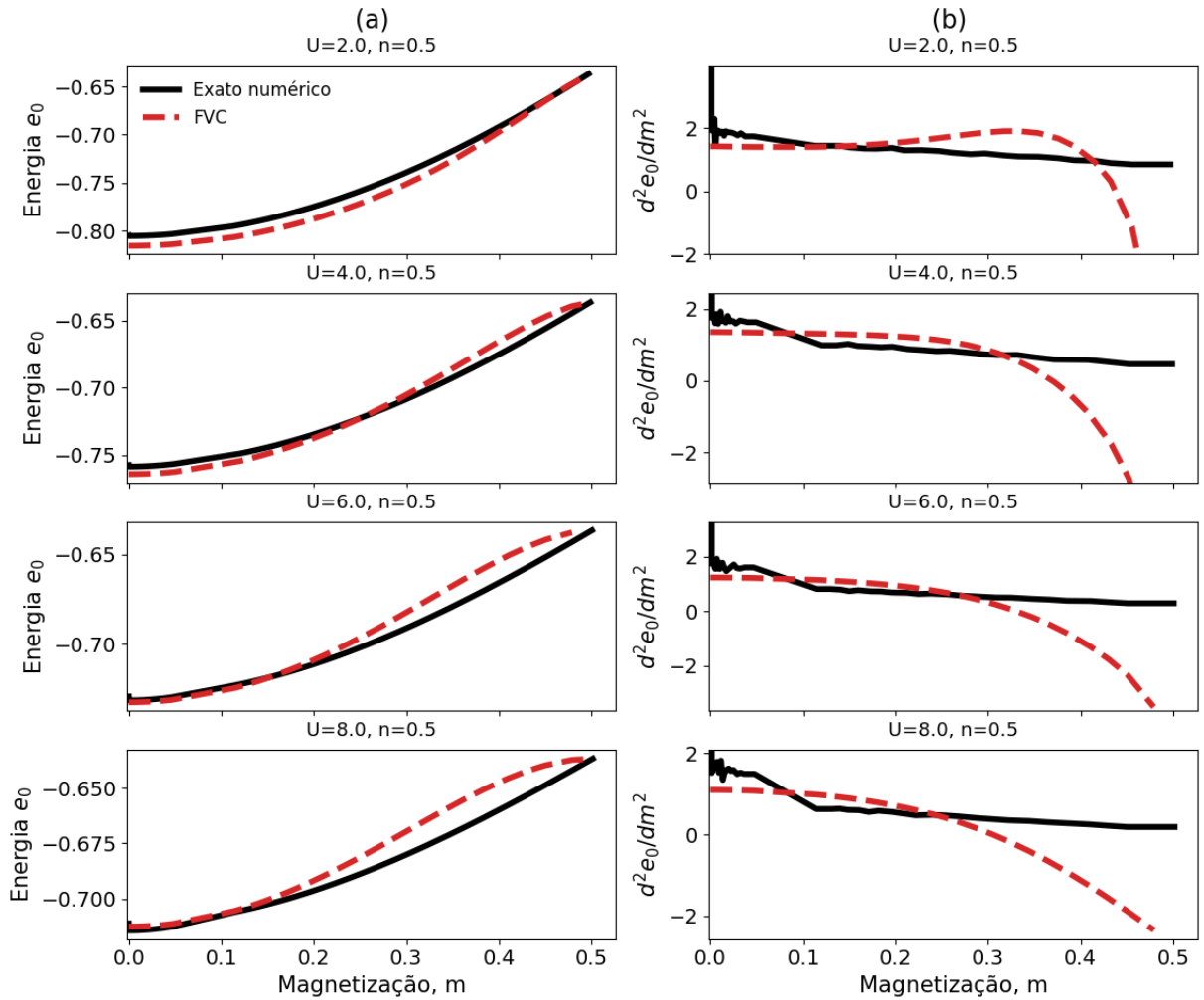


Figura 30 – Comparação entre os dados exatos (preta continua) e a FVC (vermelha tracejada) para a energia do estado fundamental $e_0(m)$ (a) e a sua segunda derivada d^2e_0/dm^2 (b) em função da magnetização m , para densidade fixa $n = 0.5$. Para diversos valores de U . No caso do BA, d^2e_0/dm^2 é calculado numericamente por ajuste local (mínimos quadrados) aos 40 pontos da tabela, após filtrar a faixa ruidosa $0.05 \leq m \leq 0.11$.

Já no semipreenchimento $n = 1$ (Figura 31) a FVC segue bem a energia exata em magnetizações pequenas, mas as diferenças se acumulam conforme m cresce. Para U baixos (por exemplo $U = 2$) observa-se até cruzamentos múltiplos entre FVC e exato em $e_0(m)$. A segunda derivada reflete diretamente esses cruzamentos, com mudanças de sinal, e volta a exibir a queda intensa reflexo do retorno forçado da FVC ao limite quando $m \rightarrow n$.

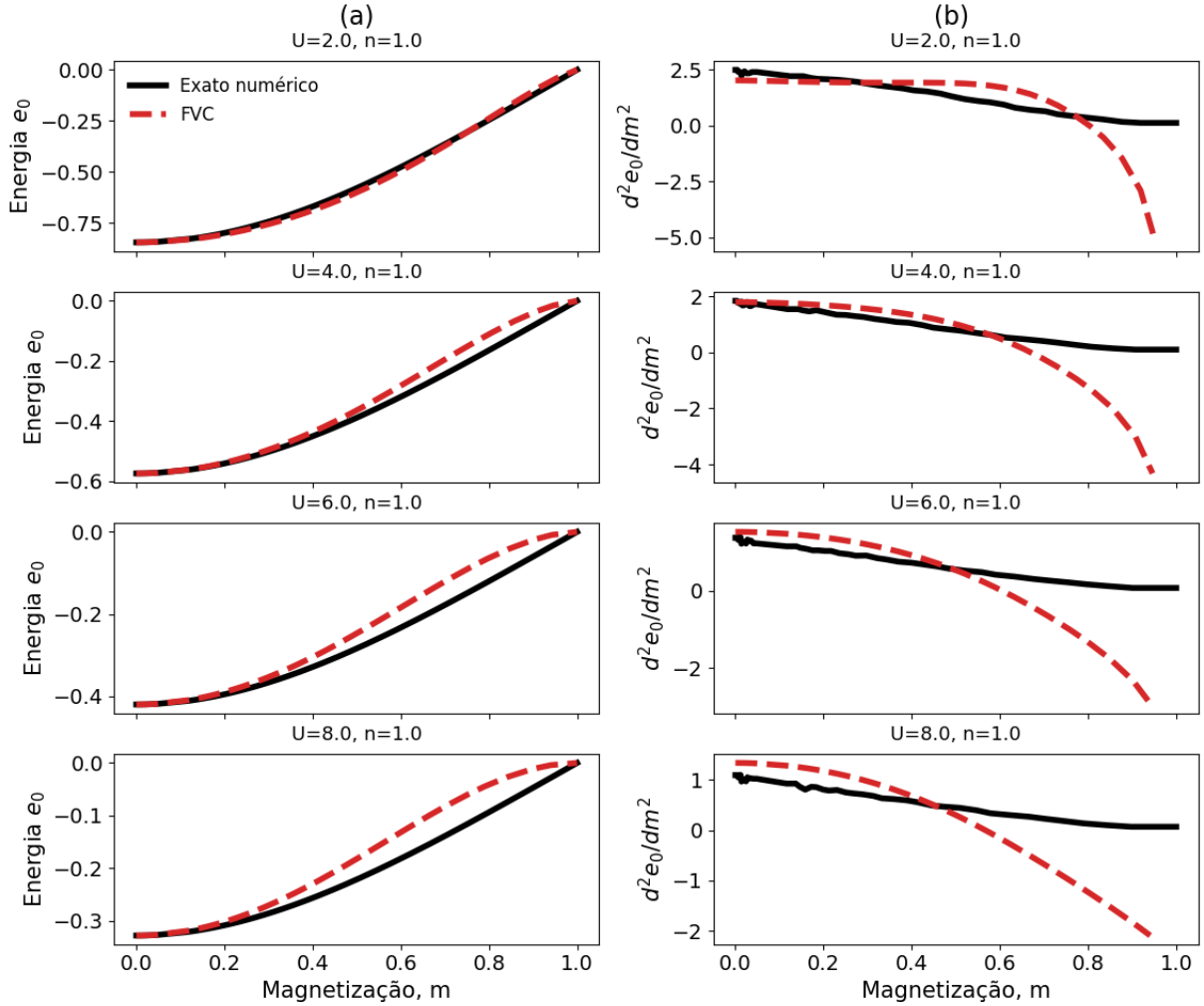


Figura 31 – Comparação entre a energia do estado fundamental $e_0(m)$ (coluna da esquerda) e a sua segunda derivada d^2e_0/dm^2 (coluna da direita) em função da magnetização m , para densidade fixa $n = 1$. Cada linha corresponde a um valor de U (de cima para baixo: $U = 2, 4, 6, 8$). A curva tracejada vermelha é o funcional FVC (expressão analítica); a curva preta contínua é o “exato numérico” obtido a partir do Bethe–Ansatz (BA). As duas curvas são avaliadas nos mesmos valores de m da tabela do BA; no caso do BA, d^2e_0/dm^2 é calculado numericamente por ajuste local (mínimos quadrados) aos 40 pontos da tabela, após filtrar a faixa ruidosa $0.05 \leq m \leq 0.11$.

Nestes três casos analisados, evidencia-se uma limitação estrutural da parametrização FVC na região de média (para U maiores) e alta (para U menores) magnetização. Esse comportamento está associado, como descrito, à construção do funcional FVC, que por "forçar" o sistema a retornar a condição exata em $n = m$, gera por consequência, um efeito não físico em d^2e_0/dm^2 . Assim, ao reproduzir a energia de sistemas magnetizados via FVC, as previsões para grandezas de segunda ordem — em particular a susceptibilidade magnética, $\chi \propto \left[\frac{d^2E}{dm^2}\right]^{-1}$ — podem perder confiabilidade. Ainda que esse comportamento seja compreensível, é desejável dispor de estimativas de χ robustas em todo o domínio de magnetização, não apenas próximo de $m \approx 0$.

5.3.3 A otimização: Algoritmos utilizados

A base da rotina numérica responsável por calcular a energia do estado fundamental inicia-se pelo parâmetro $\beta(U)$ (autorefeq:bu), obtido ao resolver numericamente uma equação transcendental que envolve integrais de funções de Bessel (via `integral`) e o ajuste do zero com `fzero`, a partir de uma estimativa inicial. Em seguida, definimos a energia $e_0^{\text{FVC}}(n, m, U; P)$, Equação 51, como descrito nas Equação 54, Equação 53 e Equação 52 dependentes de n , m , U e do vetor de parâmetros livres $P = (P_1, \dots, P_5)$. A combinação desses termos resulta na função objetivo da otimização, dependente dos parâmetros livres $P = (P_1, \dots, P_5)$, a ser ajustada de modo a reproduzir com fidelidade os resultados de referência de Lieb–Wu. Vale destacar que todas as otimizações apresentadas aqui serão com base no conjunto $U = 0.8, 2, 4, 6, 8, 10, 12$.

5.3.3.1 Algoritmo Nelder–Mead

Para calibrar o funcional proposto, empregamos uma rotina de otimização baseada no algoritmo Nelder–Mead ^[102], implementado no `fminsearch` do MATLAB. O procedimento inicia-se com a leitura dos dados de referência, provenientes de cálculos numéricos exatos (via Beth Ansatz) para diferentes valores de n, m, U e energia do estado fundamental e_0 . Em seguida, define-se um modelo paramétrico para a energia, $E(P, U, n, m, \beta(U))$, dependente de cinco parâmetros livres $P = (P_1, \dots, P_5)$. A qualidade do ajuste é quantificada

por uma função de custo, construída como a soma dos quadrados das diferenças entre a energia prevista pelo modelo e a energia de referência.

A otimização é realizada a partir do conjunto de parâmetros da FVC, e o algoritmo ajusta iterativamente cada componente de P com o objetivo de minimizar a função de custo. Restrições adicionais são impostas para evitar que os parâmetros assumam valores não físicos ($P \leq 0$), forçando a rotina a explorar apenas soluções viáveis. Para mitigar o risco de aprisionamento em mínimos locais, o processo é repetido diversas vezes com pequenas rotações aleatórias do espaço paramétrico. Ao final, os parâmetros otimizados são comparados com os originais, sendo avaliado o erro médio relativo (EMR) antes e depois da calibração. Dessa forma, o método permite quantificar de maneira clara o ganho de precisão do funcional ajustado em relação à formulação inicial.

5.3.3.2 Algoritmo Colônia de Formigas (ACO)

Diferentemente do `fminsearch`, que é um método determinístico de descida local baseado no simplex de Nelder–Mead e tende a encontrar mínimos próximos da condição inicial P_0 , a Colônia de Formigas (ACO) é uma metaheurística estocástica de busca global [103, 104, 105, 106]. Isso significa que, em vez de seguir gradualmente o relevo da função de custo, o ACO explora o espaço de parâmetros por meio da cooperação de múltiplas soluções candidatas (*formigas*), reduzindo o risco de aprisionamento em mínimos locais.

No nosso caso, o algoritmo parte de um vetor inicial P_0 e, a cada iteração, gera um *enxame* de N_f candidatas, cada uma propondo um vetor P de dimensão $L = |P_0|$. A geração dessas candidatas é guiada por um feromônio escalar por componente, atualizado a cada passo por evaporação com taxa ρ e reforço proporcional à qualidade das soluções (*best-so-far*). As probabilidades de amostragem combinam feromônio e uma heurística unitária por meio dos expoentes (α, β) , enquanto o parâmetro Q controla a intensidade do reforço. No código, exploramos combinações buscando averiguar melhores combinações dos parâmetros P_s [107, 108] e suas variantes que serão otimizados em 1D (P1), 2D(P1,P2), 3D(P1,P2,P3), 4D(P1,P2,P3,P4) e 5D(P1-P5) com variações de: $N_f = [5 : 5 : 15]$, $N_{\text{iter}}=1000$, $\rho = [0 : 0.1 : 1]$, $\alpha = [0 : 0.1 : 10]$, $\beta = [0 : 0.1 : 10]$ e $Q = [0 : 1 : 100]$.

Cada candidata P é avaliada por uma função de custo $J(P)$ definida como a soma dos quadrados dos resíduos entre a energia prevista e a referência numérica: $J(P) =$

$\sum_i \left(E(P; U_i, n_i, m_i, \beta(U_i)) - e_i \right)^2$. Para manter a viabilidade física, impõe-se $P_k > 0$ (custos infinitos caso contrário) e adiciona-se uma penalização suave quando $E > e$ em algum ponto, evitando soluções que superestimem a energia, de modo a forçar o não cruzamento das curvas de energia. Os dados de entrada (U, n, m, e_0) são obtidos de planilhas para vários valores de U e combinados ao parâmetro $\beta(U)$ previamente calculado. O ciclo ACO consiste na repetição das seguintes etapas: (i) amostragem de N_f vetores P ponderada por feromônio; (ii) avaliação de $J(P)$; (iii) atualização do melhor P global e do feromônio por evaporação e reforço $\propto Q/J$. O melhor valor encontrado (**bestFval**) e o histórico de custos por iteração são registrados, bem como métricas de tempo de execução por configuração. Ao final, salvamos uma tabela com a síntese dos resultados e um gráfico da evolução temporal, além de computarmos o erro médio relativo (EMR) entre o funcional otimizado e a parametrização de referência FVC. Em suma, a ACO explora globalmente o espaço de parâmetros com controle de exploração via feromônio e obtém reduções substanciais de erro na energia, ao custo de um maior número de avaliações da função-objetivo.

5.3.3.3 Algoritmo ACO-Like

No presente trabalho também foi implementado um método inspirado em colônia de formigas [103, 104, 105, 106], que chamaremos de *ACO-like*. Diferentemente do *ACO clássico*, que utiliza uma população explícita de formigas, feromônio e probabilidades de construção de soluções ao longo das iterações, o ACO-like atua como um esquema simplificado de otimização heurística que combina a ideia de busca guiada com restrições e ajustes específicos ao problema físico estudado. Sua função de custo é centrada no *erro médio relativo (EMR)* entre a energia calculada pelo funcional e os valores de referência, isto é,

$$J(P) = \text{EMR}(E(P), e) + \text{penalizações}. \quad (58)$$

Aqui as penalizações incluem: (i) barreira para garantir $E(P) \leq e_0$, evitando cruzamento entre energias; (ii) suavização via derivadas de primeira e segunda ordem em relação a m , de forma a controlar oscilações indesejadas; (iii) série de gerações afim $E \rightarrow E + c_0 + c_1 m$, que corrige deslocamentos sistemáticos entre modelo e dados; e (iv) foco em regiões de m mais altas, ponderando o custo de acordo com a relevância física. Além disso, este método permite otimizar tanto o modelo de cinco parâmetros, com subconjunto escolhido via

máscara – vetor/binário de seleção que define quais dos 5 parâmetros serão efetivamente otimizados – quanto a versão reduzida de três parâmetros. Dessa forma, o ACO-like se diferencia do ACO por dispensar a estrutura clássica de feromônio e de múltiplas formigas em interação, atuando como uma versão menos custosa e adaptada, cujo núcleo continua sendo a minimização do *erro médio relativo* reforçado por penalizações específicas do problema.

5.3.3.4 Algoritmo ACO+ACOR

O método ACOR (Archive-based Continuous Ant Colony Optimization) [103, 104, 105, 106, 109] é uma variação do ACO clássico adaptada para espaços contínuos. Enquanto no ACO tradicional cada formiga percorre uma trilha em um gráfico e atualiza o feromônio de forma discreta, no ACOR o mecanismo central é a manutenção de um arquivo de elite (armazenamento das melhores soluções encontradas no momento da otimização), que armazena as melhores soluções encontradas ao longo das iterações. A cada passo, novas soluções são geradas por amostragem em torno dessas soluções de elite, usando distribuições Gaussianas ponderadas. O processo funciona da seguinte forma: primeiro, o arquivo é inicializado com candidatos próximos ao ponto inicial; em seguida, as soluções são ordenadas pelo valor da função de custo, e pesos decrescentes são atribuídos a cada uma. Esses pesos determinam a probabilidade de uma solução ser escolhida como centro de uma nova amostragem. Cada formiga, então, gera uma nova posição sorteando um centro do arquivo e produzindo um candidato perturbado por uma Gaussiana de largura adaptativa, proporcional à dispersão do arquivo (conjunto de soluções armazenados na memória da otimização):

$$z_j = \mu_j + \sigma_j \mathcal{N}(0, 1), \quad (59)$$

onde μ_j é o centro escolhido e σ_j é definido como

$$\sigma_j = \xi \frac{\sum_{k=1}^{k_{archive}} |Z_{k,j} - \mu_j|}{k_{archive} - 1}. \quad (60)$$

Esse mecanismo permite que o ACOR explore o espaço contínuo de parâmetros de forma balanceada, alternando exploração ampla no início e refinamento próximo das melhores soluções nas últimas iterações. No código, esse núcleo está implementado na função `acor_emr_barrier_d2`, onde o arquivo Z guarda as soluções em coordenadas transformadas, os pesos w definem a seleção das elites, e o termo σ controla a largura da

Gaussiana que guia a exploração. Além disso, o algoritmo inclui um ajuste progressivo de hiperparâmetros — como o peso da barreira e o termo de regularização da segunda derivada — e utiliza um critério de parada antecipada (early stopping) quando não há melhora significativa no custo. Em resumo, o ACOR combina a lógica de formigas com um mecanismo de amostragem contínua e memória de elite, oferecendo uma alternativa mais eficiente para problemas de otimização com parâmetros contínuos, em contraste com o ACO clássico baseado em feromônio discreto.

5.3.4 Estratégia de otimização: resultados e impacto do FVC nas curvas

Nesta seção discutimos não apenas a performance numérica das otimizações em reproduzir a energia exata, mas, sobretudo, como diferentes métodos alteram as curvas de energia e suas derivadas em magnetização, evidenciando o papel estrutural do funcional FVC. A base comum a todas as rotinas permanece: cálculo prévio de $\beta(U)$ via equação transcendente com integrais de Bessel, avaliação de $e_0^{\text{FVC}}(n, m, U; P)$ conforme Equação 51–Equação 52, uso do erro médio relativo (EMR) como métrica central e aplicação de malha completa ou *filtrada* (remoção de $m \in [0.05, 0.15]$, alvo equidistante em m com passo 0.002 e seleção por vizinho mais próximo). Essa padronização assegura comparabilidade entre algoritmos, ao mesmo tempo em que mitiga os artefatos numéricos previamente identificados.

O primeiro passo foi reproduzir a abordagem de Tonin et al. ^[110], utilizando a Colônia de Formigas (ACO). A varredura em diferentes combinações de parâmetros P_1 a P_5 permitiu identificar a relevância de cada termo de forma isolada e em grupos. O resultado mais notável foi que, enquanto conjuntos de apenas um ou dois parâmetros apresentam erros relativamente altos, as combinações de três e cinco parâmetros (P_1, P_2, P_3 e P_1-P_5) atingiram $\text{EMR} \approx 0.81\%$. A Figura 32 sintetiza os resultados: a dimensão do espaço de parâmetros está diretamente ligada à capacidade do modelo de capturar a curvatura da energia, indicando que as interdependências entre termos são cruciais para reproduzir a física subjacente.

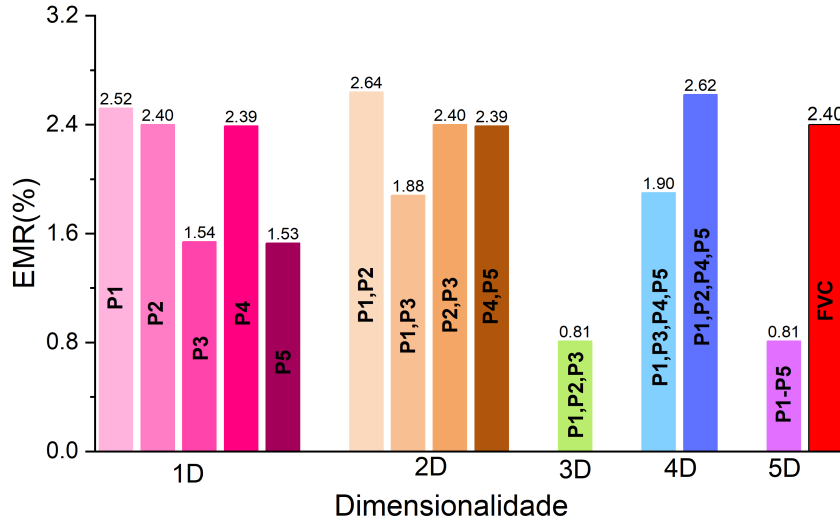


Figura 32 – Erro médio relativo (EMR) obtido via ACO para diferentes conjuntos de parâmetros P . As combinações de maior dimensionalidade apresentam os melhores desempenhos, em especial P_1, P_2, P_3 e P_1-P_5 .

Avançando para outros métodos, comparamos Nelder–Mead (`fminsearch`) e a versão ACO-like. Enquanto o primeiro é um algoritmo determinístico de busca local, o segundo combina exploração global e busca refinada, impondo limites explícitos e utilizando o EMR como métrica de custo. Essa diferença metodológica se reflete claramente nos resultados da Tabela 3: a ACO-like obteve o menor erro (0.71%), ainda que com custo computacional significativamente maior (15.000 avaliações contra apenas 562 no Nelder–Mead). Esse contraste destaca o dilema entre precisão e custo computacional, típico em problemas de ajuste paramétrico não lineares.

Tabela 3 – Comparativo entre Nelder–Mead e ACO-like sob as mesmas condições e métrica (EMR).

Método	Fevals	Tempo (s)	EMR _{base} (%)	EMR _{opt} (%)	f_{best}
<i>Nelder–Mead</i>	562	21.07	2.39	0.80	0.008
ACO-like	15000	584.37	2.39	0.71	0.007

Mais do que os números médios, as curvas revelam a essência das diferenças. A Figura 33 mostra que tanto Nelder–Mead quanto ACO-like corrigem o viés do FVC em $n = m$, recuperando a forma de referência da energia. Já para as derivadas de segunda ordem, observa-se o caráter oscilatório herdado da estrutura harmônica do FVC: a ACO-

like suaviza parcialmente as ondulações, enquanto o Nelder–Mead tende a seguir mais de perto os picos e vales. Essa diferença de comportamento explica por que, mesmo com EMR próximos, a fidelidade na curvatura pode variar de forma significativa.

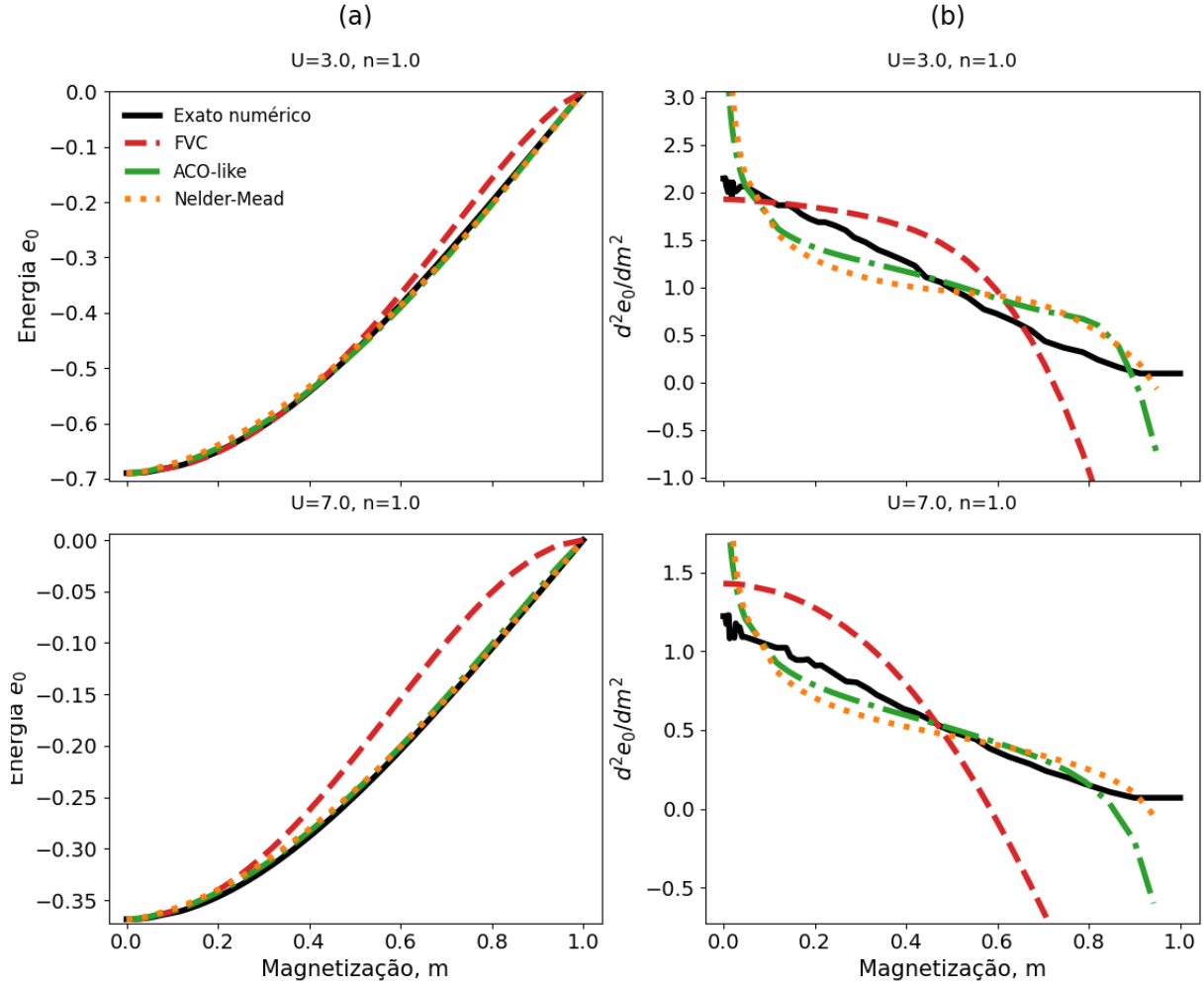


Figura 33 – Comparação entre as curvas de energia (a) e segunda derivada (b) para os métodos FVC, Nelder–Mead e ACO-like em diferentes interações U .

De forma mais quantitativa, a Tabela 4 resume os resultados para $U = 3$ e $U = 7$. Fica claro que o FVC apresenta erros muito elevados na segunda derivada (até 84.8%), enquanto os métodos otimizados reduzem esse valor substancialmente. A ACO-like alcança menor erro em energia (e_0), mas o Nelder–Mead mostra desempenho competitivo nas derivadas, sobretudo em regimes de alta interação. Essa complementaridade sugere que nenhum método domina em todos os aspectos, e que a escolha depende do equilíbrio desejado entre energia e curvatura.

Tabela 4 – Comparação dos métodos de otimização para $U = 3$ e $U = 7$, em $n = 1$, considerando energia (e_0) e segunda derivada (d^2).

U	n	Modelo	EMR e_0 (%)	EMR d^2 (%)	$m_{\min}$	$m_{\max}$
3	1	ACO-like	0.71	26.01	0.005	0.801
3	1	FVC	1.98	27.35	0.005	0.801
3	1	Nelder–Mead	1.07	37.00	0.005	0.801
7	1	ACO-like	1.15	20.14	0.005	0.801
7	1	FVC	8.26	84.77	0.005	0.801
7	1	Nelder–Mead	1.37	32.29	0.005	0.801

Considerando os resultados anteriores, adotamos como ponto de partida a otimização via ACO+ACOR com os cinco parâmetros (P_1 – P_5) e utilizamos a malha filtrada (para reduzir os artefatos da malha completa). Nesse algoritmo e configuração, obteve-se um erro global de 1.46%. Em seguida, realizamos uma varredura em U nos regimes de semipreenchimento ($n = 1$) e de um quarto de preenchimento ($n = 0.5$), comparando ACO-like, ACO+ACOR e *Nelder–Mead* ao funcional FVC. Os resultados estão na Tabela 6.

Finalmente, estendemos a análise para variações de malha e diferentes combinações de parâmetros, sintetizadas na Tabela 5. Curiosamente, a filtragem da malha melhora a estabilidade numérica, mas não reduz o EMR global, que permanece mais baixo na malha completa. Já a reinicialização sequencial (3X) mostrou ganhos marginais, reforçando que o ganho principal advém da dimensionalidade do espaço de parâmetros. A otimização com cinco parâmetros continua sendo a melhor estratégia, atingindo EMR = 0.715%, embora a fidelidade na segunda derivada permaneça como um desafio aberto.

Tabela 5 – Testes da otimização via ACO-like em diferentes conjuntos de parâmetros e configurações de malha.

Conjunto Otimizado	Tempo (min)	EMR $_{\text{opt}}$ (%)	f_{best}
P1,P2,P3	8.74	0.891	0.008
P1,P2,P3(3X)	23.48	0.8912	0.008
P1,P2,P3 + Filtro	0.045	0.966	0.016
P1-P5	9.74	0.715	0.007
P1-P5(3X)	26.09	0.7152	0.007
P1-P5 + Filtro	0.0516	0.966	0.016

Tabela 6 – Erro médio relativo (%) para U fixo em $n = 1$ e $n = 0.5$. Em negrito, o menor EMR em cada coluna. Cálculo em malha de 50 pontos equidistantes em $m \in [0.05, 1]$, excluindo $m \in [0.05, 0.11]$.

U	Modelo	$n = 1$		$n = 0.5$	
		EMR e_0	EMR d^2	EMR e_0	EMR d^2
0.8	ACO-like	3.18	126.78	0.48	61.96
	ACOR	2.83	123.71	1.89	62.02
	FVC	14.77	257.52	1.56	111.73
	<i>Nelder-Mead</i>	2.82	86.23	0.59	56.11
2.0	ACO-like	1.54	49.72	0.60	24.45
	ACOR	1.20	49.59	0.49	27.62
	FVC	2.75	127.24	1.26	44.97
	<i>Nelder-Mead</i>	1.63	50.81	1.20	35.43
3.0	ACO-like	0.80	41.42	0.69	27.61
	ACOR	0.76	41.99	0.92	26.01
	FVC	5.07	159.65	0.56	77.15
	<i>Nelder-Mead</i>	1.21	41.82	0.61	30.06
4.0	ACO-like	0.68	39.34	0.92	21.93
	ACOR	1.17	40.03	0.45	22.22
	FVC	7.78	179.90	0.70	90.41
	<i>Nelder-Mead</i>	1.07	38.68	0.95	28.09
5.0	ACO-like	0.99	37.96	0.66	23.82
	ACOR	1.62	39.58	0.61	24.75
	FVC	9.67	193.59	0.59	106.87
	<i>Nelder-Mead</i>	0.78	35.96	0.70	24.59
6.0	ACO-like	1.34	38.90	0.58	26.58
	ACOR	1.95	40.88	0.59	27.17
	FVC	11.13	202.56	0.55	121.74
	<i>Nelder-Mead</i>	1.19	35.14	0.63	23.96
7.0	ACO-like	1.60	39.41	0.69	27.61
	ACOR	2.20	41.85	0.36	27.75
	FVC	12.30	209.10	0.52	132.29
	<i>Nelder-Mead</i>	1.31	34.88	0.76	24.92
8.0	ACO-like	1.81	40.84	0.36	34.53
	ACOR	2.40	43.84	0.37	35.16
	FVC	13.29	218.49	4.46	146.63
	<i>Nelder-Mead</i>	1.40	34.75	0.42	26.92
10.0	ACO-like	2.12	42.12	0.18	95.96
	ACOR	2.70	45.63	0.68	43.53
	FVC	14.91	221.76	0.84	162.59
	<i>Nelder-Mead</i>	1.50	33.87	0.25	32.02

Em síntese, os testes confirmam que a estrutura oscilatória do funcional FVC limita a reprodução exata das derivadas, mesmo quando a energia do estado fundamental é bem ajustada. Os métodos ACO-like e Nelder–Mead apresentaram ganhos complementares: o primeiro mostrou-se mais eficiente na redução do erro médio relativo da energia, enquanto o segundo se destacou por aproximar melhor a curvatura das derivadas. Esse quadro reforça a necessidade de explorar abordagens híbridas ou mesmo alterações estruturais no funcional, de modo a tratar diretamente as limitações associadas às derivadas. Considerando o objetivo deste trabalho, destacamos o método Nelder–Mead como o mais eficiente para a recuperação das derivadas, sem perda significativa na descrição da energia do estado fundamental. O conjunto de parâmetros obtido nesse caso foi ($P_1 = 1.61$, $P_2 = 1.46$, $P_3 = 0.015$, $P_4 = 0.53$, $P_5 = 2.03$).

6 Conclusão

Neste trabalho, propusemos a comparação dos métodos DMRG e DFT, com o objetivo de averiguar a confiabilidade da DFT na detecção de transições de fase quânticas no modelo de Hubbard unidimensional. Neste estudo, mostramos uma hierarquia clara de acurácia para sistemas homogêneos — entropia média de emaranhamento mais precisa do que a energia do estado fundamental, que por sua vez supera a precisão obtida pela DFT para o perfil de densidade — e que todos os desvios diminuem à medida que o sistema aumenta: $D\%(\bar{S}) < D\%(e_0) < \bar{D}\%(n)$. Em cadeias finitas, os maiores desvios próximos ao semipreenchimento decorrem de oscilações de Friedel, pouco capturadas pela LDA: para $L \approx 100$ os erros típicos ficam abaixo de 1% na energia, ao passo que, para cadeias pequenas e próximas ao semipreenchimento, podem chegar a $\approx 16\%$; em torno de 20% de preenchimento, a DFT apresenta seu melhor desempenho, com desvios de energia inferiores a 2% para qualquer interação e tamanho de cadeia. Já para super-redes, a precisão da DFT diminui à medida que aumentamos a proporção das impurezas dentro da célula unitária, e a relação entre os desvios deixa de ser universal, passando a depender fortemente da geometria da super-rede (X:Y). No caso do confinamento harmônico, de intensidade k , a DFT descreve bem fases metálicas e tende a piorar nas fases isolantes de Mott e de banda, onde a média efetiva do emaranhamento nos sítios ocupados revela mais nitidamente as transições (metálico $\rightarrow$ Mott-like $\rightarrow$ metálico central $\rightarrow$ isolante de banda) do que a média sobre toda a cadeia. Do ponto de vista computacional, o DMRG é muito preciso, porém mais custoso (podendo demandar horas e com escalabilidade limitada), enquanto a DFT é prática em sistemas arbitrariamente grandes e costuma convergir em minutos. Assim, estratégias híbridas que combinem DFT e DMRG — sobretudo com melhorias no potencial de correlação — configuram uma via promissora para futuras investigações.

Nosso segundo estudo baseia-se na investigação de diferentes medidas de emaranhamento, no qual nossa primeira análise demonstrou a diferença entre a entropia linear e a de von Neumann. Nessa comparação, constatou-se que, em baixas densidades ($n \lesssim 0.6$), a entropia linear falha em detectar corretamente o comportamento qualitativo do emaranhamento em função da interação U . Em sistemas heterogêneos, o uso da entropia linear pode ocasionar a identificação equivocada de máximos e mínimos de emaranhamento e, como consequência, a previsão incorreta de transições de fase quânticas.

Na mesma linha de pesquisa, investigamos a entropia típica em comparação à média, e resultados preliminares apontam a entropia típica como um marcador mais sensível da perda coletiva de emaranhamento, colapsando rapidamente no momento em que uma parte substancial da cadeia torna-se pouco correlacionada — sob confinamento harmônico, super-redes ou desordem. No entanto, os mesmos resultados mostraram que essa sensibilidade penaliza regiões ainda emaranhadas e pode antecipar “mínimos críticos”, que por consequência podem ser sinalizações de uma transição de fase quântica, subestimando correlações residuais que a entropia média ainda captura. Como conclusão preliminar, entendemos que as entropias atuam de forma complementar, sendo a típica adequada como um parâmetro de ordem global, enquanto a média descreve melhor regiões espaciais localizadas da cadeia onde o emaranhamento ainda é significativo.

Em nossa última pesquisa, otimizamos os expoentes do funcional FVC ($P1 \dots P5$) visando melhorar, simultaneamente, a energia do estado fundamental $e_0(n, m, U)$ e a sua segunda derivada em m , voltada para investigações futuras com a susceptibilidade (χ). As referências numéricas foram geradas via Bethe–Ansatz (Lieb–Wu), com checagens de consistência, identificação de artefatos de malha (picos em derivadas) e uso complementar de malha equidistante/filtrada para robustez. Na métrica de energia, a ACO-like reduziu o EMR de $\sim 2.40\%$ (FVC) para $\sim 0.71\%$, ao custo de maior esforço computacional. Ao incorporar a segunda derivada na função-objetivo (*feito apenas na ACOR*) obtivemos um compromisso melhor entre ajuste energético e regularização de curvatura do que o FVC original. *O método Nelder–Mead não utilizou a segunda derivada na otimização*; ainda assim, no *pós-teste* sobre a malha equidistante/filtrada, o conjunto de parâmetros por ele obtido ($P1 = 1.61$, $P2 = 1.46$, $P3 = 0.015$, $P4 = 0.53$, $P5 = 2.03$) apresentou o melhor desempenho para a segunda derivada em várias interações, conforme Tabela 6, Figura 30 e Figura 31. Apesar desses avanços, os desvios em d^2e_0/dm^2 permanecem elevados (por exemplo, para $n = 0.5$: mínimo $\sim 22\%$ em $U = 4$ e máximo $\sim 56\%$ em $U = 0.8$), evidenciando uma limitação estrutural do FVC: o retorno “forçado” ao limite $n \simeq m$ induz mudanças bruscas de curvatura ausentes nos resultados exatos. Concluímos que ajustes paramétricos são eficazes para e_0 , mas insuficientes para tornar confiáveis grandezas de segunda ordem. A continuidade deste trabalho deve focar em modificar a estrutura do funcional, e não apenas reparametrizá-lo, a fim de viabilizar estimativas robustas de susceptibilidade magnética em todo o domínio de magnetização.

Referências¹

- [1] Paul-Antoine Moreau, Ermes Toninelli, Thomas Gregory, Reuben S. Aspden, Peter A. Morris, and Miles J. Padgett. Imaging bell-type nonlocal behavior. *Science Advances*, 5(7), July 2019.
- [2] T. Pauletti, M. Sanino, L. Gimenes, I. M. Carvalho, and V. V. França. Quantum phase transitions in one-dimensional nanostructures: a comparison between dft and dmrg methodologies. *Journal of Molecular Modeling*, 30(8), July 2024.
- [3] John Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 276(1365):238–257, November 1963.
- [4] G. A. Canella and V. V. França. Superfluid-insulator transition unambiguously detected by entanglement in one-dimensional disordered superfluids. *Scientific Reports*, 9(1), October 2019.
- [5] Hui Zhai and Tin-Lun Ho. Superfluid-insulator transition of strongly interacting fermi gases in optical lattices. *Physical Review Letters*, 99(10), September 2007.
- [6] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W. Hänsch, and Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415(6867):39–44, January 2002.
- [7] D.J. Scalapino. The case for $d_{x^2-y^2}$ pairing in the cuprate superconductors. *Physics Reports*, 250(6):329–365, January 1995.
- [8] Thomas Maier, Mark Jarrell, Thomas Pruschke, and Matthias H. Hettler. Quantum cluster theories. *Reviews of Modern Physics*, 77(3):1027–1080, October 2005.
- [9] Qi Song, Jie Lou, and Yan Chen. Exotic superfluid with emergent flux in a one-dimensional bose-fermi mixture. *Physical Review A*, 110(6), December 2024.
- [10] Thereza Paiva, Raimundo R. dos Santos, R. T. Scalettar, and P. J. H. Denteneer. Critical temperature for the two-dimensional attractive hubbard model. *Physical Review B*, 69(18), May 2004.

¹ De acordo com a Associação Brasileira de Normas Técnicas. NBR 6023.

- [11] M. Sanino, I. M. Carvalho, and V. V. França. Entanglement as a topological marker in harmonically confined attractive fermi–hubbard chains. *APL Quantum*, 2(2), May 2025.
- [12] Ji-Hong Hu, Jing-Jing Wang, Gao Xianlong, Masahiko Okumura, Ryo Igarashi, Susumu Yamada, and Masahiko Machida. Ground-state properties of the one-dimensional attractive hubbard model with confinement: A comparative study. *Physical Review B*, 82(1), July 2010.
- [13] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Reviews of Modern Physics*, 80(3):885–964, July 2008.
- [14] Russell A. Hart, Pedro M. Duarte, Tsung-Lin Yang, Xinxing Liu, Thereza Paiva, Ehsan Khatami, Richard T. Scalettar, Nandini Trivedi, David A. Huse, and Randall G. Hulet. Observation of antiferromagnetic correlations in the hubbard model with ultracold atoms. *Nature*, 519(7542):211–214, February 2015.
- [15] Lawrence W. Cheuk, Matthew A. Nichols, Katherine R. Lawrence, Melih Okan, Hao Zhang, Ehsan Khatami, Nandini Trivedi, Thereza Paiva, Marcos Rigol, and Martin W. Zwierlein. Observation of spatial charge and spin correlations in the 2d fermi-hubbard model. *Science*, 353(6305):1260–1264, September 2016.
- [16] Zhiyuan Yao, Lode Pollet, N Prokof’ev, and B Svistunov. Superfluid–insulator transition in strongly disordered one-dimensional systems. *New Journal of Physics*, 18(4):045018, April 2016.
- [17] J. X. Wang and Sabre Kais. Metal–insulator transition in the hubbard model on a triangular lattice with disorders: Renormalization group approach. *International Journal of Quantum Chemistry*, 93(5):360–374, January 2003.
- [18] Thierry Giamarchi and B. Sriram Shastry. Persistent currents in a one-dimensional ring for a disordered hubbard model. *Physical Review B*, 51(16):10915–10922, April 1995.
- [19] Masatoshi Imada, Atsushi Fujimori, and Yoshinori Tokura. Metal-insulator transitions. *Reviews of Modern Physics*, 70(4):1039–1263, October 1998.

- [20] N F Mott. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 62(7):416–422, July 1949.
- [21] Nevill Mott. On metal-insulator transitions. *Journal of Solid State Chemistry*, 88(1):5–7, September 1990.
- [22] Thereza Paiva, R. T. Scalettar, Carey Huscroft, and A. K. McMahan. Signatures of spin and charge energy scales in the local moment and specific heat of the half-filled two-dimensional hubbard model. *Physical Review B*, 63(12), March 2001.
- [23] D. Arisa, R. M. Dos Santos, Isaac M. Carvalho, and Vivian V. França. Controlling quantum phases with electric fields in one-dimensional hubbard systems, 2025.
- [24] Willdauany C. de Freitas Silva, Andressa R. Medeiros-Silva, Rubem Mondaini, Vivian V. França, and Thereza Paiva. Single-site entanglement as a marker for quantum phase transitions at non-zero temperatures, 2025.
- [25] Muqing Xu, Lev Haldar Kendrick, Anant Kale, Youqi Gang, Chunhan Feng, Shiwei Zhang, Aaron W. Young, Martin Lebrat, and Markus Greiner. A neutral-atom hubbard quantum simulator in the cryogenic regime. *Nature*, 642(8069):909–915, June 2025.
- [26] Leticia Tarruell and Laurent Sanchez-Palencia. Quantum simulation of the hubbard model with ultracold fermions in optical lattices. *Comptes Rendus. Physique*, 19(6):365–393, September 2018.
- [27] K. A. Al-Hassanieh, Julián Rincón, E. Dagotto, and G. Alvarez. Wave-packet dynamics in the one-dimensional extended hubbard model. *Physical Review B*, 88(4), July 2013.
- [28] H A Ishkhanyan and V P Krainov. One-dimensional hubbard–luttinger model for carbon nanotubes. *Physica Scripta*, 90(7):074043, June 2015.
- [29] Zhuoyu Chen, Yao Wang, Slavko N. Rebec, Tao Jia, Makoto Hashimoto, Donghui Lu, Brian Moritz, Robert G. Moore, Thomas P. Devereaux, and Zhi-Xun Shen. Anomalously strong near-neighbor attraction in doped 1d cuprate chains. *Science*, 373(6560):1235–1239, September 2021.

- [30] Isabelle Bouchoule, Roberta Citro, Timothy Duty, Thierry Giamarchi, Randall G. Hulet, Martin Klanjšek, Edmond Orignac, and Bent Weber. Platforms for the realization and characterization of tomonaga–luttinger liquids. *Nature Reviews Physics*, September 2025.
- [31] F. Mila and K. Penc. Model calculations for 1d correlated systems. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 117–118:451–467, June 2001.
- [32] Elliott H. Lieb and F. Y. Wu. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Physical Review Letters*, 20(25):1445–1448, June 1968.
- [33] H. Bethe. Zur theorie der metalle: I. eigenwerte und eigenfunktionen der linearen atomkette. *Zeitschrift for Physik*, 71(3–4):205–226, March 1931.
- [34] G. A. Canella and V. V. França. *Transições de fase quânticas em nanoestruturas desordenadas*. Dissertação (doutorado), São Paulo State University (UNESP), São Paulo, Brazil, 2021.
- [35] Tatiana Rossafa Pauletti. *Medidas de emaranhamento para detecção de transições de fase quânticas em superredes*. Dissertação de mestrado, Universidade Estadual Paulista (UNESP), São Paulo, 2021.
- [36] W. Kohn and L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A):A1133–A1138, November 1965.
- [37] P. Hohenberg and W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B):B864–B871, November 1964.
- [38] Steven R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical Review Letters*, 69(19):2863–2866, November 1992.
- [39] Steven R. White. Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. *Physical Review B*, 48(14):10345–10356, October 1993.
- [40] Florian Gebhard and Örs Legeza. Tracing the mott-hubbard transition in one-dimensional hubbard models without umklapp scattering. *Physical Review B*, 104(24), December 2021.

- [41] Antonio Adilton O. Carneiro, Alessandro Tadeu Touse, and Oswaldo Baffa. Avaliação da susceptibilidade magnética usando uma balança analítica. *Química Nova*, 26(6):952–956, December 2003.
- [42] Edmund Clifton Stoner. Collective electron ferromagnetism. *Proceedings of The Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 165:372–414, 1938.
- [43] J. Willard Gibbs and John Tyndall. *On the equilibrium of heterogeneous substances: first [-second] part*. Published by the Academy, 1874.
- [44] P. Mohn. *Magnetism in the Solid State: An Introduction*, volume 134 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. Springer, Berlin, 2006.
- [45] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical Review*, 47(10):777–780, May 1935.
- [46] E. Schrödinger. Quantisierung als eigenwertproblem. *Annalen der Physik*, 384(4):361–376, January 1926.
- [47] Jonas Maziero. Entendendo a entropia de von neumann. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 37(1):1314, March 2015.
- [48] Robert T. Beyer, editor. *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics: New Edition*. Princeton University Press, February 2018.
- [49] U. Fano. Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques. *Reviews of Modern Physics*, 29(1):74–93, January 1957.
- [50] V. Dobrosavljević. Typical-medium theory of mott–anderson localization. *International Journal of Modern Physics B*, 24(12n13):1680–1726, May 2010.
- [51] D. Semmler, K. Byczuk, and W. Hofstetter. Mott-hubbard and anderson metal-insulator transitions in correlated lattice fermions with binary disorder. *Physical Review B*, 81(11), March 2010.
- [52] T. Pauletti, M.A.G. Silva, G.A. Canella, and V.V. França. Linear entropy fails to predict entanglement behavior in low-density fermionic systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 644:129824, June 2024.

- [53] L. F. C. Faria, Victor L. Quito, João C. Getelina, José A. Hoyos, and E. Miranda. Signatures of infinite randomness in transport properties of disordered spin chains, 2023.
- [54] E. Miranda and V. Dobrosavljevic. Dynamical mean-field theories of correlation and disorder, 2011.
- [55] Vivian V França, Daniel Vieira, and Klaus Capelle. Simple parameterization for the ground-state energy of the infinite hubbard chain incorporating mott physics, spin-dependent phenomena and spatial inhomogeneity. *New Journal of Physics*, 14(7):073021, July 2012.
- [56] Dirac Paul Adrien Maurice, April 1929.
- [57] A. L. Fetter and J. D. Walecka. Quantum theory of many-particle systems. <https://archive.org/details/quantum-theory-of-many-particle-systems-by-alexander-l.-fetter-john-dirk-walecka-physics-z-lib.org/mode/2up>, 2003.
- [58] John C. Slater. The theory of complex spectra. *Physical Review*, 34(10):1293–1322, 1929.
- [59] Clemens C. J. Roothaan. New developments in molecular orbital theory. *Reviews of Modern Physics*, 23(2):69–89, 1951.
- [60] Trygve Helgaker, Poul Jørgensen, and Jeppe Olsen. *Molecular Electronic-Structure Theory*. John Wiley & Sons, Chichester, 2000.
- [61] Walter Kohn and Lu Jeu Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140(4A):A1133–A1138, 1965.
- [62] J. J. Sakurai and Jim Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, September 2020.
- [63] David J. Griffiths and Darrell F. Schroeter. *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, August 2018.
- [64] Richard M. Martin. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*. Cambridge University Press, April 2004.

- [65] Richard M. Martin, Lucia Reining, and David M. Ceperley. *Interacting Electrons: Theory and Computational Approaches*. Cambridge University Press, May 2016.
- [66] John Preskill. Lecture notes on quantum computation. https://www.lorentz.leidenuniv.nl/quantumcomputers/literature/preskill_1_to_6.pdf, 1998.
- [67] John Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands - iv. the atomic representation. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 285(1403):542–560, May 1965.
- [68] John Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands iii. an improved solution. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 281(1386):401–419, September 1964.
- [69] The hubbard model at half a century, September 2013.
- [70] Nicola Marzari and David Vanderbilt. Maximally localized generalized wannier functions for composite energy bands. *Physical Review B*, 56(20):12847–12865, November 1997.
- [71] Richard M Martin, Lucia Reining, and David M Ceperley. *Interacting electrons*. Cambridge University Press, 2016.
- [72] Patrick A. Lee, Naoto Nagaosa, and Xiao-Gang Wen. Doping a mott insulator: Physics of high-temperature superconductivity. *Rev. Mod. Phys.*, 78:17–85, Jan 2006.
- [73] Masao Ogata and Hiroyuki Shiba. Bethe-ansatz wave function, momentum distribution, and spin correlation in the one-dimensional strongly correlated hubbard model. *Physical Review B*, 41(4):2326–2338, February 1990.
- [74] Ulrich Schollwöck. The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. *Annals of Physics*, 326(1):96–192, January 2011.
- [75] R. O. Jones and O. Gunnarsson. The density functional formalism, its applications and prospects. *Reviews of Modern Physics*, 61(3):689–746, July 1989.
- [76] Kenneth G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Reviews of Modern Physics*, 47(4):773–840, October 1975.

- [77] U. Schollwöck. The density-matrix renormalization group. *Reviews of Modern Physics*, 77(1):259–315, April 2005.
- [78] F. Verstraete, V. Murg, and J.I. Cirac. Matrix product states, projected entangled pair states, and variational renormalization group methods for quantum spin systems. *Advances in Physics*, 57(2):143–224, March 2008.
- [79] Román Orús. A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states. *Annals of Physics*, 349:117–158, October 2014.
- [80] J. Eisert, M. Cramer, and M. B. Plenio. Colloquium: Area laws for the entanglement entropy. *Rev. Mod. Phys.*, 82:277–306, Feb 2010.
- [81] Matthew Fishman, Steven R. White, and E. Miles Stoudenmire. The ITensor Software Library for Tensor Network Calculations. *SciPost Phys. Codebases*, page 4, 2022.
- [82] Isaac Martins Carvalho. *Quenches em sistemas interagentes unidimensionais: formação de ordenamentos de carga e spin*. Tese de doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, Belo Horizonte, MG, Brasil, 2022.
- [83] Klaus Capelle. A bird’s-eye view of density-functional theory. *Brazilian Journal of Physics*, 36(4a):1318–1343, December 2006.
- [84] J. P. Perdew and Alex Zunger. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. *Physical Review B*, 23(10):5048–5079, May 1981.
- [85] Vivian Vanessa França HENN. *Emaranhamento em Sistemas de Muitos Férmions*. Tese (doutorado em física básica), Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008. Acesso em: 03 ago. 2025.
- [86] R. P. Feynman. Forces in molecules. *Physical Review*, 56(4):340–343, August 1939.
- [87] Google. Google acadêmico, 2025. Acessado em 2 set. 2025.
- [88] N. A. Lima, M. F. Silva, L. N. Oliveira, and K. Capelle. Density functionals not based on the electron gas: Local-density approximation for a luttinger liquid. *Physical Review Letters*, 90(14), April 2003.

- [89] John D. Trimmer. The present situation in quantum mechanics: A translation of schrödinger’s ‘cat paradox’ paper. *Proceedings of the American Philosophical Society*, 124(5):323–338, 1980.
- [90] Gustavo Rigolin. Emaranhamento quântico. *Physicae*, 7(7), July 2008.
- [91] Carl A. Kocher and Eugene D. Commins. Polarization correlation of photons emitted in an atomic cascade. *Physical Review Letters*, 18(15):575–577, April 1967.
- [92] Stuart J. Freedman and John F. Clauser. Experimental test of local hidden-variable theories. *Physical Review Letters*, 28(14):938–941, April 1972.
- [93] Alain Aspect, Philippe Grangier, and Gérard Roger. Experimental tests of realistic local theories via bell’s theorem. *Physical Review Letters*, 47(7):460–463, August 1981.
- [94] Gregor Weihs, Thomas Jennewein, Christoph Simon, Harald Weinfurter, and Anton Zeilinger. Violation of bell’s inequality under strict einstein locality conditions. *Physical Review Letters*, 81(23):5039–5043, December 1998.
- [95] J. Friedel. Metallic alloys. *Il Nuovo Cimento*, 7(S2):287–311, September 1958.
- [96] Andrea Di Carli, Christopher Parsonage, Arthur La Rooij, Lennart Koehn, Clemens Ulm, Callum W. Duncan, Andrew J. Daley, Elmar Haller, and Stefan Kuhr. Commensurate and incommensurate 1d interacting quantum systems. *Nature Communications*, 15(1), January 2024.
- [97] Guido Burkard, Thaddeus D. Ladd, Andrew Pan, John M. Nichol, and Jason R. Petta. Semiconductor spin qubits. *Reviews of Modern Physics*, 95(2), June 2023.
- [98] Gianluca Stefanucci, Robert van Leeuwen, and Enrico Perfetto. In and out-of-equilibrium ab initio theory of electrons and phonons. *Physical Review X*, 13(3), September 2023.
- [99] Murilo Alexandre Garcia Silva. Assinaturas de transições de fase quânticas via entropia média e típica. Master’s thesis, Univesidade Estadual Paulista, Instituto de Química, Araraquara, 2023.

- [100] G.A. Canella and V.V. França. Entanglement in disordered superfluids: The impact of density, interaction and harmonic confinement on the superconductor–insulator transition. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 545:123646, May 2020.
- [101] G. A. Canella and V. V. França. Mott-anderson metal-insulator transitions from entanglement. *Physical Review B*, 104(13), October 2021.
- [102] J. A. Nelder and R. Mead. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal*, 7(4):308–313, January 1965.
- [103] M. Dorigo, V. Maniezzo, and A. Colorni. Ant system: optimization by a colony of cooperating agents. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, Part B (Cybernetics)*, 26(1):29–41, February 1996.
- [104] Marco Dorigo and Christian Blum. Ant colony optimization theory: A survey. *Theoretical Computer Science*, 344(2–3):243–278, November 2005.
- [105] Wei-Neng Chen, Jun Zhang, and Yang Yu. Workflow scheduling in grids: an ant colony optimization approach. In *2007 IEEE Congress on Evolutionary Computation*, page 3308–3315. IEEE, September 2007.
- [106] Marco Dorigo and Thomas Stützle. *The Ant Colony Optimization Metaheuristic: Algorithms, Applications, and Advances*, page 250–285. Springer US, 2003.
- [107] A V Riabko, O V Zaika, R P Kukharchuk, T A Vakaliuk, and I V Hordiienko. Algorithm of ant colony optimization (aco) for 3d variation traveling salesman problem. *Journal of Physics: Conference Series*, 2288(1):012001, June 2022.
- [108] Alena Shmygelska and Holger H Hoos. An ant colony optimisation algorithm for the 2d and 3d hydrophobic polar protein folding problem. *BMC Bioinformatics*, 6(1), February 2005.
- [109] Krzysztof Socha and Marco Dorigo. Ant colony optimization for continuous domains. *European Journal of Operational Research*, 185(3):1155–1173, March 2008.
- [110] Gabriel M. Tonin, Tatiana Pauletti, Ramiro M. dos Santos, and Vivian V. França. Ant colony optimization for density functionals in strongly correlated systems. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 2025.

Apêndices

Apêndice A – Derivadas: Emaranhamento e Susceptibilidade

Assumimos ao longo de todo o texto que

$$u \geq 0, \quad n \leq 1. \quad (61)$$

onde as variáveis P_1, P_2, P_3, P_4, P_5 correspondem, respectivamente, aos parâmetros A, B, C, D, F :
 $P_1 \leftrightarrow A, \quad P_2 \leftrightarrow B, \quad P_3 \leftrightarrow C, \quad P_4 \leftrightarrow D, \quad P_5 \leftrightarrow F.$

Bloco de funções baseadas em integrais e Bessel

$$\text{calc_bess_tati}(u) = \int_0^\infty \frac{J_0(x) J_1(x)}{x(1 + e^{ux/2})} dx, \quad (62)$$

$$\beta(u) \text{ tal que } -\frac{2P}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{P}\right) + 4 \text{calc_bess_tati}(u) = 0 \quad \text{e} \quad \beta(u) = P, \quad (63)$$

$$d_{\text{int}}(u) = \begin{cases} \int_0^5 \frac{J_0(x) J_1(x) e^{ux/2}}{(1 + e^{ux/2})^2} dx, & u > 0, \\ 0.12499999987151713, & u = 0, \end{cases} \quad (64)$$

$$d(u) = \begin{cases} \frac{d_{\text{int}}(u)}{-\frac{1}{\pi} \sin\left(\frac{\pi}{\beta(u)}\right) + \frac{1}{\beta(u)} \cos\left(\frac{\pi}{\beta(u)}\right)}, & u > 0, \\ -0.4696471549202793, & u = 0. \end{cases} \quad (65)$$

Bloco funções para definir a energia do estado fundamental por a_N, b_N, g_N e suas derivadas em função de u .

Para $n \in (0, 1]$ e m tal que as potências estejam bem definidas:

$$a_N(n, m, u; A, B, C) = \begin{cases} 0, & n = 0, \\ \left(\frac{n^A - m^A}{n^B} \right)^{u^C}, & 0 < n \leq 1, \end{cases} \quad (66)$$

$$b_N(n, m, u; A, B, C) = \beta(u)^{a_N(n, m, u; A, B, C)}, \quad (67)$$

$$g_N(n, m, u; D, F) = 2 \exp\left(\frac{u^D}{1 - \left(\frac{m}{n}\right)^F} \right). \quad (68)$$

Derivadas em u (mantendo $n \leq 1$).

Considere

$$\text{base}(n, m; A, B) = \frac{n^A - m^A}{n^B}.$$

Então, para $0 < n \leq 1$,

$$\frac{da_N}{du} = C u^{C-1} [\text{base}(n, m; A, B)]^{u^C} \ln(\text{base}(n, m; A, B)), \quad (69)$$

$$\frac{db_N}{du} = \beta(u)^{a_N} \left(\frac{a_N d(u)}{\beta(u)} + \ln \beta(u) \frac{da_N}{du} \right), \quad (70)$$

$$\frac{dg_N}{du} = 2 \exp\left(\frac{u^D}{1 - (m/n)^F} \right) \frac{D u^{D-1}}{1 - (m/n)^F}. \quad (71)$$

A energia do estado fundamental ($\text{New}(n, m, u; A, B, C, D, F)$) e sua derivada.

Para $n \leq 1$,

$$\text{New}(n, m, u; A, B, C, D, F) = -\frac{2b_N}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{g_N}\right), \quad (72)$$

onde $b_N = b_N(n, m, u; A, B, C)$ e $g_N = g_N(n, m, u; D, F)$.

A derivada em relação a u (onde db_N/du e dg_N/du são definidas acima):

$$\begin{aligned} \frac{d\text{New}}{du} = & -\frac{2}{\pi} \frac{db_N}{du} \cos\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left[\sin\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) - \frac{\pi n}{b_N} \cos\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \right] \\ & - \frac{2m b_N}{g_N^2} \frac{dg_N}{du} \sin\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{g_N}\right). \end{aligned} \quad (73)$$

Emaranhamento via Entropia de von Neumann

$$\text{entNEW}(n, m, u; A, B, C, D, F) = \begin{cases} 0, & n = 0, \\ -n \log_2\left(\frac{n}{2}\right) - (1-n) \log_2(1-n), & \frac{d\text{New}}{du} = 0, \\ -\left(x_1 \log_2 x_1 + x_2 \log_2 x_2 + \right. \\ \left. x_3 \log_2 x_3 + x_4 \log_2 x_4\right), & \text{caso geral,} \end{cases} \quad (74)$$

onde

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{n}{2} - \frac{d\text{New}}{du} + m, \\ x_2 &= \frac{n}{2} - \frac{d\text{New}}{du} - m, \\ x_3 &= 1 - n + \frac{d\text{New}}{du}, \\ x_4 &= \frac{d\text{New}}{du}. \end{aligned}$$

Derivadas Auxiliares em m

$$\text{adm}(n, m, u; A, B, C) = -\frac{A u^C}{n^B} m^{-1+A} \left(n^{-B} (-m^A + n^A) \right)^{-1+u^C}, \quad (75)$$

$$\text{gdm}(n, m, u; D, F) = \frac{2 \exp\left(\frac{u^D}{1 - (m/n)^F}\right) F (m/n)^{-1+F} u^D}{\left(1 - (m/n)^F\right)^2 n}, \quad (76)$$

$$\text{bdm}(n, m, u; A, B, C) = \beta(u)^{a_N} \ln \beta(u) \text{adm}(n, m, u; A, B, C), \quad (77)$$

$$\text{addm}(n, m, u; A, B, C) = -(-1+A) A m^{-2+A} n^{-B} \left(n^{-B} (-m^A + n^A) \right)^{-1+u^C} u^C \quad (78)$$

$$+ A^2 m^{-2+2A} n^{-2B} \left(n^{-B} (-m^A + n^A) \right)^{-2+u^C} u^C (-1 + u^C), \quad (79)$$

$$\text{bddm}(n, m, u; A, B, C) = \beta(u)^{a_N} \ln \beta(u) \left[\text{addm}(n, m, u; A, B, C) + \ln \beta(u) \text{adm}(n, m, u; A, B, C)^2 \right], \quad (80)$$

$$\text{gddm}(n, m, u; D, F) = \frac{2 \exp\left(\frac{u^D}{1 - (m/n)^F}\right) (-1 + F) F (m/n)^{-2+F} u^D}{\left(1 - (m/n)^F\right)^2 n^2} \quad (81)$$

$$+ \frac{4 \exp\left(\frac{u^D}{1 - (m/n)^F}\right) F^2 (m/n)^{-2+2F} u^D}{\left(1 - (m/n)^F\right)^3 n^2} \quad (82)$$

$$+ \frac{2 \exp\left(\frac{u^D}{1 - (m/n)^F}\right) F^2 (m/n)^{-2+2F} u^{2D}}{\left(1 - (m/n)^F\right)^4 n^2}. \quad (83)$$

A segunda derivada da energia em função da magnetização, de2dmNEW

Abreviando as funções, temos

$$b_N = b_N(n, m, u; A, B, C), \quad g_N = g_N(n, m, u; D, F), \quad \text{bdm} = \text{bdm}(n, m, u; A, B, C),$$

$$\text{bddm} = \text{bddm}(n, m, u; A, B, C), \quad \text{gdm} = \text{gdm}(n, m, u; D, F), \quad \text{gddm} = \text{gddm}(n, m, u; D, F).$$

Então

$$\begin{aligned}
\text{de2dmNEW}(n, m, u; A, B, C, D, F) = & \left(-\frac{2 \text{bddm}}{\pi} \right) \sin\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \\
& + \left(-\frac{2 \text{bdm}}{\pi} \right) \cos\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(-\frac{\pi n \text{bdm}}{b_N^2} \right) \\
& + \left(\frac{2 \text{bdm}}{\pi} \right) \sin\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(\frac{\pi}{g_N} - \frac{\pi m \text{gdm}}{g_N^2} \right) \\
& + \left(-\frac{2 \text{bdm}}{\pi} \right) \cos\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(-\frac{\pi n \text{bdm}}{b_N^2} \right) \\
& + \left(\frac{2 b_N}{\pi} \right) \sin\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(-\frac{\pi n \text{bdm}}{b_N^2} \right)^2 \\
& + \left(\frac{2 b_N}{\pi} \right) \cos\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(-\frac{\pi n \text{bdm}}{b_N^2} \right) \left(\frac{\pi}{g_N} - \frac{\pi m \text{gdm}}{g_N^2} \right) \\
& + \left(-\frac{2 b_N}{\pi} \right) \cos\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(\frac{2\pi n \text{bdm}^2}{b_N^3} - \frac{\pi n \text{bddm}}{b_N^2} \right) \\
& + \left(\frac{2 \text{bdm}}{\pi} \right) \sin\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(\frac{\pi}{g_N} - \frac{\pi m \text{gdm}}{g_N^2} \right) \\
& + \left(\frac{2 b_N}{\pi} \right) \cos\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(\frac{\pi}{g_N} - \frac{\pi m \text{gdm}}{g_N^2} \right) \left(-\frac{\pi n \text{bdm}}{b_N^2} \right) \\
& + \left(\frac{2 b_N}{\pi} \right) \sin\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(\frac{\pi}{g_N} - \frac{\pi m \text{gdm}}{g_N^2} \right)^2 \\
& + \left(\frac{2 b_N}{\pi} \right) \sin\left(\frac{\pi n}{b_N}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{g_N}\right) \left(-\frac{2\pi \text{gdm}}{g_N^2} + \frac{2\pi m \text{gdm}^2}{g_N^3} - \frac{\pi m \text{gddm}}{g_N^2} \right). \tag{84}
\end{aligned}$$

Susceptibilidade

$$\text{susNEW}(n, m, u; A, B, C, D, F) = \frac{1}{\text{de2dmNEW}(n, m, u; A, B, C, D, F)}. \tag{85}$$