

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA - UNESP

Instituto de Química de Araraquara- campus de Araraquara

FERNANDO CASELLATO

**Contornando problemas de convergência da DFT para sistemas magnetizados em regime
atrativo do modelo de Hubbard unidimensional :**
um estudo metodológico com enfoque numérico

Araraquara

2025

Fernando Casellato

**Contornando problemas de convergência da DFT para sistemas magnetizados em regime
atrativo do modelo de Hubbard unidimensional :**
um estudo metodológico com enfoque numérico

Dissertação, apresentada à Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química de Araraquara, Araraquara, para obtenção do título de Mestre em Mestrado em Química.

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

Araraquara
2025

C337c	Casellato, Fernando Contornando problemas de convergência da DFT para sistemas magnetizados em regime atrativo do modelo de Hubbard unidimensional : um estudo metodológico com enfoque numérico / Fernando Casellato. -- Araraquara, 2025 75 p. : il., tabs. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara Orientadora: Vivian Vanessa França Henn 1. Física teórica. 2. Matéria condensada. 3. Magnetização. 4. Supercondutividade. 5. Calculos numericos. I. Título.
-------	--

IMPACTO POTENCIAL DESTA PESQUISA

Esta pesquisa de mestrado, de caráter teórico e metodológico, desenvolveu um código computacional para descrever sistemas eletrônicos fortemente correlacionados em uma dimensão. Ao possibilitar cálculos mais rápidos e acessíveis, mantendo excelente concordância com métodos exatos, o trabalho amplia a capacidade de investigação de fases quânticas exóticas, como a superfluidez FFLO, em regimes de difícil acesso experimental ou computacional.

O impacto esperado desta pesquisa é principalmente científico, por gerar novos conhecimentos fundamentais que podem servir de base para avanços futuros em áreas como física de materiais, simulações quânticas e desenvolvimento de novas tecnologias quânticas. Além disso, ao tornar ferramentas teóricas avançadas mais eficientes e viáveis em computadores convencionais, o estudo contribui para a democratização do conhecimento científico, fortalecendo a formação de recursos humanos qualificados. Esse aspecto conecta-se diretamente com o ODS 4 (Educação de Qualidade) e o ODS 9 (Indústria, Inovação e Infraestrutura), fomentando inovação e acesso ao conhecimento em diferentes contextos.

Embora os benefícios diretos à sociedade sejam esperados no longo prazo, a pesquisa estabelece um alicerce para futuras soluções tecnológicas e experimentais, com potencial de gerar impactos positivos no desenvolvimento científico global e na formação de novas gerações de pesquisadores.

POTENTIAL IMPACT OF THIS RESEARCH

This master's research, of a theoretical and methodological nature, developed a computational code to describe strongly correlated one-dimensional electronic systems. By enabling faster and more accessible calculations while maintaining excellent agreement with exact methods, this work expands the capacity to investigate exotic quantum phases, such as the FFLO superfluidity, in regimes that are experimentally or computationally challenging.

The expected impact of this research is mainly scientific, as it generates new fundamental knowledge that may serve as a foundation for future advances in areas such as materials physics, quantum simulations, and the development of emerging quantum technologies. Moreover, by making advanced theoretical tools more efficient and feasible even on conventional computers, this study contributes to the democratization of scientific knowledge and supports the training of highly qualified human resources. This aligns directly with SDG 4 (Quality Education) and SDG 9 (Industry, Innovation, and Infrastructure), fostering innovation and equitable access to advanced knowledge.

Although direct benefits to society are expected in the long term, this research lays the groundwork for future technological and experimental solutions, with the potential to generate positive impacts on global scientific development and the education of new generations of researchers.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: "Contornando problemas de convergência da DFT para sistemas magnetizados em regime atrativo do modelo de Hubbard unidimensional: um estudo metodológico com enfoque numérico"

AUTOR: FERNANDO CASELLATO

ORIENTADORA: VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN

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

 Documento assinado digitalmente
VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN
Data: 08/08/2025 15:02:06-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

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

Prof. Dr. FERNANDO IEMINI DE REZENDE AGUIAR (Participação Virtual)
Instituto de Física / Universidade Federal Fluminense - UFF - Niterói

Prof. Dr. WALBER HUGO DE BRITO (Participação Virtual)
Departamento de Física / Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG - Belo Horizonte

Araraquara, 08 de agosto de 2025

DADOS CURRICULARES

IDENTIFICAÇÃO	
	Fernando Casellato 19/04/1999
Nacionalidade	Brasileiro
Nome em citações bibliográficas	Casellato, Fernando Casellato, F.
Currículo Lattes	http://lattes.cnpq.br/4965785454832891
ORCID	https://orcid.org/0000-0001-6399-7459
FORMAÇÃO ACADÊMICA	
2018/2023	Licenciatura em Química Universidade Estadual Paulista (UNESP), Instituto de Química, Araraquara
PRODUÇÃO BIBLIOGRÁFICA	
MORIS, C. H. A. A.; CASELLATO, F.; NASCIMENTO, M. M.; AGOSTINI, G.; MASSI, L. Distinção e classe social no acesso ao ensino superior brasileiro. <i>Tempo Social</i> , v. 34, n. 2, p. 69-91, 2022.	
CAMPANHOL, B. S.; RIBEIRO, B. D.; CASELLATO, F.; MEDINA, K. J. D.; SPONCHIALDO, S. R. P. Improvement of DOPA-Melanin Production by <i>Aspergillus nidulans</i> Using Eco-Friendly and Inexpensive Substrates. <i>Journal of Fungi</i> , v. 9, n. 7, p. 714, 2023.	
MASSI, L.; MORIS, C. H. A. A.; CASELLATO, F.; NASCIMENTO, M. M.; AGOSTINI, G. ACM e o campo de Bourdieu: contribuições de pesquisas empíricas e estatísticas. <i>BIB - Revista Brasileira de Informação Bibliográfica em Ciências Sociais</i> , n. 1, p. 1-20, 2023.	
AGOSTINI, G.; MORIS, C. H. A. A.; CASELLATO, F.; MASSI, L.; NASCIMENTO, M. M. Homologias entre o campo acadêmico-científico e a ABRAPEC: configurando um espaço de posições. In: ENCONTRO NACIONAL DE PESQUISA EM EDUCAÇÃO EM CIÊNCIAS – ENPEC, 14., 2023, São Carlos. <i>Anais</i> . São Carlos: ABRAPEC, 2023. p. 1–15.	
CASELLATO, F.; MASSI, L.; NASCIMENTO, M. M. A estrutura interna do campo da Química no Brasil. <i>Química Nova</i> , v. 48, n. 2, e-20250071, 2025.	
PARTICIPAÇÃO EM EVENTOS CIENTÍFICOS	
Autumn Meeting of the Brazilian Physical Society, 2024, (Florianópolis). Título do trabalho apresentado: Circumventing convergence problems in the Kohn-Sham density functional theory. 2024. (Pôster).	
Sao Paulo School of Advanced Science on Quantum Materials, 2024, (São Paulo). Título do trabalho apresentado: Circumventing convergence problems in the Kohn-Sham density functional theory. 2024. (Pôster).	

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família pelos incessantes investimentos em meus estudos, mesmo nos momentos de grande escassez de recursos. Agradeço aos meus orientadores, Vivian e Vivaldo, por todo o tempo, atenção, conhecimento e cuidado dedicados à minha orientação — especialmente pelas inúmeras e extensas reuniões, inclusive durante seus respectivos períodos de férias docentes —, sempre priorizando meu acompanhamento e se esforçando para compatibilizar seus calendários com o ritmo de pesquisa e os prazos de um aluno com vínculo empregatício. Agradeço a todos os colegas do grupo de pesquisa pelo apoio e contribuições construtivas ao trabalho, especialmente à Marina e ao Isaac - especialistas em DMRG do grupo - que providenciaram os dados de DMRG para as análises comparativas de validação do código que desenvolvi. Agradeço, também, a todo o axé movimentado pela espiritualidade superior, que constantemente me auxiliou na caminhada para a realização deste trabalho, especialmente na superação de minhas limitações pessoais.

O presente trabalho foi realizado com apoio de bolsa de mestrado temporária, acumulada a vínculo empregatício, da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001.

RESUMO

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) pautada na resolução das equações autoconsistentes de Kohn-Sham por meio do ajuste da densidade do sistema, quando aplicada ao modelo de Hubbard unidimensional, constitui uma abordagem aproximada de baixo custo computacional que consegue capturar, ao menos qualitativamente, muitos dos fenômenos relevantes em sistemas fortemente correlacionados. No entanto, apresenta desafios de convergência quando aplicada a funcionais de energia com descontinuidades, característica física inerente a sistemas magnetizados em regime atrativo. Com o objetivo de contornar tais limitações e oferecer uma alternativa de baixo custo computacional a estes regimes descontínuos onde a DFT falha, esta dissertação desenvolveu e implementou um código numérico baseado na *Total-energy Local Density Approximation* (TLSDA), direcionado ao estudo de cadeias unidimensionais com interação atrativa no modelo de Hubbard, em particular para o regime magnetizado. O trabalho teve, portanto, caráter metodológico e numérico, buscando implementar e validar a TLSDA como uma ferramenta eficaz para descrever sistemas físicos de difícil convergência em DFT via orbitais de Kohn-Sham. O código TLSDA foi validado por meio de comparações diretas com o método *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG), considerado numericamente exato em uma dimensão, alcançando excelente concordância qualitativa e quantitativa, com desvios médios absolutos máximos na ordem de 10^{-2} . Essa precisão, aliada ao baixo custo computacional, evidenciou o potencial da TLSDA como alternativa viável para varreduras extensas em diagramas de fase e exploração de regimes físicos ainda pouco acessados, permitindo realizar dentro de segundos varreduras que, via DMRG, demandariam horas. O código TLSDA foi utilizado para análises físicas preliminares de uma cadeia semi-preenchida, sugerindo identificação da fase Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) com valores de emaranhamento crítico robustos a perturbações, indicando possível estrutura topológica extendendo achados anteriores respectivos à topologia neste mesmo sistema sem magnetização. Adicionalmente, a extensão da fase FFLO até cerca de 30% de polarização corroborou parcialmente com as previsões analíticas debatidas na literatura. Assim, os resultados obtidos reforçam a TLSDA como ferramenta promissora para investigações futuras de sistemas fortemente correlacionados e para a caracterização detalhada de fases exóticas em redes unidimensionais, combinando alta eficiência computacional e fidelidade física.

Palavras-Chave: teoria do funcional da densidade; modelo de Hubbard unidimensional; magnetização; TLSDA; FFLO; emaranhamento.

ABSTRACT

Density Functional Theory (DFT), based on the self-consistent solution of the Kohn-Sham equations via density adjustment, when applied to the one-dimensional Hubbard model, constitutes an approximate approach of low computational cost that is capable of capturing, at least qualitatively, many relevant phenomena in strongly correlated systems. However, it presents convergence challenges when applied to discontinuous energy functionals, a physical feature inherent to magnetized systems in the attractive regime. Aiming to overcome such limitations and to offer a low-cost alternative where DFT fails in these discontinuous regimes, this dissertation developed and implemented a numerical code based on the Total-energy Local Density Approximation (TLSDA), targeted at the study of one-dimensional chains with attractive interaction in the Hubbard model with spin imbalanced lattices. This work had a methodological and numerical bias, seeking to implement and validate TLSDA as an effective tool for describing physical systems that exhibit poor convergence in DFT via Kohn-Sham orbitals. The TLSDA code was validated through direct comparisons with the Density Matrix Renormalization Group (DMRG) method, which is considered numerically exact in one dimension, achieving excellent qualitative and quantitative agreement, with maximum absolute mean deviations on the order of 10^{-2} . This level of accuracy, combined with low computational cost, highlighted the potential of TLSDA as a viable alternative for preliminary studies, extensive scans of phase diagrams, and exploration of physical regimes that are still largely inaccessible, enabling scans in seconds that would require hours via DMRG. The TLSDA code was employed in preliminary physical analyses of a half-filled chain, suggesting the identification of the Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) phase with critical entanglement values robust to perturbations, indicating a possible topological structure extending previous findings regarding the topology for this system in the unpolarized case. Additionally, the extension of the FFLO phase up to approximately 30% polarization partially corroborated the analytical prediction discussed in the literature. Thus, the results obtained reinforce TLSDA as a promising tool for future investigations of strongly correlated systems and for the detailed characterization of exotic phases in one-dimensional lattices, combining high computational efficiency with physical fidelity.

Keywords: density functional theory; one-dimensional Hubbard model; magnetization; TLSDA; FFLO; entanglement.

SUMÁRIO

DADOS CURRICULARES	4
1 INTRODUÇÃO	9
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	11
2.1 Modelo de Hubbard Unidimensional	11
2.2 Teoria do Funcional da Densidade aplicada ao Modelo de Hubbard via LDA	12
2.2.1 LDA e Ansatz de Bethe	14
2.3 Problemas de convergência e abordagens alternativas: TLSDA e μ -BA-LDA	15
2.3.1 O problema de convergência para o sistema magnetizado em regime atrativo: descontinuidade em $m = 0$	15
2.3.2 Abordagem μ -BA-LDA	16
2.3.3 Total-energy Local Desity Approximation	18
2.4 A coexistência exótica entre supercondutividade e magnetismo	19
2.4.1 Avanços recentes na caracterização da fase FFLO	19
2.5 Emaranhamento, fases topológicas e fases exóticas	20
3 METODOLOGIA	22
3.1 TLSDA para sistemas magnetizados em regime atrativo	22
3.2 Implementação	28
3.2.1 LSDA para o modelo de Hubbard unidimensional atrativo com magnetização	28
3.2.2 (n_i, m_i) a partir de G e H	30
3.2.3 Determinação autoconsistente de n_i e m_i : função TLSDA	36
3.3 Validação do código	38
3.4 Rotina geral do código TLSDA	39
4 RESULTADOS E DISCUSSÃO	43
4.1 Validação	43
4.2 Topologia e FFLO em $\bar{n} = 1$	60
5 CONCLUSÃO	70
Bibliografia	71

1 INTRODUÇÃO

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT, sigla do inglês) [1, 2], formulada por Kohn, Hohenberg e Sham na década de 60, se mantém como um dos métodos mais utilizados para cálculos de estrutura eletrônica na química quântica e física da matéria condensada. Fundamentando-se no teorema de Hohenberg-Kohn, o eixo central dos cálculos de DFT é a densidade do sistema, visto que esta propriedade estabelece uma relação unívoca com sua função de onda. Em outras palavras, a função de onda é um funcional da densidade e, em princípio, pode ser determinada univocamente por meio dela. Consequentemente, todas as grandezas físicas (observáveis) são também funcionais da densidade.

A maior vantagem da DFT reside em seu baixo custo computacional, uma vez que o ciclo autoconsistente de Kohn-Sham (KS) [2] permite encontrar a densidade de sistemas quânticos complexos (e, portanto, todas as outras propriedades subsequentes) driblando a custosa resolução da equação de Schrödinger para muitos corpos em um sistema interagente. Assim, a DFT emerge como uma abordagem que oferece uma precisão considerável e é significativamente mais eficiente do que métodos exatos como a *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG) [3, 4], viabilizando a análise de sistemas complexos nos quais barreiras computacionais se tornam significativas [5, 6].

Posto isso, não são em todos os regimes de parâmetros que a DFT é plenamente funcional, visto que problemas de convergência são frequentemente encontrados em casos de abrupta variação nos funcionais da densidade, ou seja, quando existem descontinuidades entre o potencial de troca e correlação em função da densidade [7, 8, 9, 10]. Como ordinariamente tais descontinuidades são inerentes à física dos sistemas, abordagens que busquem contornar os desafios de convergência do cálculo autoconsistente iterativo se mostram necessárias para expandir a abrangência da DFT e é nesta lacuna que se encaixa o objetivo da presente pesquisa.

O modelo de Hubbard [11, 12, 13], proposto por três pesquisadores independentes no mesmo ano, é uma ferramenta simples, porém fundamental para simular o comportamento de elétrons em materiais sólidos complexos, sendo amplamente aplicado para sistemas fortemente correlacionados na física, química e ciência dos materiais. Para seu caso unidimensional, ele simplifica a dinâmica dos elétrons em uma cadeia constituída por sítios que podem conter no máximo dois elétrons de spins opostos, respeitando o princípio de exclusão de Pauli [14], podendo se mover para sítios vizinhos com uma certa probabilidade. A única interação considerada é entre elétrons no mesmo sítio, modelada pela força Coulombiana. Além disso, cada sítio pode ser afetado por um potencial externo, agregando inomogeneidade ao sistema, o que permite simular diferentes efeitos, como o confinamento parabólico.

Para o regime repulsivo do modelo de Hubbard, tais problemas de convergência oriundos da descontinuidade relacionada ao *gap* de energia da transição metal para isolante de Mott-Hubbard [15] em densidade $n = 1$ (semipreenchimento da banda que acomoda no máximo duas partículas

de *spins* opostos por sítio) foram resolvidos por meio do esquema μ -BA-LDA [10]. O esquema adotado pelos autores consiste na troca da variável independente, densidade, pelo potencial químico, o que suaviza a descontinuidade da energia e melhora a convergência do cálculo.

Nosso regime de interesse consiste em sistemas magnetizados para o modelo de Hubbard com interações atrativas no mesmo sítio da rede. Nesse caso, existe uma descontinuidade da energia que impede a convergência do cálculo por meio da abordagem tradicional da DFT na região próxima à magnetização igual a zero, impossibilitando o estudo de sistemas desse tipo. Na Seção 2.3.1, daremos mais detalhes dos motivos dessa descontinuidade, que é inerente à energia associada à magnetização do sistema.

Em situações onde sistemas magnetizados estão em regime de atração entre elétrons, torna-se possível a ocorrência de uma condição peculiar: a coexistência exótica de supercondutividade e magnetismo. Isso surge devido à competição entre o emparelhamento de elétrons para formarem pares de Cooper e a força de um campo magnético externo, levando à fase exótica de Fulde–Ferrell–Larkin–Ovchinnikov (FFLO) [16, 17]. Como os mecanismos eletrônicos da transição que levam a essa fase ainda são desconhecidos para diversos contextos [18, 19, 20], essa é uma das lacunas para qual pretendemos contribuir, possibilitando o estudo dessas transições com baixo custo computacional.

Sendo assim, esta pesquisa de mestrado tem como objetivo a implementação de um código que permita resolver os funcionais da densidade no regime atrativo para sistemas magnetizados. Nossa abordagem se baseia, inicialmente, na implementação de uma *Total-Energy Local Spin Density Approximation* (TLSDA), similar à aproximação de Thomas-Fermi (TFA), mas sem descartar a energia de troca e correlação [21]. Essa implementação tem como objetivo construir um funcional aproximado para o potencial químico, passível de refinamento posterior por meio da generalização do esquema μ -BA-LDA [10] para o regime de interesse, similar ao realizado para o modelo de Hubbard bidimensional sem magnetização [22].

No decorrer do trabalho, observou-se que a implementação TLSDA, mesmo sem o ajuste da energia cinética por meio da μ -BA-LDA, apresentou excelente concordância qualitativa e quantitativa com os resultados obtidos por DMRG para perfis de densidade, magnetização e emaranhamento, com desvios médios absolutos da ordem de 10^{-2} para densidades médias 0.5, 1.0 e 1.5.

Esses resultados destacam o potencial da TLSDA como ferramenta eficiente para o estudo de transições quânticas no modelo de Hubbard 1D, motivando a postergação da implementação do ajuste μ -BA-LDA para investigações futuras, caso se mostre necessário um ganho adicional de precisão quantitativa. Com base nesse sucesso, os próximos passos da pesquisa concentraram-se em mobilizar o código desenvolvido para investigar, com baixo custo computacional, os mecanismos eletrônicos que conduzem a transições de fases quânticas no sistema, em particular aquelas que envolvem a coexistência entre supercondutividade e magnetismo [16, 17], aprofundando a compreensão dessa fase elusiva da matéria.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Na Seção 2.1 iremos apresentar os fundamentos teóricos do modelo de Hubbard unidimensional. Na Seção 2.2 apresentaremos os fundamentos da DFT aplicada ao modelo de Hubbard via LDA. Na Seção 2.3 falaremos dos problemas de convergência da DFT e as abordagens alternativas que buscam contorná-los. Na 2.4 discutiremos os fundamentos teóricos que caracterizam a fase FFLO. Por fim, na Seção 2.5 discorreremos sobre os fundamentos teóricos da medida de emaranhamento como marcador topológico e no contexto da FFLO.

2.1 MODELO DE HUBBARD UNIDIMENSIONAL

O modelo de Hubbard, proposto por três pesquisadores independentemente no mesmo ano de publicação [11, 12, 13], é uma forma simples de descrever o comportamento de elétrons em um sólido, porém poderosa e vastamente utilizada na área de sistemas fortemente correlacionados. Para um sistema unidimensional, a ideia básica do modelo de Hubbard consiste em simular a dinâmica de elétrons sobre uma cadeia com L sítios. Cada sítio é ocupado por no máximo dois elétrons de spins opostos, que possuem uma certa probabilidade de tunelarem para um sítio vizinho. Esse movimento possui a energia cinética t e é descrito pelo termo t_{ij} , usualmente chamado de *hopping*. A única interação entre elétrons levada em conta no modelo é aquela experimentada entre duas partículas ocupando o mesmo sítio i , descrita pelo termo U_i , que pode simular a atração ou repulsão Coulombiana. Por fim, cada sítio pode sofrer ação de um potencial externo V_i , termo utilizado para modelar o sistema, seja pela influência de campos elétricos ou magnéticos, impurezas, efeitos de borda etc.

O Hamiltoniano deste modelo para o caso unidimensional consiste em:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} \nu_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (1)$$

onde $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ e $\hat{c}_{j\sigma}$ são operadores de criação e aniquilação de elétrons no sítio i com spin σ . Os operadores densidade, que contam o número de elétrons com spins σ nos sítios i , são expressos em termos dos operadores de criação e aniquilação de elétrons, de tal forma que $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$. A densidade média da cadeia é dada por $\sum_{i\sigma} \langle n_{i\sigma} \rangle = n = N/L$, onde $N = N_\uparrow + N_\downarrow$, é o número total de partículas na cadeia.

No caso de cadeias com $L \leq 20$ sítios, o Hamiltoniano descrito na Equação (1) pode ser diagonalizado numericamente. Para o caso de uma cadeia de comprimento infinito homogênea, isto é $U_i = U$ e $t_{ij} = t$, a solução exata da Equação (1) é obtida por meio do Ansatz de Bethe [23, 24], baseada na solução numéricas das equações integrais acopladas de Lieb-Wu [23]. Para cadeias intermediárias não existem soluções exatas, contudo, as propriedades do modelo são satisfatoriamente e frequentemente mapeadas de forma aproximada via DFT em

conjunto da *Local Density Approximation* (LDA), com exceção dos casos com problemas de convergência, como no contexto do modelo de Hubbard atrativo, que é o regime de interesse para esta pesquisa. Na seção seguinte, apresentaremos os fundamentos básicos da DFT conjunta ao modelo de Hubbard, detalhando o papel da solução exata aliada à LDA para a resolução do modelo utilizando esta metodologia.

2.2 TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE APLICADA AO MODELO DE HUBBARD VIA LDA

A DFT [1, 2], formulada por Kohn, Hohenberg e Sham em meados da década de 1960, fornece uma abordagem amplamente utilizada para o cálculo da energia total de sistemas de muitos elétrons interagentes. O ponto de partida teórico da metodologia é o teorema de Hohenberg-Kohn, que estabelece uma relação unívoca entre a densidade eletrônica de um sistema e sua função de onda, postulando o formalismo de que a função de onda é um funcional da densidade, ou seja,

$$\Psi_0(r_1, r_2, \dots, r_N) = \Psi[n_0(r)]. \quad (2)$$

Sendo assim, a densidade $n_0(r)$ carrega as mesmas informações que a função de onda no estado fundamental Ψ_0 , logo, qualquer observável O pode ser obtido tanto por meio da função de onda Ψ_0 , quanto por meio da densidade $n_0(r)$. Portanto, todo e qualquer observável pode ser reescrito como um funcional da densidade, isto é:

$$O = O[n_0(r)]. \quad (3)$$

Dessa forma, a energia no estado fundamental pode ser obtida por meio da minimização em relação à densidade do funcional da densidade que descreve a energia total do sistema,

$$E[n] = T[n] + U[n] + V[n], \quad (4)$$

onde $T[n]$ é o funcional da energia cinética, $U[n]$ é o da energia de interação coulombiana e $V[n]$ o do potencial externo. Dado que $F[n]$ é o funcional universal, tal que $F[n] = T[n] + U[n]$, a minimização resulta em

$$\begin{aligned} \frac{\delta E[n]}{\delta n(r)} &= \frac{\delta F[n]}{\delta n(r)} + \frac{\delta V[n]}{\delta n(r)}, \\ 0 &= \frac{\delta F[n]}{\delta n(r)} + v(r), \end{aligned} \quad (5)$$

onde $v(r) = \frac{\delta V[n]}{\delta n(r)}$ é o potencial externo. Contudo, como o funcional universal não é exatamente conhecido, são necessárias aproximações para a energia cinética e energia de interação. Para isso, a energia cinética do sistema interagente T em (4) é substituída pela energia cinética do sistema auxiliar não-interagente T_s , assim como a energia de interação U é substituída pela energia de Hartree, E_H , analogamente à energia eletrostática clássica de interação entre dois elétrons. Isso, evidentemente, implica em um brusco erro que é compensado pela introdução

do termo do funcional de energia de troca e correlação, $E_{xc}[n]$, no sistema não homogêneo, que busca incorporar as informações perdidas nas substituições T_S e E_H , levando à expressão final a ser minimizada

$$E[n] = T_s[n] + E_H[n] + E_{xc}[n] + V[n], \quad (6)$$

cujas minimização leva à relação

$$\frac{\delta E[n]}{\delta n(r)} = \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} + \nu_H(r) + \nu_{XC}(r) + \nu(r) = 0. \quad (7)$$

Como os funcionais $T_s[n]$ e $E_{xc}[n]$ não são conhecidos explicitamente, Kohn e Sham propuseram um esquema de minimização indireta da expressão mostrada na Equação (6), por meio de um cálculo autoconsistente que mapeia a densidade do sistema interagente utilizando um sistema auxiliar não-interagente. Neste caso o funcional do sistema não interagente é expresso como

$$E_s = T_s[n] + V_s[n], \quad (8)$$

cujas minimização leva à relação

$$\frac{\delta E_s[n]}{\delta n(r)} = \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} + \nu_{KS}(r) = 0, \quad (9)$$

onde $\nu_{KS}(r) = \frac{\delta V_s[n]}{\delta n(r)}$, chamado de potencial Kohn-Sham, é o potencial externo do sistema não-interagente que, quando escolhido em concordância com (10), nos permite estabelecer uma equivalência entre encontrar o ponto mínimo do sistema auxiliar e encontrar o ponto mínimo do sistema interagente, contornando o problema da resolução da equação de Schrödinger para muitos corpos interagentes. Ao igualar as expressões mostradas nas Equações (7) e (9), obtemos a relação de mapeamento entre o sistema auxiliar e o interagente

$$v_{KS}[n(r)] = v_H[n(r)] + v_{xc}[n(r)] + v_{ext}(r). \quad (10)$$

Como o v_{KS} depende das densidades que não são conhecidas, inicia-se o ciclo com um chute para o valor da densidade, que iremos chamar de n_i . Feito isso, determina-se, por meio da Equação (10) o potencial KS do sistema auxiliar, que é utilizado na Equação de Schrödinger (11) e, portanto, determinar a energia no estado fundamental do sistema não-interagente. Em seguida, podemos recalcular a densidade do sistema auxiliar, que dessa vez nomearemos de n_f , obtida por meio da relação $n_f(r) = \sum_i |\Phi_i^{KS}(r)|^2$.

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + \nu_{KS} \right] \Phi_i^{KS}(r) = \varepsilon_i \Phi_i^{KS}(r). \quad (11)$$

Por fim, comparamos n_i com n_f , e, no caso de igualdade dentro de um limite de tolerância, temos a convergência do ciclo autoconsistente. Caso contrário, n_f torna-se o n_i da próxima interação, ou seja, torna-se o novo chute e o *loop* se repete até os valores das densidades convergirem. Ao escolher o potencial externo do sistema auxiliar, v_{KS} , de acordo com a Equação (10), a

minimização do sistema auxiliar nos leva à minimização do sistema interagente. Posto isso, o caso de convergência indica que, nesta interação do ciclo, n_i assumiu um valor que satisfaz a autoconsistência das equações de KS, portanto, é a densidade do sistema de interesse, interagente, em seu estado fundamental.

O ciclo é formalmente exato, contudo, a implementação de pelo menos uma aproximação se mostra necessária, pois precisamos do potencial de troca e correlação do sistema interagente inhomogêneo, $v_{xc}(r)$. Como já mencionado, o funcional exato da energia de troca e correlação não é conhecido para sistemas não-homogêneos. Sendo assim, na DFT é necessário determinar essa grandeza de forma aproximada. Caso contrário, se o funcional da energia de troca e correlação fosse conhecido exatamente quando temos um potencial externo, todo o esquema KS e a DFT seriam exatos, sem aproximações.

2.2.1 LDA e Ansatz de Bethe

Uma forma bastante usual de determinar aproximadamente o potencial de troca e correlação é via *Local Density Approximation* (LDA), proposta por Hohenberg e Kohn [1]. A LDA consiste na construção de um funcional para o sistema não homogêneo a partir da aproximação, localmente, com os valores do observável para o sistema homogêneo calculados sob as densidades do sistema não homogêneo [21, 25]. Em outras palavras, substituir localmente o sistema inhomogêneo pelo sistema homogêneo. Portanto, exemplificando com o caso da energia de troca e correlação, em LDA teremos que os valores para o caso homogêneo desse observável serão avaliados, sítio por sítio, sob as densidades do sistema não homogêneo. O formalismo para essa aproximação é dado por

$$E_{xc}[n] \approx E_{xc}^{LDA}[n] = \sum_i e_{xc}^{hom}(n_i, u)|_{n \rightarrow n_i}, \quad (12)$$

onde e_{xc}^{hom} é a energia de troca e correlação por sítio do sistema homogêneo no modelo de Hubbard unidimensional, energia de interação u e densidade de ocupação local n_i . Sendo assim, na LDA, cada sítio i irá contribuir para a energia de troca e correlação como se estivesse imerso em um sistema infinito e homogêneo, cujas contribuições são calculadas por meio das densidades de ocupação locais n_i do sistema heterogêneo. O funcional final será a soma de todas essas contribuições.

Para construir os melhores funcionais aproximados em sistemas não homogêneos, é interessante tomar como partida o funcional mais próximo o possível da solução exata para o caso homogêneo [26, 27]. A solução exata do modelo de Hubbard unidimensional homogêneo (cadeia infinita e sem potencial externo) é conhecida via Bethe-Ansatz [23, 24, 28] com base na resolução das equações integrais acopladas de Lieb-Wu. A LDA baseada nessa solução é comumente chamada de BA-LDA ou BALDA [21] e será a utilizada na metodologia desta pesquisa. Na seção seguinte, detalharemos sobre casos com condições desfavoráveis à convergência do ciclo KS e sobre abordagens alternativas que podem contornar os problemas de convergência.

2.3 PROBLEMAS DE CONVERGÊNCIA E ABORDAGENS ALTERNATIVAS: TLSDA E μ -BA-LDA

Uma limitação da DFT é a incapacidade dos cálculos convergirem em situações com funcionais de rápida variação com relação à densidade [7, 8, 9, 10]. As razões para isso são densamente discutidas por Xiaolong et. al [8]. Os autores desenvolvem o formalismo matemático que explica a inconstância na convergência dos cálculos iterativos de KS quando os funcionais não variam de uma forma suficientemente suave com a densidade. Apoiados no teorema do ponto fixo de Banach, os autores defendem a existência de um problema intrínseco à convergência dos cálculos iterativos para qualquer sistema que apresente um potencial de troca e correlação de rápida variação. Como discutido na Seção 2.2, em DFT, aproximações como a LDA são necessárias. Contudo, as soluções exatas utilizadas por essas aproximações, como a de Bethe-Ansatz, apresentam descontinuidades relacionadas à física dos sistemas.

A situação de desafio em convergência mais explorada na literatura [7, 8, 9, 10] é para o caso de semipreenchimento no modelo de Hubbard repulsivo, em função do comportamento abrupto, fisicamente previsto, relacionado a uma descontinuidade na energia do sistema vinculada à transição de Mott-Hubbard. Nesse caso, em densidade igual a um, o potencial de troca e correlação provindo da BALDA não é definido, visto que a energia de troca e correlação não é diferenciável neste ponto de descontinuidade, restringindo o uso de funcionais BALDA para situações em que a densidade local está longe do semipreenchimento [8]. Diferentes métodos foram desenvolvidos com atenção à esse problema, como reparametrizações da curva sob temperatura finita [8], introdução de parâmetros *ad hoc* [7], modificações no funcional BALDA [29, 30] e mudança na variável independente do problema [10]. Essa última abordagem, apelidada de μ -BA-LDA pelos autores, por apresentar um contorno ao problema mais generalizável para qualquer caso de descontinuidade, assim como ter apresentado ótimos resultados no regime repulsivo, nos pareceu promissora como uma tentativa de solucionar o problema de convergência atrelado à descontinuidade em magnetização igual a zero no modelo de Hubbard atrativo, objetivo deste estudo.

2.3.1 O problema de convergência para o sistema magnetizado em regime atrativo: descontinuidade em $m = 0$

No regime atrativo, ao colocar dois elétrons no mesmo sítio, há uma diminuição na energia total do sistema por conta do efeito estabilizador da atração entre férmions. Para criar magnetização, ou seja, sair de $m = 0$, é necessário desbalancear o número de spins, logo, remover um elétron de um sítio duplamente ocupado. Para isso, existe uma barreira energética a ser paga em função do rompimento dessa atração estabilizadora e a descontinuidade que impede a convergência dos cálculos na região próxima a $m = 0$ está relacionada a esse custo energético inerente à magnetização. Como detalharemos na Seção 3.1, a função H é a que descreve a porção da energia total do sistema atrelada ao campo magnético. A (Figura 5) ilustra a superfície

dessa função com referência aos possíveis pares de densidade e magnetização (n, m) . Nela, podemos ver a descontinuidade da energia deste sistema ao longo da linha $m = 0$ que dificulta a convergência dos cálculos via DFT em sítios com magnetização próxima dessa.

Dessa forma, abordagens alternativas se mostraram necessárias para contornar essa descontinuidade inerente à física do sistema. Apoiados na literatura, pensamos inicialmente na combinação de duas: primeiro uma TLSDA, que implicaria na minimização direta da energia total do sistema aplicando uma LSDA tanto na energia cinética quanto na energia de troca e correlação; posteriormente uma generalização do esquema μ -BA-LDA ao regime atrativo com magnetização a fim de tratar a energia cinética via orbitais KS. Uma proposta metodológica semelhante foi implementada com sucesso no estudo do modelo de Hubbard bidimensional não magnetizado, servindo como base para o delineamento de nossa pesquisa [22].

Nessa linha, os chutes iniciais para a implementação μ -BA-LDA seriam os *outputs* minimizados via TLSDA, ou seja, algo já próximo da solução final, visando otimização de convergência. Contudo, como os resultados iniciais da TLSDA foram promissores, a implementação desse ajuste via μ -BA-LDA foi postergada até que se justifique o ganho quantitativo. Ainda assim, iremos detalhar ambas abordagens nas subseções seguintes, visto que a implementação do ajuste μ -BA-LDA se mantém na perspectiva futura do código, apesar de extrapolar os contornos desta dissertação.

2.3.2 Abordagem μ -BA-LDA

A μ -BA-LDA [10], formulada sob a motivação de solucionar os problemas de convergência no modelo de Hubbard repulsivo, propõe uma rota alternativa para solucionar o ciclo KS próximo à região de semipreenchimento da cadeia sem a adição de novos parâmetros. Essa rota alternativa consiste em utilizar o potencial químico por sítio do sistema homogêneo como variável independente, no lugar da densidade. Portanto, é proposto o uso da função inversa $n_i = n_i^{hom}(U, \mu_i)$, na qual a densidade é uma função do potencial químico, ao invés do potencial químico ser uma função da densidade. A vantagem dessa escolha pode ser ilustrada comparando Figura 1 e a Figura 2.

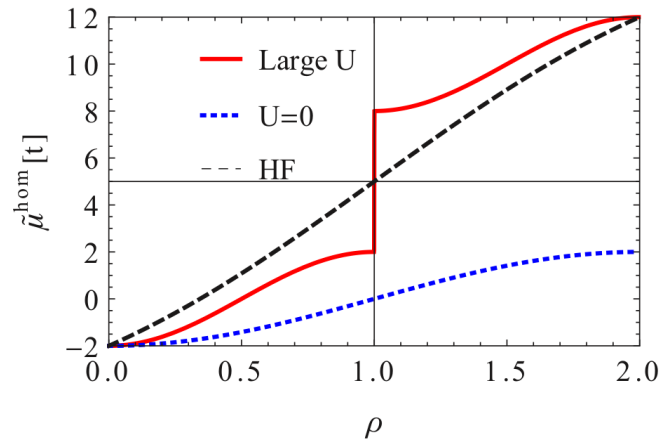


Figura 1 – Comportamento do potencial químico em função da densidade no modelo de Hubbard repulsivo. A curva mostra o comportamento não linear do potencial químico μ em relação à densidade n para um grande U repulsivo (linha vermelha). Fonte: [10], adaptada pelo autor.

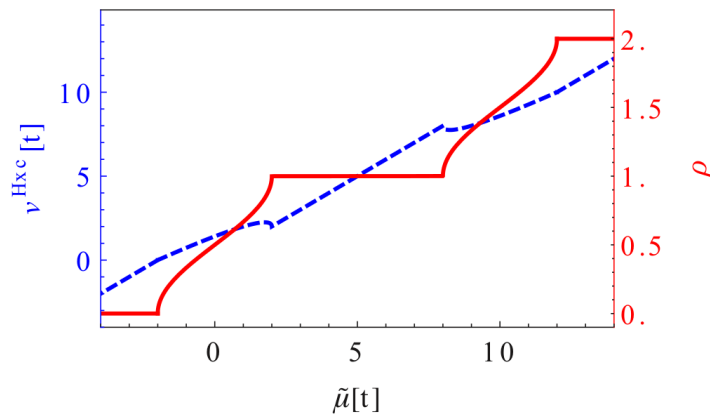


Figura 2 – Densidade e potencial de troca e correlação em função do potencial químico. Relação entre a densidade em função do potencial químico (escala vermelha, eixo direito), em conjunto com o potencial de troca e correlação (escala azul, eixo esquerdo), para o modelo de Hubbard com interação repulsiva. Fonte: [10], adaptada pelo autor.

A [Figura 1](#) ilustra o comportamento do potencial químico em função da densidade (n_i como variável independente) e a [Figura 2](#) o comportamento da densidade em função do potencial químico (μ_i como variável independente) junto do comportamento do potencial de troca e correlação em função do potencial químico, que se dá:

$$v_i^{xc}(\mu_i) = \mu_i - \mu^{hom}[0, n_i^{hom}(U, \mu_i)]. \quad (13)$$

Essa representação esquemática mostra que, no caso da [Figura 2](#), a função inversa apresenta platôs ao invés de descontinuidades na situação de semipreenchimento da cadeia ($n_i = 1$). Sendo assim, o usual potencial de troca e correlação, que é uma função descontínua da densidade ($v_i^{xc} = \mu^{hom}(U, n_i) - \mu^{hom}(0, n_i)$), passa a ser uma função contínua de μ_i . Isso porque o último termo da Equação (13) diz respeito ao potencial químico do sistema homogêneo, que não

apresenta descontinuidades, mas sim se torna constante quando a densidade é constante, levando aos platôs observados na [Figura 2](#).

Como visto na [Figura 2](#), existe mais de um valor de potencial químico local que leva ao valor de densidade igual a um. Isso é uma vantagem para a convergência dos cálculos utilizando o potencial químico local como variável independente, visto que permite trabalhar com esses valores intermediários de potencial vinculados à condição de descontinuidade da densidade, suavizando-a. Em outras palavras, é possível trabalhar com mais de um valor de potencial químico local que leva à convergência da resposta densidade igual a um, ao invés de trabalhar com um valor de densidade ($n_i = 1$) que remete a uma descontinuidade, logo, impede convergência.

Portanto, adaptar essa abordagem ao nosso sistema de interesse, com descontinuidade em $m = 0$, aparenta ser promissor. Nesse contexto, como perspectiva futura deste trabalho de mestrado, utilizaríamos o sistema minimizado via TLSDA como chute inicial do potencial químico para esta metodologia com inversão da variável independente. Voltando ao nosso recorte, detalhamos na subseção seguinte os fundamentos teóricos da metodologia TLSDA.

2.3.3 Total-energy Local Desity Approximation

Inspirada na Aproximação de Thomas-Fermi (TFA), a TLDA [\[21\]](#), [\[31\]](#) consiste em aplicar uma LDA tanto na energia cinética quanto na energia de troca e correlação, seguida de uma minimização direta do funcional da energia total. A diferença em comparação à TFA é que a energia de troca e correlação não é descartada:

$$E_{TLDA}[n_i] = T_s^{LDA}[n_i] + U_H[n_i] + E_{xc}^{LDA}[n_i] + V_{ext}. \quad (14)$$

como todos os termos em [\(14\)](#) são conhecidos, basta minimizar diretamente o sistema via multiplicadores de Lagrange sujeito aos vínculos de número de partículas constante e magnetização total constante. Parecida

Normalmente a TLSDA não é usada por si só, visto que os orbitais KS, por serem exatos, permitem um tratamento mais refinado da energia cinética do que pela via de inserir mais uma aproximação LDA [\[21\]](#). Portanto, é uma metodologia usualmente utilizada em análises preliminares, por conta de sua conveniente solução. Sendo assim, os resultados da TLSDA são costumeiramente refinados via orbitais KS ou alternativas *ab initio* em sistemas complexos.

Xianlong et. al estudaram sistemas magnetizados em regime atrativo no contexto de outro modelo teórico e obtiveram bons resultados [\[32\]](#). Os autores aplicaram TLDA aliada a métodos de parametrização para contornar a descontinuidade em $m = 0$. A TLDA mostrou resultados consistentes para a região de descontinuidade, visto que contorna o problema de convergência do ciclo KS.

Aplicada ao modelo de Hubbard unidimensional, a LDA é uma ferramenta poderosa [\[33\]](#). Como confirmado na seção de resultados, mesmo minimizando um funcional duplamente aproximado via LDA para a energia cinética e para a energia de troca e correlação, a concordância

com uma metodologia numericamente exata, a DMRG, foi maior que o esperado, balizando a metodologia desta dissertação à utilização apenas desta abordagem alternativa.

2.4 A COEXISTÊNCIA EXÓTICA ENTRE SUPERCONDUTIVIDADE E MAGNETISMO

A supercondutividade convencional, descrita pela teoria BCS [34], surge do pareamento de férmions com spins opostos que condensam em um estado com momento total nulo. No entanto, quando um forte desequilíbrio de spin é imposto ao sistema, seja por campos magnéticos intensos ou por polarização intrínseca, esse estado convencional torna-se instável. Surge então a possibilidade teórica de uma fase supercondutora radicalmente distinta: o estado Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov (FFLO) [16, 17], onde os pares de Cooper adquirem um momento finito q , permitindo a coexistência exótica entre supercondutividade e magnetização.

Sendo assim, a fase FFLO emerge como um estado de compromisso entre dois efeitos antagônicos: a energia de condensação de pares de Cooper, que favorece supercondutividade convencional com spins antiparalelos $\uparrow\downarrow$ e magnetização líquida nula; o acoplamento Zeeman, que promove alinhamento de spins com o campo magnético, gerando magnetização $M \neq 0$. Essa coexistência é possível porque o estado FFLO contorna a incompatibilidade tradicional entre supercondutividade e magnetismo através de dois mecanismos fundamentais:

- **Modulação Espacial:** a função de onda dos pares exibe variações periódicas no espaço, formando padrões onde regiões supercondutoras alternam-se com domínios magnetizados. Essa estrutura híbrida emerge como o resultado da minimização energética sob ação combinada das duas grandezas concorrentes já explicadas (a energia de condensação de pares de Cooper e o acoplamento de Zeeman).
- **Supressão de Efeitos Orbitais:** diferentemente da supercondutividade convencional, que é destruída por campos magnéticos devido às correntes orbitais induzidas (efeito Meissner), o estado FFLO é estável apenas em sistemas onde esses efeitos são minimizados - seja por confinamento dimensional (materiais quasi-2D [35]) ou pelo uso de sistemas neutros (como gases atômicos ultrafrios [36]).

A estabilização desse estado exótico requer condições específicas: campos magnéticos próximos ao limite de Pauli, sistemas com baixa dimensionalidade efetiva e amostras com alta pureza para evitar espalhamento por impurezas [37]. Esses requisitos explicam por que, apesar de prevista há mais de meio século, a observação experimental inequívoca do estado FFLO permanece um desafio.

2.4.1 Avanços recentes na caracterização da fase FFLO

Um marco decisivo na busca pela fase FFLO em sistemas de átomos ultrafrios foi o experimento realizado pelo grupo de Randall G. Hulet na Rice University, que forneceu a primeira

evidência experimental dessa fase em um gás fermiônico com população de spin desbalanceada, sob ação de confinamento em geometrias unidimensionais [38]. Nesse estudo pioneiro, Liao e colaboradores investigaram um gás de lítio-6 aprisionado em uma matriz de tubos 1D e observaram, via imagens *in situ*, a inversão do padrão de separação de fases esperado para o regime tridimensional, consistente com a formação de pares de Cooper com momento finito — assinatura da fase FFLO em 1D [38]. Em trabalhos subsequentes, o grupo de Hulet expandiu esses resultados, explorando o crossover dimensional entre 1D e 3D e mapeando diagramas de fase com maior resolução espacial [39, 40]. Esses avanços consolidaram os experimentos com átomos frios como a plataforma mais promissora para a detecção controlada da fase FFLO, ao fornecer não apenas indícios experimentais diretos, mas também ferramentas para investigar sistematicamente sua estabilidade em diferentes geometrias e regimes de interação.

Em sistemas bidimensionais, foi estudado que a amplitude de pareamento Δ na fase FFLO pode atingir valores comparáveis à energia de ligação de dois corpos, com o vetor de onda q exibindo dependência anisotrópica com os parâmetros do sistema [41]. Geometrias não convencionais, como a rede honeycomb, revelaram comportamentos novos: foram identificadas transições reentrantes onde a direção de q muda abruptamente devido a singularidades na densidade de estados [42].

Do ponto de vista experimental, avanços significativos foram alcançados com técnicas de alta precisão. Estudos de RMN de ^{13}C em supercondutores orgânicos [43] mapearam diretamente a modulação espacial da polarização de spin, enquanto medidas de anisotropia acústica em materiais 2D [44] confirmaram a existência de momento finito nos pares. Resultados complementares em dicalcogenetos de metais de transição [45] revelaram que a estabilidade da fase FFLO depende criticamente da dimensionalidade efetiva do sistema.

A natureza peculiar do transporte de corrente pela FFLO foi explorada, sugerindo a existência de múltiplas correntes críticas e a formação espontânea de paredes de domínio [46]. Em trabalhos subsequentes, foi demonstrado que a resposta magnética próximo a superfícies pode exibir efeitos contra-intuitivos como a inversão do efeito Meissner [47].

Em sistemas confinados unidimensionalmente, foi investigado como efeitos de tamanho finito podem quantizar os valores possíveis para q , levando a transições discretas entre configurações com diferentes simetrias de modulação [48]. Esses resultados são particularmente relevantes para a interpretação de experimentos com átomos ultrafrios em armadilhas ópticas, pois estabelecem uma correspondência direta entre as previsões teóricas para esses sistemas de tamanho finito e os observáveis experimentais.

2.5 EMARANHAMENTO, FASES TOPOLÓGICAS E FASES EXÓTICAS

O emaranhamento representa uma medida fundamental do grau de entrelaçamento quântico entre diferentes partes de um sistema. Em termos físicos, ele quantifica a incerteza sobre o estado local de uma sub-região quando conhecemos o estado global total, refletindo diretamente

o caráter coletivo e intrinsecamente não clássico dos estados quânticos. Em muitos sistemas de matéria condensada, o emaranhamento tem sido usado como uma ferramenta versátil para identificar transições de fase, mapear fronteiras de fase e revelar a estrutura interna de estados quânticos complexos.

Em cadeias unidimensionais descritas pelo modelo de Hubbard com interação atrativa, o emaranhamento também se destaca como um marcador robusto para fases topológicas [49] e para estados superfluídos exóticos [18]. No regime atrativo e com polarização de spin, o sistema pode hospedar a fase FFLO [16, 17], caracterizada pela coexistência de superfluidez e magnetização, na qual os pares de Fermi formam-se com momento total não nulo. França e colaboradores mostram que o emaranhamento exibe um comportamento não monotônico na fase FFLO, enquanto tende a se tornar monotônico na fase normal polarizada [18]. Essa não monotonicidade decorre do mecanismo de quebra de pares e da competição entre graus de liberdade locais, servindo, portanto, como assinatura clara da superfluidez exótica e como indicador da transição FFLO-normal.

Adicionalmente, Sanino et. al expandem a análise ao considerar cadeias de Hubbard confinadas harmonicamente em interação fortemente atrativa [49]. Nessa configuração, foi identificada uma transição de fase superfluida para um isolante topológico não trivial, caracterizado por um *bulk* isolante no centro da cadeia cercado por bordas superfluídas altamente emaranhadas. O emaranhamento local nessas regiões periféricas mostrou-se robusto contra perturbações e protegido por simetrias locais. Nesse sentido, os autores defendem essa medida como um marcador topológico confiável. A coincidência quase quantitativa entre os perfis de emaranhamento e o parâmetro de ordem supercondutor reforça essa interpretação [49].

Em síntese, a combinação dos resultados desses trabalhos evidencia o emaranhamento como uma grandeza sensível tanto às propriedades topológicas quanto à presença de fases superfluídas exóticas em sistemas unidimensionais. Além de revelar a estrutura de fases (como o isolante topológico e regimes metálicos intermediários), o perfil espacial do emaranhamento atua como um parâmetro de ordem local capaz de indicar estados protegidos e a robustez do sistema frente a variações de condições físicas. Essa perspectiva fundamenta o uso do emaranhamento como ferramenta central para a caracterização detalhada das fases no modelo de Hubbard e é nesse sentido que pretendemos mobilizá-lo no presente trabalho.

3 METODOLOGIA

Na Seção 3.1 iremos desenvolver o formalismo da TLSDA para nosso sistema de interesse, levando aos funcionais que embasaram a implementação computacional desta abordagem. Na Seção 3.2, discutiremos os detalhes metodológicos da implementação do código que minimiza o sistema alvo. Na Seção 3.3, descreveremos como foram gerados os resultados que comparam a metodologia implementada à DMRG para fins de validação. Por fim, na Seção 3.4 sintetizamos os detalhes metodológicos na forma de um fluxograma que representa a rotina geral do código produto desta pesquisa de mestrado.

3.1 TLSDA PARA SISTEMAS MAGNETIZADOS EM REGIME ATRATIVO

Nesta seção iremos desenvolver o formalismo matemático da TLSDA aplicada ao nosso sistema de interesse, que embasa a implementação dessa metodologia. Começemos com o funcional da densidade para a energia total do modelo de Hubbard Unidimensional com polarização

$$E[n] = T_s[n_\uparrow, n_\downarrow] + \sum_i V_{ext}(i)n_i + \sum_i U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + E_{xc}[n_\uparrow, n_\downarrow], \quad (1)$$

onde

T_s é a energia cinética dos férmions sem interação U ;

n_i é a densidade de férmions no sítio i (mais detalhadamente, o valor médio dessa densidade $\langle \Psi_{gnd} | \hat{n}_i | \Psi_{gnd} \rangle$ no estado fundamental $|\Psi_{gnd}\rangle$);

$\sum_i U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}$ representa a energia Hartree;

E_{xc} é a energia de troca e correlação.

Iniciamos a TLSDA aproximando os funcionais $T_s[n_\uparrow, n_\downarrow]$ e $E_{xc}[n_\uparrow, n_\downarrow]$ pelos funcionais exatos do sistema homogêneo, substituídos localmente nas densidades de spin do sistema a ser minimizado. Em outras palavras, aproximamos via *Local Spin Density Approximation* (LSDA), que é a LDA aplicada com respeito à densidade de spins, o que é necessário para estudar o sistema com magnetização

$$E_{xc}[n_\uparrow, n_\downarrow] \approx E_{xc}^{\text{LSDA}} = \sum_i \epsilon_{xc}^{\text{hom}}(n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow}), \quad (2)$$

$$T_s[n_\uparrow, n_\downarrow] \approx T_s^{\text{LSDA}} = \sum_i \tau_s^{\text{hom}}(n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow}), \quad (3)$$

onde $\epsilon_{xc}^{\text{hom}}(n_\uparrow, n_\downarrow)$ é a energia de troca e correlação do sistema homogêneo interagente (no limite termodinâmico) obtida da solução exata via Bethe-Ansatz [23, 24, 28] e $\tau_s^{\text{hom}}(n_\uparrow, n_\downarrow)$ é a energia cinética por sítio do sistema homogêneo não-interagente com densidades $n_\uparrow$ e $n_\downarrow$. Esse sistema

também é conhecido como modelo *tight-binding* e essa energia por sítio é calculada como [22]:

$$\tau_s^{\text{hom}}(n_{\uparrow}, n_{\downarrow}) = -\frac{2t}{\pi} \sin(\pi n_{\uparrow}) - \frac{2t}{\pi} \sin(\pi n_{\downarrow}). \quad (4)$$

Na TLSDA, a energia do modelo de Hubbard $E[n]$ será, portanto, aproximada por $E^{TLSDA}[n]$

$$E[n] \approx E^{TLSDA}[n] = \sum_i [\tau_s^{\text{hom}}(n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow}) + V_{\text{ext}}(i)(n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}) + U n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} + \epsilon_{xc}^{\text{hom}}(n_{i,\uparrow}, n_{i,\downarrow})]. \quad (5)$$

onde $V_{\text{ext}}(i)$ é o potencial externo aplicado à cadeia de i sítios. Queremos minimizar esse funcional sujeito aos vínculos de conservação de número de partículas por spin:

$$\sum_i n_{i,\uparrow} = N_{\uparrow} \quad \text{e} \quad \sum_i n_{i,\downarrow} = N_{\downarrow}. \quad (6)$$

Para isso, utilizamos o método dos multiplicadores de Lagrange por meio do qual construímos a seguinte função:

$$\mathcal{L} = E^{TLSDA} - \mu_{\uparrow} \sum_i n_{i,\uparrow} - \mu_{\downarrow} \sum_i n_{i,\downarrow}, \quad (7)$$

onde $\mu_{\uparrow}$ e $\mu_{\downarrow}$ são os multiplicadores de Lagrange associados a cada tipo de férmion e, fisicamente, interpretados como os potenciais químicos correspondentes. No ponto de mínimo, temos as seguintes condições de otimalidade:

$$\frac{\partial E^{TLSDA}}{\partial n_{i,\sigma}} = \mu_{\sigma}, \quad \text{com } \sigma = \uparrow, \downarrow. \quad (8)$$

Para facilitar a análise e interpretação física, reescrevemos em termos das variáveis densidade local n_i e magnetização local m_i , definidas como

$$n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}, \quad m_i = n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow}. \quad (9)$$

Com isso, os vínculos globais são reescritos em função da densidade total N e magnetização total M :

$$\sum_i n_i = N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}, \quad \sum_i m_i = M = N_{\uparrow} - N_{\downarrow}. \quad (10)$$

Para reescrever (7) em termos dessas novas variáveis, fazemos uma transformação linear dos multiplicadores:

$$\mu = \frac{\mu_{\uparrow} + \mu_{\downarrow}}{2}, \quad b = \frac{\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}}{2}. \quad (11)$$

Com essa mudança, a parte dos vínculos de (7)

$$\mu_{\uparrow} n_{i,\uparrow} + \mu_{\downarrow} n_{i,\downarrow} \quad (12)$$

é reescrita como

$$\mu n_i + b m_i, \quad (13)$$

permitindo expressar a equação de minimização como

$$\mathcal{L} = E^{TLSDA} - \mu \sum_i n_i - b \sum_i m_i = E^{TF} - \mu N - b M. \quad (14)$$

No ponto de mínimo, as condições de otimalidade agora tomam a forma:

$$\frac{\partial E^{TLSDA}}{\partial n_i} = \mu, \quad \frac{\partial E^{TLSDA}}{\partial m_i} = b. \quad (15)$$

Isso mostra que μ é a derivada da energia em relação à densidade total local n_i , enquanto b é a derivada da energia em relação à magnetização local m_i , justificando a interpretação física desses multiplicadores de Lagrange como potencial químico e campo magnético, respectivamente. Resolvendo (15), temos:

$$G(n_i, m_i) = \mu - V_{\text{ext}}(i), \quad (16)$$

$$H(n_i, m_i) = b, \quad (17)$$

onde

$$G(n, m) = -2t \cos\left(\frac{\pi n}{2}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{2}\right) + \frac{U}{2}n + \frac{V_{\text{xc},\uparrow}^{\text{hom}}(n, m) + V_{\text{xc},\downarrow}^{\text{hom}}(n, m)}{2}, \quad (18)$$

$$H(n, m) = 2t \sin\left(\frac{\pi n}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{2}\right) - \frac{U}{2}m + \frac{V_{\text{xc},\uparrow}^{\text{hom}}(n, m) - V_{\text{xc},\downarrow}^{\text{hom}}(n, m)}{2}. \quad (19)$$

Enquanto cada uma das variáveis $n_{\uparrow}$ e $n_{\downarrow}$ é definida no intervalo $[0, 1]$, a variável densidade n é definida no intervalo $[0, 2]$. Para um dado valor da densidade n , a variável magnetização m assumirá valores no intervalo

$$[-n, n], \quad \text{se } n \leq 1, \quad (20)$$

ou no intervalo

$$[-(2 - n), 2 - n], \quad \text{se } n > 1. \quad (21)$$

Na Figura 3 são ilustrados os domínios equivalentes antes e após a troca das variáveis.

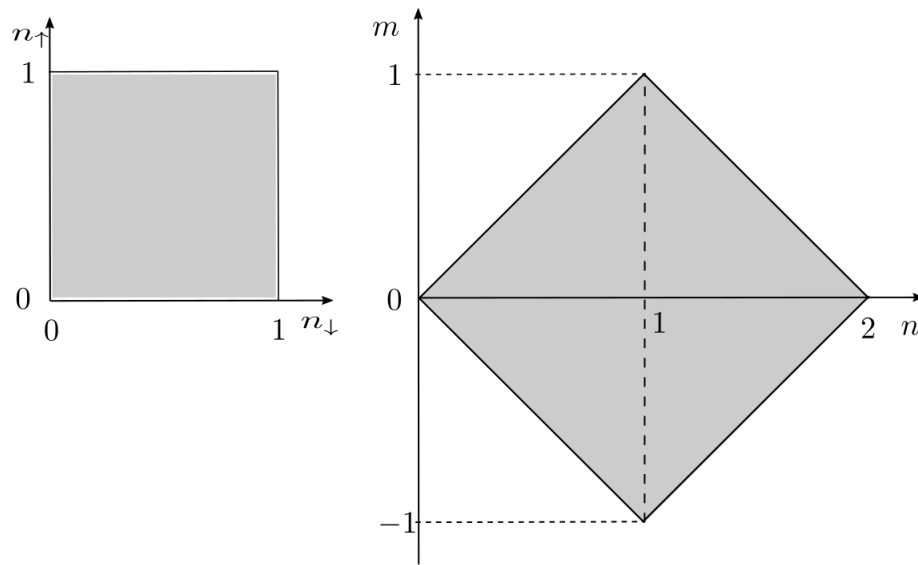


Figura 3 – Domínios nas variáveis $(n_{\uparrow}, n_{\downarrow})$ e (n, m) . Comparação entre os domínios possíveis das soluções na base $(n_{\uparrow}, n_{\downarrow})$ (esquerda) e na base transformada (n, m) (direita).
Fonte: Elaborado pelo autor.

Na [Figura 4](#) podemos ver a superfície da função G para $U = -4$ e na [Figura 5](#) a superfície da função H para esse mesmo U .

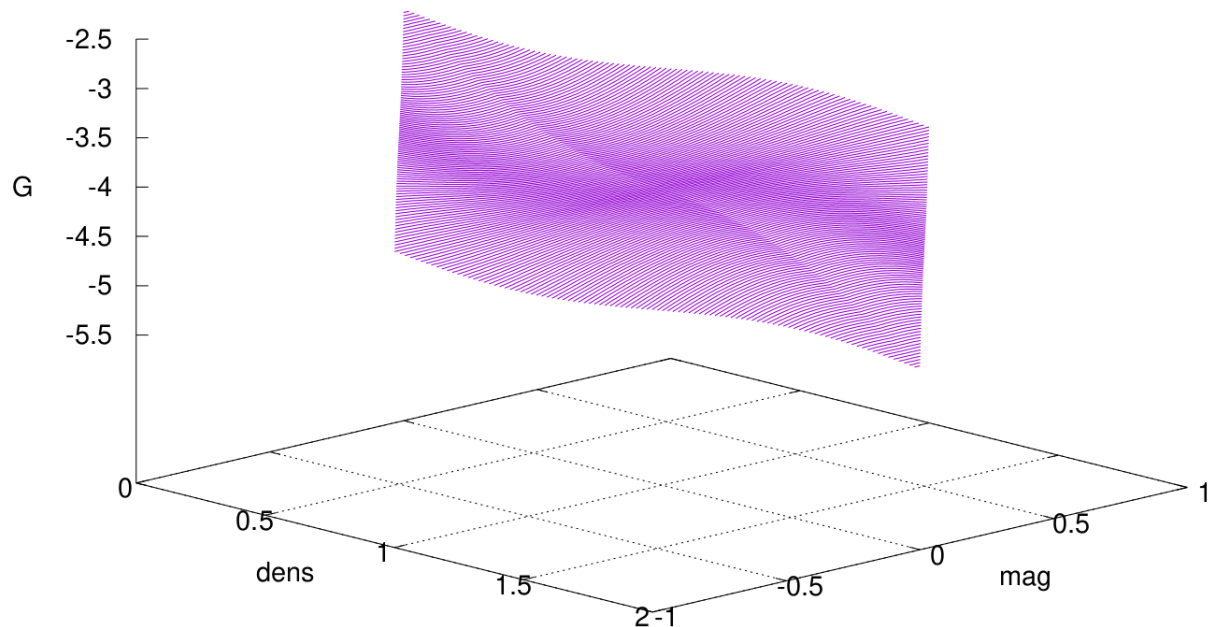


Figura 4 – Superfície da função $G(n, m)$ para $U = -4$. Superfície tridimensional da função $G(n, m)$ para $U = -4$, evidenciando a variação da energia em função da densidade e a magnetização. Fonte: Elaborado pelo autor.

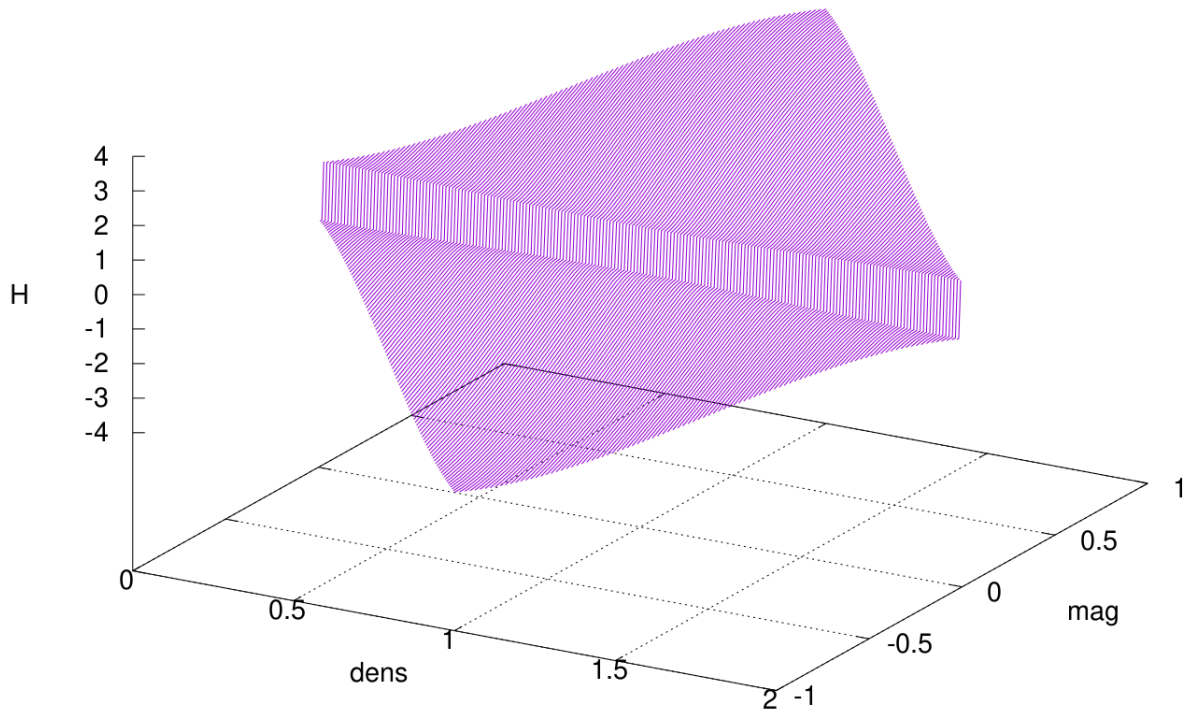


Figura 5 – Superfície da função $H(n, m)$ para $U = -4$. Superfície tridimensional da função $H(n, m)$ para $U = -4$, representando o comportamento do campo magnético em função da densidade e da magnetização. Fonte: Elaborado pelo autor.

A partir do *input* do potencial químico μ e do campo magnético b , as equações (16) e (17) permitem calcular as densidades n_i e as magnetizações m_i de cada sítio. A solução que determina o ponto (n_i, m_i) é a interseção entre as curvas de nível $G(n_i, m_i) = \mu - V_{\text{ext}}(i)$ (Figura 6) e $H(n_i, m_i) = b$ (Figura 7).

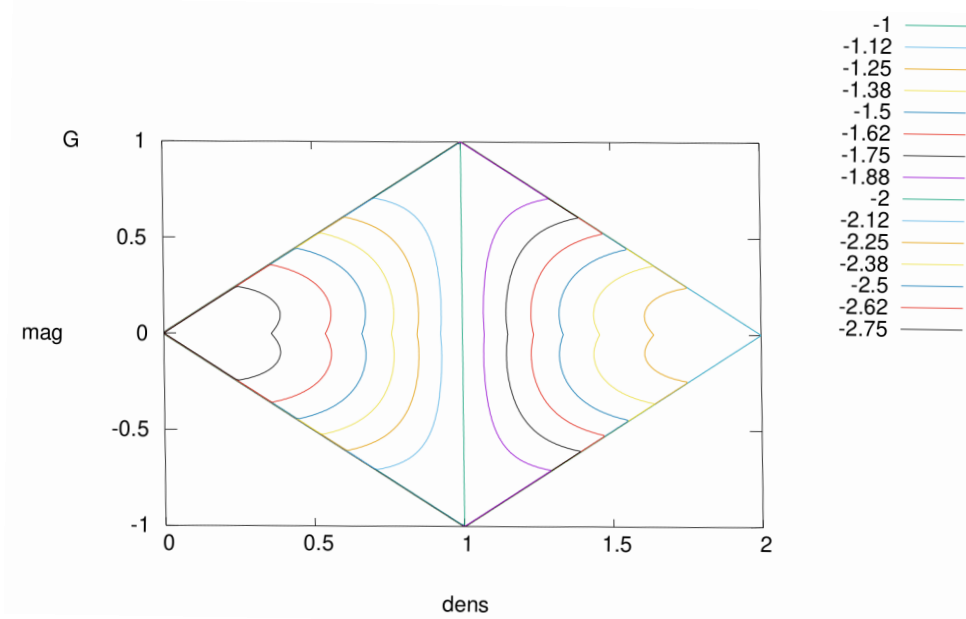
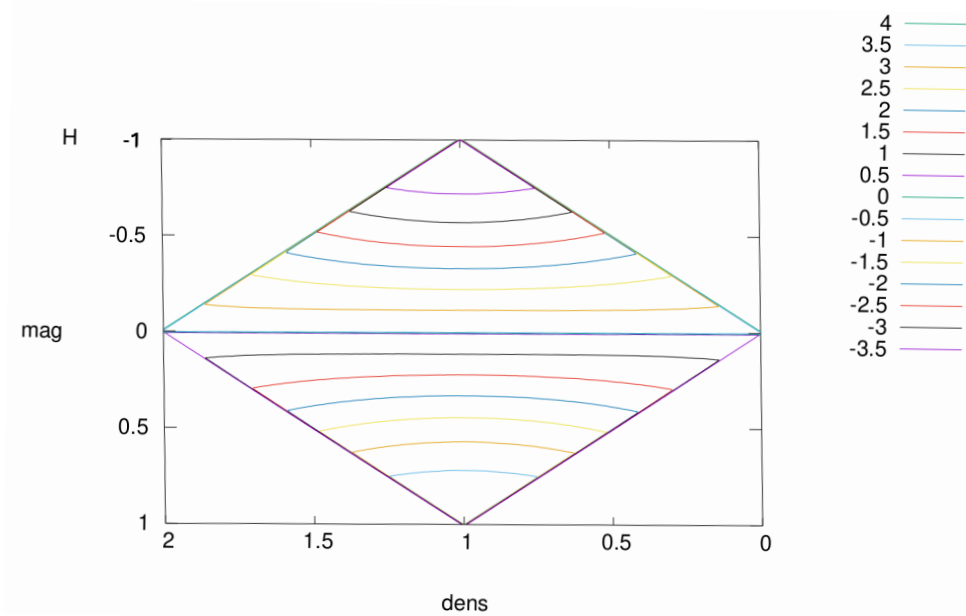


Figura 6 – Curvas de nível $G(n_i, m_i) = \mu - V_{\text{ext}}(i)$ para $U = -4$. Curvas de nível da função $G(n, m)$ sobre o plano de densidade (eixo horizontal, *dens*) e magnetização (eixo vertical, *mag*), para $U = -4$. Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 7 – Curvas de nível $H(n, m)$ para $U = -4$



Fonte: Elaborado pelo autor.

Legenda: Curvas de nível da função $H(n, m)$ sobre o plano de densidade (eixo horizontal, *dens*) e magnetização (eixo vertical, *mag*) para interação $U = -4$.

Após determinar (n_i, m_i) para todos os sítios, dados o potencial químico e o campo magnético, checamos se os vínculos em (10) foram satisfeitos somando as grandezas locais de todos os sítios. Tipicamente os vínculos não são satisfeitos, levando a um ajuste nos *inputs* por algum método numérico iterativo que irá refinar o resultado dentro de uma certa tolerância. Essa é a

modelagem do cálculo auto-consistente da TLSDA para nosso sistema em particular. Os detalhes numéricos da implementação serão discutidos na Seção [3.2](#).

3.2 IMPLEMENTAÇÃO

Nesta seção, descrevemos a implementação do código baseado na TLSDA para o modelo de Hubbard unidimensional atrativo com magnetização. O código foi desenvolvido em linguagem C++ pela familiaridade prática e não necessariamente por critérios específicos de engenharia de *software*, visto que os autores não possuem formação em ciência da computação. O foco foi, portanto, na funcionalidade e eficiência no contexto metodológico físico. Ainda assim, a estrutura do programa é modular, separando as rotinas responsáveis pelo cálculo local das densidades e magnetizações, pelo ajuste global dos multiplicadores de Lagrange e checagem dos vínculos e demais rotinas preparatórias, como cálculo de segundas derivadas.

A função principal do código percorre todos os sítios da cadeia e determina, em cada um deles, o ponto de interseção (n_i, m_i) respectivo a valores de G e H que, na primeira iteração, são determinados pelo chute inicial do potencial químico da cadeia μ (mapeado por G) e do campo magnético b (mapeado por H). Após determinar os pares (n_i, m_i) em todos os sítios, as densidades e magnetizações locais são somadas para obter os totais $N = \sum_i n_i$ e $M = \sum_i m_i$. Em seguida, os parâmetros globais μ e b são atualizados iterativamente por uma função auxiliar e este ciclo se repete até que os vínculos de número total de partículas (dependente de μ) e magnetização (dependente de b) sejam satisfeitos com a precisão numérica estipulada, ou seja,

$$\sum_i n_i = N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}, \quad \sum_i m_i = M = N_{\uparrow} - N_{\downarrow}. \quad (22)$$

Os valores de $N_{\uparrow}$ e $N_{\downarrow}$ são fornecidos como entrada do usuário, juntamente com o restante dos parâmetros do problema físico a ser minimizado: o parâmetro de interação U , o comprimento da cadeia L e a forma do potencial externo $V_{\text{ext}}(i)$. Portanto, a checagem dos vínculos globais equivale a verificar se os valores de μ e b utilizados para determinar as soluções locais (n_i, m_i) efetivamente correspondem ao sistema físico desejado. A resolução do problema autoconsistente é feita por métodos numéricos como a bisseção e a interpolação por *Spline* cúbica, aplicados na localização precisa dos pontos (n_i, m_i) em cada sítio da cadeia e no ajuste numérico dos valores de μ e b .

Na subseção [3.2.1](#) descreveremos os detalhes metodológicos da solução exata deste sistema; na [3.2.2](#) apresentamos o trabalho numérico implementado para encontrar a interseção das curvas de nível de G e H , ou seja, encontrar os pares (n_i, m_i) a partir de valores de G e H ; por fim em [3.2.3](#)

3.2.1 LSDA para o modelo de Hubbard unidimensional atrativo com magnetização

Como discutido na Seção [3.1](#), a base da implementação TLSDA é a solução exata do sistema homogêneo no limite termodinâmico. As equações integrais de Lieb-Wu são não-

lineares e acopladas, o que torna impossível obter soluções analíticas. Por isso, a resolução prática dessas equações é feita numericamente, em uma malha discreta de pontos. Sendo assim, foram geradas tabelas com a malha discreta da solução exata do modelo de Hubbard unidimensional magnetizado para diferentes valores de $U < 0$. Para isso, foi utilizado um código já existente implementado pelo coorientador deste mestrado, que resolve numericamente as equações integrais acopladas de Lieb-Wu [23, 28]. Elas descrevem as densidades espectrais de quasimomento $\rho(k)$ e de parâmetro rápido $\sigma(\Lambda)$ no limite termodinâmico. As equações são obtidas a partir da solução do Ansatz de Bethe [50] para N elétrons (com M spins para baixo) distribuídos em L sítios. No limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$), as somas sobre os quasimomentos e parâmetros rápidos tornam-se integrais:

$$\rho(k) = \frac{1}{2\pi} + \cos k \int_{-B}^B a_2(\sin k - \Lambda) \sigma(\Lambda) d\Lambda, \quad (23)$$

$$\sigma(\Lambda) = \int_{-Q}^Q a_2(\Lambda - \sin k) \rho(k) dk - \int_{-B}^B a_1(\Lambda - \Lambda') \sigma(\Lambda') d\Lambda', \quad (24)$$

onde

$$a_n = \frac{1}{2\pi} \frac{U/n}{(U/2n)^2 + x^2}, \quad (25)$$

sendo U o parâmetro de interação e Q e B os limites de integração determinados pelas condições de preenchimento e magnetização. Essas equações formam um sistema de equações integrais acopladas para $\rho(k)$ e $\sigma(\Lambda)$, cuja solução permite determinar as densidades e magnetizações do sistema homogêneo. A resolução numérica utilizada consiste em substituir a equação para $\rho(k)$ na equação para $\sigma(\Lambda)$ e ficar com uma única equação integral. A resolução dessa integral é aproximada utilizando quadraturas gaussianas baseadas em polinômios de Legendre.

Nossos arquivos de saída desta solução exata, os quais nomeamos de tabelas LSDA, contêm uma malha discreta de pontos da solução com duzentas magnetizações e, para cada magnetização, duzentas e duas densidades, assim como valores das funções G e H aproximadas via LSDA para cada densidade e magnetização de acordo com (16) e (17), respectivamente. Descrevemos a tabela da solução exata a título ilustrativo e complementamos: a função que lê os dados da solução exata é capaz de ler tabelas com mais ou menos pontos, desde que escritas no formato que atenda à lógica de leitura.

Devido às simetrias da solução homogênea do modelo de Hubbard no plano das variáveis conjugadas (G, H) , podemos restringir a busca numérica pelo ponto (n_i, m_i) a uma única região do domínio $(G, H) \in [0, U/2] \times [0, 1]$, correspondente ao primeiro quadrante. Portanto, a malha de pontos gerada nas tabelas LSDA é restrita ao primeiro quadrante da solução. Subdividimos os quadrantes da solução de acordo com a numeração apresentada na ??

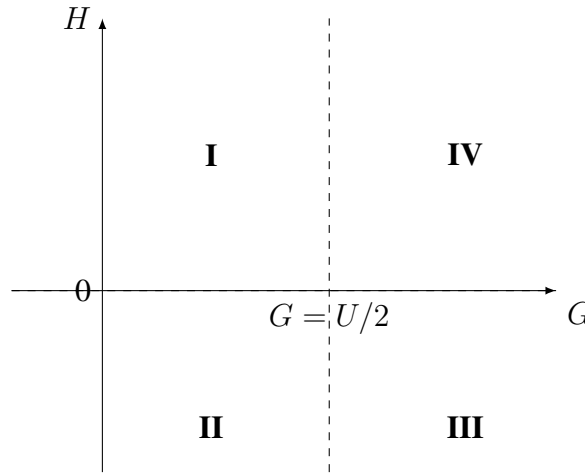


Figura 8 – Divisão da solução em quadrantes. Representação dos quadrantes do plano (G, H) onde se encontram os pontos da solução. A divisão é feita com base na simetria da solução exata em torno da linha $G = U/2$ e do eixo $H = 0$. Fonte: Elaborado pelo autor.

Sendo assim, o código identifica, com base nos sinais de entrada (g, h) , o quadrante original em que o ponto se encontra e realiza uma transformação apropriada das variáveis, utilizando a simetria da solução para refletir os dados no domínio reduzido. Essa transformação é detalhada na subseção 3.2.2. Após a determinação do ponto correspondente no primeiro quadrante, aplica-se a operação inversa para recuperar os valores corretos de (n_i, m_i) no quadrante original. Essa abordagem reduz o custo computacional dos cálculos, pois evita redundância de busca em regiões simetricamente equivalentes.

Discutidos os detalhes da solução exata, queremos uma função que itere sobre todos os sítios e determine o ponto de interseção (n_i, m_i) de cada sítio, ou seja, as densidades e magnetizações locais respectivas a valores de G e H . Vamos detalhar o trabalho numérico desta função na subseção 3.2.2.

3.2.2 (n_i, m_i) a partir de G e H

O problema está resolvido nas tabelas LSDA, uma vez que essas fornecem os valores aproximados via LSDA de G e H para uma malha discreta de pontos do primeiro quadrante do domínio da solução homogênea. Entretanto, durante o processo de minimização, os valores de G e H obtidos a partir de μ e b podem situar-se em qualquer quadrante do plano (G, H) , inclusive fora da malha pré-tabularizada. Para contornar essa limitação, implementamos a função `dens_mag_from_g_h`, que é responsável por iterar sobre todos os sítios da cadeia e determinar o ponto local (n_i, m_i) correspondente aos valores de entrada (g, h) (utilizaremos $G = g$ e $H = h$ para nos referirmos aos valores de G e H que entram na função `dens_mag_from_g_h` e determinam um par de (n, m) correspondente a eles).

Na primeira iteração do código, partimos de valores iniciais $\mu = U/2$ e $b = 0$ (chutes iniciais), centrados no domínio da solução. Com isso, obtemos o primeiro conjunto de densidades

e magnetizações locais. Esses valores são então ajustados iterativamente por outra função, discutida na subseção 3.2.3, por meio de um ciclo autoconsistente, até que os vínculos globais de partícula e magnetização definidos na Equação (10) sejam satisfeitos com a precisão desejada.

Durante esse ajuste, o par (g, h) percorre diferentes regiões do plano, sendo necessário identificar, a cada passo, o quadrante ao qual pertence e aplicar uma transformação de simetria que os leve ao primeiro quadrante. Após a interpolação no primeiro quadrante e determinação de (n_i, m_i) , aplicamos a transformação inversa, transportando os valores, agora de densidade e magnetização, ao quadrante original da entrada de g e h . O Quadro 1 resume as transformações aplicadas, tanto na ida (ajuste para o primeiro quadrante), quanto na volta (restauração para o quadrante original):

Quadrante	Condições de entrada	Transformação para o 1º quadrante	Transformação de volta
I	$h \geq 0, g \leq U/2$	Nenhuma	Nenhuma
II	$h < 0, g \leq U/2$	$h \mapsto -h$	$m \mapsto -m$
III	$h < 0, g > U/2$	$h \mapsto -h, g \mapsto U - g$	$m \mapsto -m, n \mapsto 2 - n$
IV	$h \geq 0, g > U/2$	$g \mapsto U - g$	$n \mapsto 2 - n$

Quadro 1 – Transformações entre quadrantes no plano (G, H) e suas inversas. Fonte: Elaborado pelo autor.

Daremos um panorama do domínio da função com auxílio da Figura 9 para explicar com clareza o trabalho numérico feito.

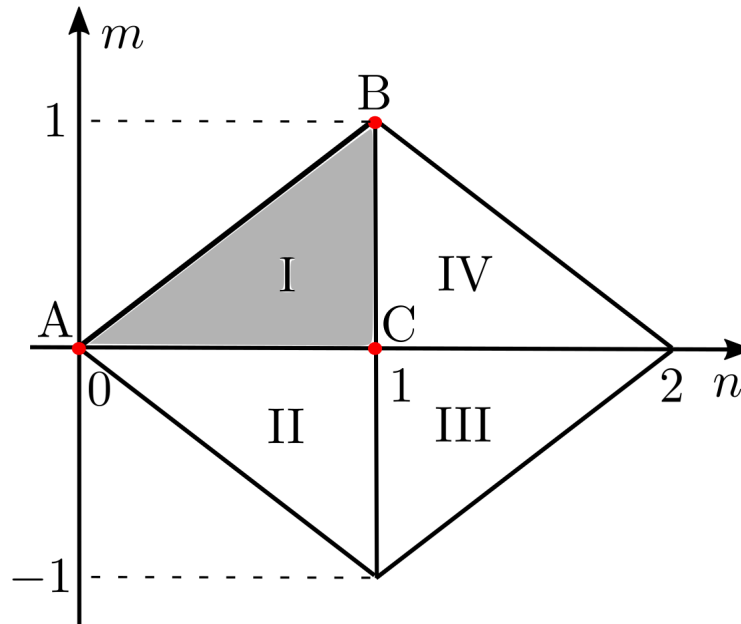


Figura 9 – Domínio balizado pelos pontos A, B e C. Ilustração do domínio da malha da solução exata, com destaque em vermelho para os pontos de extremo A, B e C. Fonte: Elaborado pelo autor.

Em relação à Figura 9, temos:

Ao longo da diagonal AB, $n = m$ (isto é, $n_{\downarrow} = 0$, sistema totalmente polarizado), e vale a relação:

$$G(n, n) + H(n, n) = -2 \cos(\pi n). \quad (26)$$

Ou seja, os termos de interação desaparecem, pois no modelo de Hubbard a interação ocorre apenas entre férmions de spins opostos, logo, no mesmo sítio.

Ao longo da vertical CB, temos densidade constante $n = 1$, com:

$$G(1, m) = \frac{U}{2}, \quad 0 \leq m \leq 1. \quad (27)$$

Em particular, no ponto B (que pertence simultaneamente à diagonal AB e à vertical CB), temos:

$$H(1, 1) = 2 - \frac{U}{2}. \quad (28)$$

Ao longo da horizontal AC, convencionamos que a magnetização seja infinitesimalmente positiva, ou seja, estamos nos aproximando da reta AC pelo limite $m \rightarrow 0^+$. Para um dado valor de densidade n nesta borda inferior da malha, temos:

$$\lim_{m \rightarrow 0^+} H(n, m) = h_{\min}(n) > 0. \quad (29)$$

Com $U < 0$, se tivermos uma cadeia homogênea com densidade n e magnetização nula, então, para introduzirmos qualquer valor positivo de magnetização, por menor que seja, será necessário um campo magnético externo $H > h_{\min}(n)$. Esse comportamento se deve à interação atrativa entre férmions de spins opostos, a qual torna energeticamente desfavorável a quebra de pares de spins antialinhados enquanto o campo magnético não for suficientemente forte.

Os valores de $h_{\min}(n)$ ao longo da reta AC são exatamente os valores de H listados na tabela LSDA correspondentes à menor magnetização da malha. Por exemplo, no arquivo referente a $U = -4.0$, esses valores de H correspondem à magnetização $m = 3.89999144090325 \times 10^{-12}$, valor pequeno o suficiente para representar numericamente o limite $m \rightarrow 0^+$.

Estabelecido esse panorama geral, organizamos agora a tarefa de encontrar o ponto (n, m) no primeiro quadrante da malha dado um par $(G = g, H = h)$. O primeiro passo é verificar se o potencial químico provindo de g não é pequeno demais.

Ao buscar as densidades e magnetizações locais (n_i, m_i) a partir de (g, h) é possível que, em algumas situações, g seja menor que o menor valor disponível na malha da tabela LSDA. Isso significa que temos um potencial químico muito baixo, logo, só popularemos o sistema se o campo magnético for suficientemente alto para tornar isso favorável. Sendo assim, só será possível incluir férmions alinhados ao campo, ou seja, com spin para cima. Portanto, estamos discutindo o sistema que é descrito por $G(n, n) + H(n, n) = -2 \cos(\pi n)$ e para tratar esses casos implementaremos soluções analíticas. Como $\cos(\pi n) \in [-1, 1]$, os valores extremos são dados por $G + H = 2$ para $n = 1$, e $G + H = -2$ para $n = 0$.

Assim, para $g \leq G_{\min}$, onde $G_{\min}$ é o menor valor da tabela LSDA, temos três cenários baseados no valor de $g + h$:

- Se $g + h < -2$, não é energeticamente favorável adicionar partículas ao sistema, e a solução física é $n_i = m_i = 0$;

- Para $|g + h| \leq 2$, apesar do baixo potencial químico, o campo magnético foi grande o suficiente ao ponto de ser favorável acrescentar férmions na cadeia totalmente polarizada. Como teremos apenas férmions de spin up, $n_i = m_i$ e a solução analítica é dada por

$$n = m = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \left(-\frac{G + H}{2} \right) \quad (30)$$

- Se $g + h > 2$, o campo magnético ficou alto o suficiente a ponto de tornar o sistema totalmente saturado com spins alinhados ao campo, portanto $n_i = m_i = 1$;

Essa extrapolação garante consistência física para eventuais valores de g muito pequenos, evitando erros de interpolação. No **Quadro 2** resumizamos as soluções analíticas implementadas para valores de $g < G_{\min}$.

Condição	Região física	Solução
$g + h < -2$	Sistema vazio	$n = m = 0$
$ g + h \leq 2$	Sistema insaturado polarizado	$n = m = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \left(-\frac{g+h}{2} \right)$
$g + h > 2$	Saturação total	$n = m = 1$

Quadro 2 – Soluções analíticas para valores de $g < G_{\min}$. Fonte: Elaborado pelo autor.

Checada a condição $g < G_{\min}$, o código determina os valores locais de densidade n_i e magnetização m_i resolvendo numericamente a condição de interseção das curvas de nível $G(n, m) = g$ e $H(n, m) = h$. O procedimento a seguir descreve a rotina aplicada no primeiro quadrante da solução, com os pares (g, h) já mapeados para a região $[0, U/2] \times [0, 1]$, onde se encontra a malha tabulada da solução exata via LSDA. Portanto, para valores dentro da faixa $G_{\min} < g \leq U/2$, o código executa os seguintes passos:

1. Determinamos o ponto P ao longo da diagonal AB , como ilustrado na **Figura 10**, tal que $G(n, n) = G(P) = g$. Para isso, identificamos um intervalo dos pontos discretos da diagonal no qual g está inserido. A magnetização (que é igual à densidade) neste ponto é então determinada bisseccionando esse intervalo com o método da bisseção [51] até atingir uma tolerância de 10^{-11} . Essa tolerância é utilizada em todas as chamadas do código que usam o método da bisseção. O valor de $H(P)$ é então obtido por interpolação via *Spline* cúbica [51], determinando o valor de H correspondente a $m(P)$.

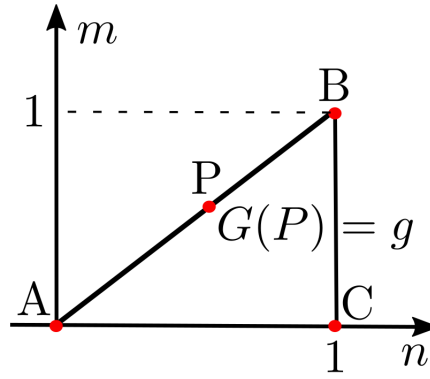


Figura 10 – Ponto P na diagonal da malha $G(n, n) = g$ com $n = m$. Figura esquemática do problema numérico. Fonte: Elaborado pelo autor.

2. Avaliamos então o valor do campo magnético de entrada h em relação a $H(P)$:

- Caso $h > H(P)$: o campo magnético é suficientemente alto para polarizar totalmente o sistema, e as curvas $G = g$ e $H = h$ possivelmente nem se cruzam no domínio da solução. Assim, a solução está sobre a diagonal e é dada analiticamente por:

$$n = m = \frac{1}{\pi} \cos^{-1} \left(-\frac{g + h}{2} \right), \quad (31)$$

ou, se $g + h > 2$ (situação de saturação total),

$$n = m = 1. \quad (32)$$

3. Caso $h \leq H(P)$, prosseguimos com a reconstrução numérica da curva $G(n, m) = g$ para encontrar a interseção com a curva $H(n, m) = h$:

- O código varre os valores de magnetização m abaixo de $m(P)$, isto é, $m < m(P)$, e para cada valor calcula a densidade n tal que $G(n, m) = g$, por meio de bisseção. Esses pares (n, m) constroem uma curva de nível de G fixa. O valor de H também é interpolado via *Spline* cúbica para todas essas densidades provindas de $G(n, m) = g$. Ou seja, temos um vetor de densidades que satisfazem $G(n, m) = g$, que vamos chamar de `dens_from_g` e um vetor de valores de H interpolados para essas densidades, que vamos chamar de `h_from_g`.
- O ponto Q é então definido como o ponto dessa curva correspondente a $m \rightarrow 0^+$, ou seja, sobre a linha inferior da malha (linha AC da Figura 10). Assim como foi feito para o resto da curva, a densidade foi determinada via bisseção para g e o valor $H(Q)$ interpolado via *Spline* cúbica nessa mesma densidade $n(Q)$.
- Avalia-se então o valor de h em relação a $H(Q)$:
 - Caso $h \leq H(Q)$: o campo magnético ainda não é forte o suficiente para induzir magnetização. Assim, a solução física será:

$$m = 0, \quad n = n(Q), \quad (33)$$

onde $n(Q)$ é a densidade no ponto Q , determinada por bisseção para o valor de g dentro de um vetor de densidades correspondente a esta linha de magnetização (menor valor de magnetização tabelado).

- Caso intermediário $H(Q) < h < H(P)$: a solução pertence ao interior do domínio. Ou seja, teremos o cruzamento das curvas de nível. Para encontrar esse cruzamento, realizamos uma bisseção sobre os valores de H interpolados nas densidades que percorrem curva $G = g$ construída anteriormente (vetor `h_from_g`), para encontrar a magnetização do ponto X tal que $H(n_X, m_X) = h$. Ilustramos a curva numérica levantada e o ponto X na [Figura 11](#). A magnetização da solução m_X é obtida e, com esse valor, a densidade da solução n_X é encontrada interpolando o valor dentro de `dens_from_g` que corresponda a m_X . Assim, garantimos:

$$G(n_X, m_X) = g, \quad H(n_X, m_X) = h. \quad (34)$$

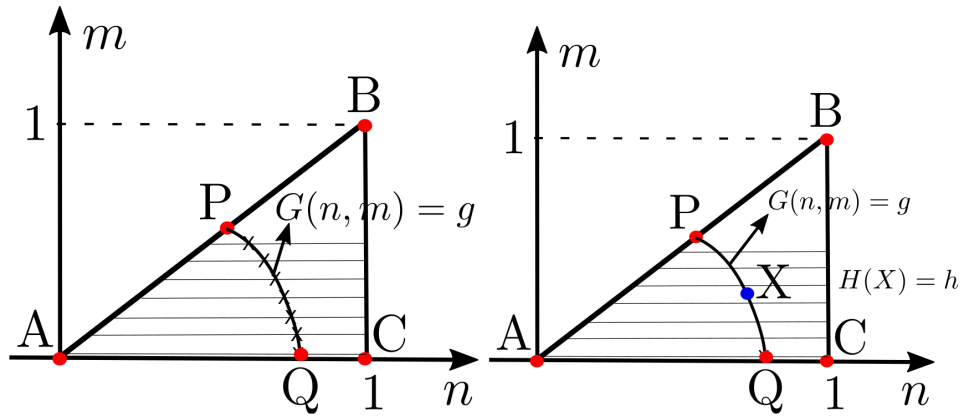


Figura 11 – Curva numérica levantada $G = g$ e ponto X de interseção. Figuras esquemáticas do problema numérico: à esquerda, curva numérica obtida a partir de $G = g$. À direita, ponto X que satisfaz $G(n, m) = g$ e $H(n, m) = h$ simultaneamente. Fonte: Elaborado pelo autor.

4. Finalmente, caso os valores de entrada (g, h) estivessem fora do primeiro quadrante, a rotina inicial já os mapeou para essa região por simetria. Ao final, essas transformações são revertidas, restaurando os valores físicos originais de (n, m) no quadrante correspondente.

Esse procedimento garante que, mesmo com malha discreta, o código seja capaz de determinar com precisão qualquer valor de densidade e magnetização locais. A implementação faz uso das funções auxiliares `bissecao`, que implementa o método da bisseção; `spline3`, que implementa a interpolação via *Spline* cúbica e `gera_dy2_alternativa`, que gera segundas derivadas, permitindo cálculos robustos em diferentes pontos do espaço de parâmetros.

Em síntese, a função `dens_mag_from_g_h` desempenha papel central na aplicação do funcional TLSDA, pois mapeia as densidades e magnetizações para qualquer valor de (g, h) .

Ao conjugar transformações de simetria, extrapolações analíticas fundamentadas fisicamente e técnicas numéricas de interpolação e bisseção, essa rotina assegura a generalização da solução exata tabulada. Essa versatilidade é essencial para o refinamento e convergência do método autoconsistente aplicado à cadeia inhomogênea. Na subseção 3.2.3, detalharemos o ciclo autoconsistente que ajusta (g, h) até satisfação dos vínculos.

3.2.3 Determinação autoconsistente de n_i e m_i : função TLSDA

A função TLSDA implementa a rotina de obtenção autocogerente das densidades e magnetizações locais $\{n_i\}$ e $\{m_i\}$, para uma cadeia com N_s sítios, a partir dos parâmetros de entrada $U, N_\uparrow, N_\downarrow$ e tipo de potencial externo. Seu objetivo principal é ajustar os valores do potencial químico μ e do campo magnético b que reproduzam os vínculos globais dentro de uma tolerância numérica:

$$\sum_{i=1}^{N_s} n_i = N_\uparrow + N_\downarrow, \quad \sum_{i=1}^{N_s} m_i = N_\uparrow - N_\downarrow. \quad (35)$$

Determinamos uma tolerância de 10^{-7} para o ajuste de μ e b . Valor que, na prática, mostrou ser balanço ótimo entre convergência e precisão dos resultados.

1. Chute inicial centrado no domínio: A rotina inicia com o chute centrado no domínio da solução, adotando $\mu = U/2$ e $b = 0$. Isso centraliza o ponto de partida, ou seja, é um ponto de distância intermediária para qualquer ajuste dentro do domínio, o que otimiza a convergência. A função auxiliar `loop_sitios` é então chamada para calcular n_i e m_i em cada sítio a partir dos valores de entrada ($g_i = \mu - V_{\text{ext}}(i)$, $h_i = b$) usando a função `dens_mag_from_g_h`, discutida na subseção 3.2.2.

2. Ajuste inicial do potencial químico μ : Caso o vínculo de número de partículas não seja atendido por meio do chute inicial, inicia-se um ajuste de μ via bisseção pela função `ajuste_mi`. Primeiro, a função determina o intervalo no qual a quantidade total de partículas n_{tot} cruza o valor alvo N_e , incrementando ou decrementando μ de um em um até n_{tot} ultrapassar o alvo no sentido positivo ou negativo. Em seguida, aplica o método da bisseção para bisseccionar esse intervalo até encontrar o valor de μ que satisfaz $n_{\text{tot}} = N_e$ dentro da tolerância especificada.

3. Ajuste do campo magnético b : Após encontrar um valor de μ que satisfaz o vínculo de densidade para $b = 0$, o código verifica se o vínculo de magnetização é também satisfeito. Caso contrário, inicia-se o ajuste do campo magnético:

- Inicialmente, o código busca um intervalo onde o sinal de $(m_{\text{tot}} - M)$ muda, isto é, onde m_{tot} cruza o valor alvo da magnetização total $M = N_\uparrow - N_\downarrow$. Para isso, incrementa ou decrementa b de forma iterativa, recalculando a solução autoconsistente de μ para cada novo valor de b , ou seja, chamando a função `ajuste_mi` para cada novo valor de b .
- Uma vez encontrado o intervalo adequado, é realizada uma bisseção sobre b para satisfazer o vínculo $m_{\text{tot}} = M$. **Importante:** a cada iteração da bisseção de b , o código realiza internamente uma nova bisseção em μ , via `ajuste_mi`, para garantir que $n_{\text{tot}} = N_e$

continue sendo satisfeito. Assim, temos um procedimento de bisseção aninhada (bisseção dentro de bisseção), essencial para garantir consistência de ambos os vínculos físicos.

4. Cálculo da energia e entropia de von Neumann: Dentro desta mesma função também são implementados os cálculos da energia por sítio, energia total e entropia de von Neumann por sítio. Com as soluções $\{n_i\}$ e $\{m_i\}$ obtidas, o código calcula a energia por sítio e a energia total utilizando:

$$E_i = -\frac{2}{\pi} \sin(\pi n_{\uparrow,i}) - \frac{2}{\pi} \sin(\pi n_{\downarrow,i}) + U n_{\uparrow,i} n_{\downarrow,i} + V_{\text{ext}}(i) + \varepsilon_{\text{xc}}(n_i, m_i), \quad (36)$$

onde $n_{\uparrow,i} = (n_i + m_i)/2$, $n_{\downarrow,i} = (n_i - m_i)/2$ e ε_{xc} é a energia de troca e correlação obtida por interpolação cúbica a partir da tabela LSDA.

A medida de emaranhamento que implementamos é o emaranhamento médio por sítio, sendo então o emaranhamento médio de um sítio i da cadeia em relação ao restante dos sítios subsequentes $L - i$ [52]. Como defendido por França et. al, esse emaranhamento pode ser quantificado pelas probabilidades de ocupação dos quatro estados locais: vazio (w_0), ocupação simples com spin para cima ($w_{\uparrow}$), ocupação simples com spin para baixo ($w_{\downarrow}$) e dupla ocupação ($w_{\uparrow\downarrow}$) [18]. Essa é a entropia de von Neumann que é quantificada por:

$$S_i = -w_{\uparrow} \log_2 w_{\uparrow} - w_{\downarrow} \log_2 w_{\downarrow} - w_0 \log_2 w_0 - w_{\uparrow\downarrow} \log_2 w_{\uparrow\downarrow}, \quad (37)$$

onde os pesos de ocupação são dados por:

$$w_{\uparrow} = \frac{n}{2}(1 + P) - w_{\uparrow\downarrow}, \quad (38)$$

$$w_{\downarrow} = \frac{n}{2}(1 - P) - w_{\uparrow\downarrow}, \quad (39)$$

$$w_0 = 1 - n + w_{\uparrow\downarrow}, \quad (40)$$

$$w_{\uparrow\downarrow} = \langle n_{\uparrow} n_{\downarrow} \rangle = \frac{\partial e_0(n, P, U)}{\partial U}, \quad (41)$$

em que n é a densidade local, P é a polarização local e $e_0(n, P, U)$ é a energia total do sistema no estado fundamental.

A polarização local P é calculada a partir da densidade n e da magnetização m em cada sítio, como:

$$P = \frac{m_i}{n_i}, \quad (42)$$

com $P = 0$ quando $n = 0$.

A quantidade $w_{\uparrow\downarrow}$, que representa a probabilidade de ocupação dupla local, é estimada numericamente pelo cálculo da derivada descrita pela Equação (41) em concordância com o teorema de Hellmann-Feynman. Como o cálculo da energia foi aproximado de acordo com (36), a derivada da energia total em relação a U é expressa por

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial U} = \frac{n_i^2 - m_i^2}{4} + \frac{\partial \epsilon_{\text{xc}}}{\partial U}, \quad (43)$$

onde $\frac{n_i^2 - m_i^2}{4}$ é a forma de calcularmos $n_{\uparrow,i}n_{\downarrow,i}$ reescrevendo em termos das densidades e magnetizações locais e $\frac{\partial \epsilon_{xc}}{\partial U}$ é a derivada da energia de troca e correlação com respeito a U estimada numericamente. Para isso, foram geradas diferentes tabelas LSDA com valores próximos dos U alvo, que no nosso caso foram $U = -4$ e $U = -10$. Interpolamos os valores respectivos de ϵ_{xc} para os novos U e calculamos a derivada numericamente. Dessa forma, a derivada em (43) foi estimada para toda a malha de pontos LSDA, ou seja, para todos os conjuntos (n_i, m_i) da solução exata. Por fim, os valores obtidos da derivada da energia total em relação a U na malha da solução exata foram interpolados via *Spline* cúbica para o cálculo da entropia de von Neumann.

Dessa forma, nesta rotina foi implementado o cálculo autoconsistente de perfis espaciais de densidade e magnetização, garantindo que os vínculos globais sejam respeitados e fornecendo, ainda, informações sobre propriedades termodinâmicas e correlacionadas, como a energia total do sistema e a entropia.

3.3 VALIDAÇÃO DO CÓDIGO

Para validar os resultados obtidos por meio da TLSDA, realizamos comparações diretas com os dados obtidos por simulações DMRG, método estado da arte numericamente exato para sistemas unidimensionais de férmions fortemente correlacionados.

Foram geradas varreduras em todas as polarizações físicas possíveis em passos de 0.04, tanto na TLSDA quanto na DMRG, para as densidades médias da cadeia $\bar{n} = 0.5, 1.0$ e 1.5 (cadeias 25%, 50% e 75% preenchidas, respectivamente), sob interação atrativa fixa $U = -10$. A polarização total do sistema foi definida como a razão entre o excesso de elétrons com spin para cima e o número total de elétrons, ou seja,

$$P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}. \quad (44)$$

Essa definição permite quantificar o grau de alinhamento magnético do sistema, variando de $P = 0$ (não polarizado) até $P = 1$ (totalmente polarizado). Além disso, a densidade média $\bar{n} = 1.0$ foi também investigada para interação $U = -4$, com o objetivo de estudar o desempenho da TLSDA para diferentes intensidades de interação, mantendo constante a densidade média.

A partir dessas varreduras, foram gerados gráficos comparativos dos perfis físicos obtidos por ambas as abordagens. Em cada caso, foram comparados:

- o perfil de densidade local n_i ;
- o perfil de magnetização local m_i ;
- e o perfil de emaranhamento médio por sítio S_i .

Os dados da DMRG utilizados nessas comparações foram gerados com:

- número de *sweeps*: 900;
- erro de truncamento máximo: ordem de 10^{-9} .

Tanto no TLSDA quanto na DMRG, foi utilizado o mesmo potencial externo parabólico harmônico, definido por:

$$V_{\text{ext}}(i) = k(i - i_0)^2, \quad (45)$$

onde $i_0 = L/2$ para L ímpar, e $i_0 = L/2 - 0.5$ para L par, ou seja, parábola centrada no sítio intermediário da cadeia. O parâmetro de confinamento foi fixado em $k = 0.002$.

No código TLSDA, as tolerâncias adotadas foram:

- tolerância para ajuste dos vínculos globais de número de partículas e magnetização: 10^{-7} ;
- tolerância do método da bisseção utilizado para encontrar soluções locais: 10^{-11} .

É importante que a tolerância da bisseção seja suficientemente baixa pois suas saídas precisam de alta precisão para garantir convergência consistente no ajuste de μ e b .

Todos os gráficos foram gerados com `matplotlib` por meio de rotinas em Python capazes de ler os arquivos de saída dos códigos. Essa abordagem permitiu um teste quantitativo da qualidade da aproximação TLSDA frente à solução DMRG por meio do cálculo do Desvio Médio Absoluto (DMA) entre os perfis provenientes das duas metodologias, com referência à DMRG. O DMA entre os perfis provenientes da TLSDA e da DMRG foi calculado por:

$$\text{DMA} = \frac{1}{N_s} \sum_{i=1}^{N_s} |x_i^{\text{TLSDA}} - x_i^{\text{DMRG}}|, \quad (46)$$

onde x_i^{TLSDA} e x_i^{DMRG} são os valores locais do perfil (de densidade, magnetização ou emaranhamento) no sítio i para TLSDA e DMRG, respectivamente. No capítulo 4 discutimos esses resultados comparativos a fim de validar o código.

3.4 ROTINA GERAL DO CÓDIGO TLSDA

A Figura 12 apresenta, de forma esquemática, a rotina geral do código que implementa a metodologia TLSDA desenvolvido neste trabalho. O fluxograma resume as principais etapas do programa, desde a leitura dos dados de entrada até a geração do arquivo final de saída e a liberação de memória.

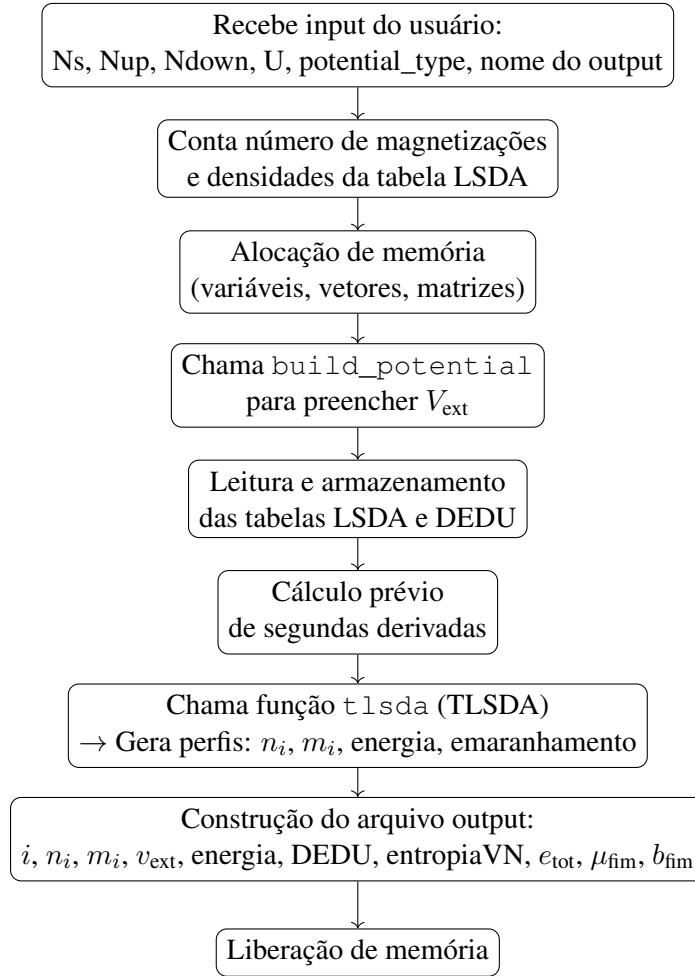


Figura 12 – Esquema geral da rotina do código TLSDA desenvolvido. Fonte: Elaborado pelo autor.

Inicialmente, o código recebe como entrada do usuário os parâmetros fundamentais do sistema: o número de sítios N_s , o número de elétrons com spin para cima $N_\uparrow$ e para baixo $N_\downarrow$, o parâmetro de interação U , o tipo de potencial externo (definido pelo parâmetro `potential_type`), e o nome do arquivo de saída onde os resultados serão armazenados. Para todos os estudos apresentados nesta dissertação, adotamos `potential_type` = 2, que corresponde ao confinamento harmônico. Apesar disso, o código permite explorar diferentes tipos de potencial externo já implementados.

Em seguida, uma função específica determina o número de pontos de magnetização e de densidade disponíveis na tabela LSDA correspondente ao valor de U escolhido. Com essa informação, ocorre a etapa de alocação dinâmica de memória para variáveis, vetores e matrizes necessárias ao cálculo.

Na etapa seguinte, o vetor de potencial externo V_{ext} é preenchido utilizando a função `build_potential`, de acordo com o potencial escolhido pelo usuário. Posteriormente, são realizadas as leituras das tabelas LSDA que contêm a solução exata para o sistema homogêneo, além dos dados discretos da derivada da energia total em relação a U (DEDU), fundamentais para o cálculo de emaranhamento.

Na sequência, é realizado o cálculo prévio das segundas derivadas, etapa importante para preparar os dados que serão usados nos procedimentos de interpolação via *spline* cúbica ao longo do código. Após todas essas preparações, é chamada a função principal `tlsda`, detalhada na Seção 3.2.3. Essa função recebe os parâmetros do sistema (N_s , $N_\uparrow$, $N_\downarrow$, V_{ext}) e retorna os perfis finais de densidade local n_i , magnetização local m_i , energia local e entropia de von Neumann (emaranhamento médio por sítio), além das quantidades globais de energia total e_{tot} , potencial químico final μ_{fim} e campo magnético final b_{fim} .

Após a execução da função `tlsda`, o código organiza e escreve no arquivo de saída todas as informações calculadas em cada sítio: índice do sítio i , densidade n_i , magnetização m_i , potencial externo $V_{\text{ext}}(i)$, energia local, valores de emaranhamento local (entropia de von Neumann), valor global de DEDU, energia total, potencial químico da cadeia e campo magnético da cadeia. Por fim, uma última rotina é responsável por liberar toda a memória alocada dinamicamente ao longo da execução.

Por fim, na Figura 13 sintetizamos esquematicamente a lógica de minimização autoconsistente desempenhada de forma conjunta pelas rotinas `dens_mag_from_g_h` e `tlsda`.

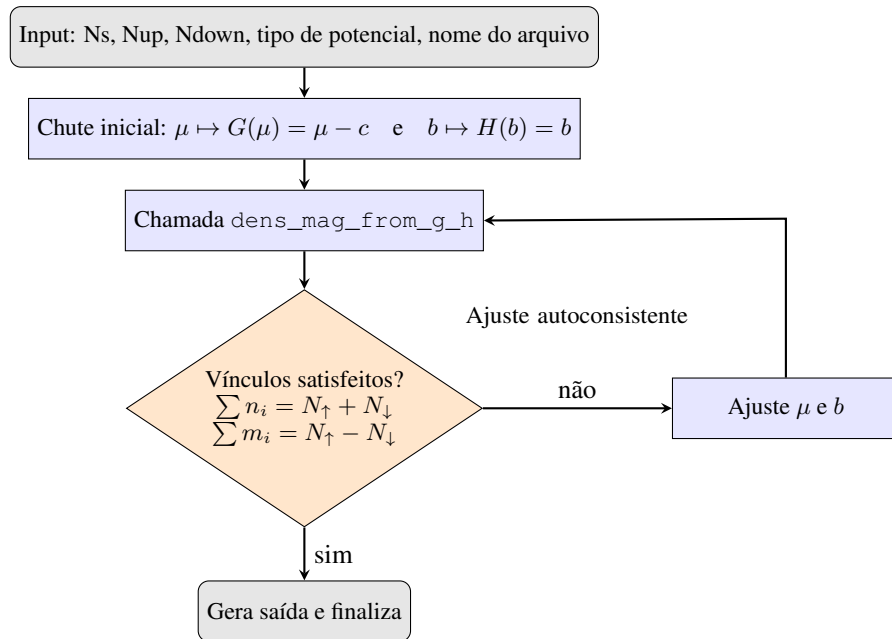


Figura 13 – Lógica de minimização autoconsistente. Fonte: Elaborado pelo autor.

Os parâmetros de entrada são lidos para estabelecer os vínculos do sistema físico a ser minimizado. A seguir, na função `tlsda`, é realizado o chute inicial para o potencial químico e para o campo magnético intrínseco. A função `dens_mag_from_g_h` é então chamada para calcular as distribuições locais de densidade e magnetização correspondentes a esses valores. A rotina `tlsda` verifica se os vínculos globais de número de partículas e de magnetização total são satisfeitos. Caso não sejam, os parâmetros μ e b são ajustados iterativamente até que a condição de autoconsistência seja alcançada. Uma vez convergido, o código gera os resultados finais e encerra a execução.

Dessa forma, os esquemas apresentados sintetizam a estrutura lógica do código, resumindo como são calculados, a partir dos parâmetros iniciais fornecidos pelo usuário, os perfis físicos locais e globais do sistema descrito. Dada esta visão lógica geral do código, reforçamos que as subseções 3.2.2 e 3.2.3 detalham o trabalho numérico implementado nas principais rotinas.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo, apresentamos os principais resultados obtidos com o código TLSDA desenvolvido, organizados em duas frentes complementares. Na Seção 4.1 realizamos uma validação detalhada, comparando os perfis da TLSDA com os resultados exatos do método DMRG, de modo a atestar a precisão, a confiança e a robustez da implementação. Na Seção 4.2, exploramos as propriedades de superfluidos exóticos, ou seja, superfluidos na presença de magnetização em cadeias unidimensionais semi-preenchidas, destacando a evolução das fases em função da variação da polarização.

4.1 VALIDAÇÃO

Para verificar a precisão, a robustez e a confiança do código TLSDA desenvolvido, realizamos uma validação comparando diretamente os perfis de densidade, magnetização e emaranhamento obtidos por meio dessa abordagem frente a resultados provenientes do método estado da arte DMRG, considerado numericamente exato para cadeias unidimensionais. Tal comparação permite avaliar a qualidade das aproximações empregadas na TLSDA, especificamente na reprodução dos perfis de densidade n_i , magnetização m_i e emaranhamento S_i . Conforme detalhado na Seção 3.3, a validação foi estruturada por meio da varredura de polarizações em diferentes condições de interação (U) e preenchimento da cadeia ($\bar{n}$), permitindo um mapeamento geral do desempenho do código em regimes físicos distintos. Para todos os casos adotamos o potencial externo harmônico, como definido na Seção 3.3.

A Figura 14, a Figura 15 e a Figura 16 apresentam os gráficos comparativos dos perfis de densidade, magnetização e emaranhamento para $\bar{n} = 0.5$, correspondendo a um regime de baixo preenchimento (25% da cadeia ocupada). Já a Figura 17, a Figura 18 e a Figura 19 para $\bar{n} = 1.0$, caracterizando um regime de semi-preenchimento (50%). Por fim, a Figura 20, a Figura 21 e a Figura 22 contemplam o caso de $\bar{n} = 1.5$, próximo à saturação total da cadeia (75%). Em todas essas figuras, os gráficos exibem os perfis obtidos por TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja), para todas as polarizações acessadas. Os gráficos também incluem o desvio médio absoluto entre os métodos no canto superior direito de cada caso.

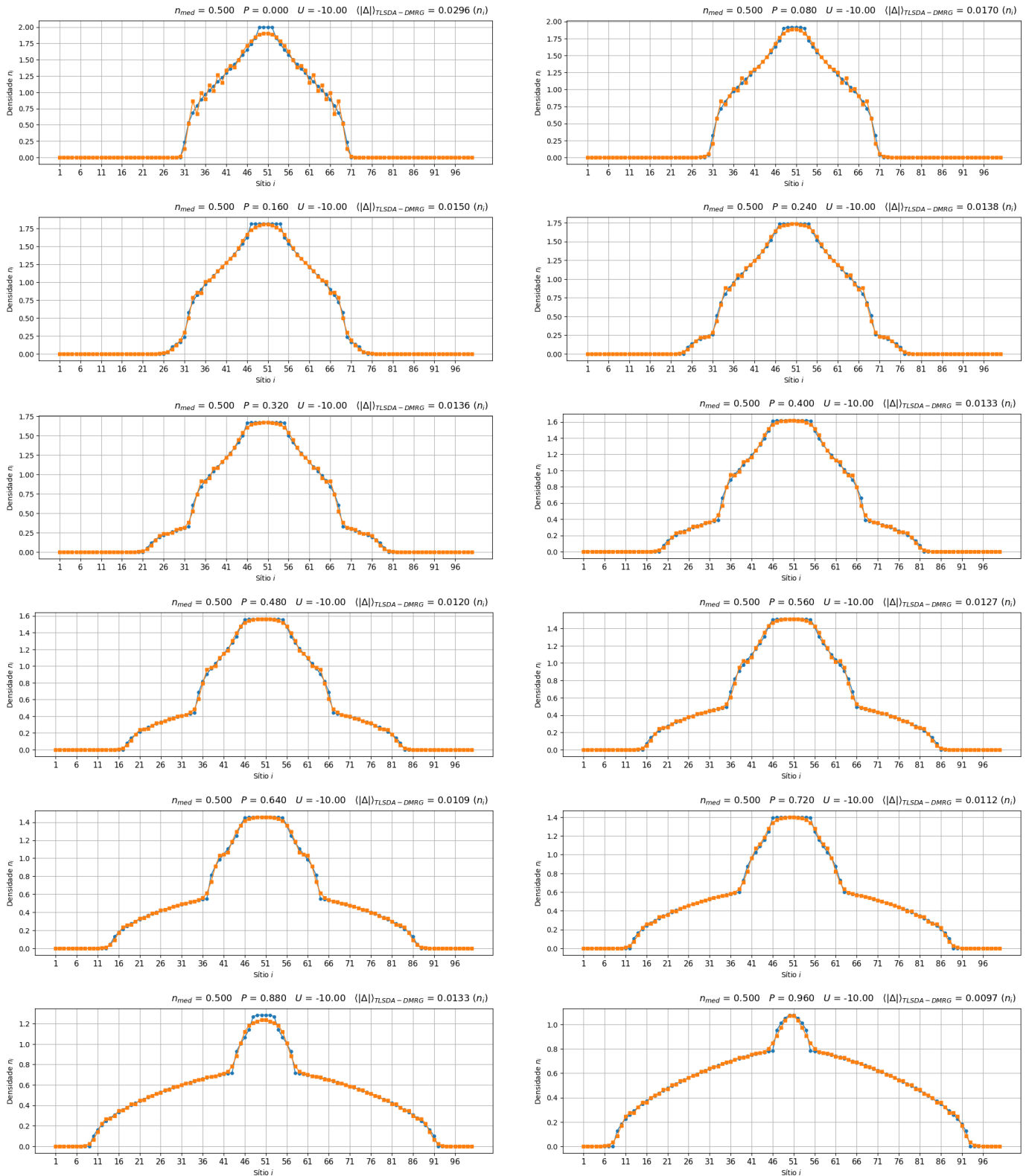


Figura 14 – Perfis de densidade obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 0.5$, $U = -10$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

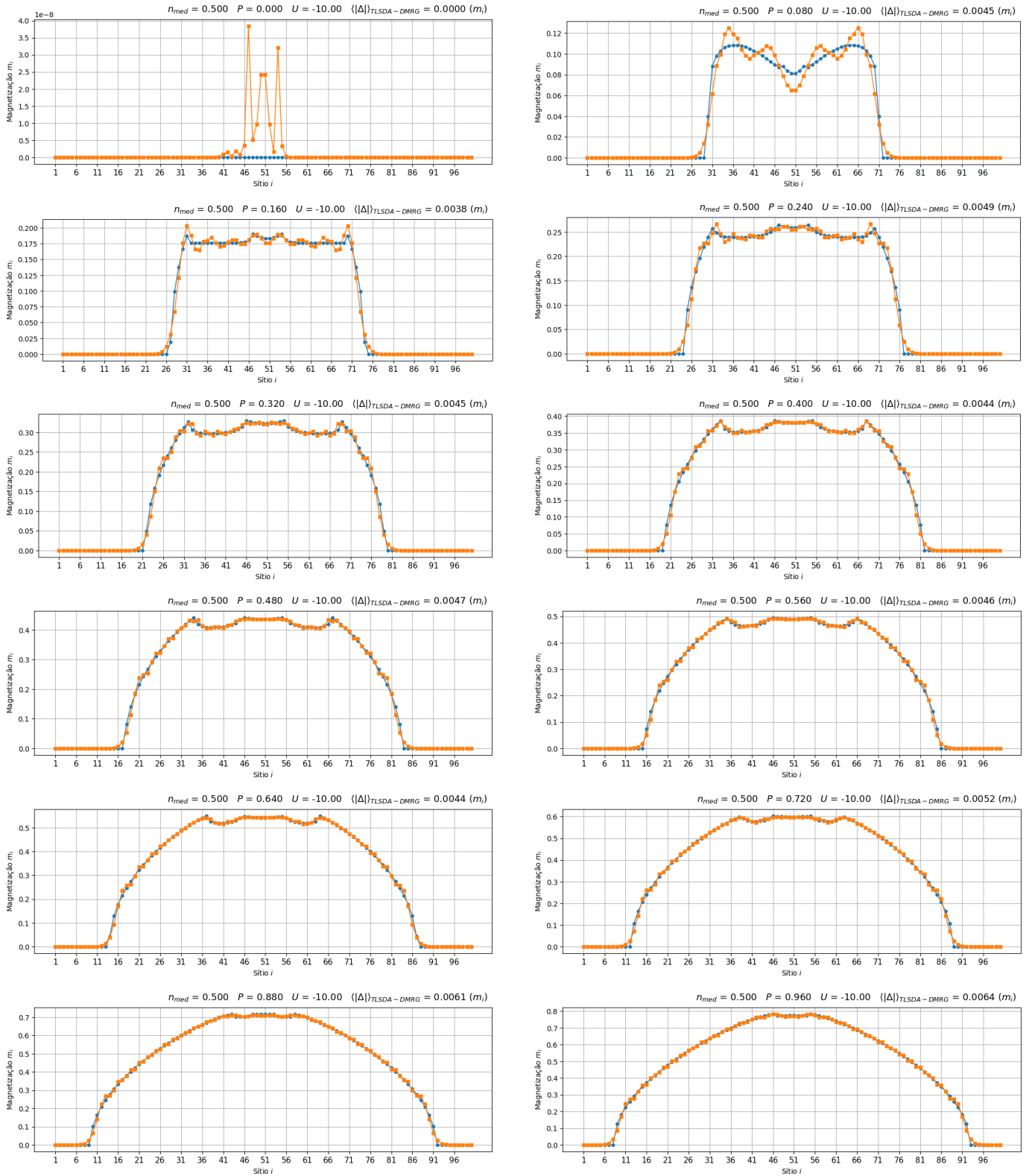


Figura 15 – Perfis de magnetização obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 0.5$, $U = -10$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

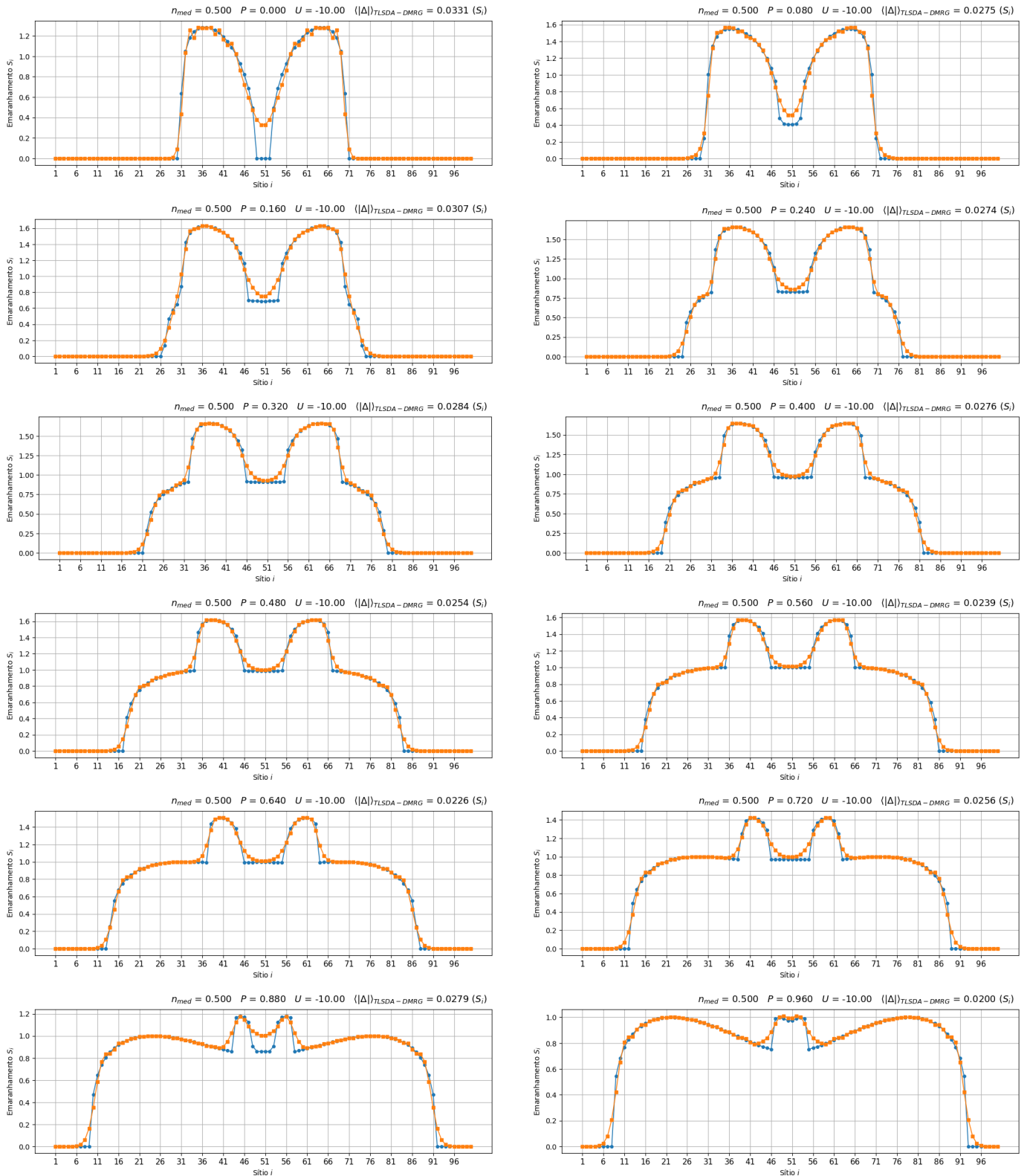


Figura 16 – Perfis de emaranhamento obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 0.5$, $U = -10$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

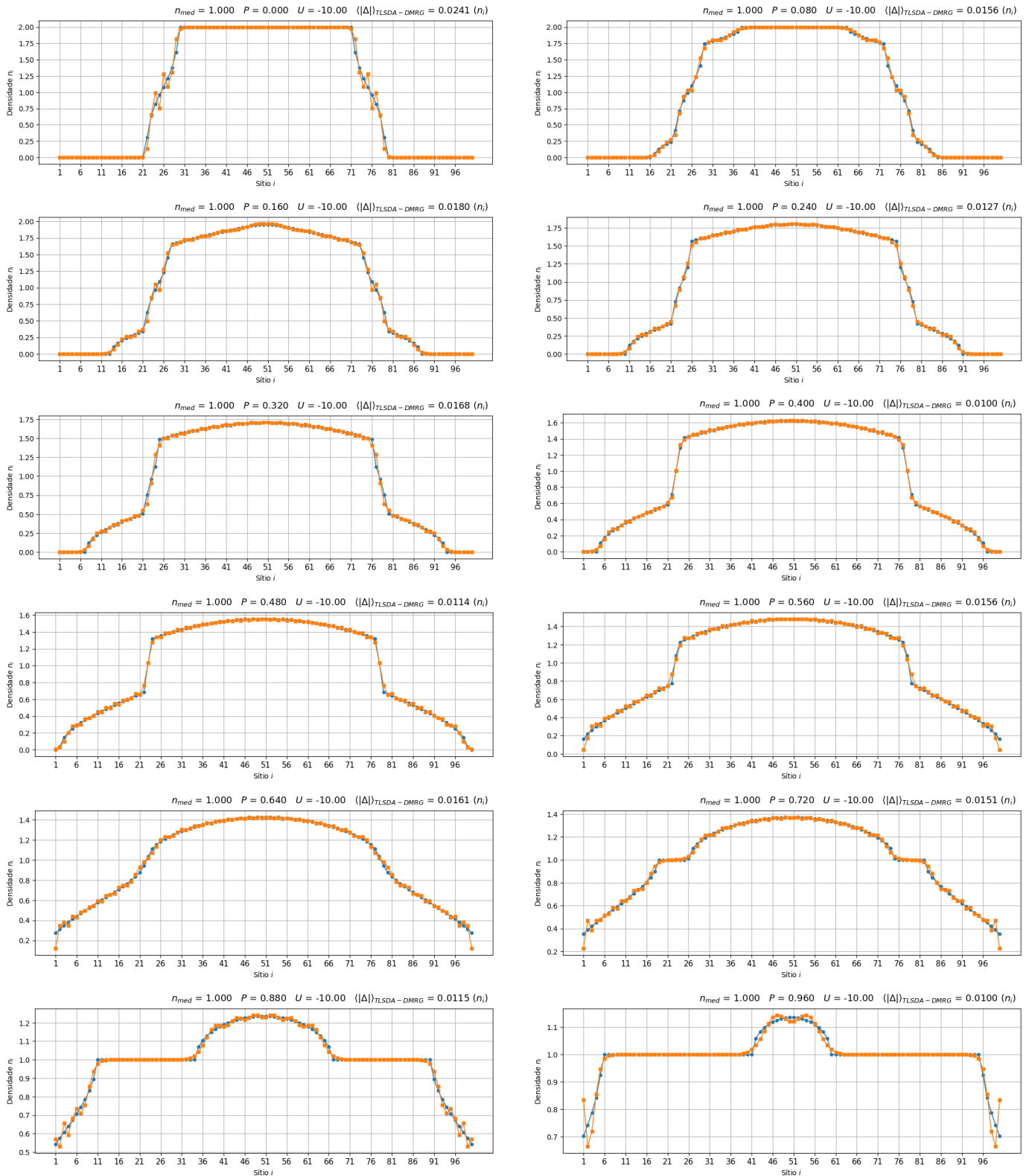


Figura 17 – Perfis de densidade obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 1.0$, $U = -10$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

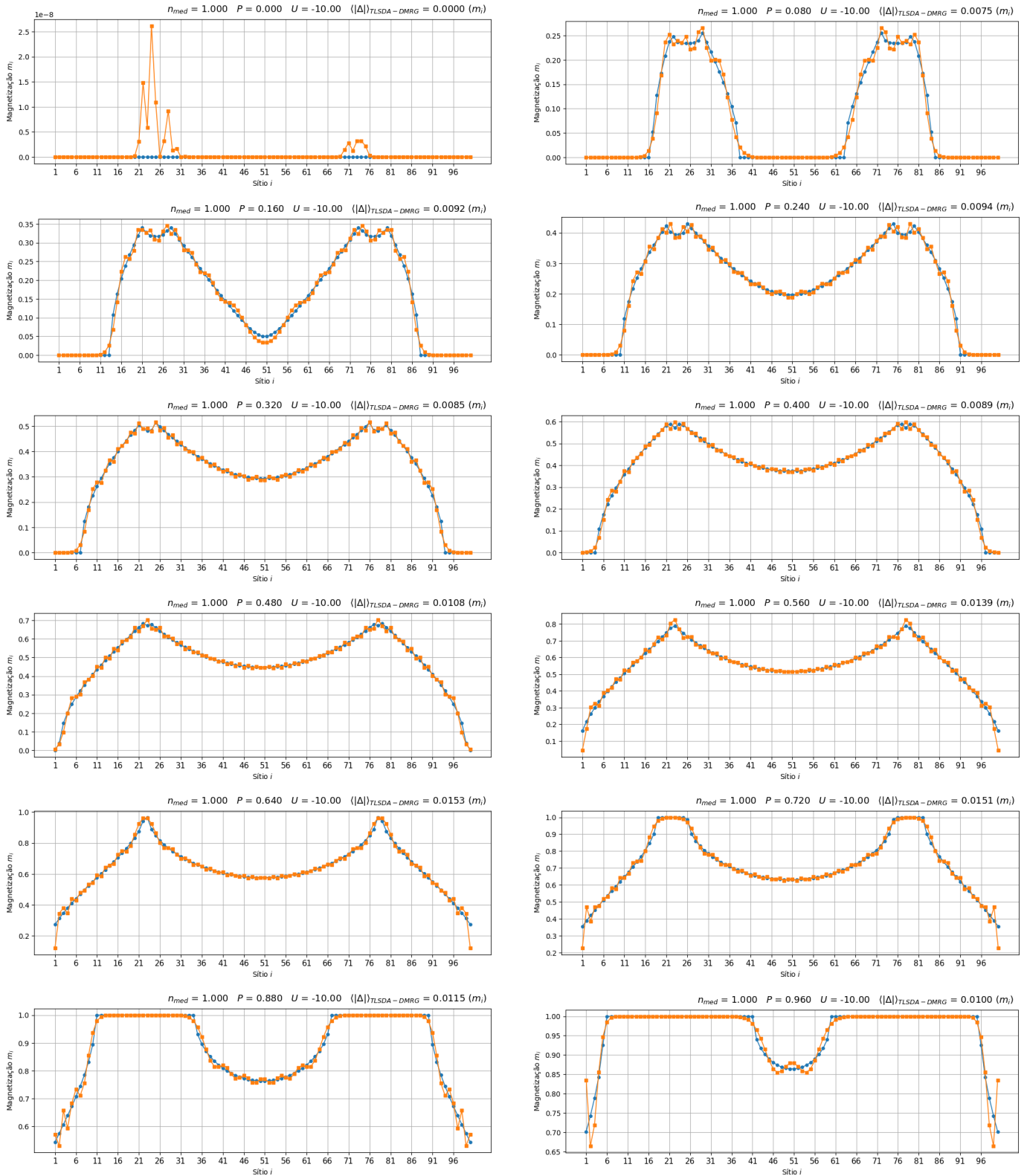


Figura 18 – Perfis de magnetização obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 1.0$, $U = -10$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

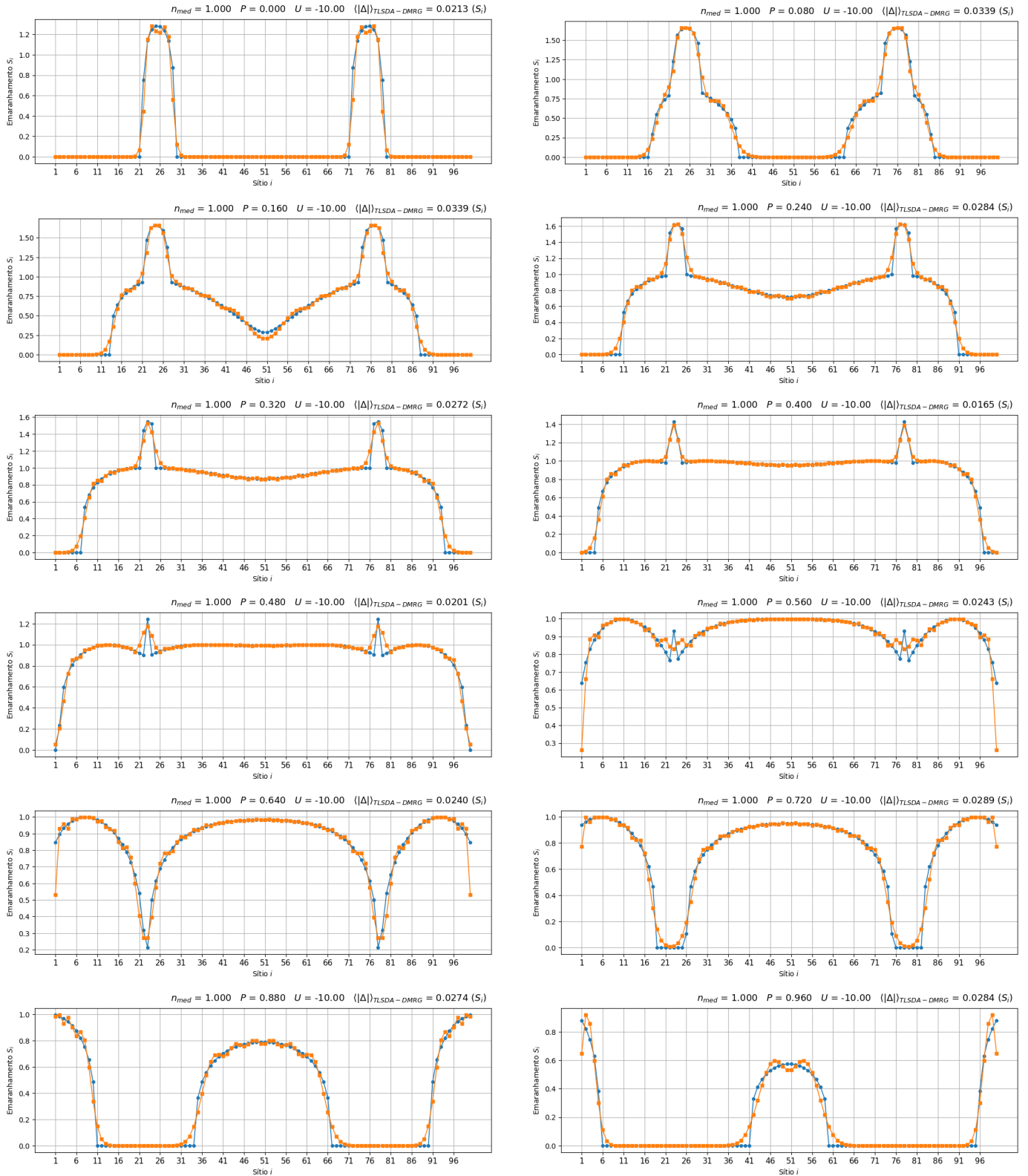


Figura 19 – Perfis de emaranhamento obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 1.0$, $U = -10$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

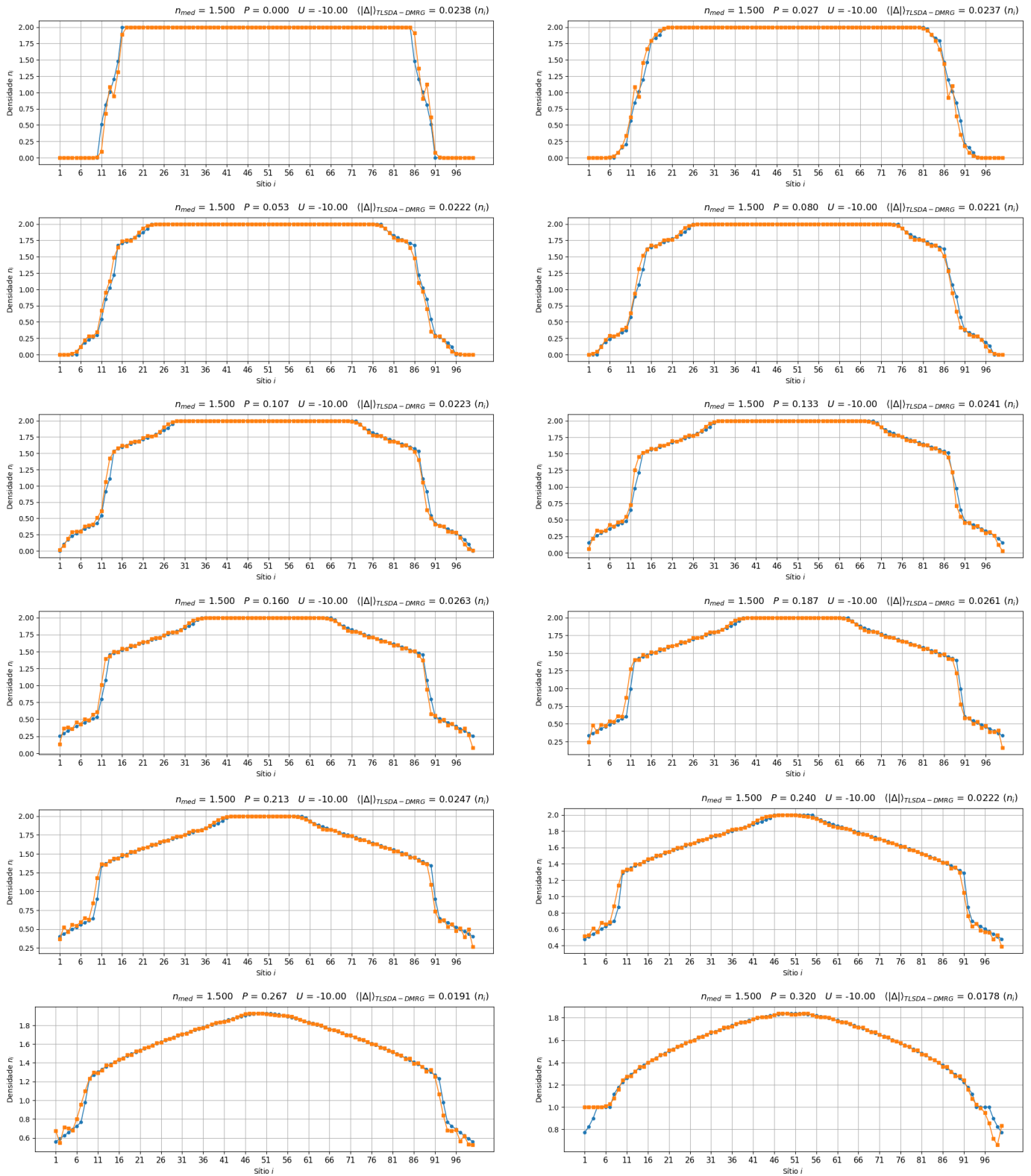


Figura 20 – Perfis de densidade obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 1.5$, $U = -10$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

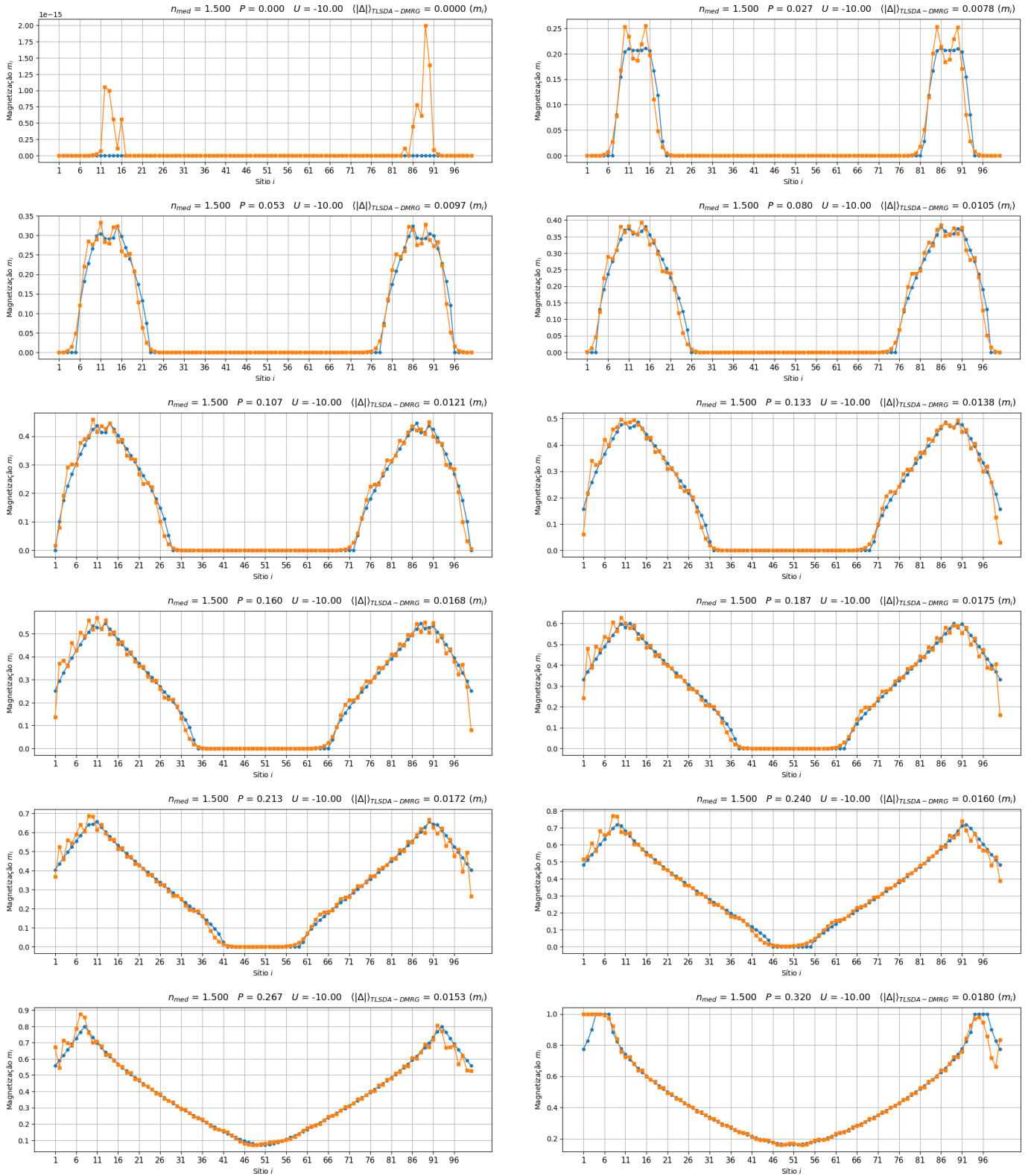


Figura 21 – Perfis de magnetização obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 1.5$, $U = -10$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

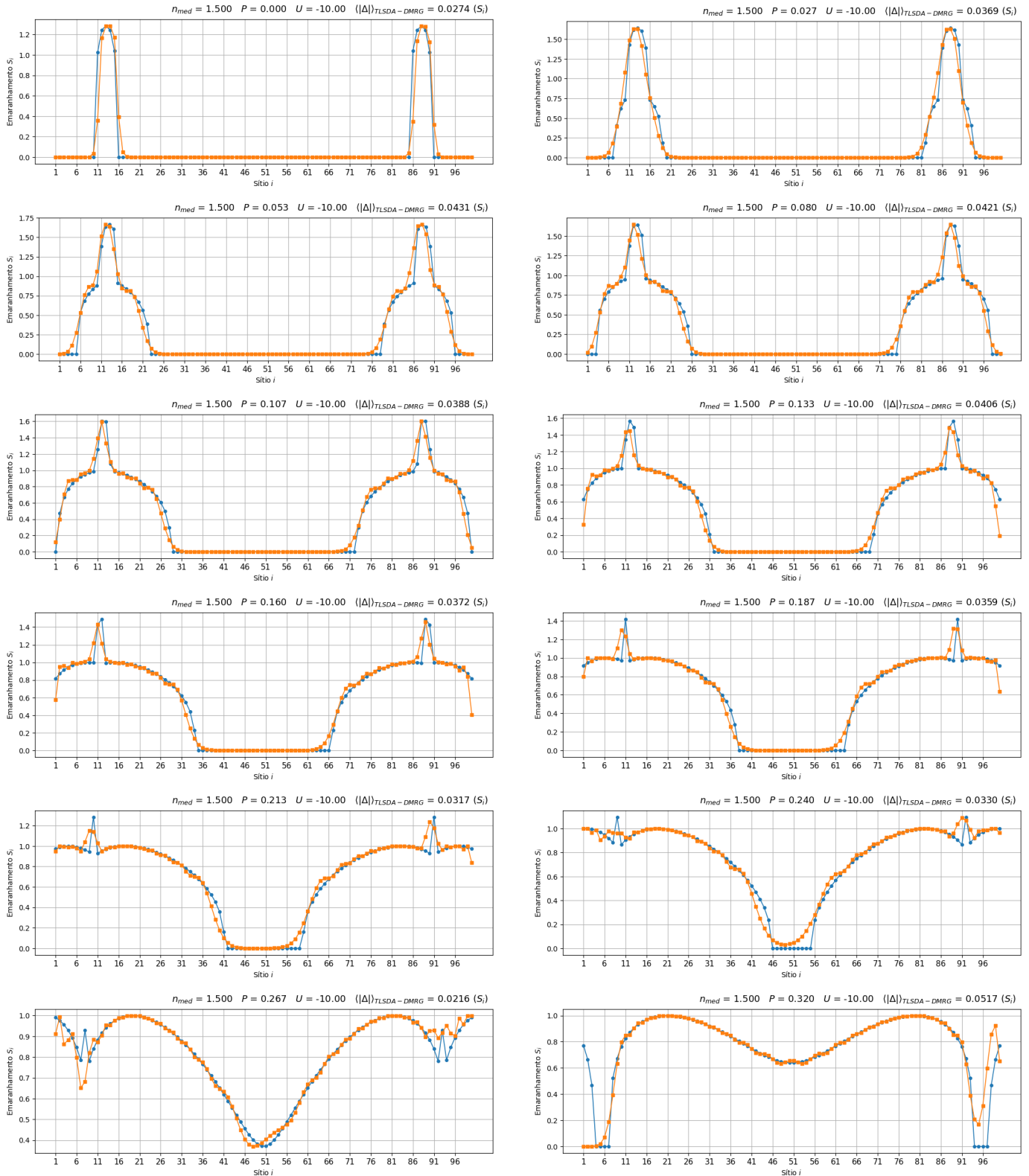


Figura 22 – Perfis de emaranhamento obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 1.5$, $U = -10$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

Como visto nessas figuras, observamos uma ótima concordância qualitativa e quantitativa entre os resultados obtidos via TLSDA e aqueles provenientes da DMRG, com desvios médios absolutos máximos na ordem de 10^{-2} . O código TLSDA reproduz adequadamente tanto as regiões centrais de alta densidade, quanto as bordas da cadeia onde a ocupação cai abruptamente em função do confinamento parabólico. A concordância ótima entre TLSDA e DMRG foi observada de forma constante em todos os regimes de polarização e preenchimento investigados.

Além das variações em $\bar{n}$, o desempenho do código também foi testado para diferentes valores de interação U . Na [Figura 23](#), na [Figura 24](#) e na [Figura 25](#), trouxemos os gráficos comparativos para $\bar{n} = 1.0$ em $U = -4$. Os resultados mostram que a ótima concordância verificada em $U = -10$ ([Figura 23](#)) se mantém em $U = -4$, com desvios igualmente desprezíveis.

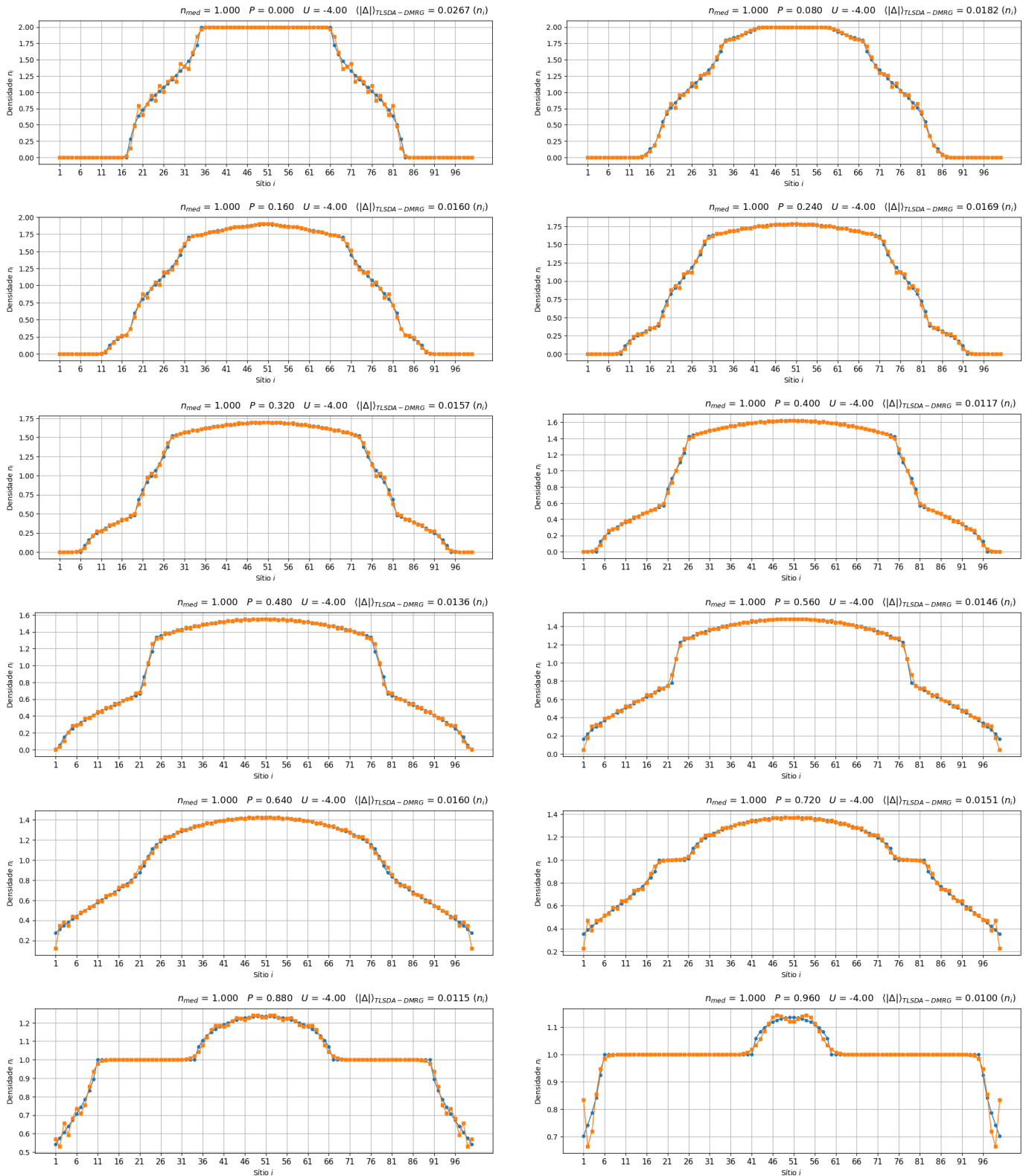


Figura 23 – Perfis de densidade obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 1.0$, $U = -4$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

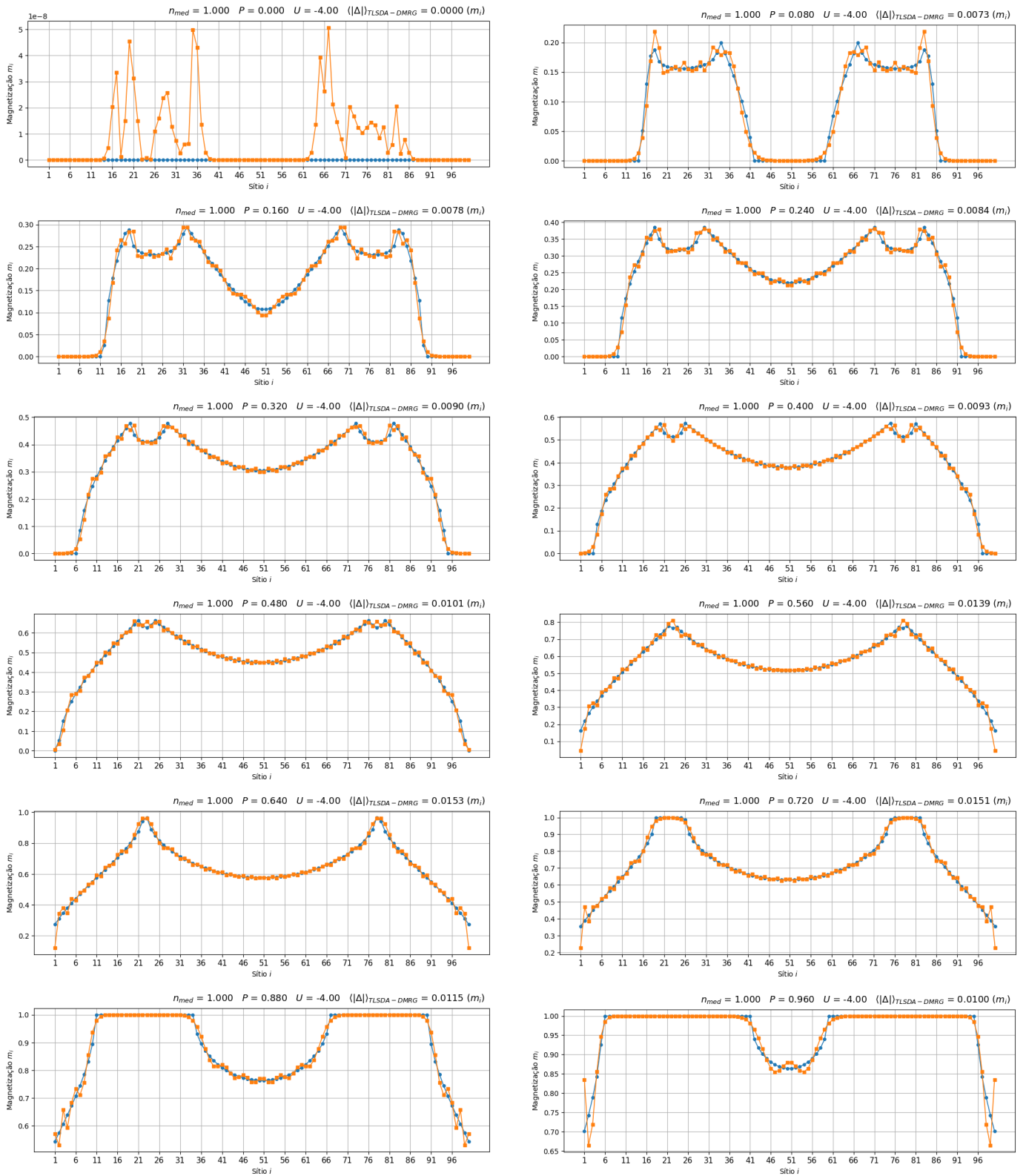


Figura 24 – Perfis de magnetização obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 1.0$, $U = -4$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

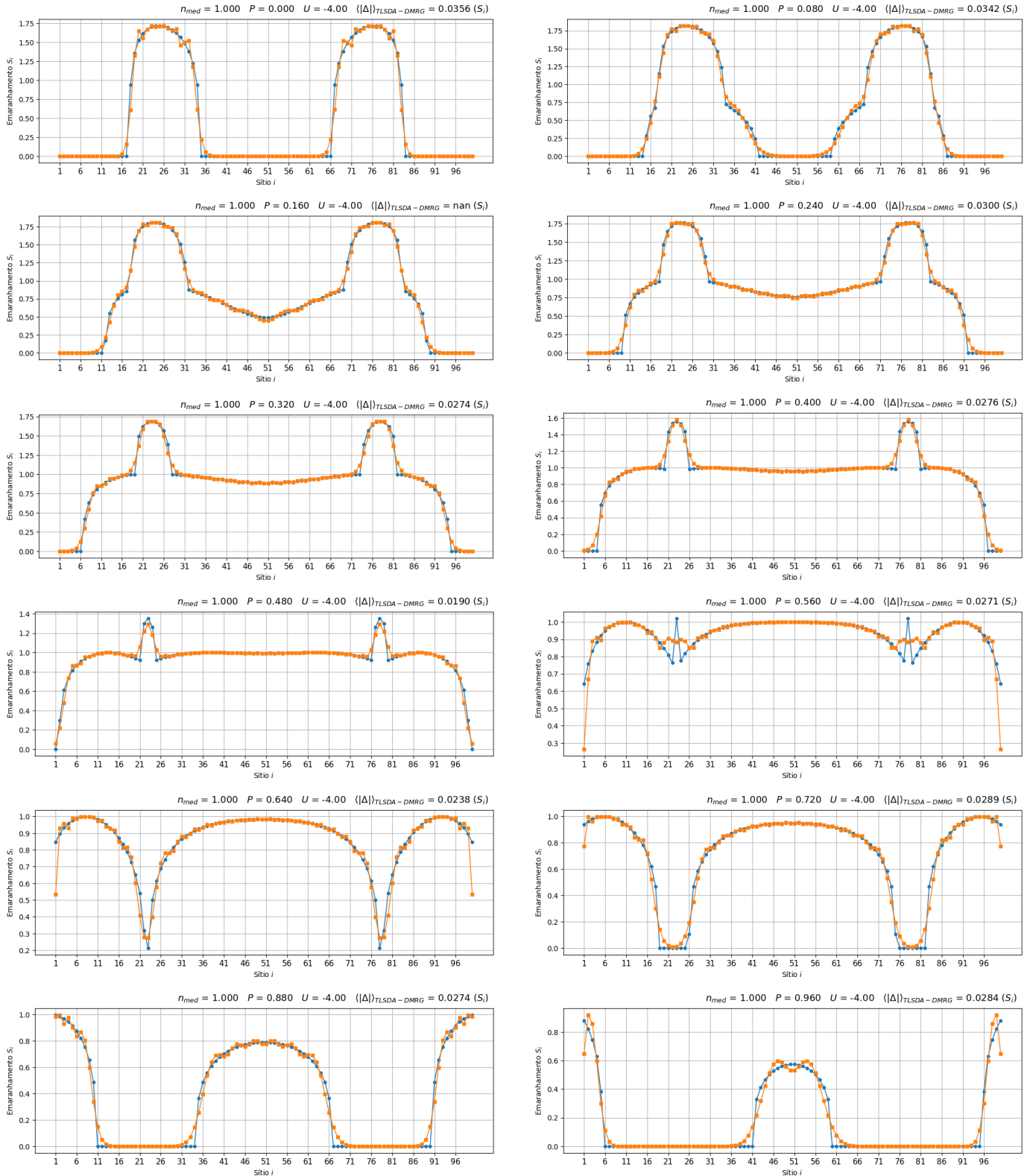


Figura 25 – Perfis de emaranhamento obtidos por TLSDA e DMRG para diferentes polarizações em $\bar{n} = 1.0$, $U = -4$ e curvatura do confinamento $k = 0.002$. Cada gráfico mostra a comparação direta entre TLSDA (série azul) e DMRG (série laranja) para um dado valor de polarização. Na legenda de cada gráfico (canto direito superior) está indicado o desvio médio absoluto entre as duas séries de dados e a polarização em questão. Fonte: Elaborado pelo autor.

Vale pontuar alguns casos nos quais os dados obtidos por DMRG apresentaram oscilações aparentemente anômalas: nas polarizações $P = 0$ e $P = 0.08$ da [Figura 15](#); na polarização $P = 0$ da [Figura 18](#); na polarização $P = 0$ da [Figura 21](#); e na polarização $P = 0$ da [Figura 24](#). Esclarecemos que esses casos de oscilações correspondem, na verdade, a flutuações de ordem numérica e possivelmente de efeito de tamanho finito da cadeia efetiva, como revelado pelas escalas extremamente pequenas nos eixos verticais desses gráficos. Reforçando esse argumento, destacamos, na mesma ordem em que os casos foram citados, os respectivos desvios médios absolutos, todos consistentemente baixos: $DM = 0.0000$ e $DM = 0.0045$; $DM = 0.0000$; $DM = 0.0000$; e $DM = 0.0000$.

Outras oscilações observadas nos perfis de DMRG, como nas bordas da cadeia em $P = 0.027$ no perfil de magnetização para $\bar{n} = 1.5$ ([Figura 21](#)) parecem não possuir significado físico e estarem relacionadas à questões de tamanho finito desta região da borda onde os elétrons estão confinados. Análises para cadeias maiores precisam ser feitas para confirmar essa hipótese, mas aqui destacamos uma possível vantagem da TLSDA que parece ser menos suscetível aos efeitos de borda.

Por fim, na [Figura 26](#) sintetizamos os dados de desvio médio absoluto entre as duas metodologias para todos os regimes físicos testados comparativamente nos perfis de densidade, magnetização e emaranhamento. Percebemos que, como já discutido, todos os casos são consistentemente baixos, com desvios absolutos consistentemente nas vizinhanças de 0.02. Esta síntese nos permite analisar uma única tendência clara: os erros, apesar de sempre muito pequenos, são constantemente maiores para os perfis de emaranhamento (séries verdes), seguido dos erros para os perfis de densidade (séries azuis) e, por fim, com os menores erros, os perfis de magnetização (séries laranjas).

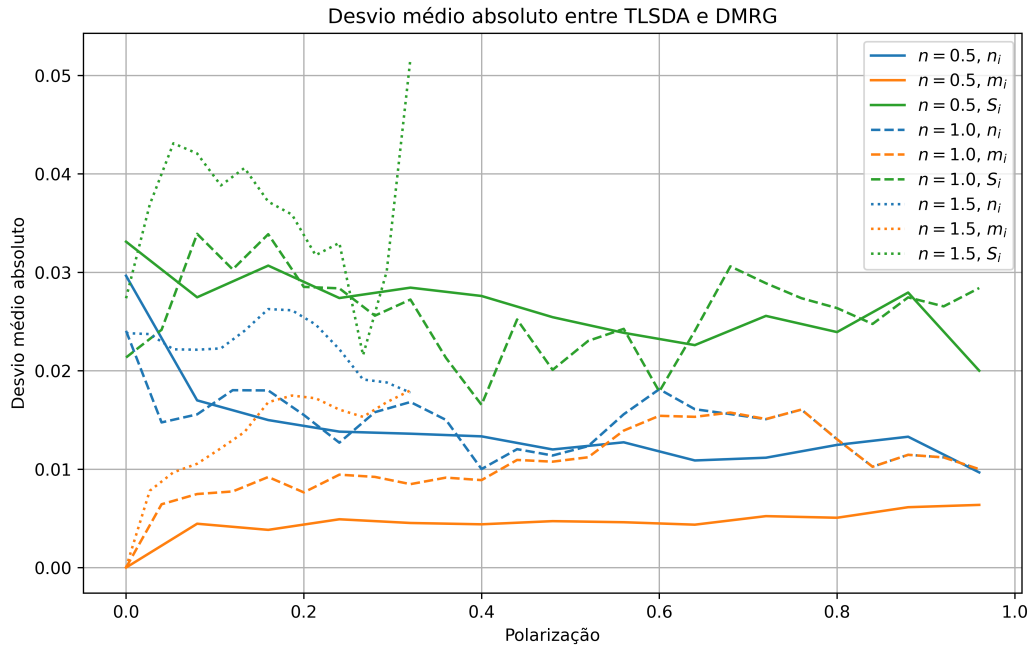


Figura 26 – Desvio médio absoluto entre TLSDA e DMRG para todas as condições comparativas analisadas. Os perfis de emaranhamento são as variações das séries verdes, os de magnetização das laranjas e os de densidade das séries azuis, de acordo com a legenda explicativa inclusa no gráfico. Fonte: Elaborado pelo autor.

Quanto à performance computacional do código, investigamos os dados coletados dos *logs* do terminal, indicando o tempo de execução do código TLSDA para cada polarização, por meio da rotina em python de automação da varredura. Em busca de analisar possíveis regimes de preenchimento $\bar{n}$, polarização P e força de interação U de melhor desempenho, agrupamos os tempos de processamento para todas as diferentes condições possíveis na [Figura 27](#).

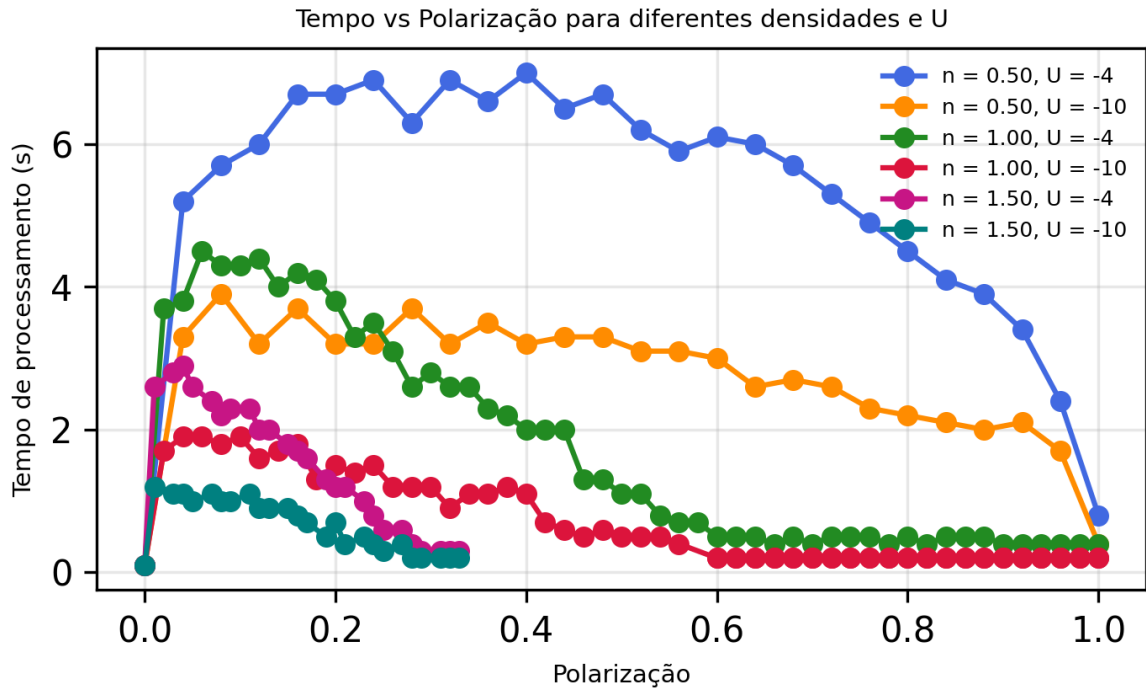


Figura 27 – Tempo de processamento do código TLSDA nas diferentes polarizações varridas em todas as condições testadas: $\bar{n} = 0.5$ e $U = -4$ (série azul), $\bar{n} = 0.5$ e $U = -10$ (série amarela), $\bar{n} = 1.0$ e $U = -4$ (série verde selva), $\bar{n} = 1.0$ e $U = -10$ (série vermelha), $\bar{n} = 1.5$ e $U = -4$ (série roxa) e $\bar{n} = 1.5$ e $U = -10$ (série verde água). O caso de $\bar{n} = 1.5$ varre apenas até $P = 0.3$, pois é a polarização máxima permitida pelo princípio de exclusão de Pauli (100 elétrons $\uparrow$ em 100 sítios). Fonte: Elaborado pelo autor.

A [Figura 27](#) revela uma tendência clara: à medida que a polarização aumenta, o tempo necessário para a execução do código diminui em todos os regimes físicos analisados. De forma particularmente notável, os casos extremos de polarização $P = 0$ e $P = 1$ apresentam os menores tempos de processamento, indicando uma convergência muito mais rápida nesses pontos. O caso de $P = 0$ é particularmente rápido de convergir, pois a lógica da função `tlsda` já inicia com o campo magnético correto em $b = 0$ e precisa apenas de um ciclo de *loops* para ajustar o potencial químico, ao invés de um ciclo inserido no outro para ajustar μ e b simultaneamente, como discutido na Seção [3.2.3](#). Já a facilidade de convergência em altas polarizações pode ser atribuída à existência de muitos sítios totalmente polarizados, onde $n_i = m_i$. Isso faz o código percorrer a linha numérica $n = m$ ou próximo dela na maioria dos sítios, como discutido na Seção [3.2.2](#). Isso implica na predominância de soluções analíticas na função `dens_mag_from_g_h`, dispensando etapas mais custosas de bisseção e interpolação. Ainda que variações no preenchimento e na intensidade da interação modifiquem o desempenho do código — por exemplo, regimes com interações menos intensas ou cadeias mais vazias tendem a demandar tempos ligeiramente maiores —, em todos os casos o tempo de execução permaneceu desprezível do ponto de vista computacional, com valores máximos em torno de 6

segundos para a cadeia mais vazia ($\bar{n} = 0.5$) com a interação atrativa menos intensa ($U = -4$). Cabe ressaltar, contudo, que uma análise definitiva das causas subjacentes a essas tendências e variações exigiria um mapeamento interno mais preciso do tempo gasto em cada rotina do código, uma vez que o desempenho depende criticamente de duas etapas principais: (i) o ajuste global dos parâmetros μ e b por bisseção para satisfazer os vínculos físicos na função `tlsda`, e (ii) os caminhos lógicos distintos da função `dens_mag_from_g_h`, que ora utiliza soluções analíticas, ora exige bisseções e interpolação de dados tabulados para determinar as grandezas locais com base no potencial químico e no campo magnético. Por fim, embora não tenha sido objetivo uma análise quantitativa rigorosa, medidas foram tomadas para garantir a consistência qualitativa da comparação (como o fechamento de todos os programas durante as execuções), e a repetição informal dos testes mostrou variação insignificante nos tempos observados.

No que diz respeito à eficiência computacional comparativamente com a DMRG, destacamos o expressivo ganho proporcionado pela TLSDA. A varredura completa de polarizações via DMRG consumiu cerca de 2 horas para os casos com $\bar{n} = 1.0$ e 1.5 e aproximadamente 8 horas para $\bar{n} = 0.5$, todos com $U = -10$. Em contrapartida, o mesmo conjunto de varreduras foi concluído em menos de cinco minutos utilizando o código TLSDA em um *laptop* para uso doméstico equipado com processador *Intel Core i5*. Como já discutido, o tempo de processamento utilizando o código TLSDA é desprezível. Considerando que para estudos como levantamentos de diagramas de fases é necessário um volume expressivamente maior de cálculos do que os realizados nesta pesquisa para fins de validação, essa diferença marcante no custo computacional ilustra a grande vantagem obtida com a metodologia TLSDA, ainda que acompanhada de uma pequena perda de precisão em relação à DMRG. Além disso, devido à rapidez dos cálculos via TLSDA, torna-se viável realizar grandes varreduras nos espaços de parâmetros relevantes, identificando regiões mais promissoras para posterior análise refinada com métodos mais precisos, como a DMRG — configurando uma estratégia híbrida eficiente para o estudo dessas cadeias.

Em linhas gerais, concluímos que o código TLSDA, além de apresentar ótimo acordo qualitativo e quantitativo com o método exato em diferentes regimes de interação e preenchimento, também oferece uma alternativa altamente eficiente do ponto de vista computacional. Essa é uma vantagem expressiva para estudos exploratórios e varreduras extensas em diagramas de fase, funções para as quais pretendemos mobilizar o código na perspectiva futura deste trabalho de mestrado.

4.2 TOPOLOGIA E FFLO EM $\bar{n} = 1$

Apesar do caráter metodológico deste trabalho, os resultados comparativos obtidos nos permitem realizar interpretações físicas iniciais sobre o comportamento do sistema, especialmente no que se refere à presença da fase exótica FFLO, caracterizada pela coexistência de superfluidez e magnetismo, e à sua resposta frente à polarização. Essa análise se articula diretamente com o estudo Sanino et. al, que investigou o mesmo sistema sem magnetização, ou seja, no

regime $P = 0$, em que o estado superfluido não é exótico [49]. Nesse caso, foi observado que, para baixas densidades (ou, de forma equivalente, pequenos valores de k), o centro da cadeia abriga um superfluido, evidenciado por um alto parâmetro de ordem de pareamento e elevado emaranhamento local. À medida que a densidade aumenta, essa fase superfluida no *bulk* é gradualmente projetada para as bordas da cadeia efetiva, cedendo lugar a uma fase metálica central, marcada por um emaranhamento menor, embora ainda finito, e por uma correspondente redução do parâmetro de ordem supercondutor. Em outras palavras, ocorre uma transição do superfluido central para um metal, e posteriormente para um isolante de banda, com a superfluidez deslocando-se para as bordas. Esse cenário, embora não envolva magnetização, é relevante por indicar que as regiões metálicas são, nesse regime, protegidas topologicamente pela fase superfluida, a qual se manifesta como um pico no perfil de emaranhamento resistente a perturbações. Um achado importante de Sanino et. al foi a concordância semi-quantitativa entre o emaranhamento local e o parâmetro de ordem supercondutor neste sistema, permitindo usar o primeiro como marcador topológico e parâmetro de ordem de fase, como será feito nesta seção [49]. Nossos resultados nos permitem, portanto, investigar esse regime de fases topológicas agora na presença de magnetização, ou seja, quando o superfluido é possivelmente não convencional. Além disso, dialogamos diretamente com o estudo que explorou o diagrama de fases desse sistema em função da polarização, interação e densidade, e demonstrou que a polarização crítica P_C , abaixo da qual a fase FFLO é possível, possui um limite superior universal de $1/3$, independente da densidade, da intensidade da interação ou do confinamento [19].

A escolha da densidade média $\bar{n} = 1$ nesta análise preliminar se justifica justamente porque, conforme mostrado em França et. al, é nesse regime que a fase FFLO persiste até polarizações mais altas, com polarização crítica analítica $P_C = 1/3$, estendendo a janela de estabilidade dessa fase exótica antes da transição para a fase normal polarizada [19]. O confinamento harmônico simula experimentos com átomos ultrafrios em armadilhas ópticas, condição experimental ideal para detecção e mensuração da fase FFLO [38, 39, 40]. Já o U fortemente atrativo garante um regime de forte acoplamento dos pares de Cooper necessário para a fase superflúida desejada ($U \leq -2t$) [53]. Para investigar o comportamento do sistema em função da polarização, analisamos conjuntamente os perfis de densidade, magnetização e emaranhamento (apresentados na Figura 28, na Figura 29 e na Figura 30, respectivamente) nas polarizações $P = 0.0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ e 0.96 . Essas figuras se complementam para fornecer uma visão detalhada das transformações que ocorrem no sistema com o aumento da polarização. Apresentamos, a partir dessa análise, uma descrição geral da evolução do sistema com ênfase nas baixas polarizações, onde a fase FFLO emerge de forma mais marcante.

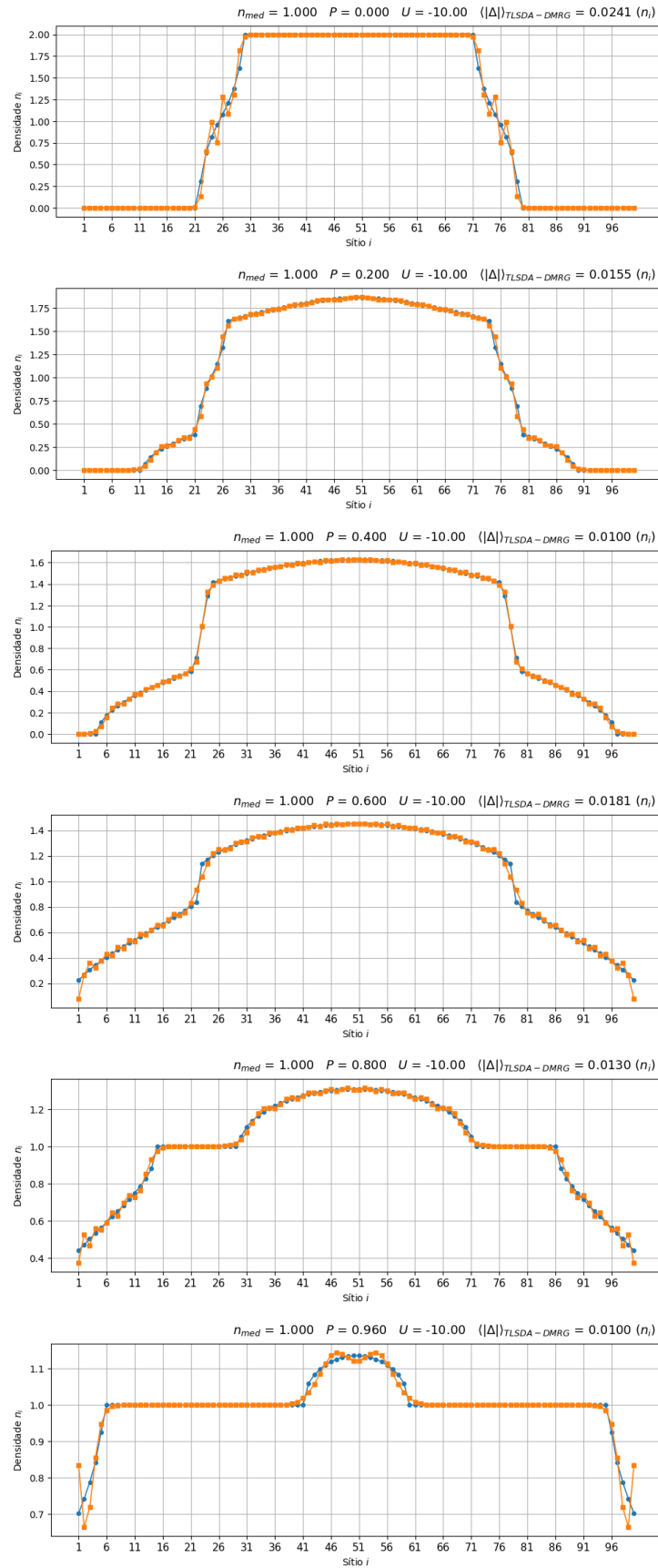


Figura 28 – Perfis de densidade para as polarizações sob análise. Cada gráfico mostra o perfil de densidade do sistema semipreenchido $\bar{n} = 1$, com interação $U = -10$, curvatura do confinamento $k = 0.002$, nas condições de polarização $P = 0$, $P = 0.2$, $P = 0.4$, $P = 0.6$, $P = 0.8$ e $P = 0.96$. Fonte: Elaborado pelo autor.

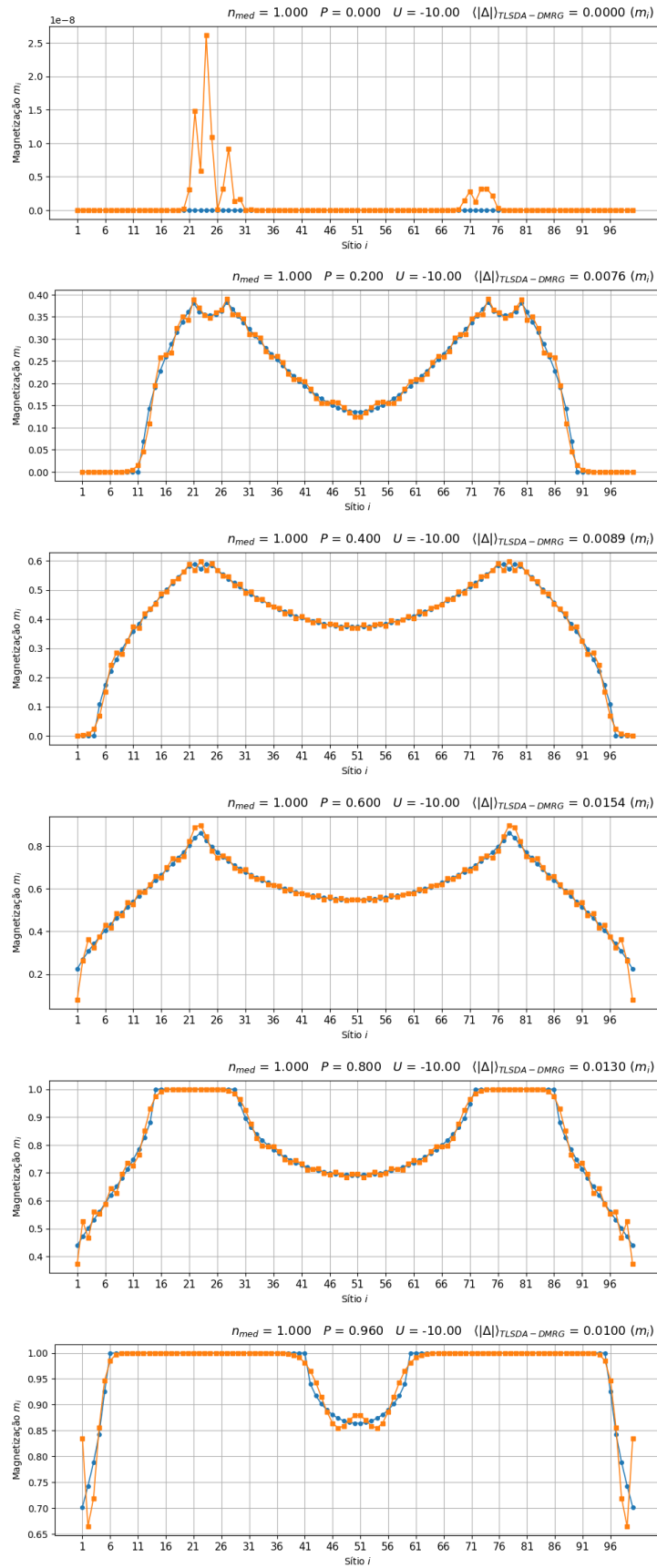


Figura 29 – Perfis de magnetização para as polarizações sob análise. Cada gráfico mostra o perfil de magnetização do sistema semipreenchido $\bar{n} = 1$, com interação $U = -10$, curvatura do confinamento $k = 0.002$, nas condições de polarização $P = 0$, $P = 0.2$, $P = 0.4$, $P = 0.6$, $P = 0.8$ e $P = 0.96$. Fonte: Elaborado pelo autor.

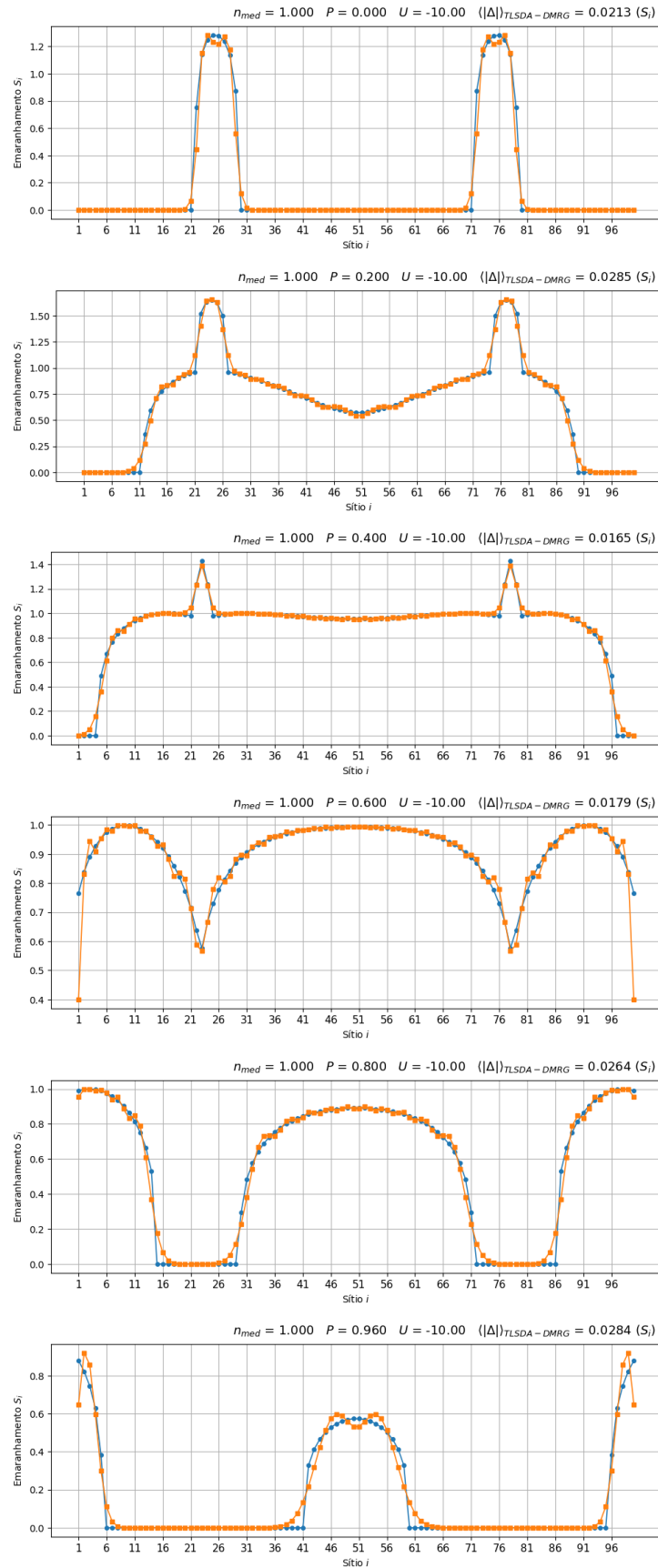


Figura 30 – Perfis de emaranhamento para as polarizações sob análise. Cada gráfico mostra o perfil de emaranhamento do sistema semipreenchido $\bar{n} = 1$, com interação $U = -10$, curvatura do confinamento $k = 0.002$, nas condições de polarização $P = 0$, $P = 0.2$, $P = 0.4$, $P = 0.6$, $P = 0.8$ e $P = 0.96$. Fonte: Elaborado pelo autor.

No regime não polarizado, o centro da cadeia (*bulk*) exibe sítios duplamente ocupados $n_i = 2$, caracterizando um isolante rígido tipo banda. Essa configuração reflete a saturação da cadeia semi-preenchida induzida pelo confinamento harmônico, que favorece a dupla ocupação em sítios centrais de baixo potencial externo e interação fortemente atrativa. O perfil de emaranhamento revela picos elevados ($S_i \approx 1.28$) nas bordas ao redor do *bulk*, sugerindo a presença de um superfluido (neste caso não magnetizado, afinal $P = 0$), interpretado como uma proteção topológica ao *bulk* isolante [49]. Ressaltamos que a cadeia efetiva se concentra nos sítios centrais, pois os extremos permanecem vazios devido ao potencial de confinamento.

À medida que a polarização aumenta (20% e 40%), observamos a quebra progressiva do platô de dupla ocupação, dando lugar a um *bulk* metálico, com valores intermediários de emaranhamento, e a flexibilização dos graus de liberdade (perfil de densidade variante), antes congelados pela rigidez da dupla ocupação. O campo magnético intrínseco desfavorece energeticamente a formação de pares, promovendo a formação de sítios magnetizados com desbalanceamento de spin. Em 20% de polarização, os perfis de magnetização exibem comportamento complementar aos de densidade: nas regiões de alta ocupação, a magnetização tende a zero, enquanto nas bordas ao redor da região central, observamos máximos de magnetização, confirmando a presença de partículas polarizadas nessas regiões.

Ainda em 20% e 40%, os máximos globais de emaranhamento coincidem com os máximos locais de magnetização nas vizinhanças do *bulk*, além de se associarem a saltos descontínuos no perfil de densidade, reforçando a presença de uma estrutura heterogênea de diferentes fases da matéria induzida pela ação combinada dos parâmetros físicos do sistema. Em 20%, há uma particularidade: as regiões nas bordas do *bulk* com picos de emaranhamento apresentam dois subpicos na magnetização, interpretados como um efeito de tamanho finito dessa região fortemente polarizada que tende à minimização energética, fragmentando a distribuição de spin local. Além disso, o perfil de emaranhamento exibe um mínimo no sítio central ($i = 50$), explicado pela maior certeza na ocupação local (pico de densidade), o que reduz a entropia local. Quando $n_i = 2$, o emaranhamento é nulo, pois o estado é bem definido; nesse caso, a densidade elevada no centro reduz o grau de indefinição, logo, de emaranhamento, do estado quântico local.

Diferentemente do estudo de Sanino et. al [49], que nesta condição de preenchimento, porém, com k (parâmetro de confinamento) menor ($k = 0.001$ em Sanino et. al e $k = 0.002$ neste estudo) identificaram apenas o *bulk* metálico e bordas superfluídas, nesta análise, agora com a cadeia polarizada, identificamos uma região adicional, externa às bordas fortemente emaranhadas, também com características de fase metálica (com valores intermediários de emaranhamento $0 \leq S_i \leq 1$).

A análise do emaranhamento crítico local nas bordas da cadeia revela que, até aproximadamente $P = 0.24$, o valor de S_i se mantém elevado e aproximadamente constante em torno de 1.65. Essa estabilidade sugere a presença de uma estrutura persistente, possivelmente associada à fase FFLO. Um comportamento análogo foi observado no regime sem magnetização [49]: o emaranhamento nos sítios periféricos da cadeia permaneceu robusto frente a perturbações, sendo

interpretado como uma assinatura topológica da fase superfluida. Embora no presente trabalho lidemos com esses sítios magnetizados (e, portanto, com um superfluido possivelmente exótico), os dados indicam que essa robustez nas bordas persiste até cerca de $P = 0.24$, o que pode ser indício da manutenção de uma estrutura de caráter topológico nesse regime. Ressaltamos, no entanto, que esta interpretação permanece sugestiva: o alto valor de S_i nas bordas, aliado à presença de magnetização, é compatível com uma fase FFLO, mas não é suficiente para confirmá-la. Para isso, será necessário, em etapas futuras, verificar se a origem do emaranhamento está de fato associada à superfluidez, o que requer a análise das probabilidades de ocupação dos estados duplamente ocupados w_2 e vazios w_0 .

A [Figura 31](#) sintetiza essa análise, apresentando o valor de S_i nas bordas como função da polarização, assim como a derivada dessa grandeza. Os valores foram obtidos via TLSDA, considerando o sítio localizado na borda da fase central, que se manifesta como máximo local nas polarizações mais baixas e passa a se comportar como mínimo local em polarizações intermediárias e altas, refletindo a mudança de fase na região central da cadeia.

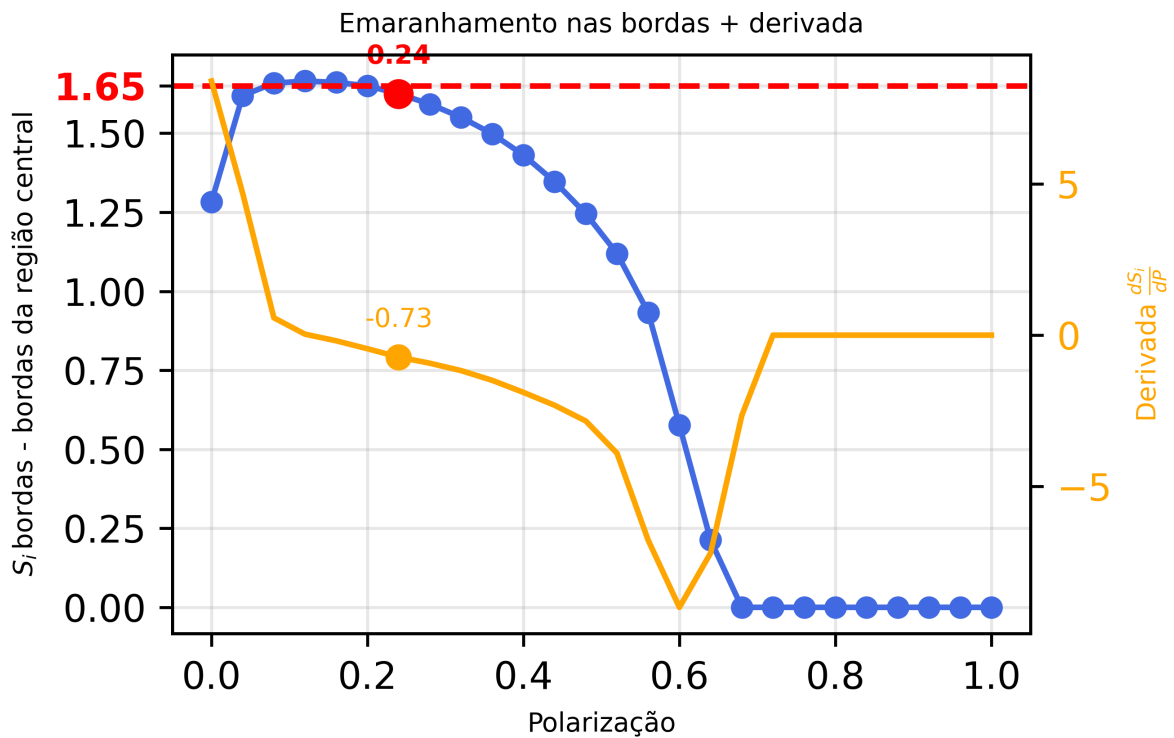


Figura 31 – Emaranhamento crítico nas bordas do *bulk* da cadeia em função da polarização (série azul) e derivada dessa grandeza em função da polarização (série amarela). Destacamos em vermelho o valor máximo do emaranhamento crítico presente nas bordas do ceio metálico em FFLO, que se mantém constante com o aumento da polarização até 24% de polarização da cadeia. Fonte: Elaborado pelo autor.

A partir de $P = 0.24$, observamos uma queda progressiva do emaranhamento nas bordas, que se intensifica significativamente em torno de $P = 0.32$, como confirmado pela derivada cada vez mais negativa. Embora não seja possível determinar, a partir de nossos dados, com

precisão o ponto exato de transição, essa faixa de polarização representa a região em que o sistema deixa gradualmente de sustentar uma fase possivelmente superfluida magnética e passa a exibir características compatíveis com uma fase metálica. Destacamos que o início da queda de S_i serve como um indicativo claro dessa transição, ainda que não permita concluir se o regime metálico já está plenamente estabelecido nesse ponto. O desaparecimento completo do pico de emaranhamento nas bordas ocorre apenas em $P = 0.56$, caso ilustrado na [Figura 32](#). Nessa polarização, os sítios vizinhos da região central se comportam de forma peculiar em relação ao perfil de emaranhamento: na região onde em polarizações anteriores apresentava um comportamento uniforme (apenas um ponto de inflexão, o pico máximo local de S_i), agora apresenta dois pontos de mínimo local e um de máximo local com valor de S_i menor que do centro metálico. O perfil foi redesenhado de modo que não temos mais os picos de máximos globais nas bordas do *bulk* como ainda existe em $P = 0.52$, mesmo que bastante reduzido. Agora, temos três regiões com valores intermediários e aproximadamente correspondentes de emaranhamento.

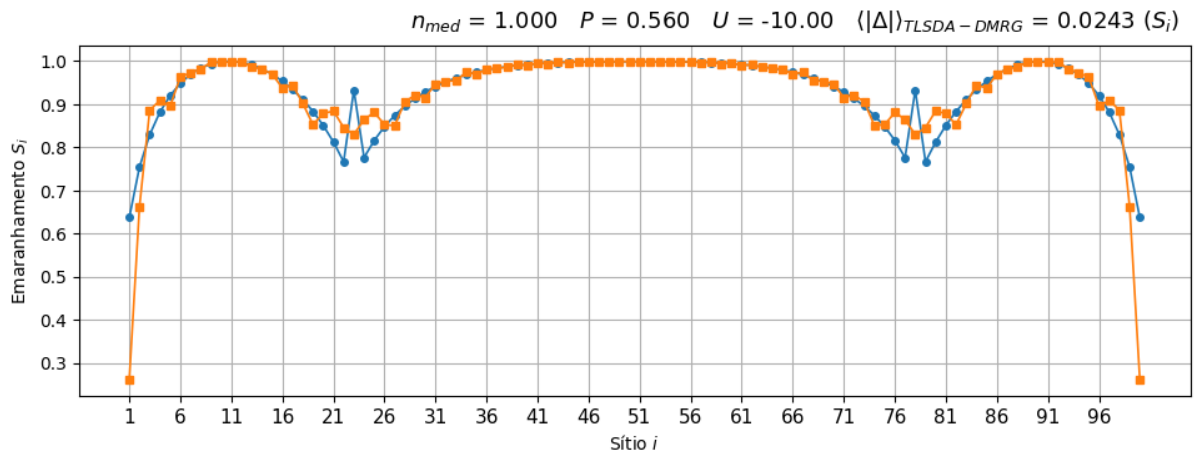


Figura 32 – Perfil de emaranhamento para $P = 0.56$, $\bar{n} = 1$ e $U = -10$. Para polarização $P = 0.56$, o perfil de emaranhamento S_i revela o desaparecimento completo dos picos nas bordas do *bulk*, presentes em polarizações menores. Observa-se um novo padrão, com dois mínimos locais ladeando um máximo local na região central, cujo valor de S_i é inferior ao do centro metálico. Essa reorganização indica que, embora o regime metálico esteja mais estabelecido, o sistema apresenta agora três regiões com valores intermediários e aproximadamente equivalentes de emaranhamento. Fonte: Elaborado pelo autor.

Com relação à previsão analítica [\[19\]](#), que estabelece um limite superior universal de $P_C = 1/3$ para a estabilidade da fase FFLO, nossos dados mostram boa concordância qualitativa, ainda que não haja coincidência exata. O valor de $P = 0.24$ encontrado aqui, abaixo do limite teórico de $1/3$, marca o início da queda de S_i e, portanto, o início da transição. A queda mais acentuada a partir de $P = 0.32$ reforça a ideia de que a transição ocorre dentro de uma faixa de polarizações, e não em um ponto único, o que é compatível com as limitações da definição operacional da transição entre fases.

Nesta faixa de polarizações iniciais, a cadeia exibe uma estrutura de fases complexa: extremos vazios — região supostamente metálica externa — superfluido — centro metálico — superfluido — região supostamente metálica externa — extremos vazios. Ilustramos essa pluralidade na [Figura 33](#) para o perfil de densidade e na [Figura 34](#) para o perfil de emaranhamento em $P = 0.2$. Essa organização variada resulta da simetria induzida pelo confinamento harmônico e da interação entre confinamento, polarização e forte interação atrativa ($U = -10$) para a densidade média $\bar{n} = 1$.

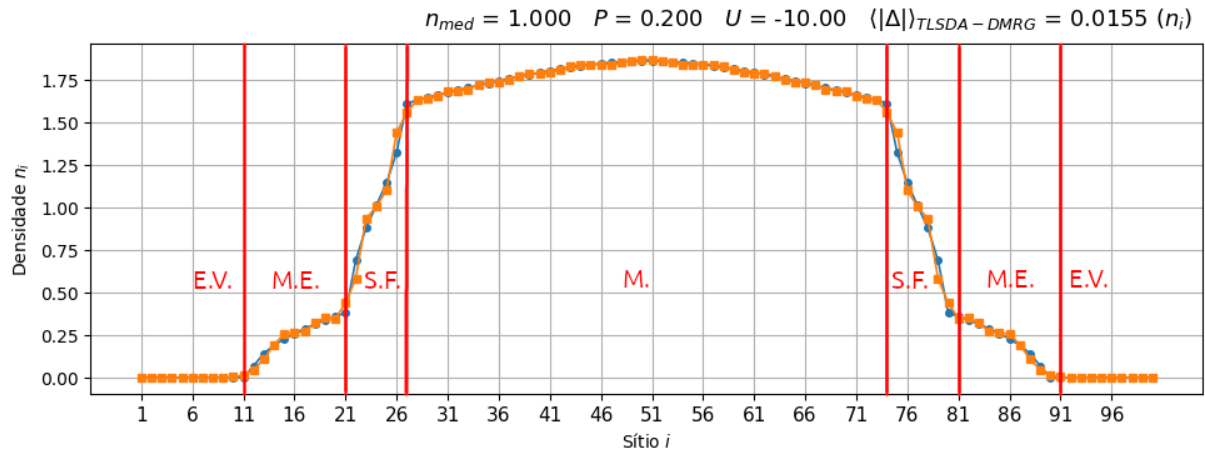


Figura 33 – Regiões da cadeia e suas respectivas fases (vermelho) no perfil de densidade para $P = 0.2$, $\bar{n} = 1$ e $U = -10$. Foi delimitado por meio das linhas verticais vermelhas as diferentes regiões da cadeia: extremos vazios (E.V.), região supostamente metálica externa (M.E.), superfluido (S.F.) e centro metálico (M.). Fonte: Elaborado pelo autor.

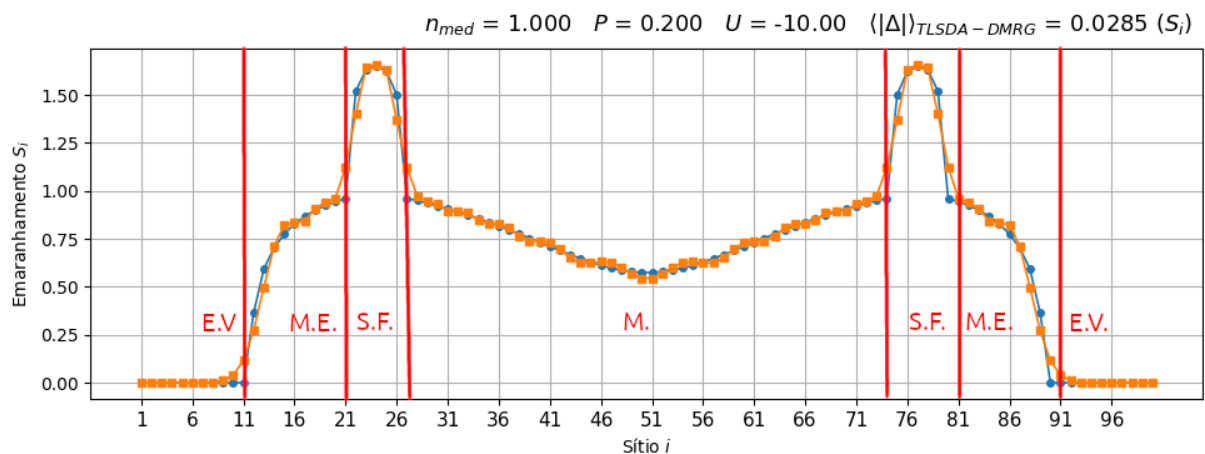


Figura 34 – Regiões da cadeia e suas respectivas fases (vermelho) no perfil de emaranhamento para $P = 0.2$, $\bar{n} = 1$ e $U = -10$. Foi delimitado por meio das linhas verticais vermelhas as diferentes regiões da cadeia: extremos vazios (E.V.), região supostamente metálica externa (M.E.), superfluido (S.F.) e centro metálico (M.). Fonte: Elaborado pelo autor.

Na polarização de 60%, o perfil de densidade indica um centro da cadeia ainda com características metálicas, mas as regiões externas apresentam maior ocupação, aproximando-se do *bulk*. O emaranhamento máximo já se reduziu a cerca de 1.0, valor típico de fase metálica. As bordas da região central, que anteriormente apresentavam picos de emaranhamento, passam a exibir mínimos locais (cerca de $S_i = 0.4$), sugerindo o início da formação de uma fase isolante ferromagnética, por conta do emaranhamento estar tendendo a zero. Nesse regime, parece consolidar-se o fim definitivo da FFLO, substituída por fases com características essencialmente metálicas e, posteriormente, isolantes nas bordas do *bulk*.

Em 80% de polarização, aparecem claramente sítios totalmente magnetizados ($m_i = 1$) nas vizinhanças do *bulk*, localizados em regiões de maior potencial externo. Esses sítios apresentam $n_i = 1$ e $S_i = 0$, caracterizando um isolante ferromagnético induzido pelo campo magnético intrínseco. O *bulk* metálico permanece, enquanto as bordas mais externas passam a exibir o máximo de emaranhamento na cadeia com valores medianos ($S_i \approx 1.0$).

Para polarizações ainda maiores (88%, 92% e 96%), há um aumento progressivo na largura das regiões totalmente magnetizadas ($m_i = 1$), enquanto o *bulk* se estreita. No limite totalmente polarizado (100%), todos os sítios se tornam $m_i = 1$, $n_i = 1$ e $S_i = 0$, configurando um isolante ferromagnético saturado. Destaca-se que, embora para $n = 1$ não magnetizado em regime atrativo a fase típica seja o líquido Luther-Emery (supercondutor), neste caso observamos um bloqueio da condutividade em função da saturação ferromagnética [49].

Em síntese, nossos resultados apontam para uma faixa de transição que se inicia em torno de $P = 0.24$ e se intensifica a partir de $P = 0.32$, o que mostra concordância aproximada com a previsão analítica [19], que estabelece um limite superior universal de $P_C = 1/3$ para a estabilidade da fase FFLO. Além disso, a persistência aproximadamente constante do valor elevado de S_i nas bordas até $P = 0.24$ corrobora, de forma qualitativa, interpretação que associa essa robustez do emaranhamento à presença de uma possível proteção topológica na fase superfluida [49]. A análise conjunta dos perfis de densidade, magnetização e emaranhamento revela uma coexistência rica de fases e transições graduais, impulsionadas pela ação combinada da polarização, do confinamento e da forte interação atrativa, ressaltando a complexidade física desse sistema unidimensional fortemente correlacionado.

5 CONCLUSÃO

Neste trabalho de mestrado, apresentamos o desenvolvimento e a validação de um código baseado na implementação da TLSDA para cadeias unidimensionais fortemente correlacionadas no espectro atrativo do modelo de Hubbard. O objetivo principal deste trabalho metodológico era escapar os problemas de convergência inerentes à DFT neste regime de parâmetros por conta da descontinuidade na energia em $m = 0$, permitindo o estudo desse sistema a baixo custo computacional. A etapa de validação revelou ótima concordância qualitativa e quantitativa com o método exato DMRG, apresentando desvios médios absolutos máximos na ordem de 10^{-2} . Além disso, o código TLSDA se destacou por seu elevado ganho computacional: varreduras que demandariam horas via DMRG foram realizadas em minutos em um simples *laptop* doméstico, ilustrando o potencial do método para investigações exploratórias e estudos de diagramas de fase. Sendo assim, consideramos que o principal objetivo desta pesquisa - de caráter metodológico - foi atingido satisfatoriamente.

A viabilidade computacional do código permitiu uma análise física aprofundada no regime de semi-preenchimento ($\bar{n} = 1$) com interação atrativa forte ($U = -10$). Ao variar a polarização, identificamos uma sequência contínua de transições de fase: de um *bulk* isolante tipo banda, protegido por regiões superfluídas altamente emaranhadas, para um regime metálico central com bordas sugestivamente FFLO, culminando em um isolante ferromagnético totalmente polarizado. A presença da fase FFLO é mais assertiva até aproximadamente $P = 0.24$, com indícios de transição mais intensa a partir de $P \approx 0.32$, em concordância aproximada com o limite superior $P_C = 1/3$ [19]. A persistência de valores elevados de emaranhamento nas bordas ($S_i \approx 1.65$) até essa faixa sugere uma robustez que dialoga com a interpretação de que a fase superfluída (sem magnetização) apresenta proteção topológica [49].

Esses resultados demonstram não apenas a capacidade da TLSDA de capturar fenômenos físicos complexos, como também a riqueza do sistema unidimensional estudado, onde confinamento harmônico, magnetização, interação atrativa e ocupação competem de forma intrincada. Esta dissertação, portanto, contribui com uma ferramenta eficiente para o estudo de sistemas fortemente correlacionados, ao mesmo tempo em que avança na compreensão das transições de fase, com destaque para os mecanismos da fase FFLO, e das estruturas emergentes nesse contexto. Como desdobramentos futuros, propomos empregar o código no mapeamento de diagramas de fase e em investigações sistemáticas sobre o efeito da polarização em diferentes regimes de preenchimento, bem como sobre o papel das probabilidades de ocupação, buscando estender os achados quanto à dinâmica dessas grandezas em sistemas não magnetizados [49]. Também destacamos o potencial do cálculo TLSDA aplicado a uma abordagem híbrida - mobilizá-lo para grandes varreduras sobre diversos parâmetros, permitindo identificar regiões mais sugestivas para análises aprofundadas com técnicas mais precisas como a DMRG, otimizando o estudo dessas cadeias.

BIBLIOGRAFIA

- [1] P. Hohenberg e W. Kohn. “Inhomogeneous Electron Gas”. Em: *Physical Review* 136.3B (1964), B864–B871. DOI: [10.1103/PhysRev.136.B864](https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864).
- [2] W. Kohn e L. J. Sham. “Self-consistent equations including exchange and correlation effects”. Em: *Physical Review* 140.4 (1965), A1133–A1138. DOI: [10.1103/PhysRev.140.A1133](https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133).
- [3] S. R. White e A. E. Feiguin. “Density Matrix Renormalization Group for Quantum Systems in One Dimension”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004), p. 076401. DOI: [10.1103/PhysRevLett.93.076401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.076401).
- [4] U. Schollwöck. “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states”. Em: *Ann. Phys.* 326.1 (2011), pp. 96–192. DOI: [10.1016/j.aop.2010.09.012](https://doi.org/10.1016/j.aop.2010.09.012).
- [5] B. Hourahine et al. “DFTB+, a software package for efficient approximate density functional theory based atomistic simulations”. Em: *The Journal of Chemical Physics* 152.12 (2020), p. 124101. DOI: [10.1063/1.5143190](https://doi.org/10.1063/1.5143190).
- [6] B. G. Johnson, P. M. W. Gill e J. A. Pople. “The performance of a family of density functional methods”. Em: *The Journal of Chemical Physics* 98.7 (1993), pp. 5612–5626. DOI: [10.1063/1.464906](https://doi.org/10.1063/1.464906).
- [7] Gao Xianlong et al. “Bethe ansatz density-functional theory of ultracold repulsive fermions in one-dimensional optical lattices”. Em: *Phys. Rev. B* 73 (2006), p. 165120. DOI: [10.1103/PhysRevB.73.165120](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.165120).
- [8] Gao Xianlong et al. “Lattice density functional theory at finite temperature with strongly density-dependent exchange-correlation potentials”. Em: *Physical Review B* 86.23 (2012), p. 235139. DOI: [10.1103/PhysRevB.86.235139](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.235139).
- [9] Klaus Capelle. “A Bird’s-Eye View of Density-Functional Theory”. Em: *Brazilian Journal of Physics* 36.4A (2006), pp. 1318–1325. DOI: [10.1590/S0103-97562006000400016](https://doi.org/10.1590/S0103-97562006000400016).
- [10] Zu-Jian Ying, Valentina Brosco e José Lorenzana. “Solving lattice density functionals close to the Mott regime”. Em: *Phys. Rev. B* 89 (2014), p. 205130. DOI: [10.1103/PhysRevB.89.205130](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.205130).
- [11] M. C. Gutzwiller. “Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals”. Em: *Physical Review Letters* 10.5 (1963), pp. 159–162. DOI: [10.1103/PhysRevLett.10.159](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.10.159).

- [12] J. Hubbard. “Electron Correlations in Narrow Energy Bands”. Em: *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 276.1365 (1963), pp. 238–257. DOI: [10.1098/rspa.1963.0204](https://doi.org/10.1098/rspa.1963.0204).
- [13] Junjiro Kanamori. “Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals”. Em: *Progress of Theoretical Physics* 30.3 (1963), pp. 275–289. DOI: [10.1143/PTP.30.275](https://doi.org/10.1143/PTP.30.275).
- [14] W. Pauli. “Über den Einfluss der elektrischen Feldes auf das magnetische Verhalten der Elektronen”. Em: *Zeitschrift für Physik* 31 (1925). Princípio da exclusão de Pauli, pp. 765–783.
- [15] N. F. Mott. “Metal-Insulator Transition”. Em: *Rev. Mod. Phys.* 40.4 (1968), pp. 677–683. DOI: [10.1103/RevModPhys.40.677](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.40.677).
- [16] A. J. Larkin e Y. N. Ovchinnikov. “Zhurnal Eksperimental’noi i Teoreticheskoi Fiziki”. Em: *Soviet Physics JETP* 20.2 (1965), pp. 762–769. DOI: [10.1007/BF01040483](https://doi.org/10.1007/BF01040483).
- [17] P. Fulde e R. A. Ferrell. “Superconductivity in a Strong Spin-Exchange Field”. Em: *Phys. Rev.* 135.A (1964), A550–A563. DOI: [10.1103/PhysRev.135.A550](https://doi.org/10.1103/PhysRev.135.A550).
- [18] V. V. França. “Entanglement and exotic superfluidity in spin-imbalanced lattices”. Em: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 475 (2017), pp. 82–87. ISSN: 0378-4371. DOI: [10.1016/j.physa.2017.02.013](https://doi.org/10.1016/j.physa.2017.02.013), URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437117301309>.
- [19] Vivian V. França, Dominik Härndlein e Andreas Buchleitner. “Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov critical polarization in one-dimensional fermionic optical lattices”. Em: *Phys. Rev. A* 86 (3 set. de 2012), p. 033622. DOI: [10.1103/PhysRevA.86.033622](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.86.033622). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.86.033622>.
- [20] T. de Picoli, I. D’Amico e V. V. França. “Metric-Space Approach for Distinguishing Quantum Phase Transitions in Spin-Imbalanced Systems”. Em: *Brazilian Journal of Physics* 48.5 (2018), pp. 472–477. DOI: [10.1007/s13538-018-0604-7](https://doi.org/10.1007/s13538-018-0604-7).
- [21] Klaus Capelle e Vivaldo L. Campo Jr. “Density functionals and model Hamiltonians: Pillars of many-particle physics”. Em: *Physics Reports* 528 (2013), pp. 91–116. DOI: [10.1016/j.physrep.2013.03.002](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2013.03.002).
- [22] Jeferson Joel Moraes Osmari dos Santos. “Estudo do modelo de Hubbard bidimensional não homogêneo via teoria do funcional da densidade”. Dissertação de Mestrado. São Carlos, SP, Brasil: Universidade Federal de São Carlos, 2021. URL: https://bdtd.ibict.br/vufind/Record/SCAR_39d07a0b5bd04068d9aef21e0b9c0b73.
- [23] E. H. Lieb e F. Y. Wu. “Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension”. Em: *Physical Review Letters* 20.25 (1968), pp. 1445–1448. DOI: [10.1103/PhysRevLett.20.1445](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.20.1445).

- [24] M. Ogata e H. Shiba. “Bethe-ansatz wave function, momentum distribution, and spin correlation in the one-dimensional strongly correlated Hubbard model”. Em: *Phys. Rev. B* 41.4 (1990), pp. 2326–2331. DOI: [10.1103/PhysRevB.41.2326](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.41.2326).
- [25] Vivian V. França, Daniel Vieira e Klaus Capelle. “Simple parameterization for the ground-state energy of the infinite Hubbard chain incorporating Mott physics, spin-dependent phenomena, and spatial inhomogeneity”. Em: *New Journal of Physics* 14 (2012), p. 013022. DOI: [10.1088/1367-2630/14/1/013022](https://doi.org/10.1088/1367-2630/14/1/013022).
- [26] N. A. Lima, L. N. Oliveira e K. Capelle. “Density-functional study of the Mott gap in the Hubbard model”. Em: *Europhys. Lett.* 60.4 (2002), pp. 601–607. DOI: [10.1209/epl/i2002-00261-y](https://doi.org/10.1209/epl/i2002-00261-y).
- [27] N. A. Lima et al. “Density Functionals Not Based on the Electron Gas: Local-Density Approximation for a Luttinger Liquid”. Em: *Phys. Rev. Lett* 90 (2003), p. 146402. DOI: [10.1103/PhysRevLett.90.146402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.146402).
- [28] H. Shiba. “Phase transition in the one-dimensional Hubbard model at absolute zero temperature”. Em: *Phys. Rev. B* 6.6 (1972), pp. 3451–3453. DOI: [10.1103/PhysRevB.6.3451](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.3451).
- [29] D. Karlsson, A. Privitera e C. Verdozzi. “Nonequilibrium Dynamics of the Hubbard Model: A Time-Dependent Density Functional Approach”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011), p. 116401. DOI: [10.1103/PhysRevLett.106.116401](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.116401).
- [30] S. Kurth et al. “Time-Dependent Density-Functional Theory for Strongly Correlated Systems”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 104 (2010), p. 236801. DOI: [10.1103/PhysRevLett.104.236801](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.104.236801).
- [31] V. L. Campo e K. Capelle. “Strongly correlated fermions in an optical lattice: An exact solution”. Em: *Phys. Rev. A* 72 (2005), p. 061602. DOI: [10.1103/PhysRevA.72.061602](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.72.061602).
- [32] Gao Xianlong e Reza Asgari. “Spin-density-functional theory for imbalanced interacting Fermi gases in highly elongated harmonic traps”. Em: *Phys. Rev. A* 77 (2008), p. 033604. DOI: [10.1103/PhysRevA.77.033604](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.77.033604).
- [33] Xianlong Gao et al. “Bethe ansatz density-functional theory of ultracold repulsive fermions in one-dimensional optical lattices”. Em: *Phys. Rev. B* 73 (16 abr. de 2006), p. 165120. DOI: [10.1103/PhysRevB.73.165120](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.165120). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.165120>.
- [34] John Bardeen, Leon N. Cooper e J. Robert Schrieffer. “Theory of Superconductivity”. Em: *Phys. Rev.* 108 (5 dez. de 1957), pp. 1175–1204. DOI: [10.1103/PhysRev.108.1175](https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.108.1175>.

- [35] A. Buzdin, Y. Matsuda e T. Shibauchi. “FFLO State in Thin Superconducting Films”. Em: *Europhys. Lett.* 80.6 (dez. de 2007), p. 67004. DOI: [10.1209/0295-5075/80/67004](https://doi.org/10.1209/0295-5075/80/67004). URL: <https://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/80/67004>.
- [36] Roberto Casalbuoni e Giuseppe Nardulli. “The physics of the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state”. Em: *Rev. Mod. Phys.* 76 (2004), pp. 263–320. DOI: [10.1103/RevModPhys.76.263](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.76.263).
- [37] R. Beyer e J. Wosnitza. “Emerging Evidence for FFLO States in Layered Organic Superconductors”. Em: *Low Temp. Phys.* 39.3 (2013). [Translated from *Fizika Nizkikh Temperatur*, Vol. 39, No. 3, pp. 293–300, March 2013], pp. 225–231. DOI: [10.1063/1.4795172](https://doi.org/10.1063/1.4795172). URL: <https://doi.org/10.1063/1.4795172>.
- [38] Yean-an Liao et al. “Spin-imbalance in a one-dimensional Fermi gas”. Em: *Nature* 467 (2010), pp. 567–569. DOI: [10.1038/nature09393](https://doi.org/10.1038/nature09393).
- [39] Melissa C. Reville et al. “1D to 3D Crossover of a Spin-Imbalanced Fermi Gas”. Em: *Phys. Rev. Lett.* 117 (2016), p. 235301. DOI: [10.1103/PhysRevLett.117.235301](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.235301).
- [40] Lin Ye et al. “Observation of pairing in a 1D Fermi gas with spin imbalance”. Em: *Phys. Rev. A* 97 (2018), p. 053614. DOI: [10.1103/PhysRevA.97.053614](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.97.053614).
- [41] Daniel E. Sheehy. “Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state of two-dimensional imbalanced Fermi gases”. Em: *Phys. Rev. A* 92 (2015), p. 053631. DOI: [10.1103/PhysRevA.92.053631](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.92.053631).
- [42] Agnieszka Cichy e Andrzej Ptok. “Reentrant Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov superfluidity in the honeycomb lattice”. Em: *Phys. Rev. A* 97 (2018), p. 053619. DOI: [10.1103/PhysRevA.97.053619](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.97.053619).
- [43] S. Molatta et al. “Order-parameter evolution in the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov phase”. Em: *Phys. Rev. B* 109 (2024), p. L020504. DOI: [10.1103/PhysRevB.109.L020504](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.L020504).
- [44] Shusaku Imajo et al. “Emergent anisotropy in the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov state”. Em: *Nat. Commun.* 13 (2022), p. 5590. DOI: [10.1038/s41467-022-33354-1](https://doi.org/10.1038/s41467-022-33354-1).
- [45] Chang-woo Cho et al. “Competition between orbital effects, Pauli limiting, and Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov states in 2D transition metal dichalcogenide superconductors”. Em: *New J. Phys.* 24 (2022), p. 083001. DOI: [10.1088/1367-2630/ac8114](https://doi.org/10.1088/1367-2630/ac8114).
- [46] K. V. Samokhin e B. P. Truong. “Current-carrying states in Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov superconductors”. Em: *Phys. Rev. B* 96 (2017), p. 214501. DOI: [10.1103/PhysRevB.96.214501](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.214501).
- [47] K. V. Samokhin e B. P. Truong. “Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov superconductors near a surface”. Em: *Phys. Rev. B* 99 (2019), p. 014503. DOI: [10.1103/PhysRevB.99.014503](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.014503).

- [48] Andrzej Ptok e Dawid Crivelli. “Influence of Finite Size Effects on the Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov State”. Em: *Commun. Comput. Phys.* 21 (2017), pp. 748–762. DOI: [10.4208/cicp.OA-2016-0041](https://doi.org/10.4208/cicp.OA-2016-0041).
- [49] M. Sanino, I. M. Carvalho e V. V. França. “Entanglement as a topological marker in harmonically confined attractive Fermi–Hubbard chains”. Em: *APL Quantum* 2.2 (mai. de 2025). ISSN: 2835-0103. DOI: [10.1063/5.0255322](https://doi.org/10.1063/5.0255322). URL: <http://dx.doi.org/10.1063/5.0255322>.
- [50] H. A. Bethe. “Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette”. Em: *Zeitschrift für Physik* 71 (1931), pp. 205–226. DOI: [10.1007/BF01341708](https://doi.org/10.1007/BF01341708).
- [51] William H. Press et al. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. 3ª ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. ISBN: 978-0-521-88068-8.
- [52] Vivian V. França e Irene D’Amico. “Entanglement from density measurements: Analytical density-functional for the entanglement of strongly correlated fermions”. Em: *Physical Review A* 83.4 (2011), p. 042311. DOI: [10.1103/PhysRevA.83.042311](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.83.042311). URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.83.042311>.
- [53] D. Arisa e V. V. França. “Linear mapping between magnetic susceptibility and entanglement in conventional and exotic one-dimensional superfluids”. Em: *Phys. Rev. B* 101 (21 jun. de 2020), p. 214522. DOI: [10.1103/PhysRevB.101.214522](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.214522). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.214522>.