

RESSALVA

**Atendendo solicitação do(a)
autor(a), o texto completo deste
documento será
disponibilizado somente a
partir de 09/02/2026.**

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 inhomogeneidade 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.

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 superfluida (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 Ptak. “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>.