

Daniel Arisa Moraes e Silva

Potenciais elétrico e magnético e seus efeitos
na dinâmica de carga e transições de fase em
cadeias de Hubbard 1D

Araraquara - SP

Abril, 2025

Daniel Arisa Moraes e Silva

Potenciais elétrico e magnético e seus efeitos na
dinâmica de carga e transições de fase em cadeias de
Hubbard 1D

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

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

Araraquara - SP

Abril, 2025

S586p Silva, Daniel Arisa Moraes e
Potenciais elétrico e magnético e seus efeitos na dinâmica
de carga e transições de fase em cadeias de Hubbard 1D /
Daniel Arisa Moraes e Silva. -- Araraquara, 2025
98 f. : il.

Tese (doutorado) - Universidade Estadual Paulista (UNESP),
Instituto de Química, Araraquara
Orientadora: Vivian Vanessa França Henn

1. Matéria condensada. 2. Modelo de Hubbard. 3. Campos
elétricos. 4. Nanoestruturas. 5. Entropia quântica. I. Título.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA TESE: Potenciais elétrico e magnético e seus efeitos na dinâmica de carga e transições de fase em cadeias de Hubbard 1D.

AUTOR: DANIEL ARISA MORAES E SILVA

ORIENTADORA: VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN

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

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

Professor Adjunto I ANDRÉ FARIAS DE MOURA (Participação Virtual)
Departamento de Química / Universidade Federal de São Carlos - UFSCar

Profa. Dra. ROMARLY FERNANDES DA COSTA (Participação Virtual)
Departamento de Física / Centro de Ciências Naturais e Humanas - UFABC - Santo André

Prof. Dr. MARCO AURELIO CEBIM (Participação Virtual)
Departamento de Química Analítica, Físico-Química e Inorgânica / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Profa. Dra. ERICA REGINA FILLETTI NASCIMENTO (Participação Virtual)
Departamento de Engenharia, Física e Matemática / Instituto de Química - UNESP

Araraquara, 22 de abril de 2025

Impacto Potencial desta Pesquisa

A pesquisa explora sistemas unidimensionais fortemente correlacionados, buscando desvendar os mecanismos quânticos que governam suas propriedades. Os resultados podem impulsionar avanços em nanotecnologia e no desenvolvimento de dispositivos quânticos inovadores.

Potential Impact of this Research

The research explores strongly correlated one-dimensional systems, aiming to unravel the quantum mechanisms that govern their properties. The results may drive advancements in nanotechnology and the development of innovative quantum devices.

DADOS CURRICULARES

IDENTIFICAÇÃO

Nome: Daniel Arisa Moraes e Silva

Nome em citações bibliográficas: D. ARISA

ENDEREÇO PROFISSIONAL

Instituição: Universidade Estadual Paulista (UNESP)

Unidade: Instituto de Química

Departamento: Física e Matemática

Endereço: Rua Prof. Francisco Degni, 55, Araraquara-SP

CEP: 14800-060

E-mail: daniel.arisa@unesp.br

FORMAÇÃO ACADÊMICA/TITULAÇÃO

Doutorado em Química – UNESP Araraquara (2020 - momento)

Mestrado em Química – UNESP Araraquara (2017 - 2019)

Bacharelado em Química – UNESP Araraquara (2011 - 2016)

ATUAÇÃO PROFISSIONAL

CETEC - Centro Técnico e Educacional de Araraquara (2018 - 2021)

PRODUÇÃO BIBLIOGRÁFICA

Artigos completos publicados em periódicos:

- D. Arisa and V. V. França, **Linear mapping between magnetic susceptibility and entanglement in conventional and exotic one-dimensional superfluids.**

Physical Review B 101, 214522 (2020)

Artigos aceitos para publicação:

- D. Arisa, R. M. dos Santos, I. M. Carvalho and V. V. França, **Electric-potential difference driven charge transfer instabilities in a one-dimensional Hubbard model**, EPJ B Topical Issue: Phase Transitions and Magnetism in Spin Systems (2025)

Trabalhos publicados em anais de eventos científicos:

- Apresentação de Pôster Científico no "Autumn Meeting Brazilian Physical Society"(2020)
- Apresentação de Pôster Científico no "Simpósio Brasileiro de Química Teórica"(2021)
- Apresentação de Pôster Científico no "Encontro de Física Norte e Nordeste"(2022)
- Apresentação de Pôster Científico no "Density-Functional Theory Meets Quantum Technologies"(2022)
- Apresentação de Pôster Científica no "Autumn Meeting Brazilian Physical Society"(2024)

Apresentação de trabalhos e/ou palestras:

- Palestra apresentada na "51ª Semana da Química"(2021)
- Palestra apresentada no "XIV SEMANA CIENTÍFICA E CULTURAL DA UNIFESP DIADEMA"(2023)

Agradecimentos

À Prof.^a Dr.^a Vivian Vanessa França pela excelente orientação, inspiração, amizade e, especialmente, pela paciência.

Aos meus grandes amigos do grupo Tati, Isaac, Murilo, Silvio, Maria, Marina, Ramiro, Maia, Fabin, Fernando e Gui pela parceria e por tornarem esse processo mais prazeroso.

Ao meu pai Ivan por todo apoio e companheirismo que sempre foram o meu alicerce, assim sempre me proporcionando as oportunidades de poder estudar.

À minha mãe do coração Helena por todo apoio e companheirismo, sempre me aconselhando e cuidando de mim.

À minha mãe Regina por todo o amor e companheirismo, sempre me apoiando e me dando forças.

À minha avó Elza por todo o carinho e companheirismo, sempre me apoiando e torcendo por mim.

Ao meu grande irmão Lucas por todo o companheirismo.

Aos meus padrinhos Denise e Marco e às minhas primas Nati e Juju por todas as aventuras e do eterno companheirismo.

Aos meus grandes amigos Careca, Rober, Márcio, Leozera, Alfredo, Ari, Preta, Dexter, Maguila, Pick, Bia, Sandra, Silvia, Seu Lino, Paty, Manaus, Jen, Irã, Jô, Bruna, Helô, Lê, Vini, Sara, Jéssica e Bruno por todos os momentos incríveis que passamos.

Em especial à minha namorada Bibi pelo amor incondicional, sempre ao meu lado e por todos esses anos incríveis que passamos juntos.

*“Não julgue a minha trajetória pelo sucesso,
mas sim pelas vezes que caí e me levantei novamente”*

Nelson Mandela

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001

Resumo

Este trabalho investiga os efeitos da aplicação de campos elétrico e magnético em sistemas eletrônicos unidimensionais descritos pelo modelo de Hubbard, analisando como tais perturbações influenciam a competição entre a localização e a itinerância dos elétrons. Nesse contexto, o modelo de Hubbard unidimensional constitui uma estrutura fundamental para o estudo de fenômenos como transições metal-isolante. O campo elétrico altera a distribuição de cargas, podendo induzir transições eletrônicas de fase, enquanto o campo magnético influencia o alinhamento de spins e as propriedades magnéticas do sistema. Para caracterizar essas transições, empregamos a entropia de emaranhamento de von Neumann, uma grandeza fundamental que quantifica correlações quânticas e apresenta comportamento característico próximo às transições de fase. Além disso, investigamos a relação entre essa entropia a susceptibilidade magnética. Esse mapeamento estabelece uma conexão entre uma medida teórica de correlação quântica e uma grandeza acessível experimentalmente, proporcionando uma nova perspectiva sobre fenômenos críticos em sistemas eletrônicos correlacionados. As simulações numéricas são conduzidas por meio do método de Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG), uma abordagem eficiente para tratar a complexidade exponencial de sistemas quânticos de muitos corpos.

Palavras-chave: Transição de fase quântica, entropia de emaranhamento, modelo de Hubbard, DMRG.

Abstract

This work investigates the effects of applying electric and magnetic fields to one-dimensional electronic systems described by the Hubbard model, analyzing how these perturbations influence the competition between electron localization and itinerancy. In this context, the one-dimensional Hubbard model provides a fundamental framework for studying phenomena such as metal-insulator transitions. The electric field alters charge distribution, potentially inducing electronic phase transitions, while the magnetic field affects spin alignment and the system's magnetic properties. To characterize these transitions, we employ the von Neumann entanglement entropy, a fundamental quantity that quantifies quantum correlations and exhibits characteristic behavior near phase transitions. Additionally, we investigate the relationship between this entropy and magnetic susceptibility. This mapping establishes a connection between a theoretical measure of quantum correlation and an experimentally accessible quantity, offering a new perspective on critical phenomena in correlated electronic systems. Numerical simulations are carried out using the Density Matrix Renormalization Group (DMRG) method, an efficient approach for handling the exponential complexity of many-body quantum systems.

Key words: Quantum phase transition, entanglement entropy, Hubbard model, DMRG.

Lista de Figuras

- Figura 1 – Representação esquemática da estrutura de bandas em um isolante de Mott. O gap de energia entre as bandas de condução e de valência é determinado pela intensidade da repulsão de Coulomb U , que separa os estados eletrônicos. À esquerda, o comportamento metálico é exibido, com as bandas de energia se sobrepondo, enquanto à direita, o efeito do isolante de Mott abre um gap de energia devido à forte correlação eletrônica. 25
- Figura 2 – Representação esquemática da estrutura de bandas em isolantes de banda. O gap de energia é determinado pela densidade local n_i , que controla a separação entre as bandas de condução e de valência. À esquerda, o comportamento metálico é caracterizado por bandas sobrepostas, enquanto à direita, o isolante de banda apresenta um gap de energia devido à estrutura eletrônica do material. 27
- Figura 3 – Representação esquemática do Modelo de Hubbard para uma cadeia de L sítios, descrevendo a itinerância em uma nanoestrutura eletrônica através do parâmetro t_{ij} . Os férmions que não estão acoplados em um sítio i podem transitar para um sítio vizinho j , desde que o sítio não esteja totalmente preenchido. As partículas localizadas no mesmo sítio estão sujeitas à interação de repulsão Coulombiana U_i 29
- Figura 4 – Representação esquemática do potencial elétrico aplicado ao dímero no modelo de Hubbard com $L = 2$ sítios, onde o potencial em cada sítio é definido de modo que $V_i = -V_j$, estabelecendo uma diferença de potencial entre os sítios. 30

Figura 5 – Representação esquemática do potencial elétrico aplicado ao Modelo de Hubbard para $L = 16$ sítios, onde o potencial elétrico é dividido entre duas regiões a e b , de modo que $V_a = -V_b$. As regiões correspondem às duas metades da cadeia de sítios, refletindo a implementação de um campo elétrico aplicado de forma simétrica.	30
Figura 6 – Representação esquemática da matriz $\mathcal{H}$, com destaque para os estados relevantes no subespaço. O quadrado vermelho identifica os elementos selecionados, que serão utilizados na análise subsequente.	33
Figura 7 – Representação esquemática da etapa infinita do DMRG, em que novos sítios são adicionados iterativamente à esquerda do sítio inicial, assim formando o superbloco. A cada iteração o hamiltoniano do superbloco é diagonalizado, preservando apenas os m estados correspondentes aos maiores autovalores λ_m	36
Figura 8 – Representação esquemática do algoritmo DMRG na etapa infinita. Obtendo-se os novos blocos A e B da etapa anterior (1), um novo sítio é adicionado a cada bloco (2), em que é construído o novo superbloco (3) e diagonalizado assim gerando os m maiores autovalores λ_m a fim de construir os novos blocos para a próxima iteração (4).	37
Figura 9 – Representação esquemática do algoritmo DMRG na etapa finita. Inicia-se a varredura enquanto um bloco cresce e o outro encolhe, e o bloco encolhido é recuperado dos blocos obtidos na varredura anterior e assim armazenado.	38
Figura 10 – Energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. A energia diminui de forma monotônica para qualquer interação U	47

- Figura 11 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. A partir de um determinado valor de V o emaranhamento responde ao campo aplicado, atingindo assim um máximo que posteriormente decai em que $S \rightarrow 0$ 48
- Figura 12 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para $U = 10$, para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. O valor de V correspondente à primeira resposta do emaranhamento ao campo é denominado V_1 , atingindo assim um grau de emaranhamento máximo em V_c , que decai posteriormente em que, a partir de V_2 , $S \rightarrow 0$ 50
- Figura 13 – Probabilidade de dupla ocupação média em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. As curvas crescem de forma monotônica atingindo um platô. 51
- Figura 14 – Densidade eletrônica efetiva nos sítios do potencial negativo em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0.0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. De maneira similar à $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$, as curvas crescem de forma monotônica atingindo um platô. 52
- Figura 15 – Representação esquemática do Isolante de Mott no Modelo de Hubbard. Cada sítio é preenchido por uma única partícula com estado de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, onde a localidade do sistema é determinado pela repulsão coulombiana U 53
- Figura 16 – Representação esquemática do regime metálico no Modelo de Hubbard. O sistema tem caráter delocalizado em que os quatro possíveis estados de ocupação variam entre si a medida que V aumenta. 53
- Figura 17 – Representação esquemática do Isolante de banda no Modelo de Hubbard. Cada sítio do potencial negativo da cadeia é preenchido por um par eletrônico, assim congelando totalmente o sistema onde não há qualquer excitação de spin ou carga, caracterizando a localidade do sistema. 54

Figura 18 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para $U = 10$, para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. Os pontos críticos V_1 e V_2 representam as transições metal-isolante, em que V_1 caracteriza a transição do isolante de Mott para o metal, e V_2 a transição do metal para o isolante de banda.	54
Figura 19 – Flutuação de spin média em função do potencial elétrico V (a) e flutuação de carga média em função do potencial elétrico V (b), para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios.	56
Figura 20 – Derivada parcial de primeira ordem da probabilidade de dupla ocupação média em função do potencial elétrico V para vários U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. O regime metálico descrito pela variação da dupla ocupação é demarcado assim definindo V_1 e V_2 para qualquer valor de U	57
Figura 21 – Energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. A energia diminui de forma monotônica para qualquer interação U , porém sem a saturação das mesmas.	58
Figura 22 – Representação esquemática do Isolante de Mott no Modelo de Hubbard para $P = 0.5$. Cada sítio é preenchido por uma única partícula com estado de spin σ definido, onde a localidade do sistema é determinado pela repulsão coulombiana U	59
Figura 23 – Representação esquemática do "band-like" no Modelo de Hubbard para $P = 0.5$. Devido a diferença entre as populações de spin, forma-se apenas um único estado duplamente ocupado, assim não preenchendo a banda totalmente.	59

Figura 24 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. O emaranhamento é menor em $V < V_1$ devido ao congelamento dos estados de spin ocasionados por H , e maior para $V > V_2$, tendo em vista a formação de um único estado duplamente ocupado assim permitindo mobilidade de carga pela rede.	60
Figura 25 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para $U = 10$, $P = 0$ e $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. Apesar do comportamento do emaranhamento ser diferente em relação à $P = 0$, o grau máximo de emaranhamento definido por V_c é igual.	61
Figura 26 – Probabilidade de ocupação simples $\sigma = \uparrow$ média em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. As curvas decrescem monotonicamente atingindo um platô.	62
Figura 27 – Probabilidade de dupla ocupação média em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios.	63
Figura 28 – Densidade eletrônica efetiva nos sítios do potencial negativo em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios.	63
Figura 29 – Energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. A energia diminui de forma monotônica para qualquer interação U como observado na cadeia menor, indicando que o sistema se encontra dentro do limite termodinâmico.	65

Figura 30 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. Com a minimização dos efeitos de borda, os pontos críticos V_1 e V_2 estão melhores definidos quando comparados à cadeia menor.	66
Figura 31 – Probabilidade de dupla ocupação média em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. As curvas crescem de forma monotônica atingindo um platô, em que os pontos críticos também se encontram mais delineados.	67
Figura 32 – Gaps de energia (Δ_{sp} , Δ_c e Δ_s) em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. O regime metálico é caracterizado por todos os gaps tenderem à zero, enquanto as fases isolantes caracterizam gaps positivos refletindo o custo energético para excitar o sistema.	69
Figura 33 – Gaps de energia (Δ_{sp} , Δ_c e Δ_s) do regime metálico em função do potencial elétrico V para $U = 10$, $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. As oscilações do regime metálico manifestadas nas demais grandezas emergem nos gaps de energia, assim confirmando que tal fenômeno não se trata de efeitos de cadeia ou oscilações locais.	71
Figura 34 – Taxa de variação da probabilidade de dupla ocupação em relação à V , em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. As oscilações na derivada são mais distribuídas por um regime mais amplo de V , mostrando que a resposta do sistema à V é mais susceptível à U , revelando uma complexa dinâmica entre os termos.	73

Figura 35 – Taxa de variação dos termos isolados de V e U em relação à V , em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. Ambos os termos apresentam variações proporcionais, embora com escalas diferentes, refletindo a dinâmica itinerante do sistema.	75
Figura 36 – Emaranhamento entre as metades da cadeia em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. As oscilações do regime metálico se manifestam na correlação entre os potenciais positivo e negativo.	77
Figura 37 – Emaranhamento de um único sítio em relação ao restante da cadeia para $V = 10$, $U = 6$, $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. Mesmo com os graus de liberdade das partículas congelados, o sistema exibe um grau de emaranhamento residual nos sítios onde os potenciais se conectam (sítios 16 e 17).	78
Figura 38 – Derivada parcial de primeira ordem da probabilidade de dupla ocupação média em função da polarização P , para diversos valores de V e $U = 6$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. O regime metálico é suprimido pela polarização, assim não sendo manifestado quando o grau de polarização for máximo.	80
Figura 39 – Taxa de variação dos termos isolados de V (a) e U (b) em relação à V , em função da polarização P , para diversos valores de V , $U = 6$, $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. Como o regime metálico é caracterizado pela complexa dinâmica entre ambos os termos, estes por sua vez são igualmente suprimidos pela polarização.	80

Figura 40 – Susceptibilidade magnética em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. A medida que a competição entre os termos V e U se intensifica, o sistema torna-se progressivamente mais susceptível à aplicação de um campo magnético externo.	82
Figura 41 – Entropia de von Neumann e Parâmetro de Gruneisen em função do potencial elétrico V para $U = 1$, $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. Ambas as curvas são monotônicas, em que o parâmetro de Gruneisen apresentam uma sutil oscilação.	83
Figura 42 – Entropia de von Neumann e Parâmetro de Gruneisen em função do potencial elétrico V para $U = 6$ (a) e $U = 10$ (b), $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. As oscilações do regime metálico se manifestam pelo parâmetro de Gruneisen, em que V_c do emaranhamento acompanha relativo o <i>min</i> e <i>max</i> locais do Gruneisen.	84
Figura 43 – Pontos críticos do emaranhamento V_c e do parâmetro de Gruneisen V_{min} e V_{min} em função da interação coulombiana U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. As retas não convergem para $U \rightarrow \infty$, porém exibem uma relação intrínseca entre ambas as grandezas devido à monotonicidade das retas.	84
Figura 44 – Parâmetro de Gruneisen em função do potencial elétrico V para $P = 0$ e $P = 0.5$, $U = 6$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. A grandeza se mostrou adequada para caracterizar a complexidade da fase metálica no regime com polarização nula, mas apresentou limitações sob a presença de polarização.	87

Lista de Tabelas

- Tabela 1 – Descrição das diferentes fases do sistema para cada regime de V . O sistema é descrito pela fase de Isolante de *Mott* em $V < V_1$, no Regime Metálico em $V_1 < V < V_2$, e na fase de Isolante de Banda em $V > V_2$, para qualquer valor de U 55
- Tabela 2 – Parâmetros ajustados de regressão linear para os pontos críticos de V_c , V_{min} e V_{max} em função da interação Coulombiana U 85
- Tabela 3 – Valores de x e y nas interseções entre V_c , V_{min} e V_{max} . Os valores negativos de x e y referentes à U e V mostram que não há possibilidade de mapear as grandezas para $U > 0$ 86

Conteúdo

1	INTRODUÇÃO	20
2	FUNDAMENTOS TEÓRICOS	24
2.1	Transição Metal - Isolante	24
2.1.1	Metal - Isolante de Mott	24
2.1.2	Metal - Isolante de Banda	26
2.2	Modelo de Hubbard	27
2.2.1	Potencial Externo	29
2.3	Grupo de Renormalização da Matriz Densidade	32
2.3.1	Espaço de Hilbert	32
2.3.2	Construção do Superbloco	35
2.3.3	Matriz de Densidade Reduzida	38
2.4	Emaranhamento	39
2.4.1	Entropia de von Neumann	41
2.4.2	Emaranhamento no Modelo de Hubbard	42
3	METODOLOGIA	44
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	47
4.1	Cadeia pequena não polarizada	47
4.2	Cadeia pequena polarizada	58
4.3	Cadeia estendida não polarizada	64
4.4	Cadeia estendida polarizada	79
4.5	Mapeamento Emaranhamento e Parâmetro de Gruneisen	83
5	CONCLUSÕES	88
	BIBLIOGRAFIA	90

1 Introdução

Historicamente, o estudo das propriedades dos sólidos teve como ponto de partida a compreensão do estado metálico. Em 1900, Paul Drude propôs a primeira descrição teórica dos metais por meio do modelo de Drude [1], e que posteriormente, em 1928, Felix Bloch avançou significativamente ao resolver a equação de Schrodinger para um potencial periódico, estabelecendo assim o teorema de Bloch [2]. Com o desenvolvimento do modelo de Drude e os avanços proporcionados pelo teorema de Bloch, a compreensão das propriedades dos metais obteve um grande salto em um curto período de tempo.

Posteriormente, um grupo de materiais se destacou por exibir interações muito intensas entre os elétrons, de modo que a física até então desenvolvida fosse insuficiente para a descrição das propriedades desses materiais. Denominados materiais fortemente correlacionados [3-5], são majoritariamente compostos por elementos de transição, terras raras e actínídeos [6]. A presença de subníveis energéticos de maior intensidade, como orbitais d ou f parcialmente preenchidos, então sendo espacialmente restritos, resultam na localidade dos elétrons próximos aos núcleos atômicos, aumentando sobremaneira a repulsão coulombiana entre os mesmos [6-7]. Nesses sistemas, a interação eletrônica desempenha um papel central na descrição das propriedades dos sólidos, ao descrever a complexa competição entre o caráter localizado e a itinerância dos elétrons [7].

Fenômenos complexos emergem a partir da não trivialidade desta competição, como a transição metal-isolante [8]. Investigada pelo físico britânico Neville Mott, a transição metal - isolante de Mott [8-9] prevê que materiais caracterizados por uma estrutura eletrônica semi-preenchida, no qual em teoria permitiriam a mobilidade de carga, comportam-se como isolantes devido às intensas interações entre elétrons [8-9]. Em contraste com a transição de Mott, que é impulsionada por interações eletrônicas, a transição metal-isolante de banda é descrita pelo modelo de bandas da teoria de sólidos

[8, 10-11]. Nesse cenário, o isolante reside na estrutura eletrônica do material, devido a existência de um gap de energia entre a banda de valência e a banda de condução, impedindo a mobilidade dos elétrons e, conseqüentemente, a condução elétrica [10-12].

Um dos principais objetivos ao estudar a física dos metais é impulsionar o desenvolvimento de nanotecnologias, nas quais materiais e dispositivos em escala nanométrica desempenham um papel crucial [13]. Nesse contexto, é fundamental compreender o comportamento de sistemas metálicos de baixa dimensionalidade, como sistemas de elétrons unidimensionais (1D) [13-16]. Nesses sistemas, as interações entre elétrons são naturalmente intensificadas, tornando inadequadas as descrições efetivas que tratam as interações como meros ajustes de parâmetros em modelos de partículas livres [14].

O modelo de Hubbard unidimensional [17] é amplamente empregado para descrever tais materiais, pois incorpora dois termos principais: a energia cinética, que permite o tunelamento de elétrons entre sítios vizinhos, e a interação de Coulomb local, que penaliza a dupla ocupação de um mesmo sítio, capturando a competição entre delocalização e correlação eletrônica [17-18]. Esse modelo permite explorar fenômenos como as transições metal-isolante, além de descrever propriedades magnéticas em sistemas fortemente correlacionados [17-19].

A fim de modificar o comportamento eletrônico desses materiais, a aplicação de campos elétricos e magnéticos desempenha um papel fundamental na manipulação das propriedades dos sistemas fortemente correlacionados. O campo elétrico atua diretamente na distribuição de cargas, devido ao potencial eletrostático submetido aos elétrons [20]. Essa perturbação pode induzir uma polarização eletrônica, alterar a distribuição espacial dos elétrons e, em alguns casos, desencadear transições de fase eletrônicas e até mesmo estados topológicos [20-21].

Por outro lado, a aplicação de um campo magnético influencia principalmente os momentos magnéticos dos elétrons e a organização dos spins no material [22-23]. Dependendo da intensidade e da natureza do campo aplicado, é possível induzir transições

magnéticas, assim alterando substancialmente a resistência elétrica do sistema [22-24]. Em sistemas unidimensionais descritos pelo modelo de Hubbard, a influência dos campos magnéticos é ainda mais pronunciada. A interação entre o campo aplicado e os spins dos elétrons pode alterar a competição entre estados localizados e itinerantes [22], resultando em fenômenos como a separação de carga e spin, e até induzir estados supercondutores exóticos [25-28].

Do ponto de vista teórico, uma das formas mais eficazes de detectar tais transições é por meio da análise da entropia de emaranhamento ou também denominada entropia de von Neumann [29]. Tal grandeza quantifica o grau de correlação quântica entre diferentes partes do sistema e exibe um comportamento característico próximo às transições de fase. Ao contrário das transições de fase clássicas, que ocorrem a temperaturas finitas e são caracterizadas por quebras espontâneas de simetria, as transições de fase quânticas ocorrem a temperatura zero e são impulsionadas por flutuações quânticas. Tais flutuações emergem da competição entre diferentes interações no sistema, levando a mudanças abruptas na natureza dos estados quânticos [29].

O estudo de tais sistemas fortemente interagentes exige o desenvolvimento de modelos e cálculos complexos que vão além das aproximações utilizadas para materiais convencionais, assim demandando o uso de métodos teóricos que considerem explicitamente as correlações de muitos corpos. O método Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG) [30-32] é uma das ferramentas numéricas mais poderosas para o estudo de sistemas fortemente correlacionados, especialmente em sistemas unidimensionais, assim sendo uma alternativa eficiente para lidar com o crescimento exponencial do espaço de Hilbert em sistemas de muitos corpos. O método baseia-se na otimização da truncagem dos estados, preservando apenas os mais relevantes para a descrição da função de onda do sistema, assim utilizando a matriz densidade reduzida, obtida pela decomposição do sistema em blocos menores [31-32].

Neste trabalho investigamos, portanto, os efeitos da aplicação de campos elétricos

e magnéticos em um sistema unidimensional descrito pelo modelo de Hubbard, buscando compreender como tais perturbações influenciam a estrutura eletrônica e as propriedades emergentes do sistema. A partir da análise das transições de fase e das correlações quânticas, foi possível aprofundar o entendimento sobre a relação entre estados localizados e itinerantes dos elétrons, bem como explorar possíveis conexões entre a entropia de emaranhamento e propriedades termodinâmicas mensuráveis, como a susceptibilidade magnética.

No Capítulo 2 são apresentados os fundamentos teóricos das fases eletrônicas estudadas, incluindo a discussão detalhada sobre o modelo de Hubbard, os princípios do método DMRG e, por fim, os conceitos de emaranhamento quântico e sua aplicação como ferramenta para a caracterização de transições de fase quânticas. No Capítulo 3 é apresentada a metodologia empregada para a realização dos cálculos numéricos, enquanto o Capítulo 4 visa discutir os resultados obtidos ao longo da pesquisa. Por fim, no Capítulo 5 são apresentadas as conclusões do estudo, sintetizando as principais implicações dos resultados obtidos e perspectivas futuras.

2 Fundamentos Teóricos

2.1 Transição Metal - Isolante

As transições metal-isolante são observadas em uma ampla gama de materiais, desde sistemas simples até compostos complexos [9, 33-34]. A transição entre estados metálico e isolante é um fenômeno de grande relevância em física da matéria condensada, com implicações em diversas áreas da ciência e tecnologia [33-35]. Essa transição pode ocorrer devido a uma variedade de mecanismos, como dopagem ou a aplicação de campos externos, como campos elétricos e magnéticos. Em sistemas metálicos, os elétrons de condução se movem livremente pelo material, contribuindo para sua alta condutividade elétrica [35]. No entanto, sob certas condições, esses elétrons podem ser localizados devido a interações entre partículas, efeitos de desordem ou abertura de um gap de energia, resultando em um estado isolante [33-34].

2.1.1 Metal - Isolante de Mott

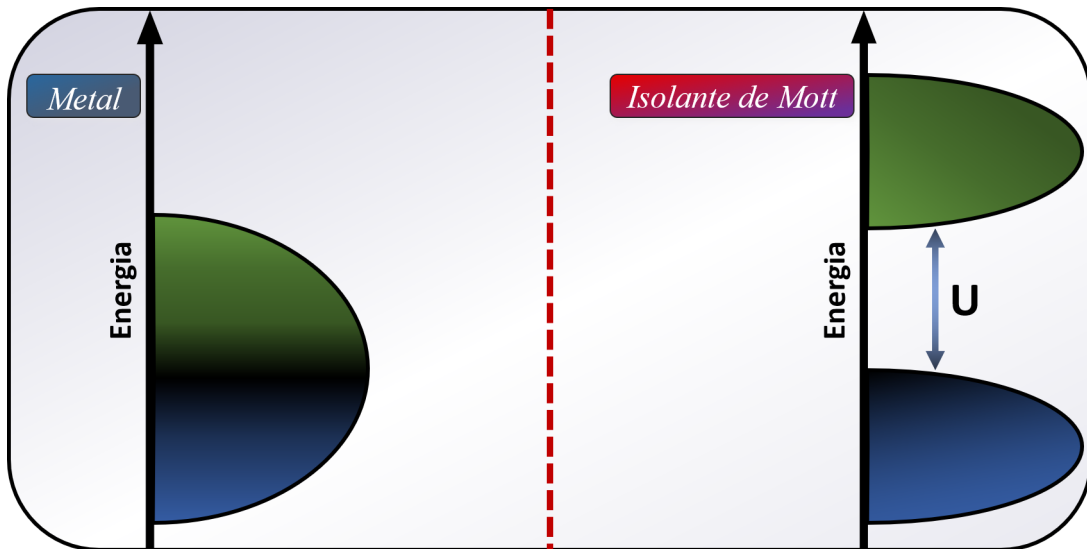
Os isolantes de Mott [9] são uma classe de materiais que, de acordo com a teoria convencional de bandas [2, 36], atuariam como bons condutores, mas que no entanto, se comportam como isolantes, especialmente em baixas temperaturas. Esse comportamento anômalo é consequência das intensas interações entre os elétrons, sendo assim, o fenômeno não pode ser descrito adequadamente pela teoria de bandas tradicional [36-37].

De acordo com a teoria de bandas de Bloch [2], materiais com bandas parcialmente preenchidas, caracterizado por um número ímpar de elétrons por célula unitária, não reduziram qualquer grau de liberdade dos elétrons, uma vez que o nível de Fermi [36] (nível mais alto de energia ocupado por elétrons em um sistema no estado fundamental à $0K$) se encontra dentro da banda de condução. No entanto, nos isolantes de Mott, as fortes interações de Coulomb entre os elétrons, representadas pelo termo U , limitam a

itinerância dos elétrons. O sistema apresenta o chamado gap de Mott [33], como mostrado na Fig. 1, uma lacuna de energia que separa o estado fundamental do primeiro estado excitado, impondo um custo energético quanto à movimentação eletrônica.

Apesar da itinerância ser nula, esse regime isolante é caracterizado por propriedades magnéticas notáveis [38-39], resultantes do acoplamento entre os spins dos elétrons localizados, em que $n_{i,\sigma} = 1$ para $\sigma = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$. Devido à intensa flutuação dos estados de spin, esse acoplamento frequentemente leva ao surgimento de ordenamentos magnéticos [38], onde os momentos magnéticos dos elétrons vizinhos se alinham antiparalelamente, acarretando na minimização da energia total do sistema. Essa interação magnética é uma consequência direta das fortes correlações eletrônicas e da ausência de movimento eletrônico, tendo em vista que as flutuações de carga estão fortemente suprimidas [38-39].

Figura 1 – Representação esquemática da estrutura de bandas em um isolante de Mott. O gap de energia entre as bandas de condução e de valência é determinado pela intensidade da repulsão de Coulomb U , que separa os estados eletrônicos. À esquerda, o comportamento metálico é exibido, com as bandas de energia se sobrepondo, enquanto à direita, o efeito do isolante de Mott abre um gap de energia devido à forte correlação eletrônica.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Se um potencial externo v , como confinamento harmônico, desordem ou potencial

elétrico por exemplo, é introduzido no sistema, a alteração resultante do comportamento das correlações eletrônicas, pode modificar os estados significativamente [40-42]. Dependendo dos valores de U e v , o sistema pode transitar do regime de isolante de Mott para um regime metálico, ou seja, suprimindo a restrição quanto às flutuações de carga, acarretando no aumento dos graus de liberdade das partículas [34, 43-44], como mostrado na Fig. 1.

Essa transição de caráter não trivial, reflete a complexa competição entre os potenciais externos v , que em geral promovem a metalicidade do sistema, e as fortes correlações eletrônicas locais U , que tendem a limitar os graus de liberdade das partículas. A compreensão dessa dinâmica das interações é importante para o entendimento de uma parte significativa da química, física da matéria condensada e ciência dos materiais.

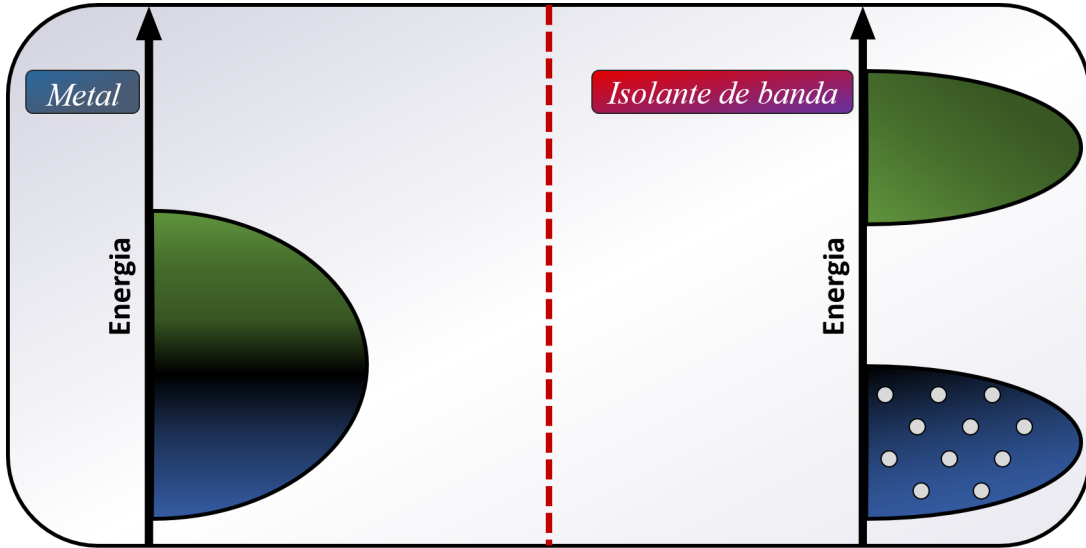
2.1.2 Metal - Isolante de Banda

Ao contrário dos isolantes de Mott, oriundos das fortes correlações eletrônicas, os isolantes de banda são descritos pela teoria de bandas de Bloch convencional [2], em que as propriedades isolantes do material provém de sua estrutura de bandas eletrônicas. Se a última banda de energia ocupada (banda de valência) estiver completamente preenchida, cria-se um gap de energia significativo em relação à próxima banda vazia (banda de condução) [2].

Nesse cenário, os graus de liberdade dos elétrons estão essencialmente congelados, pois os elétrons estão confinados em regiões específicas da rede. Isso ocorre devido ao preenchimento completo dos estados eletrônicos disponíveis nos sítios ocupados. Dessa forma, a ocupação em cada sítio é representada por $n_i = 2$, indicando que os orbitais eletrônicos relevantes estão totalmente preenchidos (respeitando o princípio de exclusão de Pauli [45]). Somente um potencial externo v suficientemente forte seria capaz de superar o gap de energia presente, permitindo que os elétrons transitem para os estados de condução [8, 12]. Isso resultaria na transição do regime isolante para o regime metálico, conforme ilustrado na Fig. 2, onde o potencial aplicado diminui a largura do gap energético,

possibilitando o transporte eletrônico.

Figura 2 – Representação esquemática da estrutura de bandas em isolantes de banda. O gap de energia é determinado pela densidade local n_i , que controla a separação entre as bandas de condução e de valência. À esquerda, o comportamento metálico é caracterizado por bandas sobrepostas, enquanto à direita, o isolante de banda apresenta um gap de energia devido à estrutura eletrônica do material.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Devido ao completo preenchimento da banda de valência, o sistema é descrito por apenas um único estado quântico, caracterizado por pares eletrônicos $|\uparrow\downarrow\rangle$ presentes em todos os sítios, como mostrado na Fig. 2. Dessa forma, os isolantes de banda são tipicamente diamagnéticos [46], apresentando magnetismo líquido nulo ($S_z = 0$), e consequentemente, não possuindo momento magnético intrínseco, gerando baixa sensibilidade quando submetido à um campo magnético externo H [46].

2.2 Modelo de Hubbard

Diversos modelos foram propostos para descrever sistemas quânticos fortemente correlacionados, como os modelos de Ising [47] e Heisenberg [48] por exemplo. No caso de sistemas fermiônicos itinerantes, o modelo de Hubbard é o mais amplamente utilizado [18]. O modelo em sua forma unidimensional, fornece uma descrição aproximada da interação e itinerância de férmions em uma cadeia composta por L sítios (átomos). Na versão

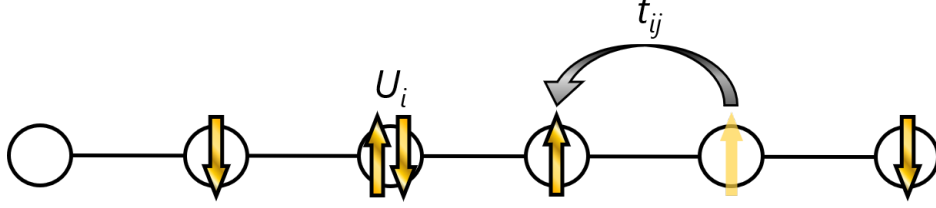
mais simples do modelo, considera-se por sítio apenas um único orbital não-degenerado, contendo no máximo dois férmions de spins opostos devido ao princípio de exclusão de Pauli [45]. Portanto, para cada sítio há quatro possíveis estados quânticos de ocupação: vazio ($|0\rangle$, com probabilidade w_0), duplamente ocupado ($|\uparrow\downarrow\rangle$, com probabilidade $w_{\uparrow\downarrow}$), ocupado por um férmion com spin up ($|\uparrow\rangle$, com probabilidade $w_{\uparrow}$) ou com spin down ($|\downarrow\rangle$, com probabilidade $w_{\downarrow}$) [18].

O modelo permite descrever sistemas homogêneos e heterogêneos. Um sistema homogêneo, de tamanho infinito, é caracterizado pela ausência de potenciais externos v , bem como pela uniformidade da interação coulombiana e da energia cinética através da rede, resultando na distribuição homogênea da densidade de partículas, em que $n_i = (N_{\uparrow} + N_{\downarrow})/L$ [18, 49]. Por outro lado, um sistema heterogêneo é composto pela presença de condições de contorno (BC) e/ou potenciais externos v . A presença de um potencial externo não nulo $v \neq 0$ impacta diretamente na distribuição de densidade ao longo da rede, criando variações locais que rompem a homogeneidade [18, 49].

As condições de contorno determinam como os limites da estrutura se integram. Sob condições de contorno periódicas (PBC), não há presença de bordas, já que a estrutura se conecta ciclicamente, criando assim uma continuidade entre as extremidades. Sob condições de contorno abertas (OBC), a estrutura contém bordas definidas em suas extremidades [49]. A presença de bordas no sistema, geram as denominadas oscilações de Friedel [50], que compõe as variações periódicas na distribuição de partículas nos sítios próximas às bordas, consequência da limitação dos graus de liberdade nesses sítios [18, 49-50].

O modelo de Hubbard, em sua forma mais simplificada, descreve apenas as interações U entre as partículas que ocupam o mesmo sítio, enquanto a itinerância é limitada a sítios vizinhos através do tunelamento t (*hopping*), que descreve a probabilidade de deslocamento entre sítios vizinhos, como ilustrado na Fig. 3.

Figura 3 – Representação esquemática do Modelo de Hubbard para uma cadeia de L sítios, descrevendo a itinerância em uma nanoestrutura eletrônica através do parâmetro t_{ij} . Os férmions que não estão acoplados em um sítio i podem transitar para um sítio vizinho j , desde que o sítio não esteja totalmente preenchido. As partículas localizadas no mesmo sítio estão sujeitas à interação de repulsão Coulombiana U_i .



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Nessa configuração, o Hamiltoniano de Hubbard é expresso em termos da interação Coulombiana em um dado sítio i , representada por U_i , e do hopping t_{ij} , que descreve a energia cinética associada ao movimento das partículas entre os sítios vizinhos i e j . O potencial externo aplicado em cada sítio i é representado por $v_{i\sigma}$, para $\sigma = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$, geralmente requisitado para simular heterogeneidades espaciais presentes na maioria dos sistemas reais, como impurezas, desordem, potenciais confinantes etc [51-52]. Sua implementação, apesar de demandar maior custo computacional, é fundamental nos tratamentos teóricos visando tornar as simulações mais aplicáveis a dispositivos reais. Assim, o Hamiltoniano de Hubbard é dado por:

$$\hat{H} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + \hat{c}_{j\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} v_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (2.1)$$

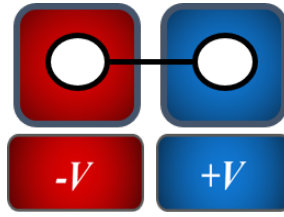
sendo $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{i\sigma}$ os operadores de criação e aniquilação de partículas em um sítio i , e $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ o operador densidade.

2.2.1 Potencial Externo

Neste trabalho, foram implementados no Hamiltoniano de Hubbard, os potenciais: elétrico, magnético e químico. Dependendo da natureza do sistema em estudo, há diversas

abordagens que podem ser utilizadas para a descrição do potencial elétrico no modelo de Hubbard [40, 53]. Nesta tese, a implementação fora baseada em dímeros de Hubbard ($L = 2$ sítios) [53], em que cada sítio está sujeito a um potencial positivo e um potencial negativo, assim resultando em um campo elétrico efetivo entre eles, de modo que $V_i = -V_j$, como ilustrado na Fig. 4.

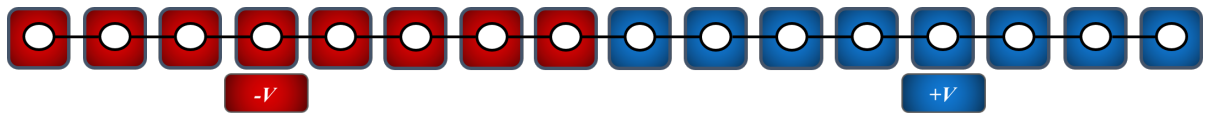
Figura 4 – Representação esquemática do potencial elétrico aplicado ao dímero no modelo de Hubbard com $L = 2$ sítios, onde o potencial em cada sítio é definido de modo que $V_i = -V_j$, estabelecendo uma diferença de potencial entre os sítios.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Visando analisar com maior profundidade as propriedades itinerantes e magnéticas, foram utilizadas cadeias maiores, especificamente $L = 4$, $L = 8$, $L = 16$, $L = 32$ e $L = 64$ sítios, tendo em vista que cadeias de base 2 são especialmente adequadas para algoritmos utilizados em simulações quânticas e cálculos de correlações, além de permitirem particionar o sistema de forma simétrica. Apesar do aumento da cadeia, a implementação do potencial elétrico se manteve nos moldes do dímero, de modo que $V_a = -V_b$, sendo a e b as metades da cadeia $L/2$, como mostrado na Fig. 5.

Figura 5 – Representação esquemática do potencial elétrico aplicado ao Modelo de Hubbard para $L = 16$ sítios, onde o potencial elétrico é dividido entre duas regiões a e b , de modo que $V_a = -V_b$. As regiões correspondem às duas metades da cadeia de sítios, refletindo a implementação de um campo elétrico aplicado de forma simétrica.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

O potencial magnético H opera sobre o spin das partículas, acoplando-se diretamente ao momento magnético dos férmions [37]. Esse termo fornece a descrição de sistemas polares e, possibilita a investigação de transições de fase induzidas por campos magnéticos externos. Para incluir esse efeito no sistema, é necessário introduzir no Hamiltoniano um termo de acoplamento de spin ao campo magnético H , que modifica a energia associada aos diferentes estados de spin das partículas, que pode ser determinada por uma magnetização interna induzida $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$.

Com o objetivo de controlar o número total de partículas no sistema, fora adicionado ao Hamiltoniano o potencial químico μ . Esse termo ajusta a energia necessária para adicionar ou remover uma partícula do sistema, atuando como um parâmetro fundamental para a determinação da densidade de partículas. O potencial químico μ regula a ocupação de cada sítio, modificando a energia associada a essa ocupação, assim impactando diretamente na densidade de férmions no sistema [54]. A inclusão desses termos possibilita a análise de uma variedade mais ampla de sistemas, como nanoestruturas eletrônicas sujeitas a campos externos, dispositivos de spintrônica e materiais com potencial para aplicações em tecnologias quânticas, onde o controle preciso das interações elétricas e magnéticas é essencial [55-56]. O Hamiltoniano com os termos adicionados é dado por:

$$\hat{H} = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} + \sum_{i\sigma} V_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} - H \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (2.2)$$

Dessa forma, o estudo aprofunda a compreensão da influência do campo elétrico no modelo, especialmente no que diz respeito à distribuição de partículas, às transições metal-isolante, e às propriedades itinerantes do sistema. Além disso, abre caminho para a investigação de novos fenômenos emergentes, expandindo o horizonte para estudos futuros em física da matéria condensada.

2.3 Grupo de Renormalização da Matriz Densidade

O Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG) uma abordagem eficiente para a determinação de estados fundamentais e excitações em sistemas fortemente correlacionados é optada [32]. Esse método é particularmente eficaz em sistemas unidimensionais e fornece uma descrição detalhada dos estados quânticos.

2.3.1 Espaço de Hilbert

No contexto da mecânica quântica, o espaço de Hilbert $\mathcal{H}$ descreve o conjunto de todos os possíveis estados quânticos de um sistema [57]. Cada vetor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ representa um estado físico que o sistema pode assumir, permitindo a representação de estados puros $|\psi\rangle$ e estados mistos $|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$, em que $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$. No espaço de Hilbert, os observáveis, como energia, posição e momento, são representados por operadores lineares $\hat{O}$ que atuam sobre esses vetores $\mathcal{H}$. Assim, o espaço de Hilbert fornece a estrutura matemática para a descrição de todos os possíveis estados e evoluções quânticas do sistema [57].

Como no modelo de Hubbard unidimensional os estados quânticos são definidos pelos quatro possíveis estados de ocupação para cada um dos sítios, o espaço de Hilbert cresce exponencialmente com o tamanho L da cadeia, em uma ordem de 4^L graus de liberdade. Dessa forma, o estudo de sistemas de muitos corpos, principalmente para cadeias extensas, exige um alto desempenho computacional. Mesmo com a utilização de propriedades de simetria ou de números quânticos conhecidos, eventualmente serão ineficazes perante o crescimento exponencial.

A fim de superar tais limitações, *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG) [32] é um método iterativo que reduz consideravelmente os graus de liberdade de uma cadeia. Os cálculos realizados utilizam uma base, em que o estado fundamental é representado por apenas alguns estados, tendo em vista que os estados físicos relevantes constituem apenas uma fração do espaço de Hilbert, como mostrado na Fig. 6.

Figura 6 – Representação esquemática da matriz $\mathcal{H}$, com destaque para os estados relevantes no subespaço. O quadrado vermelho identifica os elementos selecionados, que serão utilizados na análise subsequente.

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} & \dots & h_{1n} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} & \dots & h_{2n} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} & \dots & h_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & h_{n3} & \dots & h_{nn} \end{bmatrix} \quad \text{Estados relevantes}$$

Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Visando minimizar a perda de informação, os estados que menos contribuem para a descrição do sistema são truncados iterativamente e apenas os estados de menor energia são considerados, pois são os que mais se aproximam do estado fundamental [32, 58]. O espaço de Hilbert então, é preservado e cresce linearmente a medida que o sistema aumenta iterativamente, assim superando as adversidades do crescimento exponencial [32, 58-59].

terminado tamanho de cadeia L , é construída uma representação matricial do Hamiltoniano que posteriormente é diagonalizada. Esse processo resulta nos autovalores e autovetores da matriz $\hat{H}|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle$, que fornecem a base matemática para o cálculo de quantidades mensuráveis, como estados de ocupação, interações e correlações [58-60]. O procedimento é repetido para diferentes tamanhos de sistemas, onde os resultados são projetados de modo a se aproximar do limite termodinâmico ($L \rightarrow \infty$) [58].

Tendo o conhecimento dos autoestados do hamitoniano, é possível identificar a base que caracteriza um subespaço relevante para o sistema. As truncagens então são efetuadas por meio de renormalizações descritas pelos autoestados da matriz densidade ρ , na qual descreve os estados quânticos puros e mistos [58-61]. Ao contrário de um estado puro, que pode ser descrito por um único vetor de estado $|\psi\rangle$ no espaço de Hilbert, um estado misto representa uma superposição de diferentes estados puros sob um determinado

p_i . Assim, a matriz de densidade é dada por:

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (2.3)$$

Nesse contexto, ρ é um operador linear que age sobre o espaço de Hilbert e contém toda a informação estatística sobre o estado quântico do sistema. Se o sistema caracterizar um estado puro, a matriz de densidade reduz-se a $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$, enquanto em estados mistos, $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ é uma combinação de vários estados com suas respectivas probabilidades p_i [61]. Para o Modelo de Hubbard onde os estados são determinados pelos estados de ocupação, a matriz de densidade será dada por:

$$\rho = w_0 |0\rangle \langle 0| + w_{\uparrow} |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + w_{\downarrow} |\downarrow\rangle \langle \downarrow| + w_{\uparrow\downarrow} |\uparrow\downarrow\rangle \langle \uparrow\downarrow|, \quad (2.4)$$

em que $w_{\uparrow\downarrow}$, $w_{\uparrow}$, $w_{\downarrow}$ e w_0 representam a probabilidade de dupla ocupação, ocupação única de uma partícula com spin up ou down e ocupação nula, respectivamente [62]. A matriz ρ pode ser diagonalizada, resultando em autovalores λ_i e autovetores $|v_i\rangle$, que satisfazem a equação:

$$\rho |v_i\rangle = \lambda_i |v_i\rangle. \quad (2.5)$$

Os autovalores λ_i indicam a probabilidade associada a cada autovetor $|v_i\rangle$, e como os autovalores λ_i estão ordenados de forma decrescente ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$), os maiores autovalores correspondem aos autovetores mais importantes, ou seja, aqueles que possuem maior contribuição para a descrição do sistema [58-62]. Assim, os primeiros m autovetores, associados aos m maiores autovalores λ_i , são selecionados e o subespaço truncado é então formado pelos autovetores $|v_1\rangle$, $|v_2\rangle$, $\dots$, $|v_m\rangle$, preservando as informações mais relevantes [60-61].

2.3.2 Construção do Superbloco

A fim de se obter os autoestados e autovetores, os primeiros algoritmos desenvolvidos para sistemas de muitos corpos, distribuíam os L sítios de uma cadeia em dois blocos inicialmente idênticos. Os dois blocos formavam o denominado superbloco e seu Hamiltoniano era então diagonalizado, assim gerando seus autoestados. Embora essa abordagem tenha se mostrado eficiente para determinados modelos, demonstrou ser ineficaz para sistemas fortemente correlacionados [63].

A principal limitação surge da seleção inadequada dos autoestados do superbloco e na ausência de conexão entre os blocos, assim resultando em perdas de informações cruciais na etapa de truncagem [58]. Em particular, os autoestados das extremidades de ambos os blocos, apresentavam características impróprias quanto à descrição do sistema completo.

O método DMRG foi proposto visando reformular essa técnica, ao conectar os blocos de modo à incorporar condições de contorno variadas e combinar seus respectivos autoestados. O processo iterativo de crescimento da cadeia e truncagem do espaço de Hilbert, ocorre até que a cadeia atinja o tamanho previamente definido $L^{k+1} = 2 \times L^k$, sendo k o número de iterações [58, 61]. Esse processo é constituído por duas etapas: a parte infinita e a parte finita.

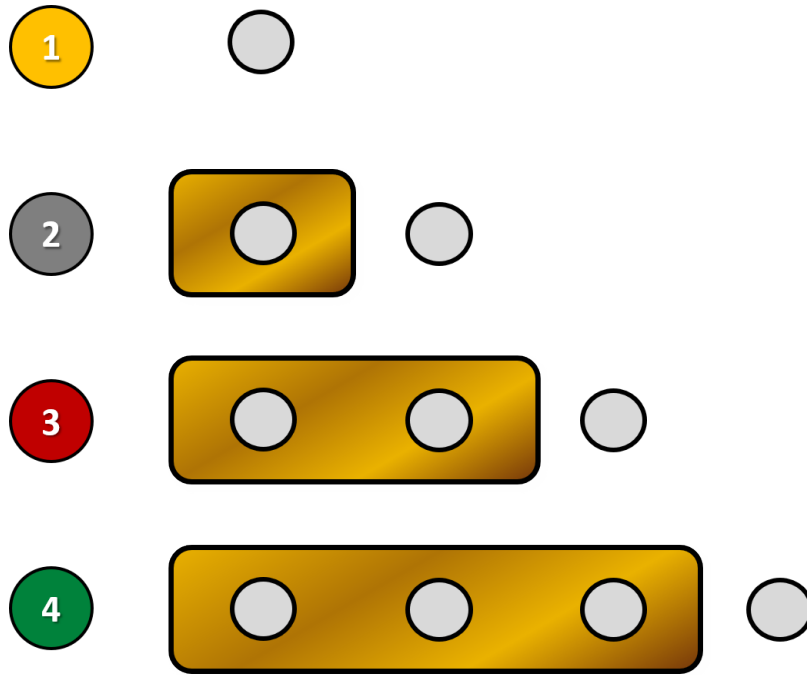
Na parte infinita, o sistema é expandido iterativamente onde novos sítios são adicionados à cadeia e o espaço de Hilbert é truncado a cada iteração. O bloco é iniciado com um único sítio, descrito por uma base de m estados $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_m\rangle\}$. Em seguida, um bloco idêntico é adicionado à direita, formando o superbloco. O Hamiltoniano do superbloco é então diagonalizado e o espaço de Hilbert resultante é truncado, com base em sua matriz de densidade ρ [58-61].

Após a diagonalização, a base do bloco ampliado à esquerda é substituída pela autobase da matriz de densidade ρ , de modo que apenas os m estados com os maiores

autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$ sejam mantidos, os quais correspondem aos estados de menor energia do sistema. O bloco da iteração seguinte corresponde ao bloco ampliado à esquerda, que fora transformado e truncado na iteração anterior [58].

O novo bloco que contém um sítio adicional, é descrito por uma base formada apenas pelos m estados de maior relevância. A cada iteração, o superbloco cresce à medida que novos sítios são incorporados ao sistema, até que o tamanho do superbloco atinja a metade do tamanho total da cadeia ($L/2$), como mostrado na Fig. 7.

Figura 7 – Representação esquemática da etapa infinita do DMRG, em que novos sítios são adicionados iterativamente à esquerda do sítio inicial, assim formando o superbloco. A cada iteração o hamiltoniano do superbloco é diagonalizado, preservando apenas os m estados correspondentes aos maiores autovalores λ_m .

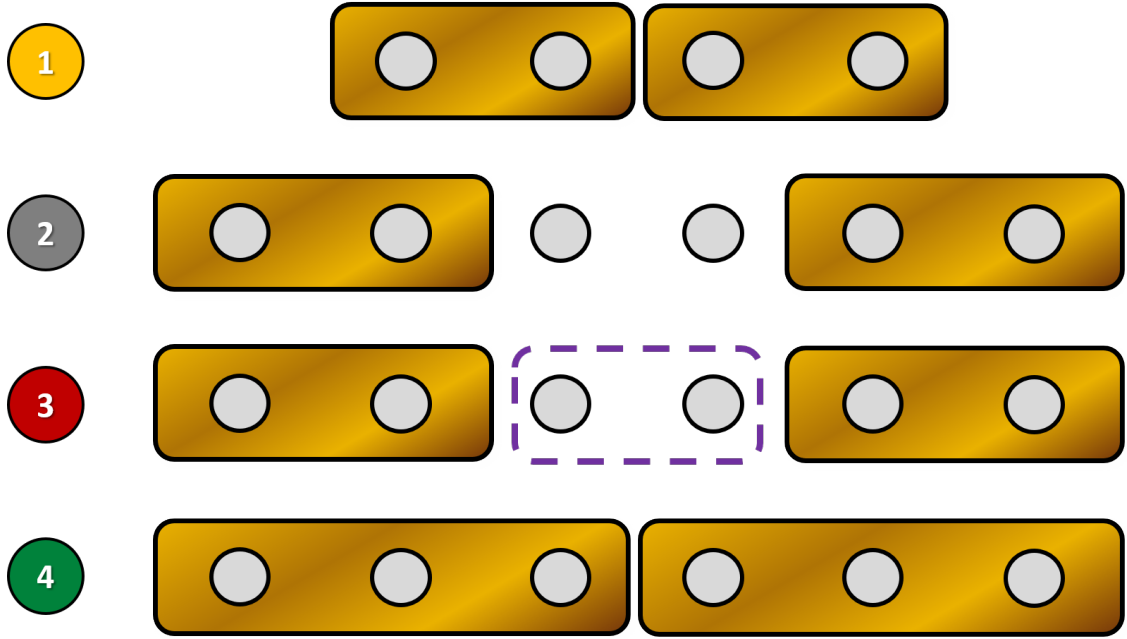


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

A cadeia então é dividida em dois blocos: bloco A e bloco B. Porém, com dois sítios no centro que atuam como os conectores de ambos os blocos, formando assim o novo superbloco. A partir desse ponto, inicia-se a parte finita do método, ao manter o tamanho do sistema finito L , tendo em vista que o sistema já se encontra dentro do limite termodinâmico [61]. Visando manter constante o número de sítios do superbloco, o bloco

A continua sendo ampliado à esquerda, enquanto o número de sítios no bloco B à direita é reduzido, como mostrado na Fig. 8.

Figura 8 – Representação esquemática do algoritmo DMRG na etapa infinita. Obtendo-se os novos blocos A e B da etapa anterior (1), um novo sítio é adicionado a cada bloco (2), em que é construído o novo superbloco (3) e diagonalizado assim gerando os m maiores autovalores λ_m a fim de construir os novos blocos para a próxima iteração (4).

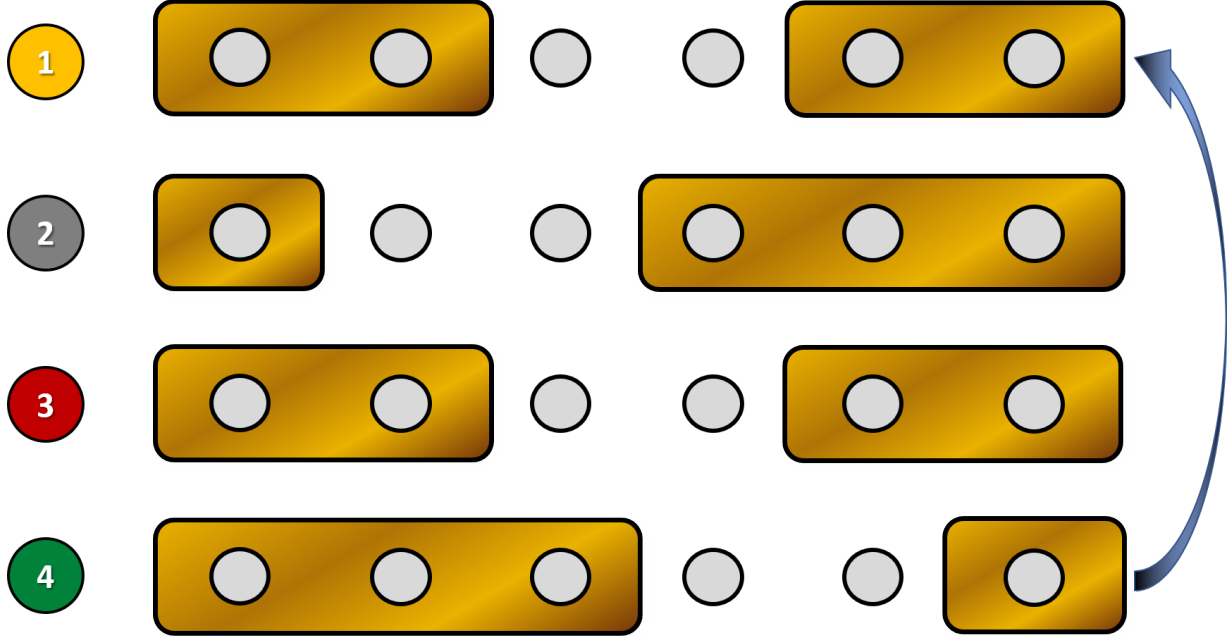


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Essa etapa visa realizar uma varredura de otimização entre os blocos e os sítios centrais, refinando a aproximação dos estados do sistema até que o bloco da direita atinja apenas um único sítio, momento em que o procedimento é encerrado [58-60]. O bloco à direita começa a ser expandido e renormalizado, repetindo o mesmo procedimento, porém no sentido inverso, até que o bloco à esquerda seja reduzido a um único sítio, como ilustrado na Fig. 9.

Apesar da exatidão dos cálculos nas primeiras varreduras ser baixa, a precisão na aproximação do estado fundamental é progressivamente refinada a cada iteração [58]. A quantidade de varreduras necessárias para a convergência do cálculo é proporcional à L e aos m estados preservados, em que $(\lim_{k \rightarrow \infty} \rho_k = \rho)$.

Figura 9 – Representação esquemática do algoritmo DMRG na etapa finita. Inicia-se a varredura enquanto um bloco cresce e o outro encolhe, e o bloco encolhido é recuperado dos blocos obtidos na varredura anterior e assim armazenado.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

2.3.3 Matriz de Densidade Reduzida

A matriz de densidade reduzida descreve a parte do sistema que está sendo analisado. Se $|\psi\rangle$ representa a combinação dos estados do bloco A e do bloco B, é possível calcular as contribuições do bloco B após serem truncadas:

$$\rho_A = \text{Tr}_B (|\psi\rangle\langle\psi|), \quad (2.6)$$

sendo ρ_A a matriz densidade reduzida do bloco A, descrita pelo traço parcial da matriz densidade total $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ realizado sobre os graus de liberdade do bloco B. De maneira similar, a matriz de densidade reduzida do subsistema B pode ser obtida pelo traço parcial sobre o subsistema A, isto é, $\rho_B = \text{Tr}_A[\rho]$.

Se o estado total $|\psi\rangle$ é dado por:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |i\rangle_A |j\rangle_B, \quad (2.7)$$

então, a matriz densidade reduzida do bloco A será dada por:

$$\rho_A = \sum_j \psi_{i,j} \psi_{i',j}^*, \quad (2.8)$$

em que i e i' representam estados distintos do bloco A. O índice i refere-se ao conjunto de estados originais do bloco A, enquanto i' indica os estados após a projeção ou transformação aplicada ao sistema. Já o índice j representa os estados associados ao bloco B, que complementam o sistema total. Como a matriz de densidade reduzida ρ_A contém as informações sobre as correlações entre os blocos A e B, pode ser usada para renormalizar o sistema, assim criando uma versão efetiva e compacta, mantendo apenas os graus de liberdade mais relevantes.

2.4 Emaranhamento

O emaranhamento quântico é um fenômeno exclusivo da mecânica quântica e um dos conceitos mais contraintuitivos da física moderna. O fenômeno se manifesta quando dois ou mais subsistemas de um sistema quântico interagem de tal forma que suas descrições individuais deixam de ser independentes [64]. Em outras palavras, a informação sobre o estado de qualquer um dos subsistemas só pode ser obtida considerando o estado dos demais. Como consequência, o estado global do sistema emaranhado não pode ser expresso como o produto de estados individuais dos subsistemas:

$$|\psi\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle. \quad (2.9)$$

No caso de estados emaranhados, a perturbação do estado de um dos subsistemas afeta instantaneamente o estado dos demais subsistemas, independentemente da separação espacial entre eles. Esse fenômeno foi descrito por Einstein como uma "ação fantasmagórica

à distância" [65], pois sugeria uma influência instantânea entre partículas separadas, desafiando o princípio de localidade estabelecido pela teoria da relatividade restrita. No entanto, experimentos posteriores, como os testes das desigualdades de Bell [66-67], confirmaram as previsões da mecânica quântica, demonstrando que a concepção clássica de "realismo local" não se sustentava no mundo quântico [66-67].

O emaranhamento quântico desempenha um papel fundamental na descrição de sistemas fortemente correlacionados, pois influencia suas propriedades emergentes e comportamento coletivo [68-69]. Os primeiros estudos realizados com emaranhamento baseavam-se em sistemas fotônicos, tendo em vista a vantagem que sistemas ópticos sempre levaram sobre os sólidos [70-73]. Essa prioridade era não apenas consequência de maior domínio teórico-experimental na área óptica, mas também devido ao fato de que, conforme o tamanho do sistema tendesse ao macroscópico, os efeitos quânticos se tornam menos perceptíveis e assim reduziria o emaranhamento [70-71].

Contudo, o emaranhamento se mostrou necessário para a completa descrição dos sólidos, pois permite analisar as correlações de longo alcance entre partículas, atuando como peça chave para descrever transições de fase quânticas. Esses fenômenos ocorrem em temperaturas próximas de 0K, onde a flutuação térmica é desprezível e os efeitos puramente quânticos dominam a dinâmica do sistema [72-73]. Além de sua relevância fundamental para a física teórica, o emaranhamento quântico tem sido explorado em diversas aplicações tecnológicas, incluindo computação quântica, criptografia quântica e comunicação quântica [55-56].

Pelo fato do emaranhamento não caracterizar uma propriedade observável diretamente, mas sim uma característica do estado quântico do sistema, o grau de emaranhamento entre subsistemas pode variar conforme os graus de liberdade envolvidos na descrição do sistema, afetando a quantidade de informação compartilhada entre eles [70-75]. Dessa forma, quantificar e manipular o emaranhamento continua sendo um desafio essencial para avançar na compreensão e aplicação das propriedades quânticas da matéria [74-75].

2.4.1 Entropia de von Neumann

A medida do grau de emaranhamento entre subsistemas, no qual quantifica a correlação entre diferentes partes do sistema, é realizada através de grandezas como a entropia de emaranhamento associado a matriz de densidade reduzida [29, 73-75]. Também denominada entropia de von Neumann, sua completa anulação ($S = 0$) implica que os subsistemas não estão emaranhados $|\psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$. Caso contrário, se a entropia for finita ($S > 0$), os subsistemas estão correlacionados, assim sendo possível extrair informação de um subsistema ao analisar o outro [29, 71-72]. A entropia de emaranhamento do subsistema A pode ser descrita como:

$$S_A = -\text{Tr}[\rho_A \log_2 \rho_A], \quad (2.10)$$

onde ρ_A é a matriz de densidade reduzida do subsistema A , obtida pelo traço parcial Tr_B sobre os graus de liberdade do subsistema B . Tendo em vista que o grau de emaranhamento entre os subsistemas A e B deve ser simétrico, a entropia de von Neumann dos subsistemas A e B será idêntica:

$$S_B = S_A = -\text{Tr}[\rho_A \log_2 \rho_A]. \quad (2.11)$$

Dessa forma, a entropia de von Neumann é uma medida apropriada de emaranhamento em dois casos principais. Primeiramente, quando o estado total do sistema é puro, garantindo que toda a correlação entre os subsistemas seja exclusivamente devida ao emaranhamento quântico. Em segundo lugar, quando a bipartição considerada é bem definida e relevante para a análise do sistema, de modo que a matriz de densidade reduzida capture adequadamente as correlações presentes no estado quântico [29, 72, 75].

2.4.2 Emaranhamento no Modelo de Hubbard

No caso do Modelo de Hubbard, o emaranhamento pode ser descrito considerando diferentes graus de liberdade do sistema, como o emaranhamento entre os spins ou entre as cargas, dependendo da representação utilizada [62, 64]. No contexto usual do modelo de Hubbard, o emaranhamento frequentemente é discutido em termos da correlação entre os spins dos elétrons. O emaranhamento geralmente se manifesta por interações diretas entre partículas subatômicas, mas também pode surgir devido a correlações quânticas emergentes no sistema [62, 64].

Na base de ocupação, a matriz densidade do sítio A é descrita por

$$\rho_A = \begin{pmatrix} w_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_{\uparrow} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_{\downarrow} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w_{\uparrow\downarrow} \end{pmatrix}$$

Através da diagonalização da matriz de densidade reduzida do subsistema A , é possível definir os quatro possíveis estados quânticos de ocupação para cada sítio $(w_{i,0}, w_{i,\uparrow}, w_{i,\downarrow}, w_{i,\uparrow\downarrow})$ por meio da análise da entropia de emaranhamento:

$$S = -w_{\uparrow} \log_2 w_{\uparrow} - w_{\downarrow} \log_2 w_{\downarrow} - w_{\uparrow\downarrow} \log_2 w_{\uparrow\downarrow} - w_0 \log_2 w_0, \quad (2.12)$$

em que $w_{\uparrow\downarrow}$ representa a probabilidade de dupla ocupação de um sítio, definida por:

$$w_{\uparrow\downarrow} = \langle \psi_0 | n_{\uparrow\downarrow} | \psi_0 \rangle, \quad (2.13)$$

$w_{\uparrow}$ e $w_{\downarrow}$ sendo a probabilidade de ocupação de uma partícula com spin up ou down:

$$w_{\uparrow} = \langle \psi_0 | n_{\uparrow} | \psi_0 \rangle - w_{\uparrow\downarrow}, \quad (2.14)$$

$$w_{\downarrow} = \langle \psi_0 | n_{\downarrow} | \psi_0 \rangle - w_{\uparrow\downarrow}, \quad (2.15)$$

e w_0 sendo a probabilidade de ocupação nula:

$$w_0 = 1 - w_{\uparrow} - w_{\downarrow} - w_{\uparrow\downarrow}. \quad (2.16)$$

Através do teorema Hellman-Feynman e, considerando a energia do estado fundamental para cada sítio, é possível calcular as probabilidades dos quatro possíveis estados de ocupação, em função da energia do estado fundamental E^{GS} , da densidade $n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$ e da magnetização $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$. Assim, a entropia de emaranhamento para a cadeia de Hubbard homogênea, constitui um funcional da densidade:

$$w_{\uparrow\downarrow} = \frac{\partial E^{GS}}{\partial U}, \quad (2.17)$$

$$w_{\uparrow} = \frac{n}{2} - \frac{\partial E^{GS}}{\partial U} + \frac{m}{2}, \quad (2.18)$$

$$w_{\downarrow} = \frac{n}{2} - \frac{\partial E^{GS}}{\partial U} - \frac{m}{2}, \quad (2.19)$$

$$w_0 = 1 - n + \frac{\partial E^{GS}}{\partial U}. \quad (2.20)$$

Além do emaranhamento de um único sítio em relação ao restante da cadeia, é de suma importância calcular o emaranhamento entre as bipartições da cadeia, tendo em vista o objetivo deste trabalho em analisar o comportamento eletrônico e as fases emergentes de uma cadeia composta pelo potencial $V^{<0}$ e $V^{>0}$ do potencial elétrico V . O grau de emaranhamento entre as metades da cadeia responde às variações na densidade eletrônica ao longo dessas bipartições, refletindo como a dinâmica dos potenciais afeta a distribuição eletrônica nas diferentes fases, isolantes e metálicas [58].

3 Metodologia

Devido ao elevado custo computacional associado aos cálculos de DMRG aplicados ao modelo de Hubbard, fora utilizado um cluster de alto desempenho (GridUNESP), localizado no IFT – UNESP em São Paulo. Através do método DMRG, foram obtidas quantidades de energia total do sistema, as densidades, probabilidades de ocupação dos sítios, entre outros, para uma determinada densidade média $n = 1$. Com as quantidades calculadas, é possível quantificar o emaranhamento em cada sítio, para calcular a média de toda a rede a fim de se obter a média de um único sítio [64].

A entropia de emaranhamento varia de $S_{min} = 0$, para um sistema bem definido, onde um dos graus de liberdade está completamente definido enquanto os demais são inexistentes, e $S_{max} = 2$, para um sistema maximamente emaranhado, em que os graus de liberdade estão igualmente distribuídos $w_{\uparrow\downarrow} = w_{\uparrow} = w_{\downarrow} = w_0 = \frac{1}{4}$ [64]. O grau máximo de emaranhamento ocorre somente para o caso de $n = 1$, $m = 0$ e $U = 0$, em que o sistema não apresenta qualquer interação entre as partículas, resultando na distribuição equivalente entre as quatro probabilidades [64].

Variando a população de spin, é possível determinar o grau de polarização interna do sistema, onde $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ é a magnetização, relacionada à polarização por $nP = m$, assim:

$$P = \frac{n_{\uparrow} - n_{\downarrow}}{n_{\uparrow} + n_{\downarrow}}. \quad (3.1)$$

Sob a varredura da população de spin, é possível quantificar o inverso da susceptibilidade magnética χ^{-1} :

$$\chi^{-1} = \frac{\partial^2 E^{GS}}{\partial m^2} \Big|_{m=0}. \quad (3.2)$$

Para melhor compreensão da mobilidade de carga e spin no sistema, foram analisadas as flutuações de carga e spin [76], sendo a de carga Δ_c determinada pela variância do número de partículas no sistema:

$$\Delta_c = \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2, \quad (3.3)$$

e a de spin Δ_s , calculada com base na componente z do spin, fornecendo uma medida da incerteza sobre a magnetização local:

$$\Delta_s = \langle S_z^2 \rangle - \langle S_z \rangle^2. \quad (3.4)$$

Foram analisados os gaps de energia, os quais fornecem a descrição sobre as barreiras energéticas para excitar o sistema. O gap de carga Δ_c , sendo a diferença de energia mínima necessária para adicionar uma carga ao sistema:

$$\Delta_c = E(n+1) + E(n-1) - 2E(n), \quad (3.5)$$

onde $E(n)$ representa a energia do sistema com n partículas. O gap de spin, Δ_s , sendo a excitação de spin:

$$\Delta_s = E(s+1) - E(s), \quad (3.6)$$

onde $E(s)$ é a energia associada ao estado de spin s . O gap de uma única partícula (sp do inglês single-particle) Δ_{sp} , descreve a energia mínima necessária para criar uma excitação de uma única partícula (como a criação de um elétron ou buraco):

$$\Delta_{sp} = E(n+1) - E(n). \quad (3.7)$$

Tendo em vista a problemática na medição do emaranhamento, em relação ao crescimento exponencial com o número de partículas, o que limita o cálculo a poucas

partículas, rotas alternativas são propostas visando superar barreira exponencial. Tais metodologias visam determinar e quantificar o emaranhamento experimentalmente, se fundamentando em explorar as relações intrínsecas entre o emaranhamento e outras grandezas físicas, cuja medição experimental já esteja bem estabelecida. Um exemplo disso é o uso da susceptibilidade magnética para medida indireta de emaranhamento, como propusermos em [77].

Como uma outra alternativa, em parceria realizada junto ao grupo de pesquisa do Prof. Dr. Valdeci Pereira Mariano de Souza do Instituto de Geociências e Ciência da UNESP - Rio Claro, foi proposto um mapeamento entre o emaranhamento, descrito pela entropia de von Neumann, e o parâmetro de Gruneisen, para a determinação dos pontos críticos do sistema. O parâmetro de Gruneisen descreve a relação entre a variação da energia e do volume de materiais, quantificando a variação da frequência das vibrações da estrutura cristalina em relação à variação volumétrica [53, 78]. Assim, os pontos críticos são determinados a partir das mudanças abruptas nas propriedades termodinâmicas dos materiais, as quais refletem nas variações energéticas [78]. O parâmetro de Gruneisen Γ , aplicado ao modelo de Hubbard, é definido por:

$$\Gamma = - \frac{\frac{\partial^2 E^{GS}}{\partial V \partial U}}{V \frac{\partial^2 E^{GS}}{\partial V^2}}. \quad (3.8)$$

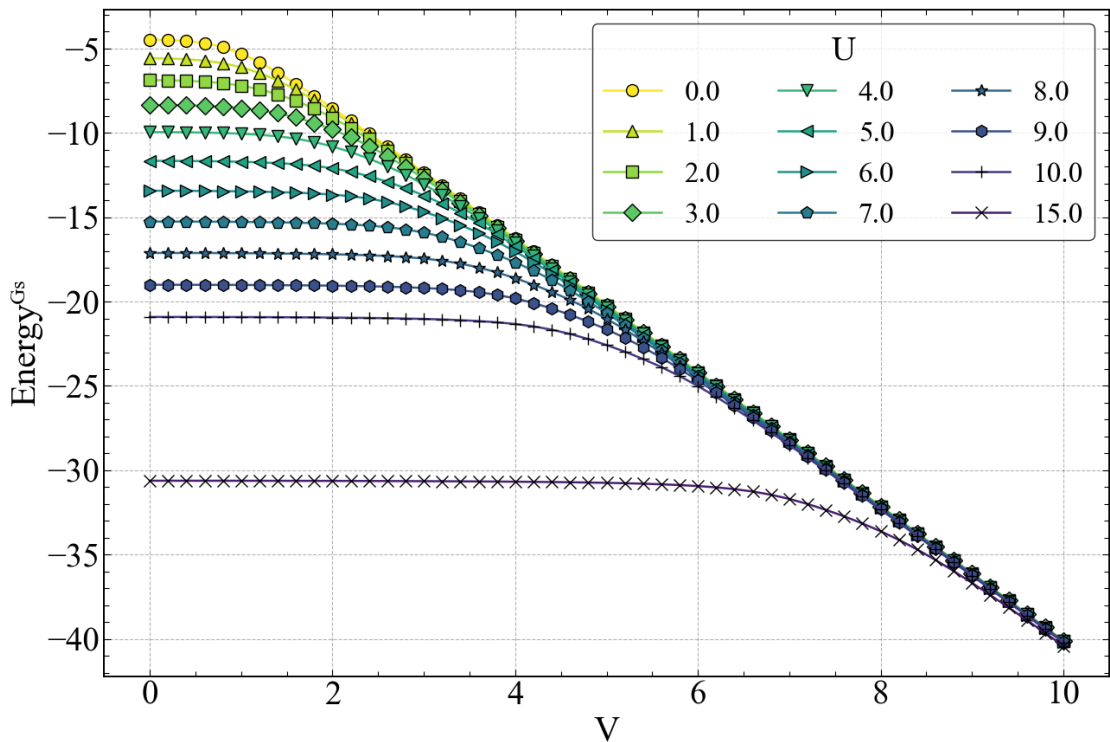
Embora nosso foco neste trabalho tenha sido em explorar o emaranhamento e a susceptibilidade magnética para caracterização das fases do modelo de Hubbard sob ação de campos elétricos, também fizemos uma comparação com este parâmetro de Gruneisen.

4 Resultados e Discussão

4.1 Cadeia pequena não polarizada

O estudo é iniciado investigando os impactos do potencial elétrico V em uma cadeia de $L = 4$ sítios, com densidade $n = 1$ e polarização nula $P = 0$. A Fig. 10 mostra a energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V para diferentes interações U .

Figura 10 – Energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. A energia diminui de forma monotônica para qualquer interação U .

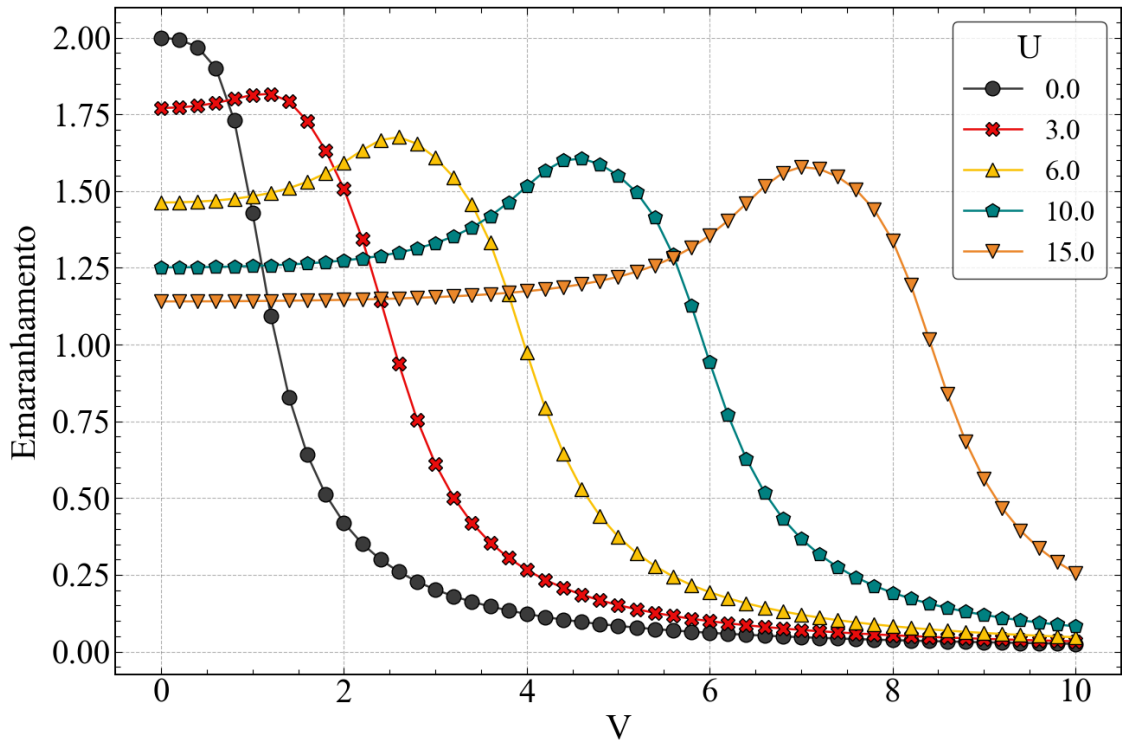


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

À medida que o potencial elétrico V aumenta, a energia do estado fundamental diminui de forma monotônica para qualquer valor de U . O aumento no potencial elétrico tende a diminuir os graus de liberdade das partículas, resultando no decaimento da energia total e consequentemente estabilizando o sistema. Para um dado U fixo, há um valor mínimo de $V \approx U/2$ necessário para a energia do sistema começar a decair. Sob a ausência

da interação coulombiana $U = 0$, o termo do potencial elétrico possui maior contribuição na minimização da energia, tendo em vista que o sistema apresenta maior sensibilidade ao aumento de V , onde uma mínima variação de V já resulta no decaimento. Para $U > 0$, o efeito do potencial elétrico na minimização da energia torna-se menos acentuado, enquanto que para $U \gg t$, como $U = 15$ por exemplo, a energia mantém-se constante por um regime mais extenso. À medida que a repulsão entre as partículas se acentua, o sistema apresenta maior robustez à variação do potencial elétrico V , refletindo maior contribuição do termo da interação coulombiana para a energia total do sistema. Para $V > U/2$, as curvas tendem a convergir para qualquer U , como consequência da inversão da predominância dos termos na energia total, agora sendo maior a contribuição do termo do potencial elétrico e, suprimindo os efeitos das interações coulombianas.

Figura 11 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. A partir de um determinado valor de V o emaranhamento responde ao campo aplicado, atingindo assim um máximo que posteriormente decai em que $S \rightarrow 0$.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

A Fig. 11 mostra o emaranhamento médio definido pela entropia de von Neumann

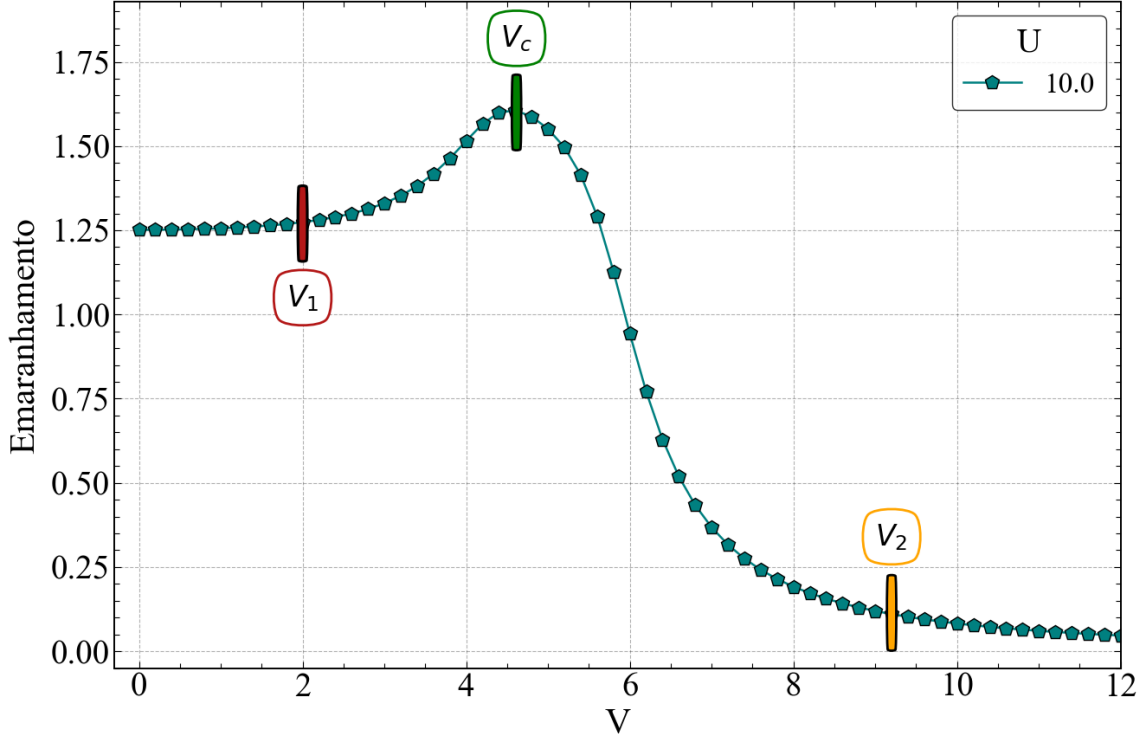
(Eq. 3.3), em função do potencial elétrico V para diferentes interações U . Como mencionado no Capítulo 3, para $U = 0$, $P = 0$ e $n = 1$, o emaranhamento é máximo $S^{max} = 2$ devido a igualdade dos quatro possíveis estados quânticos de ocupação $w_{\uparrow\downarrow} = w_{\uparrow} = w_{\downarrow} = w_0 = 0.25$ [64]. Neste caso não interagente, o emaranhamento decai rapidamente com a mínima variação de V , similar ao decaimento da energia da Fig. 10. Para $V > 2$ o emaranhamento tende à zero $S \rightarrow 0$, mostrando que na ausência de repulsão coulombiana, uma pequena variação de V é suficiente para romper as correlações quânticas no sistema, resultando no congelamento total dos graus de liberdade das partículas.

Para $U > 0$, a probabilidade de um sítio i estar duplamente ocupado $w_{\uparrow\downarrow}$ é menor devido ao custo energético provocado pela repulsão coulombiana, consequentemente favorecendo $w_{\uparrow}$ e $w_{\downarrow}$. Como as probabilidades dos quatro possíveis estados quânticos de ocupação diferem nesse caso, o grau máximo de emaranhamento será $S < S^{max}$ [64, 74].

Sob baixas interações $U < t$, a diminuição do emaranhamento com o aumento de V sugere que as correlações quânticas são facilmente quebradas pela introdução de um potencial elétrico no sistema. Neste regime de V , o termo da energia cinética t predomina sobre o termo da energia de Coulomb, resultando na itinerância dos elétrons no sentido do potencial negativo da cadeia $V_i^{<0}$. Destaca-se uma transição gradual no emaranhamento, refletindo um equilíbrio entre os termos da energias cinética e de interação coulombiana. Os picos observados para este regime de interação sugerem uma maximização das correlações quânticas em um sistema totalmente delocalizado e incerto, em um determinado V_c como mostrado na Fig. 12.

Para interações fortes $U > t$, como $U = 10$, o emaranhamento se mantém monotônico apesar do aumento de V , refletindo a robustez do sistema à variação de V devido à repulsão coulombiana. A partir de um determinado V_1 , o emaranhamento responde ao campo aplicado com um ligeiro crescimento atingindo um máximo determinado por V_c . Para $V > V_c$, o emaranhamento decai bruscamente seguido por uma suavização da curva a partir de V_2 , em que $S \rightarrow 0$, como demarcamos na Fig. 12.

Figura 12 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para $U = 10$, para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. O valor de V correspondente à primeira resposta do emaranhamento ao campo é denominado V_1 , atingindo assim um grau de emaranhamento máximo em V_c , que decai posteriormente em que, a partir de V_2 , $S \rightarrow 0$.

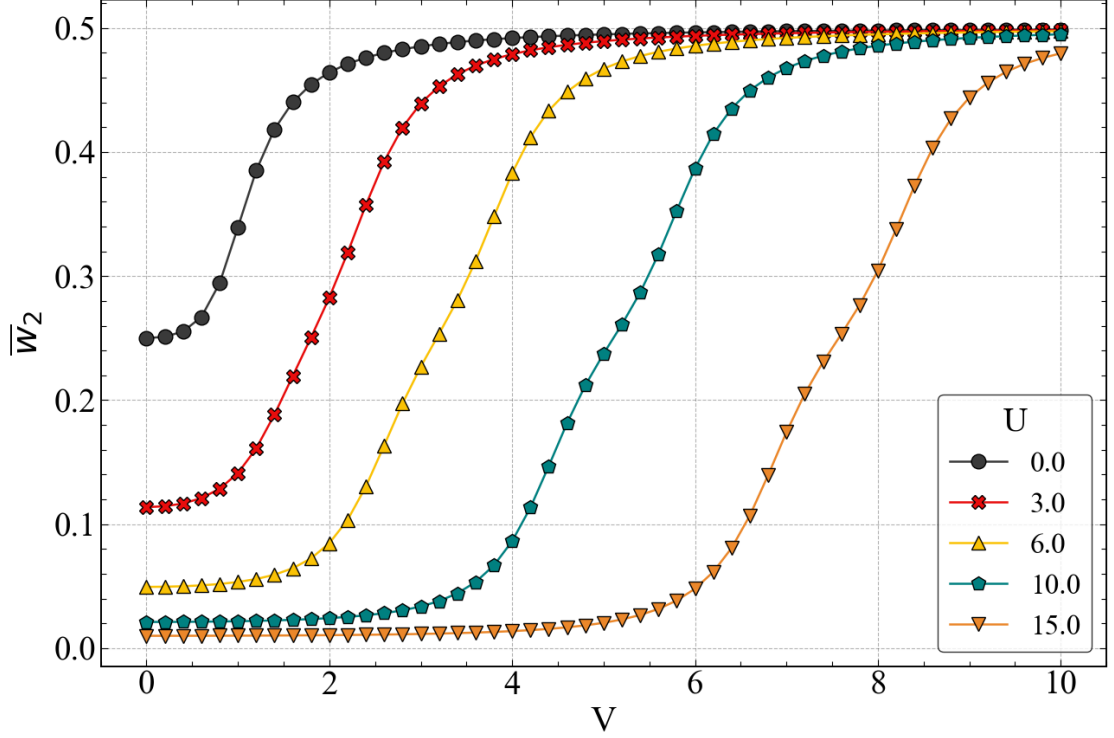


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Neste regime em que $V_2 > V > V_1$, tais variações no emaranhamento indicam uma competição complexa entre a energia do termo de Coulomb e o termo do potencial elétrico, mostrando a robustez dos estados quânticos contra a introdução de V , assim preservando as correlações por um regime mais amplo.

Diferentemente do regime de $V > V_2$, em que $S \rightarrow 0$ consequência do congelamento total dos graus de liberdade das partículas, para $V < V_1$, $S \neq 0$, demonstrando que as partículas preservam grau de liberdade de spin apesar da localidade de carga. A natureza desse intrigante comportamento pode ser analisado com maior clareza através dos termos das probabilidades de ocupação média e da densidade efetiva mostrados nas Figs. 13 e 14.

Figura 13 – Probabilidade de dupla ocupação média em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. As curvas crescem de forma monotônica atingindo um platô.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

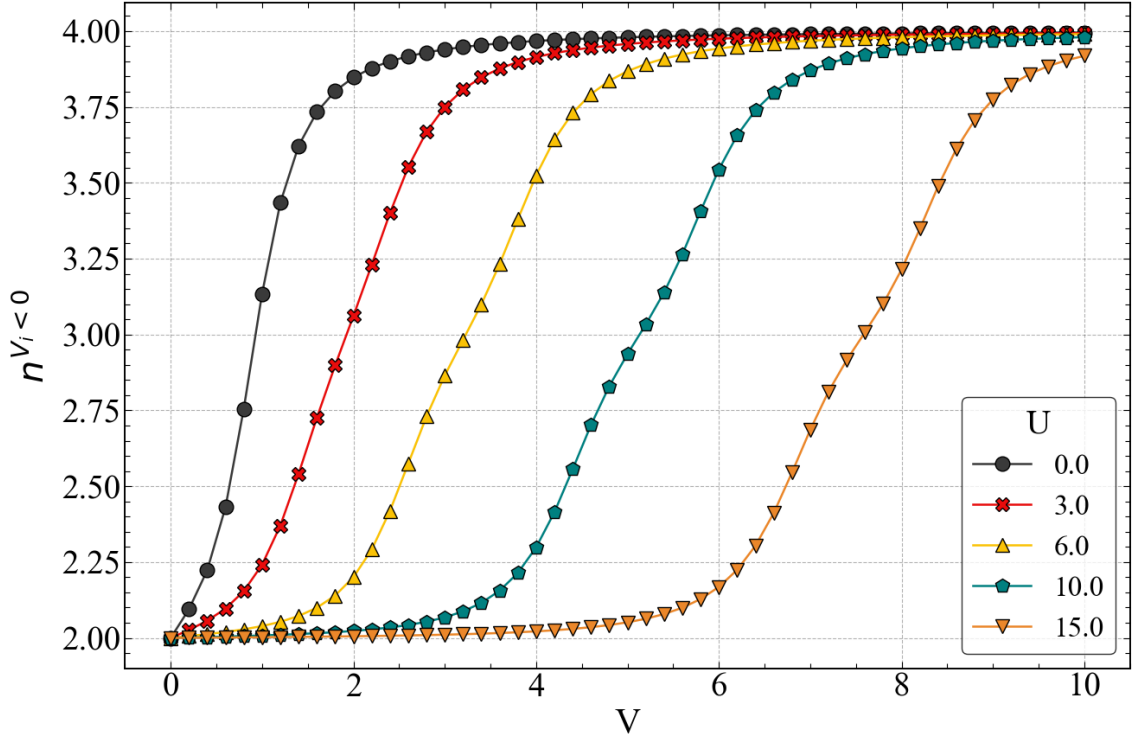
Para $U = 0$ e $V = 0$, a probabilidade de dupla ocupação é igual as demais probabilidades ($w_{\uparrow\downarrow} = w_{\uparrow} = w_{\downarrow} = w_0 = 0.25$), consequentemente, para $U > 0$, $\bar{w}_{\uparrow\downarrow} < 0.25$ em $V = 0$, tendo em vista o custo energético para que o sítio esteja duplamente ocupado. Na Fig. 13, é possível observar que, para interações $U \gg t$, como $U = 15$, $\bar{w}_{\uparrow\downarrow} \approx 0$ para $V < V_1$, refletindo o caráter local do sistema, em que os graus de liberdade das partículas se mantêm parcialmente congelados.

Para $V > V_1$, o sistema responde ao campo aplicado, quebrando sua localidade onde o termo do potencial elétrico sobrepõe ao custo energético imposto pela repulsão coulombiana. Assim favorecendo $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$, que cresce de forma monotônica atingindo um plato em $\bar{w}_{\uparrow\downarrow} \approx 0.5$, refletindo o preenchimento total dos sítios onde o potencial da cadeia é negativo $n_i^{V_i < 0} = 2$.

A fim de complementar a análise da tendência de $\bar{w}_{\uparrow\downarrow} \rightarrow 0.5$, a Fig. 14 mostra a

densidade efetiva das partículas nos sítios onde $V_i < 0$, mostrando como preenchimento dos sítios evolui a medida que o potencial elétrico V favorece a itinerância do sistema.

Figura 14 – Densidade eletrônica efetiva nos sítios do potencial negativo em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0.0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. De maneira similar à $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$, as curvas crescem de forma monotônica atingindo um platô.



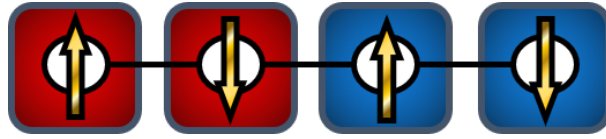
Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Para $V = 0$ e qualquer valor de U , o sistema se encontra totalmente localizado, sendo caracterizado por uma única partícula em cada sítio $n_i = 1$, em que $w_{i\uparrow} = w_{i\downarrow}$ visto que a magnetização é nula. Para $U = 0$, uma leve variação de V é suficiente para iniciar a itinerância do sistema, tendo em vista a ausência de repulsão eletrônica. Para $U > t$, a repulsão coulombiana mantém a localidade do sistema para $V < V_1$, como mostrado anteriormente na Fig. 13. Entretanto, para $V > V_2$, a distribuição das partículas se restringem à região de $V_i < 0$, ou seja $n^{V_i < 0} = 4$.

Tendo em vista que $\bar{w}_{\uparrow\downarrow} \approx 0$ e $n^{V_i < 0} = 2$ para $V < V_1$, é possível determinar este regime como estado de isolante de *Mott*, um sistema localizado em que cada sítio é descrito

pelos graus de liberdade de uma única partícula $n_{i\sigma}$, $\sigma = \uparrow, \downarrow$. A natureza desta fase condiz com o comportamento observado no emaranhamento da Fig. 11 para $V < V_1$, onde, apesar do sistema estar parcialmente congelado, $S \neq 0$, devido aos graus de liberdade de spin, como ilustrado na Fig. 15.

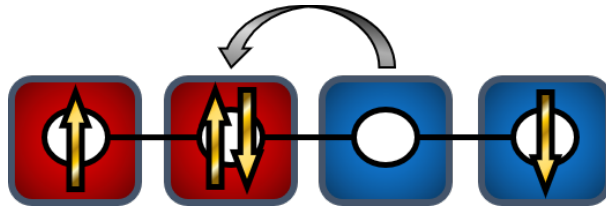
Figura 15 – Representação esquemática do Isolante de Mott no Modelo de Hubbard. Cada sítio é preenchido por uma única partícula com estado de spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, onde a localidade do sistema é determinado pela repulsão coulombiana U .



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Para $V_1 < V < V_2$, a variação positiva de $\overline{w}_{\uparrow\downarrow}$ e $n^{V_i < 0}$, Figs. 13 e 14, juntamente com a variação do emaranhamento na Fig. 11, correspondem à uma transição do isolante de *Mott* para um regime metálico, um sistema delocalizado em que os graus de liberdade das partículas são descritas pelas variações de spin e de carga [39], como ilustrado na Fig. 16.

Figura 16 – Representação esquemática do regime metálico no Modelo de Hubbard. O sistema tem caráter delocalizado em que os quatro possíveis estados de ocupação variam entre si a medida que V aumenta.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

A tendência de $S \rightarrow 0$ para $V > V_2$ da Fig. 11, reflete o congelamento total dos graus de liberdade das partículas. Como a densidade eletrônica $n_i^{V_i < 0} = 2$, correspondendo ao completo preenchimento dos sítios no potencial negativo da cadeia, de modo que

$w_{\uparrow\downarrow} \gg w_{\uparrow}, w_{\downarrow}$, este regime é caracterizado como um isolante de banda, como ilustrado na Fig. 17.

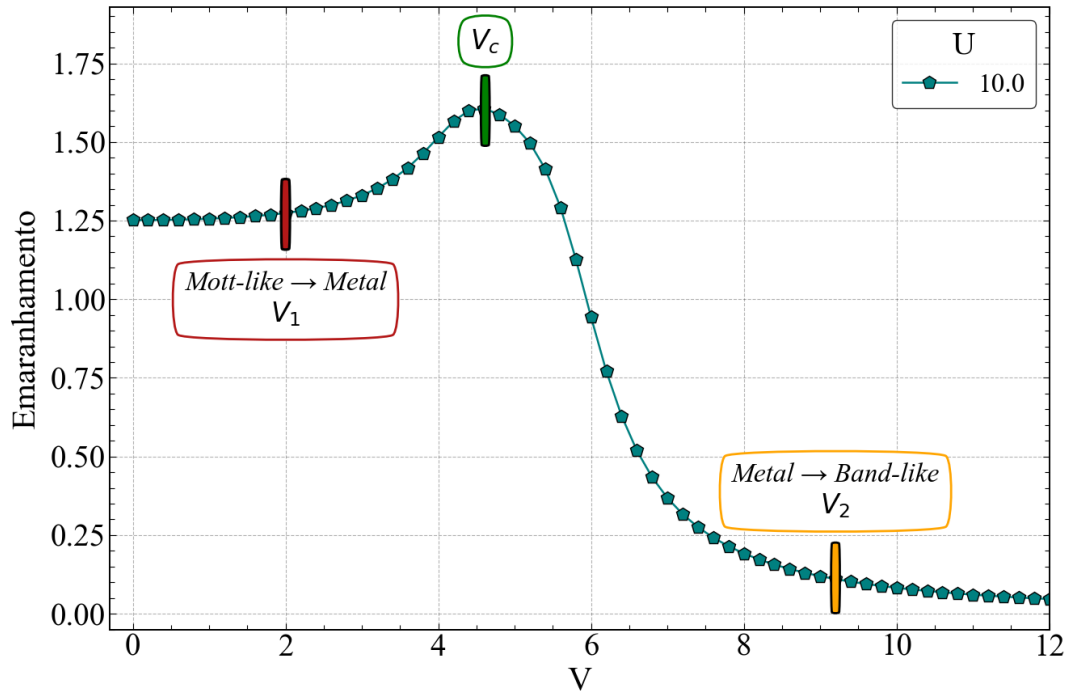
Figura 17 – Representação esquemática do Isolante de banda no Modelo de Hubbard. Cada sítio do potencial negativo da cadeia é preenchido por um par eletrônico, assim congelando totalmente o sistema onde não há qualquer excitação de spin ou carga, caracterizando a localidade do sistema.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Assim, a resposta do sistema ao campo elétrico aplicado, observada em V_1 , e sua suavização em V_2 refletem as transições de fase entre isolante de *Mott* e metal, bem como entre metal e isolante de banda, respectivamente [39, 50], como mostrado na Fig. 18 e na Tabela 1.

Figura 18 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para $U = 10$, para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. Os pontos críticos V_1 e V_2 representam as transições metal-isolante, em que V_1 caracteriza a transição do isolante de *Mott* para o metal, e V_2 a transição do metal para o isolante de banda.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Tabela 1 – Descrição das diferentes fases do sistema para cada regime de V . O sistema é descrito pela fase de Isolante de *Mott* em $V < V_1$, no Regime Metálico em $V_1 < V < V_2$, e na fase de Isolante de Banda em $V > V_2$, para qualquer valor de U .

Isolante de Mott	$V < V_1$
Metal	$V_1 < V < V_2$
Isolante de Banda	$V > V_2$

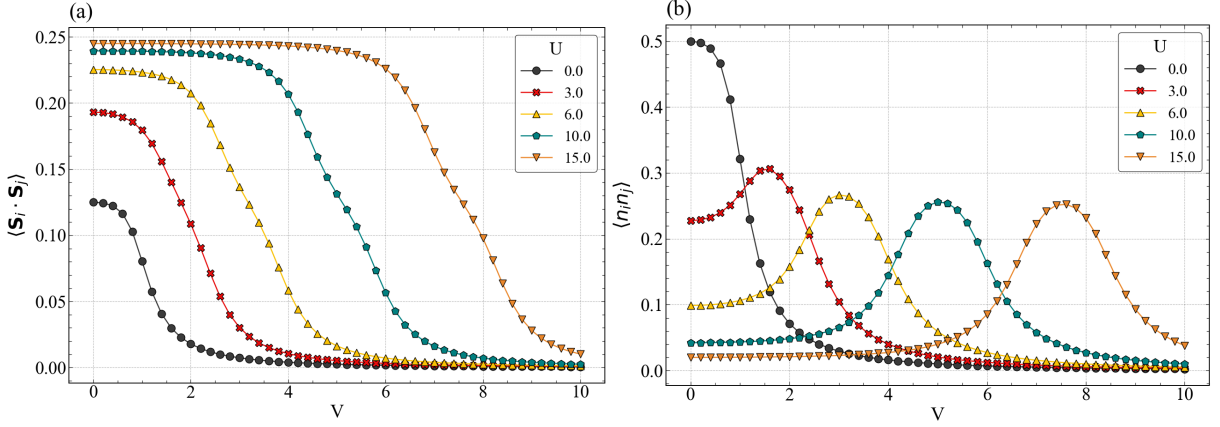
Fonte: elaborado pelo autor (2025).

A natureza desta fase corrobora com a minimização e a saturação da energia do estado fundamental observados na Fig. 10, pois as bandas quando completamente preenchidas, são descritas majoritariamente pelo termo do potencial elétrico V , no qual atua como agente confinante ao congelar por completo o sistema, independentemente de U .

Como no regime de *Mott* os graus de liberdade são descritos pelas flutuações de spin, o regime metálico pelas flutuações de spin e as de carga e, o regime do isolante de banda pela anulação de ambas as flutuações, a análise destas flutuações em função de V complementam a descrição da natureza das fases emergentes. A Fig.19 mostra as flutuações de spin (a) e de carga (b) em função do potencial elétrico V para várias interações U .

Para qualquer interação U , a flutuação de spin é monotônica para $V < V_1$, refletindo a natureza do isolante de *Mott* em que as partículas são descritas apenas pelos graus de liberdade dos spins. Tal comportamento corrobora com a Fig. 19 (b), em que as cargas se mantêm praticamente congeladas no mesmo regime devido a repulsão coulombiana. Para $V_1 < V < V_2$ ocorre uma brusca queda da flutuação de spin, tendo em vista que a fase metálica é caracterizada pela itinerância das partículas, onde $w_{\uparrow\downarrow}$ e w_0 predominam sobre $w_{\uparrow}$ e $w_{\downarrow}$, resultando na mobilidade das cargas do sistema mostrado na Fig. 19 (b).

Figura 19 – Flutuação de spin média em função do potencial elétrico V (a) e flutuação de carga média em função do potencial elétrico V (b), para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios.

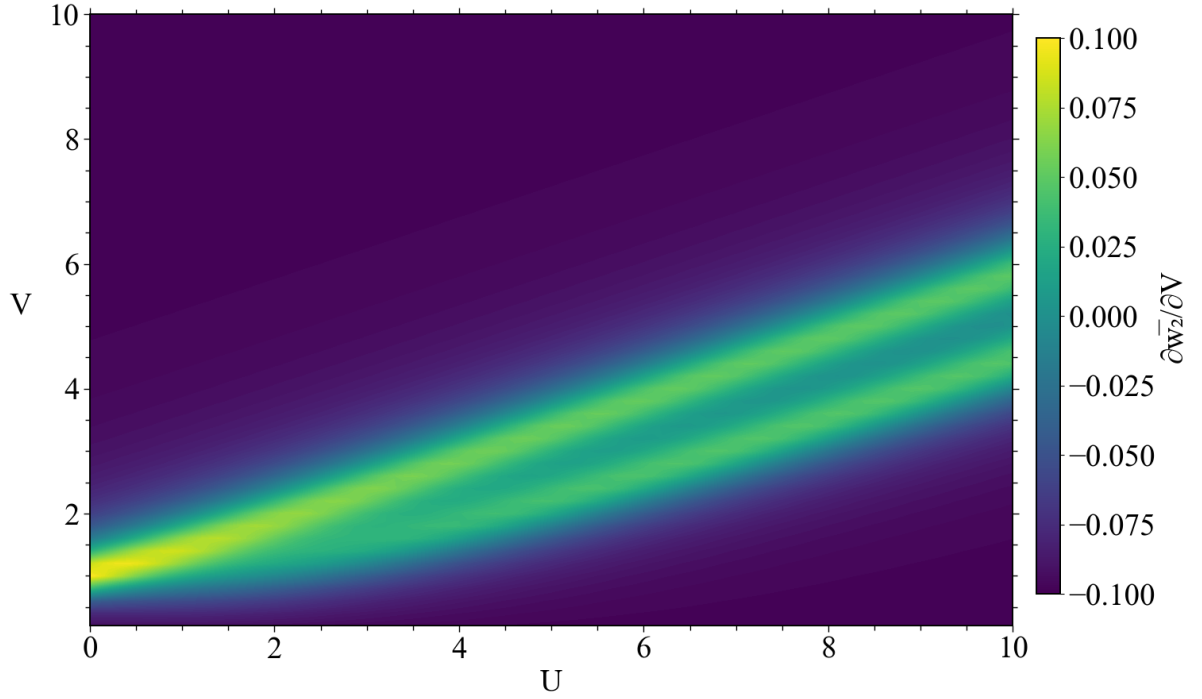


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Os máximos observados da flutuação de carga condizem com o V_c do emaranhamento da Fig. 11, refletindo a delocalização e incerteza do sistema, onde há maior variação de cargas. Em $V > V_2$, as flutuações de spin e de carga tendem a zero, refletindo a natureza do isolante de banda, em que a mesma se encontra completamente preenchida. Na ausência de portadores de carga que contribuem para o termo da energia cinética, os graus de liberdade se encontram completamente congelados, refletindo a natureza localizada do sistema.

Com exceção da energia do estado fundamental da Fig. 10, as demais grandezas realçam claramente as transições das fases na estrutura definida pelo Hamiltoniano de Hubbard sob o potencial elétrico V , como ilustramos na Fig 18 e Tabela 1. Como V_1 e V_2 representam os pontos críticos e, estes afetam diretamente o comportamento de $\overline{w}_{\uparrow\downarrow}$, a Fig. 20 introduz um diagrama de fases, em que as fases isolantes de *Mott* e banda são demarcadas pelas faixas da fase metálica que correspondem à V_1 e V_2 .

Figura 20 – Derivada parcial de primeira ordem da probabilidade de dupla ocupação média em função do potencial elétrico V para vários U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. O regime metálico descrito pela variação da dupla ocupação é demarcado assim definindo V_1 e V_2 para qualquer valor de U .

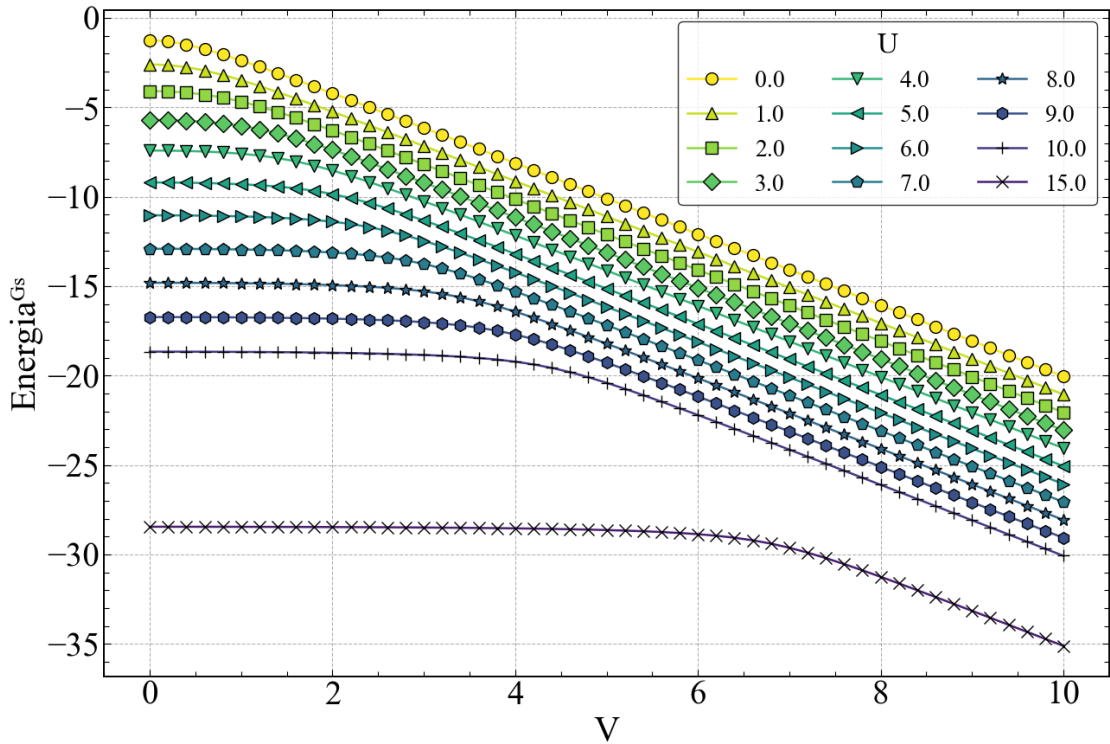


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

4.2 Cadeia pequena polarizada

A fim de melhor entendimento dos mecanismos presentes no sistema, foram investigados os impactos da aplicação de um campo magnético externo H sobre uma polarização interna induzida $P = 0.5$, em uma cadeia de $L = 4$ sítios com densidade $n = 1$. A Fig. 21 mostra a energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V para diferentes interações U .

Figura 21 – Energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. A energia diminui de forma monotônica para qualquer interação U , porém sem a saturação das mesmas.

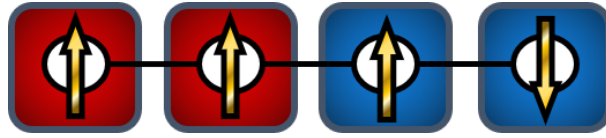


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

No sistema não polarizado $P = 0$ da Fig. 10, a energia do estado fundamental diminui monotonicamente à medida que o potencial elétrico V aumenta, mas com significativa mudança quanto à magnitude das energias. Em $P = 0$, as energias são relativamente mais altas em comparação à $P = 0.5$, indicando que o desbalanço da população de spin desfavorece a minimização dos estados quânticos do sistema.

Para ambos os casos, as energias para $V \ll U$ são mais dispersas em relação à diferentes U . Para $V \gg U$ o decréscimo da energia é mais gradual em $P = 0$, respondendo vagarosamente à variação de V . No entanto, a polarização torna o sistema mais susceptível ao campo aplicado, em que o termo de H se sobrepõe à V , consequência direta dos impactos da polarização na qual desiguala a população de spin ($N_{\uparrow} = 3$, $N_{\downarrow} = 1$) e do potencial externo magnético H que opera sobre a orientação dos spins $H(\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow})$ [22]. Como a desigualdade da população de spin $n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$ impacta diretamente na distribuição eletrônica, de modo que $w_{\uparrow} \gg w_{\downarrow}$, o termo da repulsão coulombiana é minimizado, de modo a não possuir contribuição relevante na energia do sistema, como ilustrado na Fig. 22.

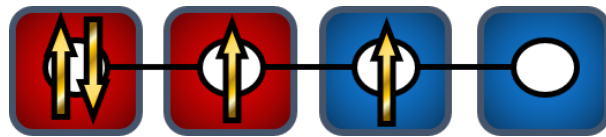
Figura 22 – Representação esquemática do Isolante de Mott no Modelo de Hubbard para $P = 0.5$. Cada sítio é preenchido por uma única partícula com estado de spin σ definido, onde a localidade do sistema é determinado pela repulsão coulombiana U .



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Diferentemente de $P = 0$, onde os elétrons de spins opostos são distribuídos uniformemente à medida que V se sobrepõe à U , o desbalanceamento da população de spin resulta na formação de um único estado duplamente ocupado para $V > V_2$, como ilustrado na Fig. 23.

Figura 23 – Representação esquemática do "band-like" no Modelo de Hubbard para $P = 0.5$. Devido a diferença entre as populações de spin, forma-se apenas um único estado duplamente ocupado, assim não preenchendo a banda totalmente.

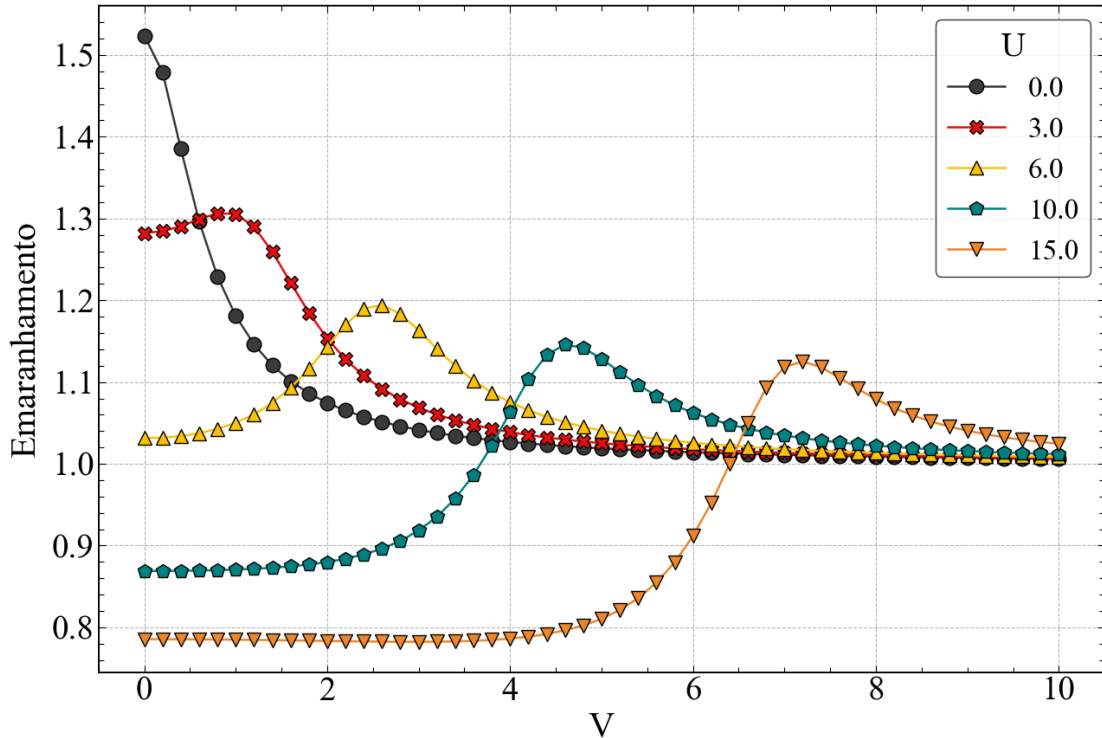


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Dessa forma, mesmo V se sobrepondo à U , a banda não é completamente preenchida, assim o termo de Coulomb determina o grau de minimização da energia, resultando na ausência da saturação das energias observada em $P = 0$.

A Fig. 24 mostra o emaranhamento médio em função do potencial elétrico V para diferentes interações U . Para $U = 0$ e $V = 0$, o emaranhamento é menor em relação à $P = 0$, tendo em vista que o desbalanceamento da população de spin $n_{\uparrow} \neq n_{\downarrow}$ propicia a desigualdade dos quatro estados de ocupação, consequentemente $S < S^{max}$ [64]. Considerando que o emaranhamento no regime de *Mott* é descrito apenas pelos graus de liberdade de spin, a presença da polarização reduz o grau de emaranhamento devido ao campo magnético externo H que induz a orientação dos spins, consequentemente reduzindo os graus de liberdade.

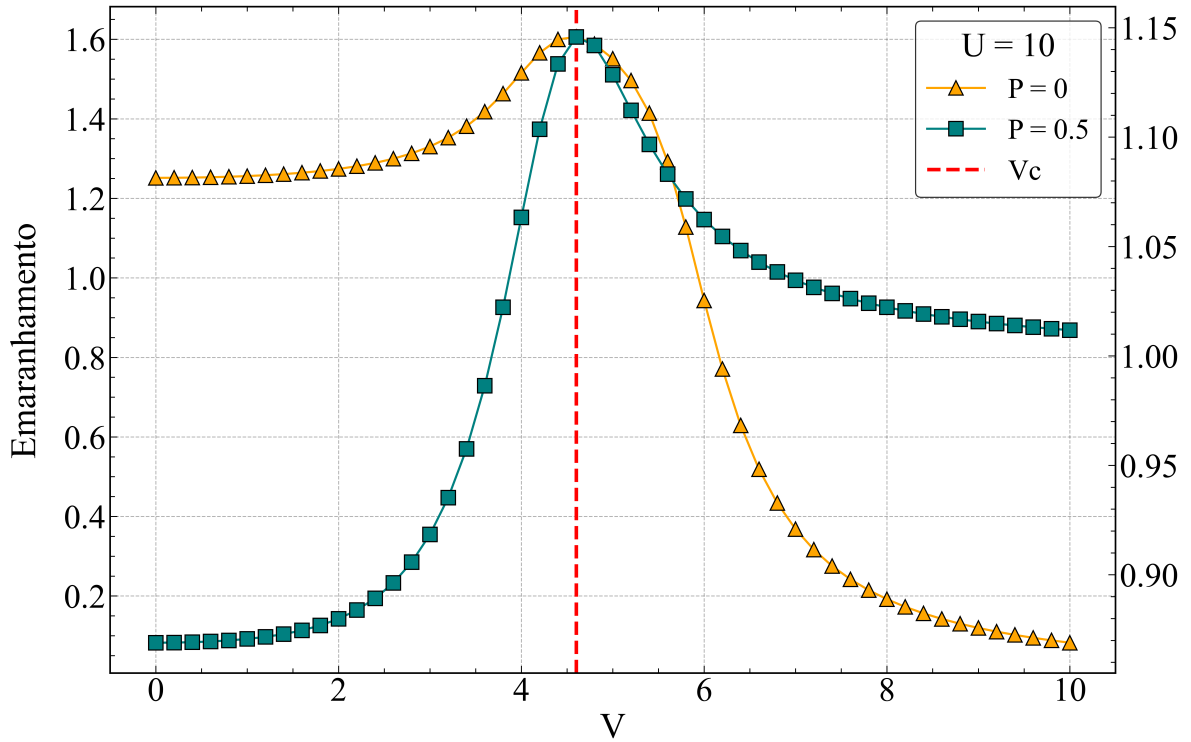
Figura 24 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. O emaranhamento é menor em $V < V_1$ devido ao congelamento dos estados de spin ocasionados por H , e maior para $V > V_2$, tendo em vista a formação de um único estado duplamente ocupado assim permitindo mobilidade de carga pela rede.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Apesar dos impactos gerados pela presença de polarização P e campo externo H , o grau de emaranhamento máximo em V_c se mantém para ambos os casos, como mostrado na Fig. 25. Apesar da polarização influenciar na distribuição eletrônica, o V_c correspondente ao grau máximo de emaranhamento, não é impactado por tal perturbação, mantendo a dinâmica dos quatro estados de ocupação.

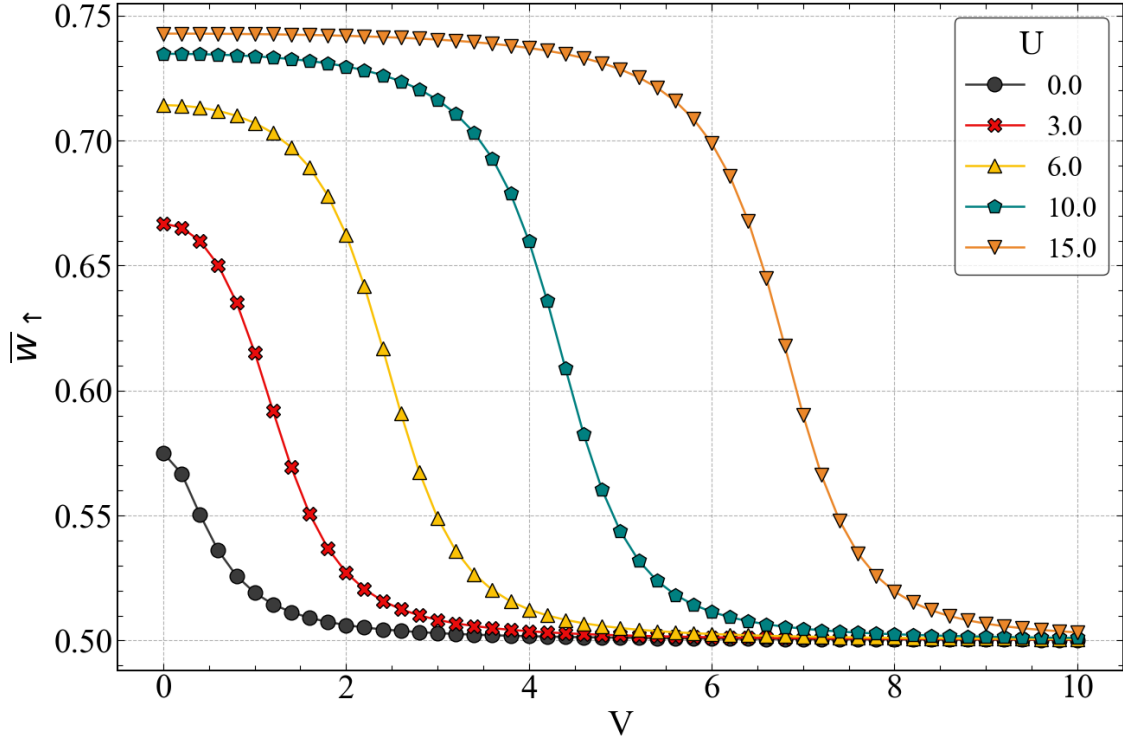
Figura 25 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para $U = 10$, $P = 0$ e $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. Apesar do comportamento do emaranhamento ser diferente em relação à $P = 0$, o grau máximo de emaranhamento definido por V_c é igual.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Para $V > V_2$, o desbalanço da população de spin impossibilita o preenchimento total da banda $n_i^{V_i < 0} \neq 2$ como mencionado, consequentemente impedindo a anulação completa do emaranhamento. Neste regime, a sensibilidade do sistema ao campo magnético externo H é menor, tendo em vista a mobilidade da carga gerada por um único par conjugado formado, que varia entre os dois sítios de $V_i < 0$. Tal condição reflete na tendência do emaranhamento $S \rightarrow 1$ para qualquer U , em que $w_{\uparrow} \rightarrow 0.5$ como mostrado na Fig. 26.

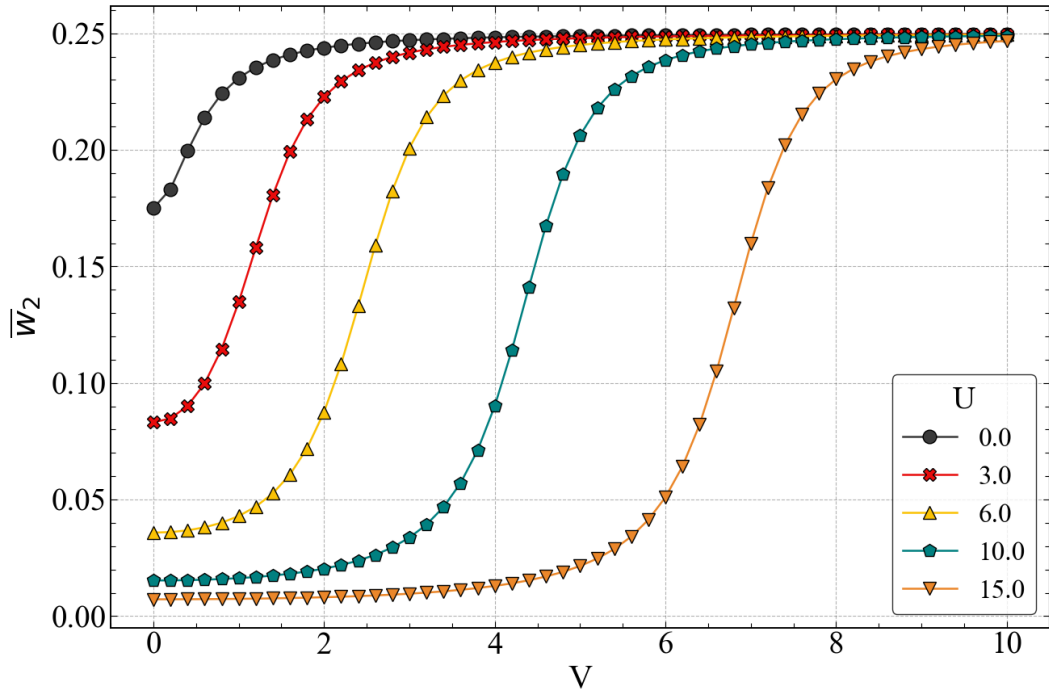
Figura 26 – Probabilidade de ocupação simples $\sigma = \uparrow$ média em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. As curvas decrescem monotonicamente atingindo um platô.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

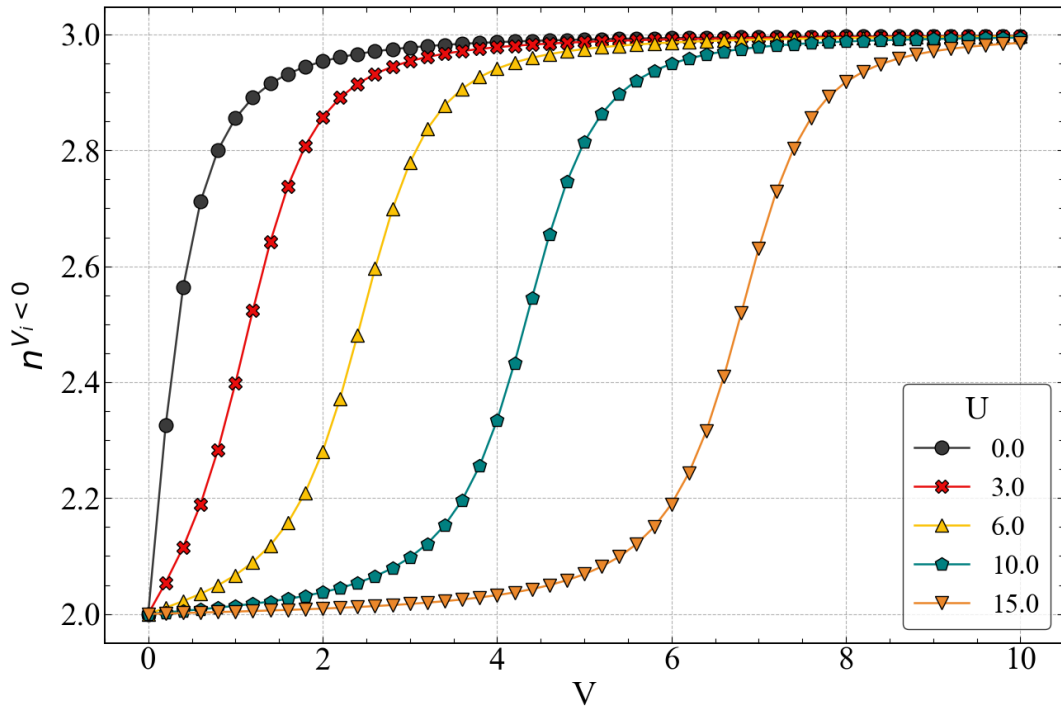
A probabilidade de dupla ocupação média $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ e a densidade efetiva $n_i^{V_i < 0}$ para $P = 0.5$ mostrados nas Figs. 27 e 28, apresentam comportamentos semelhantes aos observados no caso $P = 0$. A presença do campo magnético e da polarização interna, não alteram significativamente a tendência na distribuição das partículas na cadeia, alterando apenas as escalas, onde $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}^{P=0} \rightarrow 0.5$ e $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}^{P=0.5} \rightarrow 0.25$. Tal condição demonstra que a natureza itinerante é descrita exclusivamente pela competição entre os termos de U e V . Nota-se que para $P = 0$, ambas as grandezas apresentam oscilações no regime metálico, enquanto que para $P = 0.5$ as mesmas desaparecem. A natureza deste fenômeno necessita de um sistema de maior complexidade e será tratada na próxima seção.

Figura 27 – Probabilidade de dupla ocupação média em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Figura 28 – Densidade eletrônica efetiva nos sítios do potencial negativo em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

4.3 Cadeia estendida não polarizada

Apesar dos resultados promissores e das fases emergentes observadas, a limitação do tamanho da cadeia ($L = 4$ sítios) pode acarretar em erros significativos devido aos efeitos de borda, caracterizado pelas oscilações de Friedel [50]. Essas oscilações, que se originam da limitação dos graus de liberdade das partículas nas bordas, como discutido no Capítulo 2.2, introduzem flutuações numéricas que podem distorcer as propriedades intrínsecas do sistema, assim prejudicando a precisão dos resultados [50, 58, 64].

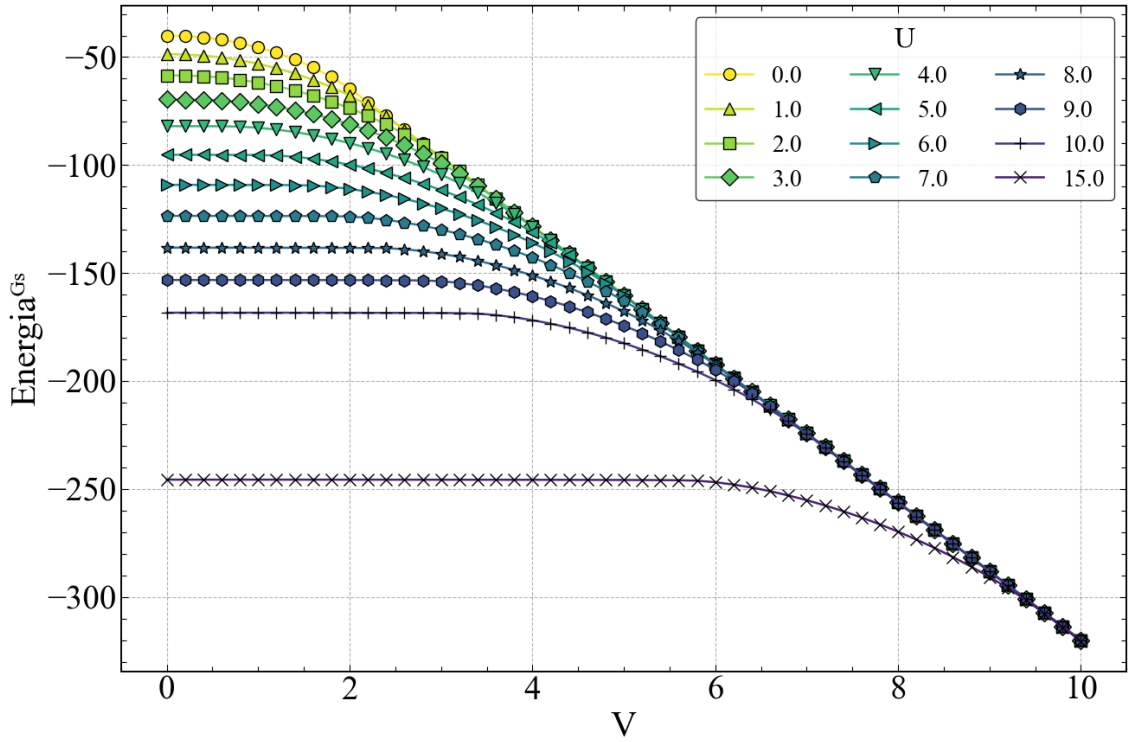
Além disso, a análise dos impactos da polarização no sistema é igualmente limitada, devido ao tamanho encurtado da cadeia que propicia apenas um único estado magnetizado ($m = 0.5$). Esta condição impossibilita a realização de uma varredura completa dos diferentes estados magnetizados [17]. Grandezas como a susceptibilidade magnética por exemplo, seriam impossíveis de serem calculadas, criando barreiras para uma compreensão mais ampla das correlações magnéticas e suas implicações na dinâmica do sistema.

A fim de superar tais obstáculos, o tamanho da cadeia foi ampliado para $L = 32$ sítios, tamanho suficiente para propiciar uma varredura eficiente dos efeitos da polarização, gerando no total $n_{mag} = 2n_{\uparrow} - L$ estados magnetizados, além de minimizar os efeitos de borda. Esse aumento também possibilita uma investigação mais aprofundada das propriedades eletrônicas em um regime de interação mais realista, sem comprometer demasiadamente o custo computacional para a realização dos cálculos [58].

A Fig. 29 mostra a energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V para diferentes interações U em uma cadeia de $L = 32$ sítios. Comparando com o caso de $L = 4$ sítios, observa-se que, embora as escalas tenham mudado significativamente devido ao aumento do comprimento da cadeia, o perfil das curvas permaneceu consistente. Esse comportamento indica que, mesmo com um número maior de sítios, o sistema segue o mesmo padrão de decaimento da energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V . Dessa forma, o sistema se encontra dentro do limite termodinâmico, validando

a robustez das observações realizadas nas cadeias menores.

Figura 29 – Energia do estado fundamental em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. A energia diminui de forma monotônica para qualquer interação U como observado na cadeia menor, indicando que o sistema se encontra dentro do limite termodinâmico.

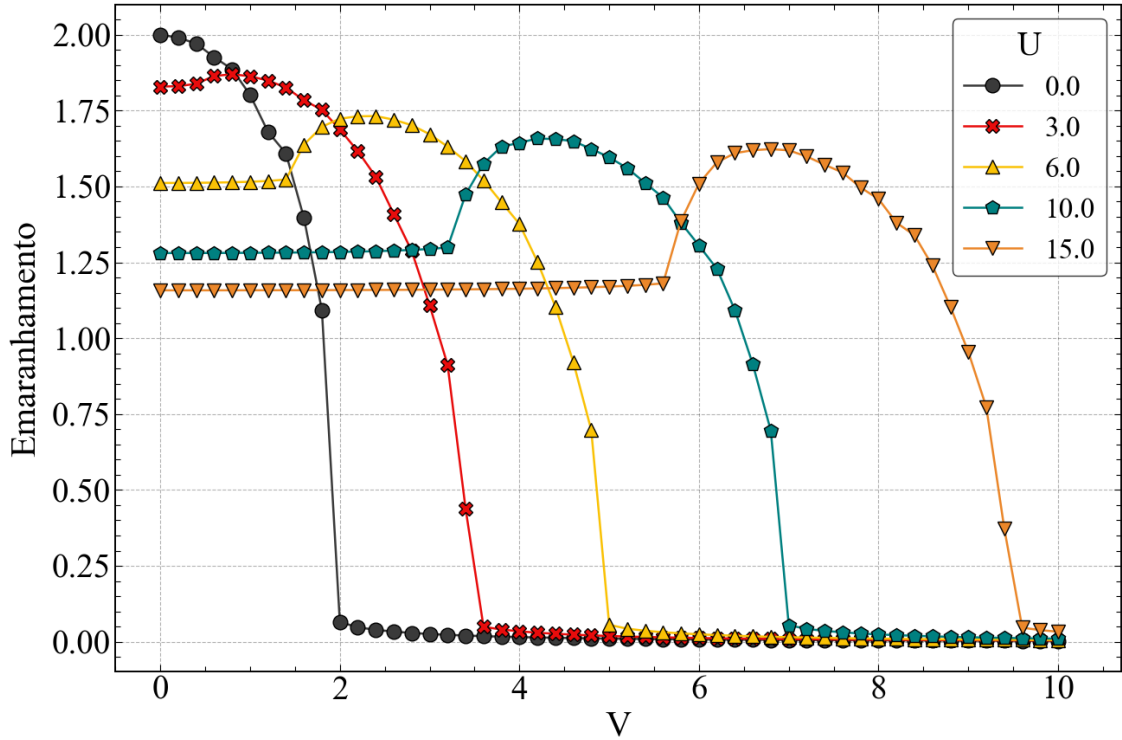


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

A Fig. 30 mostra o emaranhamento médio em função do potencial elétrico V para diferentes interações U . Comparando novamente com o caso de $L = 4$ sítios, observa-se que os pontos críticos das transições de fase estão melhor definidos para a cadeia estendida. Enquanto as curvas para $L = 4$ apresentavam transições mais suaves no emaranhamento, sugerindo uma gradual variação dos graus de liberdade com o aumento de V , as curvas para $L = 32$ exibem platôs bem delineados, indicando uma transição de fase mais clara entre os diferentes regimes de interação. Essa diferença do comportamento do emaranhamento em relação ao tamanho da cadeia L , reflete a influência dos efeitos de borda e pela maior representatividade dos graus de liberdade na dinâmica itinerante. Para o sistema de $L = 4$, as oscilações de Friedel introduziam flutuações que suavizam as transições, tornando os platôs menos pronunciados, refletindo um sistema onde os estados de ocupação das

partículas estão mais restritos.

Figura 30 – Entropia de von Neumann em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. Com a minimização dos efeitos de borda, os pontos críticos V_1 e V_2 estão melhores definidos quando comparados à cadeia menor.



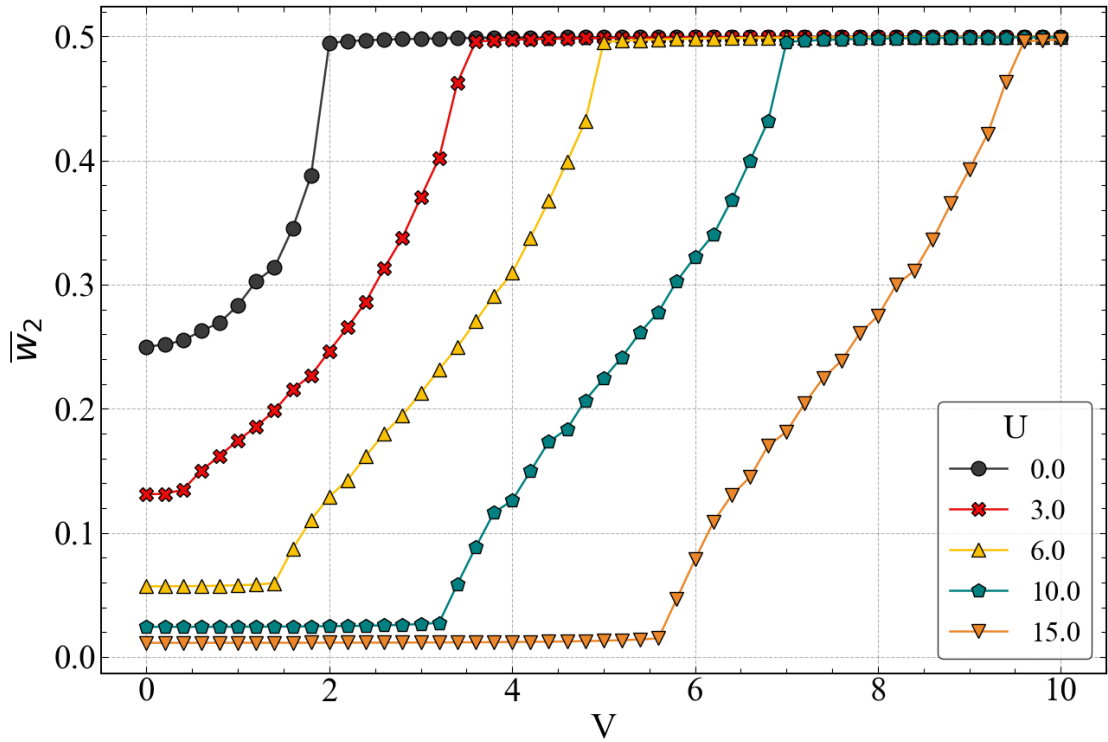
Fonte: elaborado pelo autor (2025).

A maior disponibilidade de sítios aumenta as possibilidades de distribuição dos elétrons ao longo da cadeia, o que resulta em transições de fase mais definidas. Assim, em cadeias maiores, as variações nas correlações quânticas são mais precisas e sensíveis às alterações nos parâmetros do sistema, permitindo que o emaranhamento se comporte de maneira mais abrupta em resposta ao aumento de V .

A Fig. 31 mostra a probabilidade de dupla ocupação média $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ em função do potencial elétrico V para diferentes interações U . A monotonicidade das curvas se manteve em relação à cadeia menor, em que as transições previstas por $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ em função de V para diferentes interações U seguem o mesmo padrão de crescimento. Contudo, apesar do aumento no número de sítios, as oscilações observadas na fase metálica permanecem,

assim demonstrando que este comportamento não se origina devido as oscilações de Friedel, sugerindo que se trata de uma característica intrínseca do sistema. Dado a robustez das oscilações, o aprofundamento da análise sobre a natureza desse fenômeno pode revelar informações importantes sobre os mecanismos subjacentes que governam as transições de fase e as correlações quânticas dentro do sistema.

Figura 31 – Probabilidade de dupla ocupação média em função do potencial elétrico V para para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. As curvas crescem de forma monotônica atingindo um platô, em que os pontos críticos também se encontram mais delineados.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

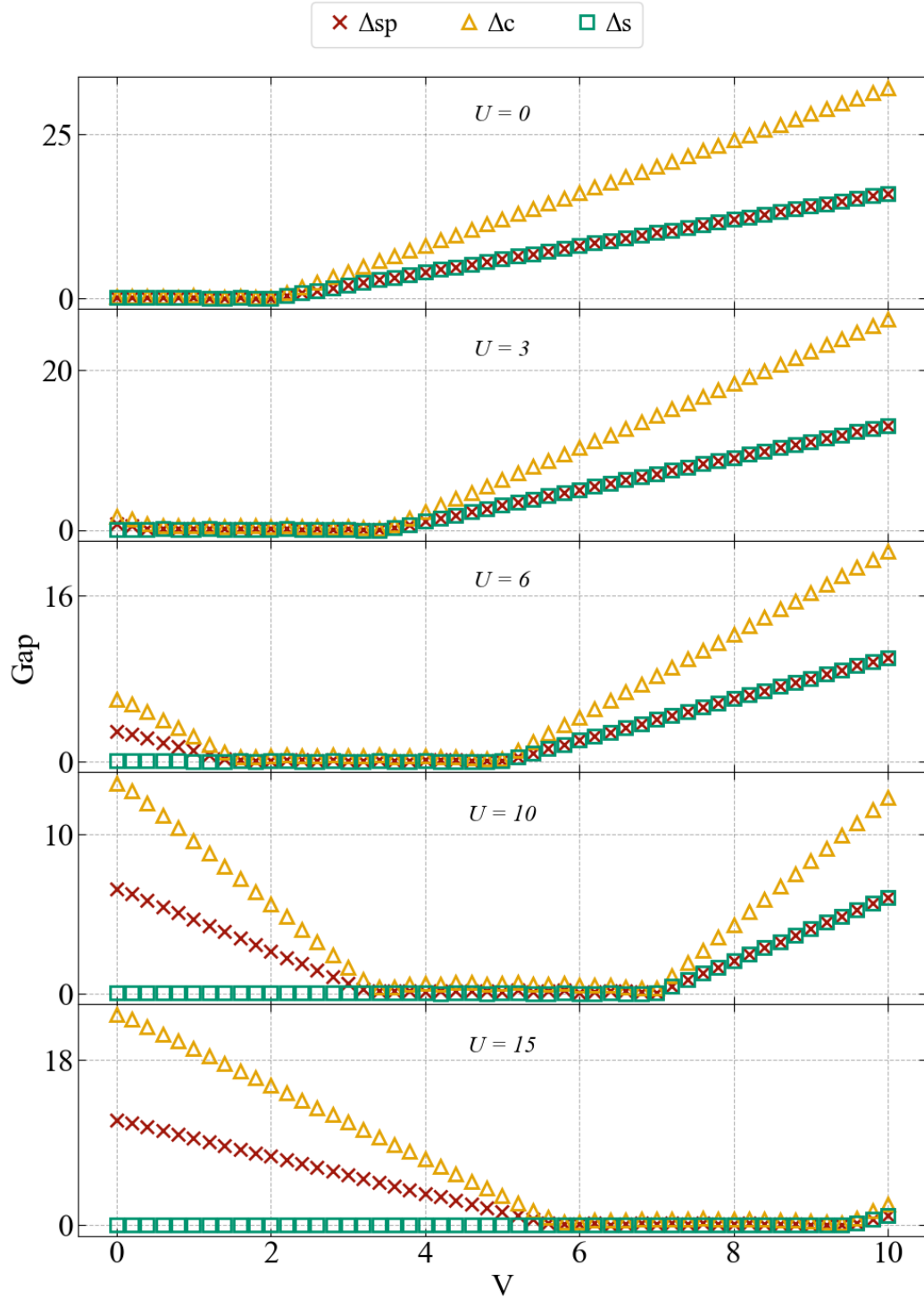
Antes de investigar a fundo a natureza das oscilações do regime metálico, analisar os gaps de energia em sistemas físicos, como no modelo de Hubbard unidimensional, traz vantagens significativas em relação a outros parâmetros como o $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ e o emaranhamento quântico. Os gaps de energia, como o gap de carga, o gap de spin e o gap de uma única partícula, fornecem uma visão direta do custo energético associado às excitações no sistema, assim desempenhando um papel fundamental para caracterizar as diferentes fases do sistema, além de também confirmar a possibilidade do comportamento oscilatório

derivar de efeitos de cadeia ou oscilações locais [76].

Como os gaps determinam características como a estabilidade e a resposta do sistema a perturbações externas, permitem identificar com precisão os regimes respectivos das fases que emergem no sistema. A fase metálica é caracterizada por gap nulo, onde os portadores de carga se movem livremente, enquanto as fases isolante possuem gap finito, onde há um custo energético significativo para a movimentação de cargas ou alteração do estado de spin. Esta análise então, permite a caracterização quantitativa da mobilidade de carga e das excitações de spin, além de fornecer informações sobre a robustez de uma transição de fase e de uma excitação do sistema, especialmente em condições de alta interação $U \gg t$ e potenciais elétricos $V \gg t$.

A Fig. 32 mostra diferentes gaps de energia (gap de uma única partícula, gap de carga e gap de spin) em função do potencial elétrico V para diferentes interações U . O gap de carga Δ_c reflete o custo energético necessário para promover a excitação de uma carga, fornecendo a descrição da mobilidade de carga no sistema. Para os casos de $U = 0$ e $U = 3$, $\Delta_c \approx 0$ para $V < V_2$, refletindo claramente o regime metálico onde os graus de liberdade das cargas estão maximizados. Para $V > V_2$, o gap de carga cresce linearmente com o potencial V , no qual atua confinando as partículas em $V_i^{<0}$ assim minimizando os graus de liberdade das mesmas. A formação desse gap de energia é o reflexo do custo energético para excitar uma carga na rede, assim caracterizando o isolante de banda, tendo em vista que nesse regime não há estados disponíveis para qualquer mobilidade de carga.

Figura 32 – Gaps de energia (Δ_{sp} , Δ_c e Δ_s) em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. O regime metálico é caracterizado por todos os gaps tenderem à zero, enquanto as fases isolantes caracterizam gaps positivos refletindo o custo energético para excitar o sistema.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Nos casos de $U = 6$, $U = 10$ e $U = 15$, devido ao regime do isolante de Mott em $V < V_1$, há um custo energético para superar a repulsão coulombiana, de modo que o gap se torna mais elevado à medida que U aumenta ($\Delta_c^{U=0} < \Delta_c^{U=3} < \Delta_c^{U=6} \dots \Delta_c^{U \rightarrow \infty}$). Para $V > V_2$, os gaps de carga apresentam crescimento menos pronunciado em comparação com os casos de $U = 0$ e $U = 3$, refletindo maior robustez do sistema à transição para o regime de isolante de banda.

O gap de uma única partícula Δ_{sp} reflete o custo energético associado à inserção ou remoção de uma partícula do sistema, similar ao conceito de energia de ionização. Nos casos de $U = 0$ e $U = 3$, $\Delta_{sp} \approx 0$ para $V < V_2$, refletindo o regime metálico onde não há um custo energético significativo para alterar a densidade do sistema. No entanto, para $V > V_2$, o gap cresce linearmente devido à tendência da localidade do sistema, em que $n_i^{V < 0} = 2$, implicando em um custo energético para alterar a densidade.

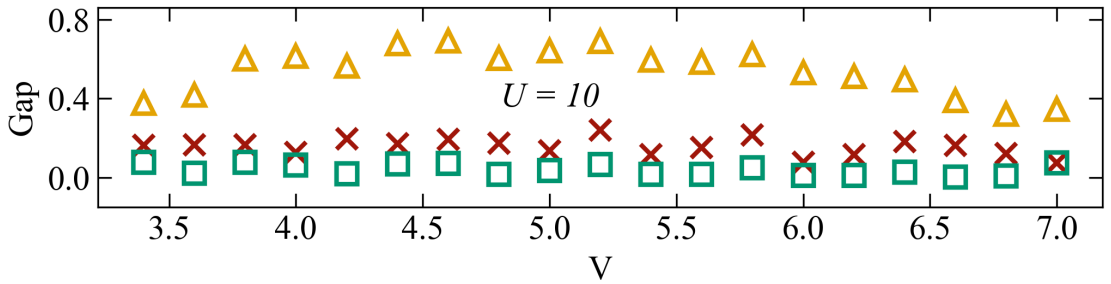
Para os casos de $U = 6$, $U = 10$ e $U = 15$, em $V < V_1$, Δ_{sp} segue uma tendência semelhante à Δ_c em uma menor escala de energia, refletindo assim a natureza do isolante de Mott. O custo energético para alterar a densidade do sistema é menor quando comparado a mobilização de uma carga, tendo em vista a maior facilidade em alterar a estrutura de distribuição referente ao regime de Mott $n_{i,\sigma} = 1$, que em relação a mobilizar uma carga em um regime onde a repulsão U predomina. Para $V > V_2$, Δ_{sp} cresce linearmente assim como Δ_c , porém novamente em uma menor escala de energia. Apesar da localidade do regime do isolante de banda, a energia necessária para alterar a densidade continua menor do que a energia para mobilizar uma carga, reflexo do total preenchimento da banda.

O gap de spin Δ_s reflete o custo energético para criar uma excitação de spin, ou seja, alterar a orientação de um spin, sem necessariamente mobilizar uma carga. Nos casos de $U = 0$ e $U = 3$, $\Delta_s \approx 0$ para $V < V_2$, mostrando que no regime metálico, não há restrições significativas quanto às flutuações dos estados de spin. Entretanto, para $U = 6$, $U = 10$ e $U = 15$, o comportamento de Δ_s difere dos demais gaps de energia, onde $\Delta_s \approx 0$ mesmo para $V < V_1$ no regime de Mott. Neste regime, apesar da repulsão coulombiana manter

a localidade do sistema, as propriedades de spin não são afetadas. Como anteriormente observado na Fig. 19 (a), as partículas alternam seus estados de spin constantemente, com o objetivo de minimizar a energia total ao manter um grau de magnetismo líquido nulo $S_z = 0$.

Para $V > V_2$, Δ_s cresce linearmente à medida que V aumenta. Isso reflete a transição do sistema para o regime de isolante de banda, onde tanto os graus de liberdade das cargas quanto dos spins estão congelados. Nesse regime, a energia necessária para alterar a orientação de um spin torna-se significativa, pois o sistema tende ao total congelamento dos graus de liberdade devido ao confinamento em $V_i^{<0}$ provocado por V . Um ponto importante a ser destacado é que, para $V > V_2$, Δ_s e Δ_{sp} são equivalentes para qualquer valor de U , uma vez que a inserção ou remoção de uma partícula do sistema afeta simultaneamente suas propriedades de spin e densidade.

Figura 33 – Gaps de energia (Δ_{sp} , Δ_c e Δ_s) do regime metálico em função do potencial elétrico V para $U = 10$, $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. As oscilações do regime metálico manifestadas nas demais grandezas emergem nos gaps de energia, assim confirmando que tal fenômeno não se trata de efeitos de cadeia ou oscilações locais.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

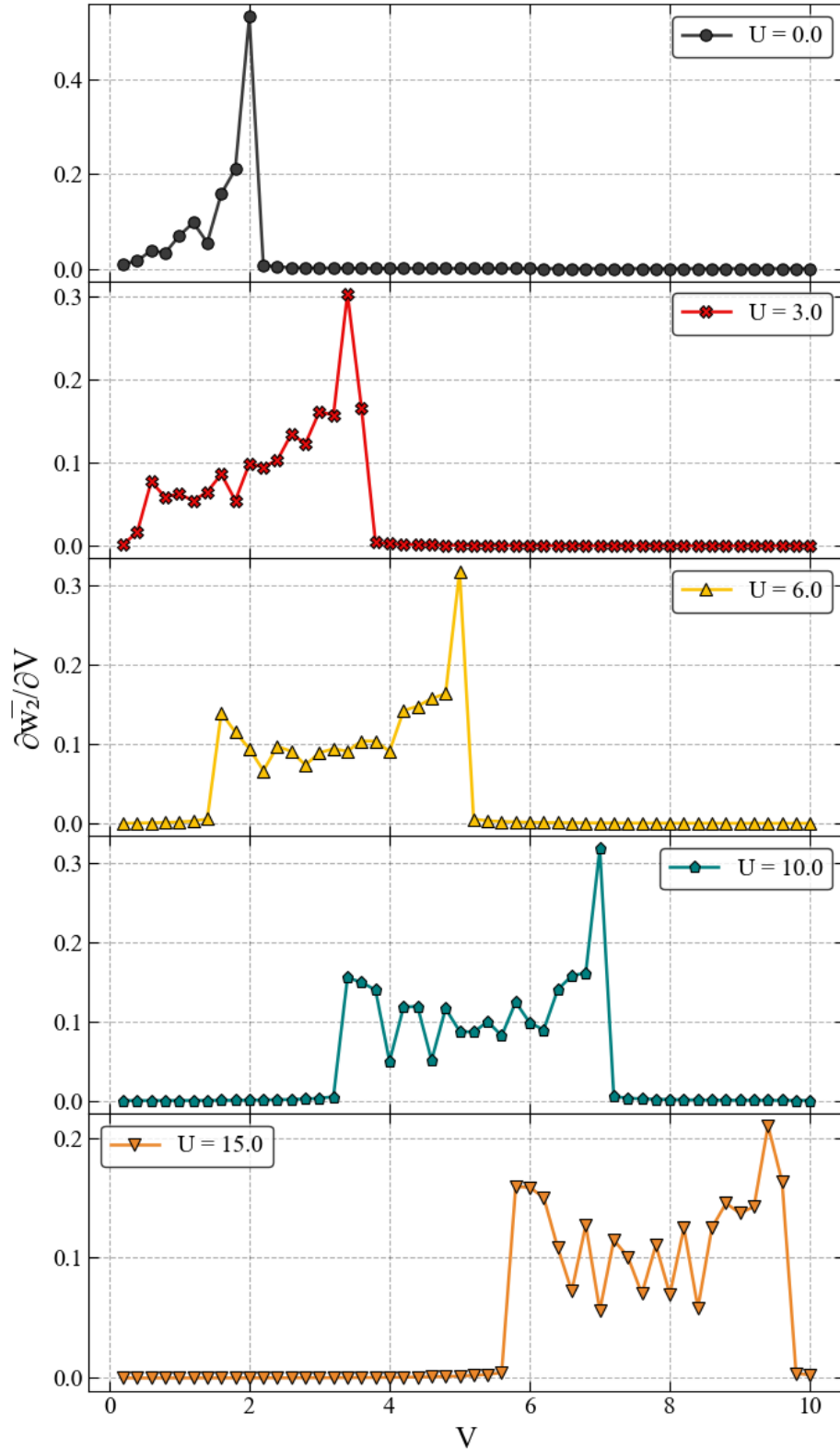
Analisando os gaps de energia no regime metálico, a Fig. 33 mostra diferentes gaps de energia (gap de uma única partícula, gap de carga e gap de spin) em função do potencial elétrico em $V_1 < V < V_2$ para interação $U = 10$. É possível observar que as oscilações características do regime, se manifestam sobre essas quantidades. Essas variações periódicas sugerem que, mesmo em um regime delocalizado, existem padrões

de reorganização das cargas que podem estar associados a interferências ou modulações decorrentes das propriedades do sistema, como interações de longo alcance ou efeitos de confinamento. O Δ_s apresenta oscilações significativas, semelhantes às observadas em Δ_c . Como Δ_s reflete o custo energético para criar excitações de spin, as oscilações nesta fase sugerem que o comportamento dos spins também está sendo influenciado por flutuações no sistema. Dessa forma, essas oscilações podem ser uma assinatura de interferência ou refletir competições entre diferentes estados magnéticos e de carga.

Como os gaps de energia confirmam que o comportamento oscilatório não deriva de efeitos de cadeia ou oscilações locais, analisamos agora na cadeia estendida os parâmetros médios como o $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ e o emaranhamento. A Fig. 34 mostra a taxa de variação de $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ em relação à V , em função do potencial elétrico V para diferentes interações U .

Tendo em vista que as fases isolantes possuem $\bar{w}_{\uparrow\downarrow} \approx 0$, mas que no regime metálico $\bar{w}_{\uparrow\downarrow} > 0$, analisar as derivadas parciais auxiliam na visualização da sensibilidade dessas oscilações em relação à V e U . Para qualquer interação U , a fase metálica é bem definida por novamente caracterizar o regime oscilatório do sistema. A derivada de $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ em relação à V exibe um pico acentuado para $V \approx V_2$, e que decai rapidamente para zero. Esse comportamento indica que há uma transição abrupta de $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ em resposta à V , o que corresponde ao rápido preenchimento dos sítios em $V_i^{<0}$. Comparando as interações $U = 10$ e $U = 15$, as oscilações na derivada são mais evidentes e distribuídas por um regime mais amplo de V , sugerindo novamente que a resposta do sistema à V é mais susceptível à U .

Figura 34 – Taxa de variação da probabilidade de dupla ocupação em relação à V , em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. As oscilações na derivada são mais distribuídas por um regime mais amplo de V , mostrando que a resposta do sistema à V é mais susceptível à U , revelando uma complexa dinâmica entre os termos.

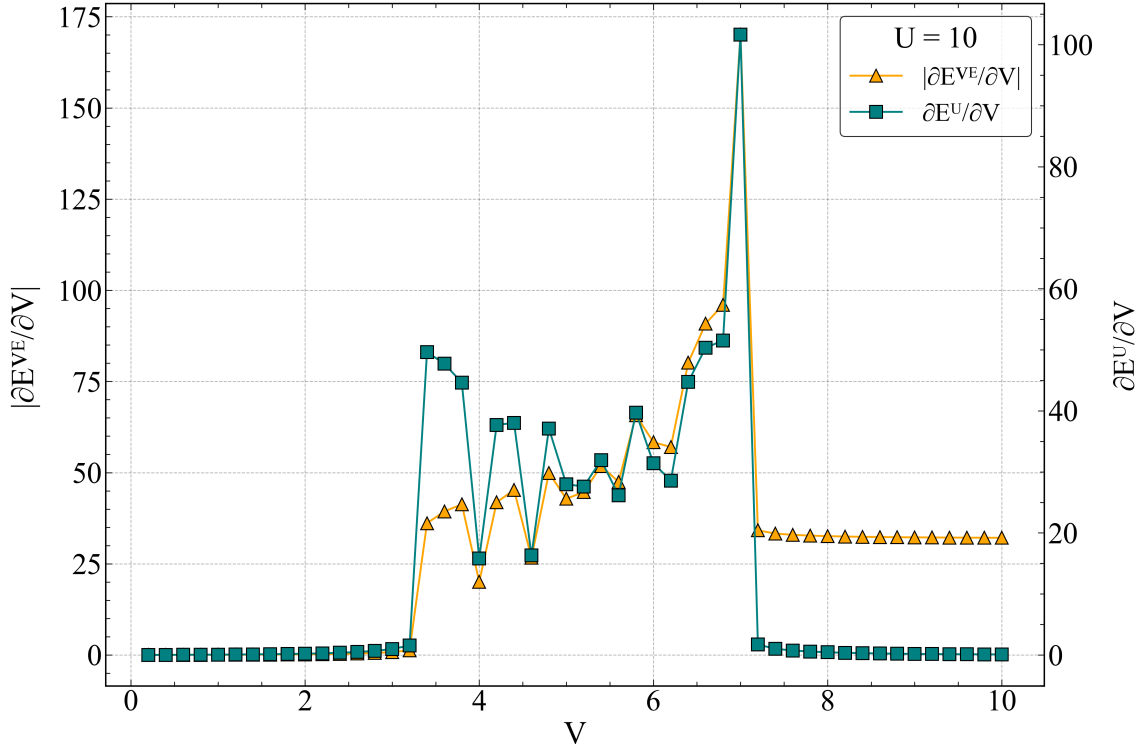


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Independentemente do tamanho da cadeia, a dinâmica entre os termos V e U do Hamiltoniano descrevem os mecanismos subjacentes às transições fases. Entretanto, como observado nas últimas análises realizadas, tal dinâmica reflete também nos mecanismos que regem o regime metálico. Dessa forma, é de suma importância investigar a evolução da competição entre esses dois termos e seus impactos na energia total do sistema. O termo U , que descreve a repulsão de Coulomb entre partículas, tende a favorecer a localização dos elétrons, enquanto V , o campo elétrico aplicado à rede, tende a favorecer a itinerância entre os sítios. A análise da variação simultânea entre V e U em relação à energia total permitirá esclarecer como os termos se correlacionam de modo a determinar as fases emergentes e o comportamento itinerante das partículas.

A Fig. 35 mostra a taxa de variação da energia dos termos de V e de U em relação à variação de V , em função do potencial elétrico V para $U = 10$. Para $V < V_1$ no regime de Mott, ambos os termos exibem uma variação praticamente nula $\frac{\partial E^k}{\partial V} \approx 0$, mostrando que o sistema não foi significativamente perturbado por V . Nesse estágio, a localidade dos elétrons ainda é fortemente ditada pela repulsão U , o que impede o aumento do grau de liberdade das partículas ao longo da cadeia. No entanto, o regime metálico em $V_1 < V < V_2$ é caracterizado pelo crescimento das variações de ambos os termos à medida que V aumenta. Esse comportamento indica o início de uma fase caracterizada pela competição entre o termo de Coulomb U e o termo do potencial elétrico V , que resultam nas oscilações da energia total.

Figura 35 – Taxa de variação dos termos isolados de V e U em relação à V , em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. Ambos os termos apresentam variações proporcionais, embora com escalas diferentes, refletindo a dinâmica itinerante do sistema.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

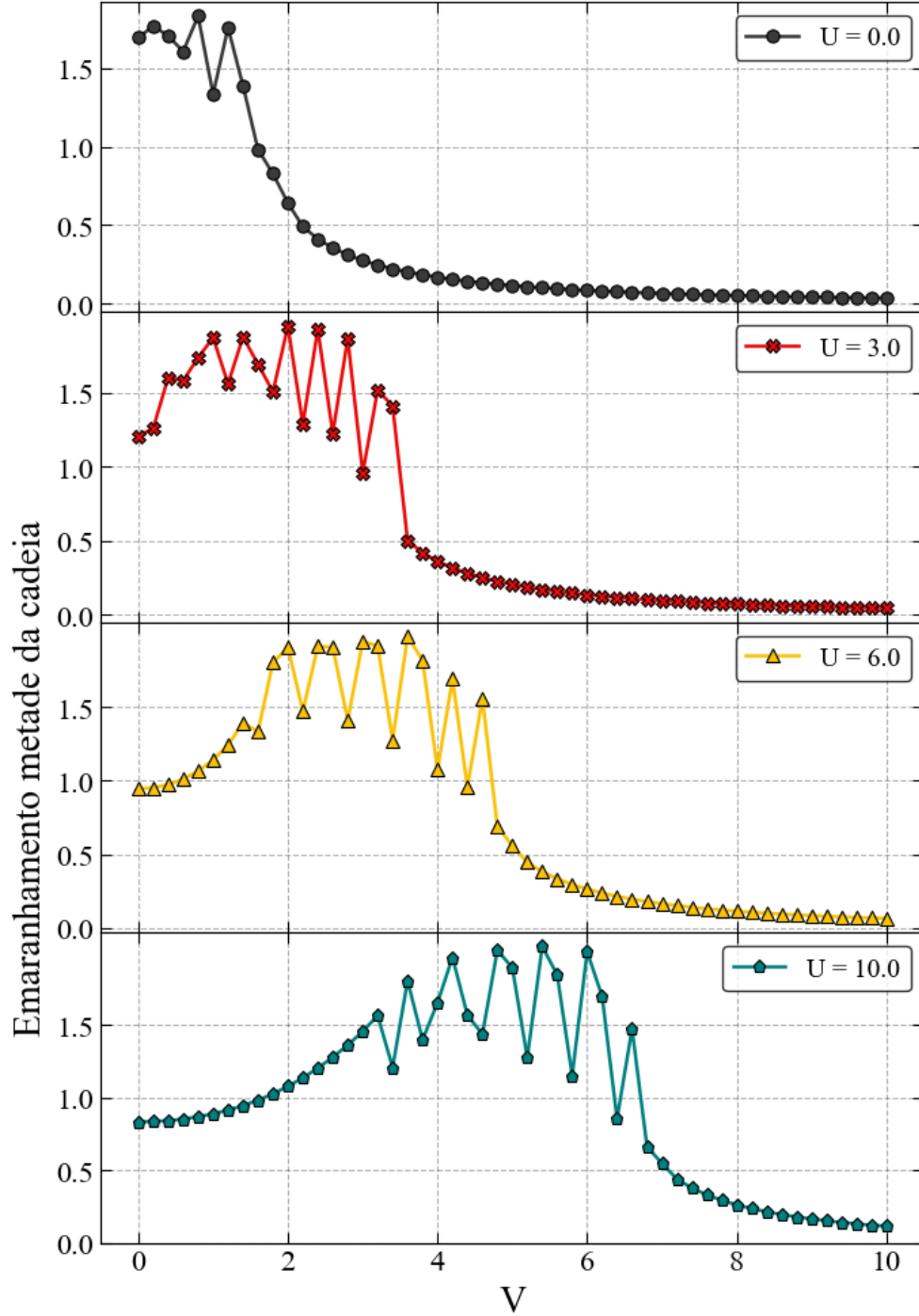
Essa dinâmica pode ser melhor visualizada pela perspectiva da itinerância eletrônica. Em V_1 , o potencial externo contribui energeticamente o suficiente para romper a hegemonia do regime de *Mott* ditado por U , assim favorecendo a dupla ocupação em $w_{\uparrow\downarrow}^{V<0}$ e consequentemente, aumentando a densidade eletrônica em $V_i^{<0}$. Contudo, com o aumento da densidade $n^{V<0}$ e o favorecimento de $w_{\uparrow\downarrow}^{V<0}$, o termo da repulsão coulombiana U adquire maior contribuição novamente, de modo a se sobrepor ao termo do potencial elétrico V . Essa conduta caracteriza o regime metálico, resultando na robustez do sistema em transitar para o isolante de banda.

Como observado na Fig. 35, ambas as derivadas possuem um pico acentuado para $V \approx V_2$, sinalizando onde a competição entre os termos é maximizada. Em $V > V_2$, ambas as derivadas caem bruscamente devido a transição para o regime do isolante de banda,

em que, apesar de $\frac{\partial E^U}{\partial V} \approx 0$, o termo de $\frac{\partial E^{VE}}{\partial V} > 0$. Esta curiosa circunstância mostra que, apesar do congelamento de todos os graus de liberdade pela banda completamente preenchida, o aumento de V ainda afeta diretamente a energia dos elétrons confinados e assim, contribuindo para a energia total do sistema.

Visando analisar os mecanismos subjacentes à itinerância, foram analisados os impactos da correlação entre os potenciais $V^{>0}$ e $V^{<0}$ da cadeia, sendo quantificado pelo emaranhamento entre as metades da cadeia, como mostra a Fig. 36 em função do potencial elétrico V para diferentes interações U .

Figura 36 – Emaranhamento entre as metades da cadeia em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. As oscilações do regime metálico se manifestam na correlação entre os potenciais positivo e negativo.

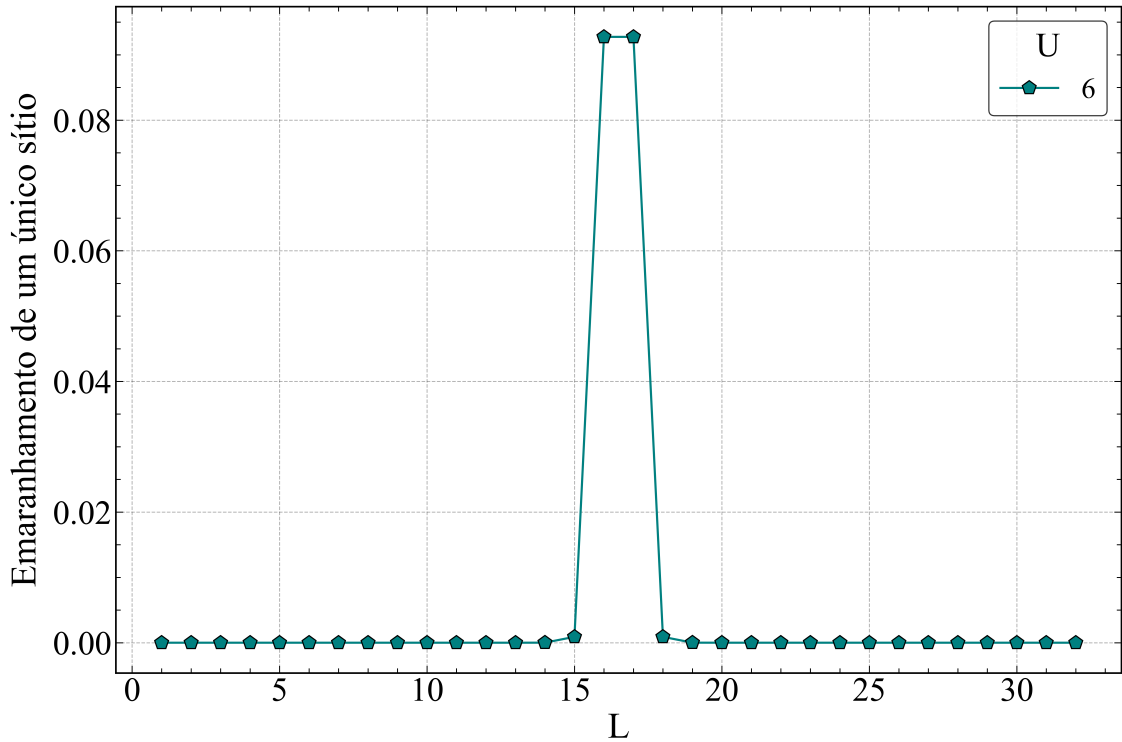


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

O emaranhamento entre as metades da cadeia atua como um marcador de densidade eletrônica. O emaranhamento diminui com o aumento da densidade eletrônica em $V_i < 0$

em que U se sobrepõe à V , assim indicando que a correlação entre as duas metades da cadeia diminuiu momentaneamente. O emaranhamento cresce novamente quando V for o suficiente para se sobrepor à U , diminuindo assim a robustez do sistema e, consequentemente, resultando no aumento da correlação entre as cadeias. Dessa forma, a competição entre os termos de V e U não apenas reflete na dinâmica da itinerância eletrônica, mas também na forma como os potenciais da cadeia se correlacionam, assim abrindo uma vasta gama de possibilidades para projetos futuros. A complexidade da conexão entre os dois extremos da cadeia transcende o comportamento típico das transições metal-isolante, pois mesmo em $V > V_2$, onde os elétrons possuem seus graus de liberdade congelados, um grau de emaranhamento de um único sítio em relação ao restante da cadeia permanece nos sítios centrais como mostrado na Fig. 37.

Figura 37 – Emaranhamento de um único sítio em relação ao restante da cadeia para $V = 10$, $U = 6$, $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. Mesmo com os graus de liberdade das partículas congelados, o sistema exibe um grau de emaranhamento residual nos sítios onde os potenciais se conectam (sítios 16 e 17).



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

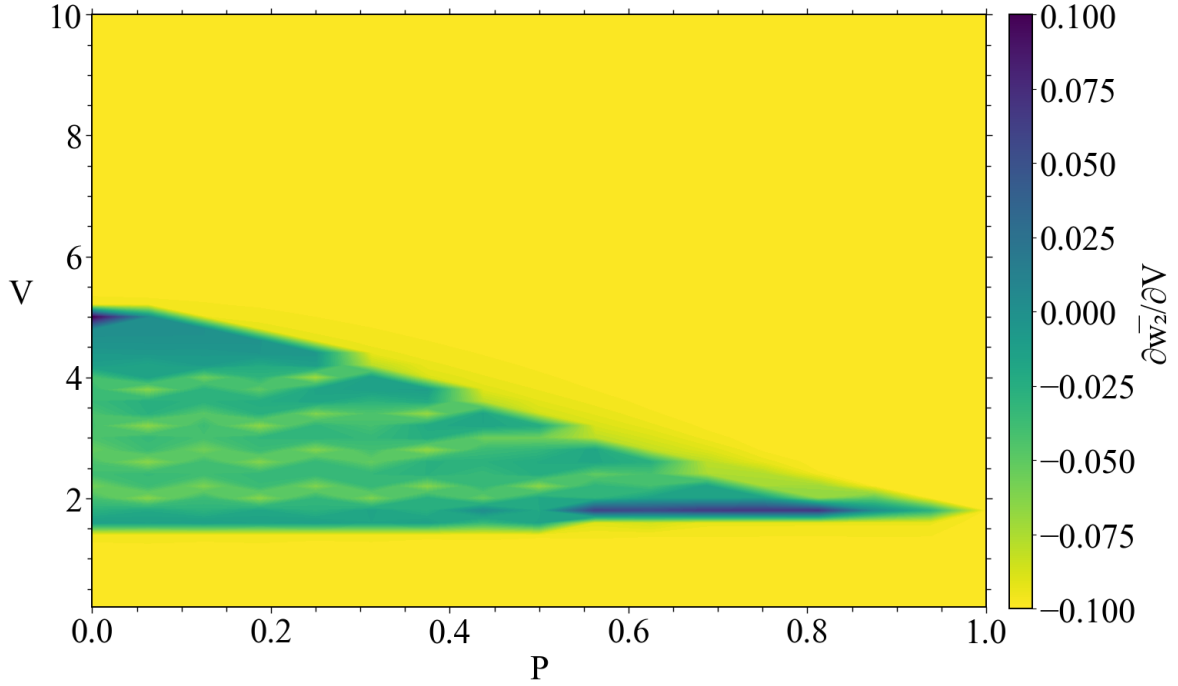
Este emaranhamento surge exclusivamente nos sítios localizados na região de interface da rede, onde $V_i^{<0}$ e $V_i^{>0}$ se conectam. Apesar de baixo, o emaranhamento nesses sítios revela que, embora os elétrons estejam espacialmente confinados, as correlações quânticas entre diferentes partes do sistema continuam a existir. Isso demonstra que mesmo em um cenário de localização eletrônica, as correlações quânticas entre os setores mantêm a coesão e influenciam as propriedades globais do sistema.

4.4 Cadeia estendida polarizada

Com as fases do sistema bem definidas e as oscilações devidamente explanadas, a próxima etapa deste trabalho se concentra na análise das propriedades magnéticas do sistema. Assim, será analisado a sensibilidade quanto à aplicação de um campo magnético externo H , sob uma polarização interna induzida P . Essa análise será crucial para compreender como as propriedades magnéticas podem afetar diretamente as correlações quânticas e a itinerância eletrônica.

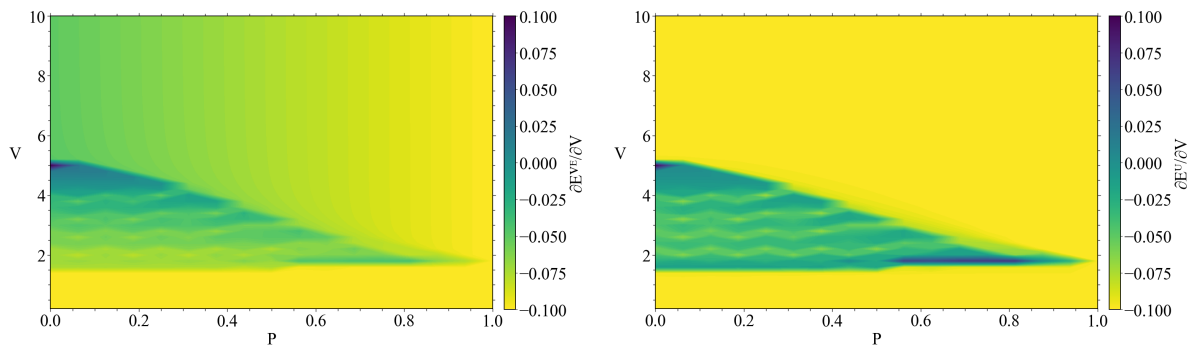
A Fig. 38 mostra a taxa de variação de $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ em relação à V em função da polarização P e do potencial elétrico V para $U = 6$. À medida em que $P \rightarrow 1$, o regime metálico é gradualmente suprimido. Para $P = 0$, a fase metálica possui a maior extensão em V , enquanto que para $P = 1$, o regime metálico é praticamente inexistente $\frac{\partial w_{\uparrow\downarrow}}{\partial V} \approx 0$. Essa tendência reflete que, a presença de um campo magnético externo H aplicado à uma polarização interna induzida P , tende o sistema à localização assim congelando os graus de liberdade das partículas. Para $P = 1$, em que $n_{\uparrow} = n$ e $n_{\downarrow} = 0$, o sistema é descrito apenas pela fase isolante, em que $\Delta_c, \Delta_s \rightarrow 0$.

Figura 38 – Derivada parcial de primeira ordem da probabilidade de dupla ocupação média em função da polarização P , para diversos valores de V e $U = 6$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. O regime metálico é suprimido pela polarização, assim não sendo manifestado quando o grau de polarização for máximo.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Figura 39 – Taxa de variação dos termos isolados de V (a) e U (b) em relação à V , em função da polarização P , para diversos valores de V , $U = 6$, $P = 0.5$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. Como o regime metálico é caracterizado pela complexa dinâmica entre ambos os termos, estes por sua vez são igualmente suprimidos pela polarização.



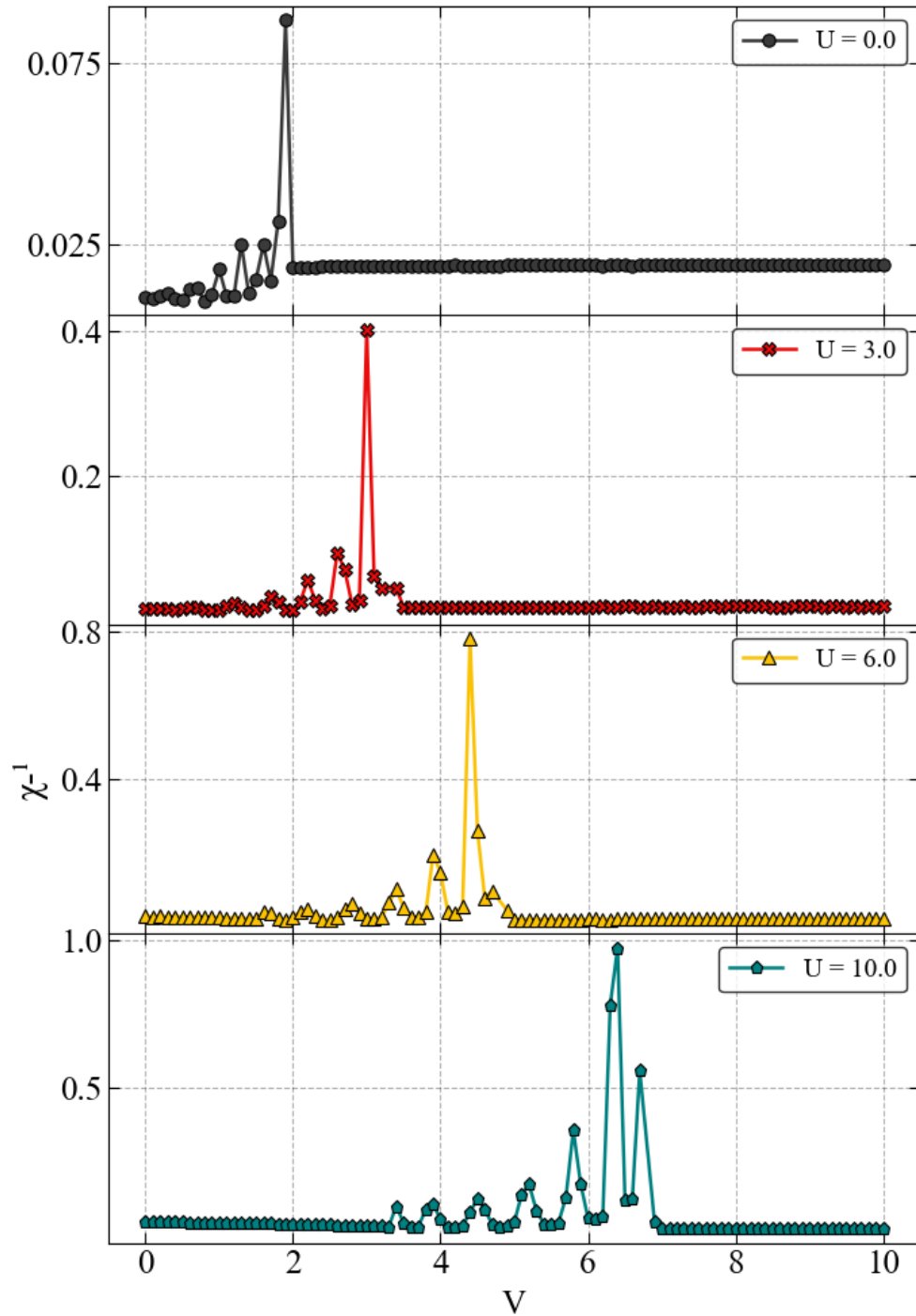
Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Como a fase metálica é caracterizada pela competição entre os termos de V e U ,

a supressão do regime metálico com o aumento da polarização, reflete igualmente nos termos isolados, como mostrado na Fig. 39. À medida em que $P \rightarrow 1$, a probabilidade de dupla ocupação é igualmente suprimida $w_{\uparrow\downarrow} \rightarrow 0$, assim refletindo em $\frac{\partial E^U}{\partial V} \rightarrow 0$. Apesar de V favorecer a itinerância, os elétrons de mesmo spin tendem a localidade, de modo $n_i = n_{\uparrow}$ resultando em $\frac{\partial E^V}{\partial V} \rightarrow 0$. Assim, a polarização tende a estabilizar o sistema em uma configuração localizada e totalmente estática, similar aos isolantes de banda por conta dos spins e cargas congelados e também aos isolantes de Mott em que $n_i = 1$. Como a polarização impacta diretamente na dinâmica e nas fases do sistema, o inverso da susceptibilidade magnética χ^{-1} revela como o sistema responde à um potencial magnético externo H aplicado.

A Fig. 40 mostra a susceptibilidade magnética em função do potencial elétrico V para diferentes U . Esta análise revela que a complexidade da competição entre os termos V e U não descreve apenas as transições de fase ou a dinâmica itinerante dos regimes isolados, mas também contribui quanto a sensibilidade em que o sistema responde à uma perturbação externa. No regime metálico em $V_1 < V < V_2$ para qualquer U , o grau de complexidade entre V e U , determinada para cada valor de V , impacta na sensibilidade do sistema em relação à H . Dessa forma, a medida em que $V \rightarrow V_2$ e os mecanismos competem entre si, o sistema se torna mais ou menos susceptível ao campo externo H . Como observado na derivada de $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ da Fig. 38 e na derivada dos termos isolados da Fig. 35, a susceptibilidade magnética é minimizada em $V \approx V_2$, mostrando novamente que o grau de sobreposição entre os termos de V e U , impacta proporcionalmente nas propriedades magnéticas do sistema.

Figura 40 – Susceptibilidade magnética em função do potencial elétrico V para diversas interações U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 32$ sítios. A medida que a competição entre os termos V e U se intensifica, o sistema torna-se progressivamente mais susceptível à aplicação de um campo magnético externo.

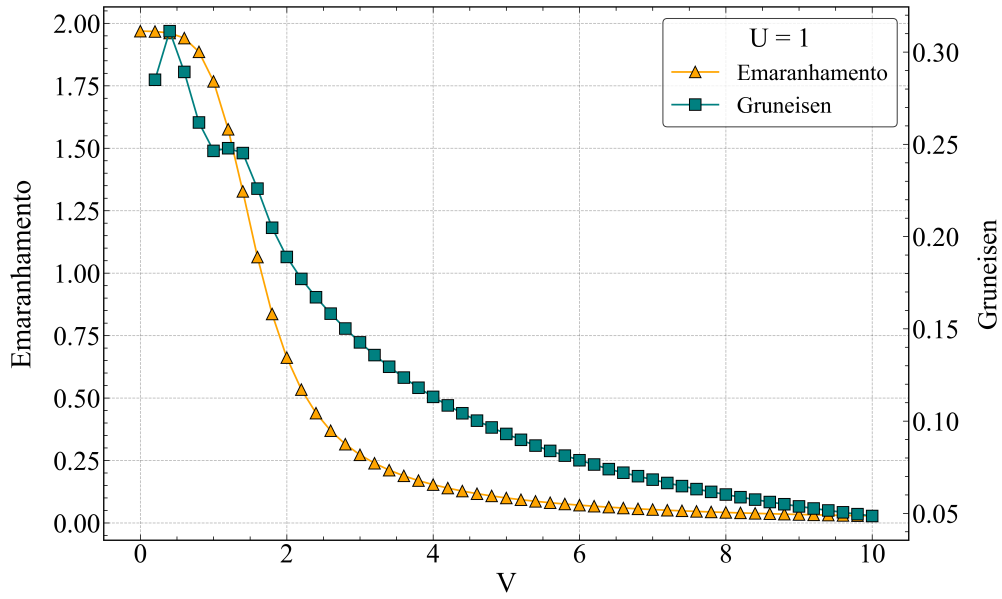


Fonte: elaborado pelo autor (2025).

4.5 Mapeamento Emaranhamento e Parâmetro de Gruneisen

Com o objetivo de propor um mapeamento entre as grandezas de emaranhamento e parâmetro de Gruneisen, ambas foram analisadas em função de V para diversas interações U , visando investigar similares tendências entre ambas. As Figs. 41 e 42 mostram o emaranhamento médio e o parâmetro de Gruneisen em função do potencial elétrico V para $P = 0$ e diferentes interações U .

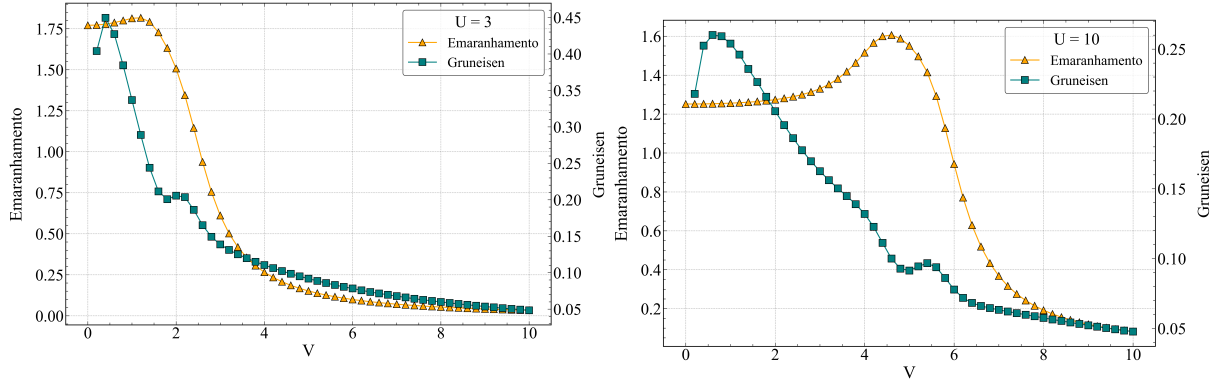
Figura 41 – Entropia de von Neumann e Parâmetro de Gruneisen em função do potencial elétrico V para $U = 1$, $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. Ambas as curvas são monotônicas, em que o parâmetro de Gruneisen apresenta uma sutil oscilação.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

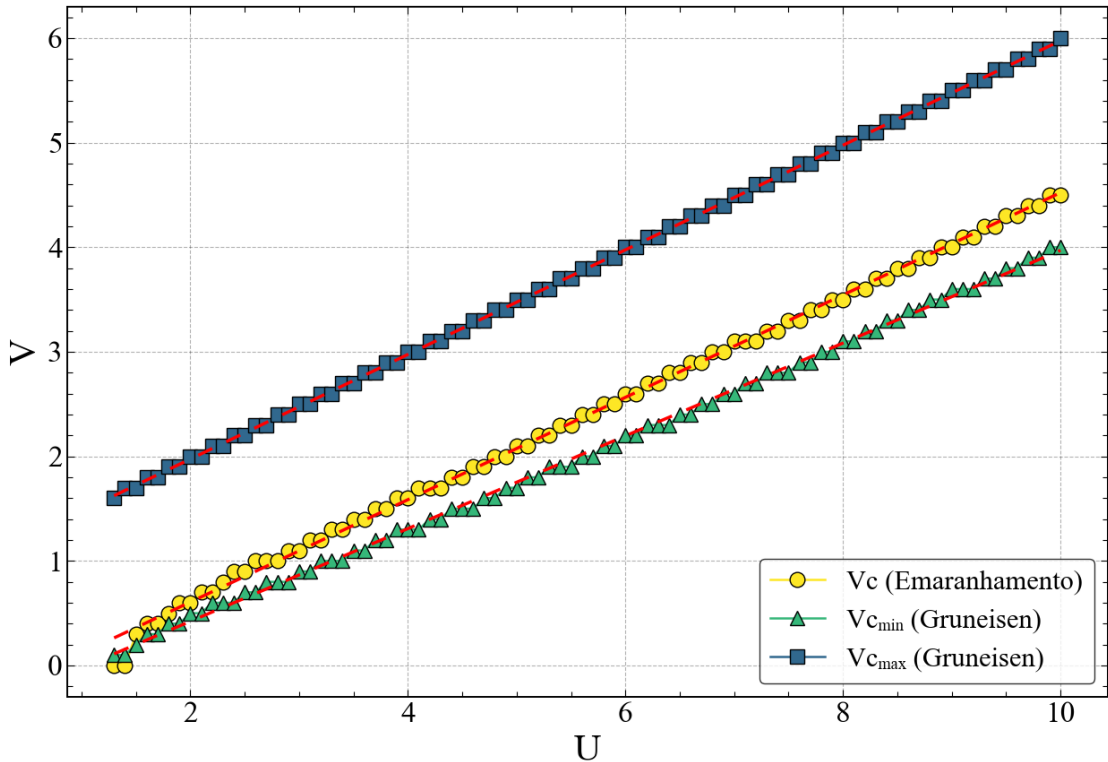
Para $U = 1$, o emaranhamento é caracterizado por um decréscimo suave à medida que V aumenta, e o parâmetro de Gruneisen exibe oscilações em $V \approx 1.5$, sugerindo maior sensibilidade à variação de V . Para $U > t$ como mostra a Fig. 42, o parâmetro de Gruneisen é igualmente sensível à variação de V , quebrando sua monotonicidade no regime metálico. Tendo em vista que um mínimo e um máximo locais acompanham razoavelmente V_c para qualquer U , esta região de não monotonicidade apresenta-se como um candidato para o mapeamento dos pontos críticos.

Figura 42 – Entropia de von Neumann e Parâmetro de Gruneisen em função do potencial elétrico V para $U = 6$ (a) e $U = 10$ (b), $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. As oscilações do regime metálico se manifestam pelo parâmetro de Gruneisen, em que V_c do emaranhamento acompanha relativo o *min* e *max* locais do Gruneisen.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

Figura 43 – Pontos críticos do emaranhamento V_c e do parâmetro de Gruneisen V_{min} e V_{max} em função da interação coulombiana U , para $P = 0$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. As retas não convergem para $U \rightarrow \infty$, porém exibem uma relação intrínseca entre ambas as grandezas devido à monotonicidade das retas.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

O primeiro máximo do parâmetro de Gruneisen, anterior à região de não monotonicidade em $V \approx 0$, é caracterizado como artefato numérico, uma vez que não apresenta deslocamento à medida em que U aumenta e desaparece dependendo do método de derivação aplicado. Os pontos críticos do emaranhamento e do Gruneisen (max e min locais) ainda apresentam desvios significativos quando comparados, como mostra a Fig. 43

Tabela 2 – Parâmetros ajustados de regressão linear para os pontos críticos de V_c , V_{min} e V_{max} em função da interação Coulombiana U .

Fit Linear			
$y = ax + b$			
Plot	Vc	Vc _{min}	Vc _{max}
Coef. Angular	0.4895 ± 0.0003	0.4436 ± 0.0002	0.5002 ± 0.0001
Coef. Linear	-0.3723 ± 0.0016	-0.4652 ± 0.0003	0.9739 ± 0.0003
R ²	0.998	0.9988	0.9996

Fonte: elaborado pelo autor (2025).

A expressão da regressão linear realizada em cada curva da Fig. 43 é apresentada na Tabela 2. Dessa forma, é possível verificar a tendência das retas para $U \rightarrow \infty$, visando analisar a possibilidade de $V_c \in V_{min}, V_{max}$. Assim, através do sistema de equações lineares:

$$0.4895x - y = 0.3723 \quad (V_c) \quad (4.1)$$

$$0.4436x - y = 0.4652 \quad (V_{min}) \quad (4.2)$$

$$0.5002x - y = -0.9739 \quad (V_{max}) \quad (4.3)$$

Calcula-se os determinantes das matrizes associadas às retas:

$$D_{min} = \begin{vmatrix} 0.4895 & -1 \\ 0.4436 & -1 \end{vmatrix} = -0.0459,$$

e

$$D_{max} = \begin{vmatrix} 0.4895 & -1 \\ 0.5002 & -1 \end{vmatrix} = 0.0107.$$

Como $D_{min}, D_{max} \neq 0$, ambas as retas V_{min} e V_{max} não são paralelas em relação à V_c . No entanto, ao se resolver os sistemas lineares associados, os valores das raízes x e y , associados à U e V respectivamente, são apresentados na Tabela 3. Ambas as interseções ocorrem para valores de x e y negativos, mostrando que não há convergência das retas para $U \rightarrow \infty$, consequentemente não sendo possível mapear diretamente os pontos críticos da entropia de emaranhamento e o parâmetro de Gruneisen. Contudo, há uma relação intrínseca entre os dois parâmetros devido ao comportamento monotônico das retas, abrindo novamente diversas possibilidades para projetos futuros.

Tabela 3 – Valores de x e y nas interseções entre V_c , V_{min} e V_{max} . Os valores negativos de x e y referentes à U e V mostram que não há possibilidade de mapear as grandezas para $U > 0$.

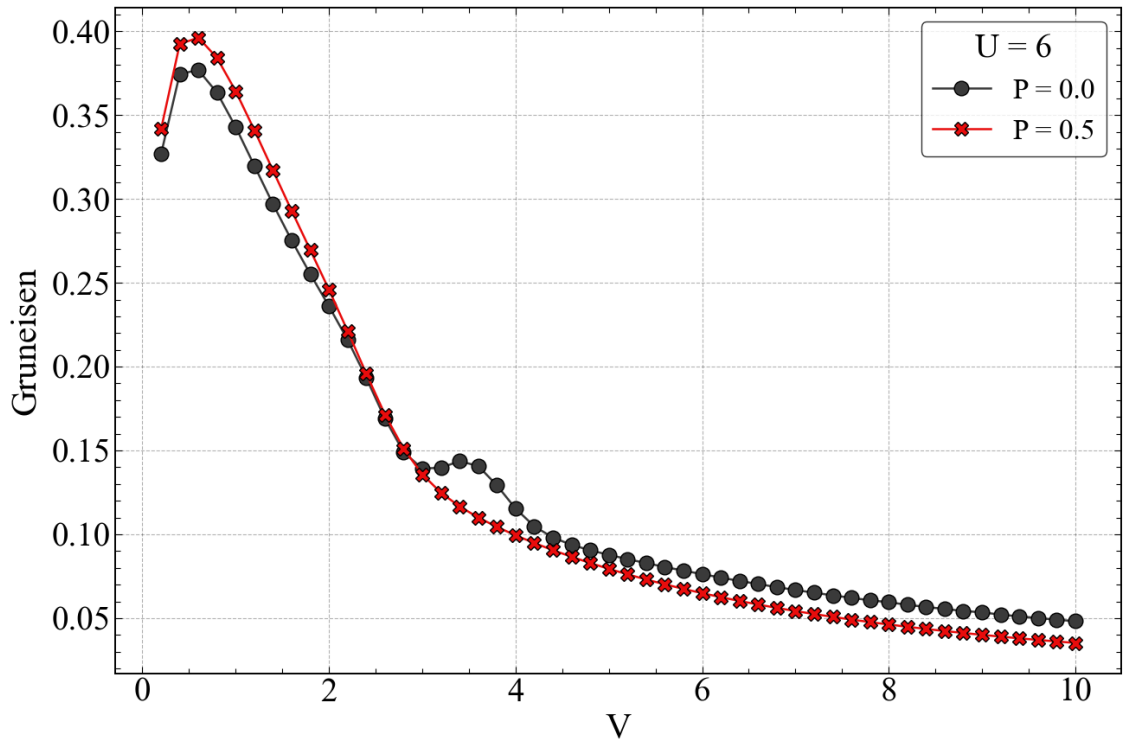
Interseção	x	y
V_c e V_{min}	-2.02	-1.36
V_c e V_{max}	-125.81	-61.95

Fonte: elaborado pelo autor (2025).

A Fig. 44 mostra o comportamento do parâmetro de Gruneisen para $P = 0$ e $P = 0.5$ em $U = 6$. As oscilações observadas na fase metálica são significativamente atenuadas em comparação com $P = 0$, comportamento semelhante ao visto em $\bar{w}_{\uparrow\downarrow}$ na Fig. 31. Esse resultado demonstra que o parâmetro de Gruneisen se mostrou adequado para detectar a complexidade da fase metálica para qualquer valor de U . No entanto, devido ao fato da polarização inibir as oscilações, as nuances da fase metálica são mascaradas, limitação a

qual o emaranhamento não apresenta, tendo em vista que o mesmo muda drasticamente seu comportamento com a presença de polarização, como mostrado na Fig. 25.

Figura 44 – Parâmetro de Gruneisen em função do potencial elétrico V para $P = 0$ e $P = 0.5$, $U = 6$ em uma cadeia de $L = 4$ sítios. A grandeza se mostrou adequada para caracterizar a complexidade da fase metálica no regime com polarização nula, mas apresentou limitações sob a presença de polarização.



Fonte: elaborado pelo autor (2025).

5 Conclusões

Neste trabalho, foi conduzido um estudo aprofundado sobre os impactos do potencial elétrico no modelo de Hubbard fermiônico, com o objetivo de investigar as transições de fase quântica e o comportamento itinerante dos elétrons ao longo de uma cadeia, além de explorar os efeitos de um potencial magnético sobre esses fenômenos. A pesquisa buscou esclarecer como os potenciais externos elétrico e magnético podem induzir mudanças nas propriedades eletrônicas do sistema e influenciar as dinâmicas de correlação entre partículas, proporcionando uma compreensão mais detalhada dos fatores que governam a mobilidade e as interações dos elétrons em materiais fortemente correlacionados.

O estudo revelou uma transição de fase quântica entre as fases de isolante de Mott e isolante de banda em um regime específico de V e U , destacando a elevada sensibilidade da estrutura eletrônica do sistema à influência de campos elétricos externos. Os resultados mostraram que entre as fases isolantes, emerge uma fase metálica em que, para sistemas não polarizados, apresenta um comportamento oscilatório, enquanto que para sistemas polarizados sob a ação de um campo magnético externo, o comportamento é predominantemente linear. Esse padrão oscilatório, observado na maioria dos parâmetros analisados, reflete a complexa competição entre os mecanismos de interação e potencial elétrico.

Essa complexa competição também exerce uma influência expressiva sobre as propriedades magnéticas do sistema, em que o balanço entre as contribuições dos mecanismos altera a resposta magnética do material, afetando diretamente a intensidade da reação do sistema a campos magnéticos externos. À medida que essa interação evolui, observa-se uma modulação na susceptibilidade magnética, indicando um ajuste dinâmico da estrutura eletrônica em função dos parâmetros U e V . Essas características evidenciam a complexidade da interação entre a localização e a mobilidade dos elétrons no sistema, revelando

dinâmicas distintas dependendo das condições de polarização e da presença de campos externos.

Além dessas observações, foi calculado o parâmetro de Gruneisen, que se mostrou igualmente sensível ao potencial elétrico, além de demonstrar eficácia em condições de temperatura nula. Esse cálculo buscou investigar a possibilidade de uma correlação direta entre o parâmetro de Gruneisen e a entropia de von Neumann, uma vez que os valores mínimos e máximos locais do Gruneisen tendem a acompanhar o valor máximo de emaranhamento. Contudo, o mapeamento direto entre os parâmetros revelou-se inviável, pois os pontos críticos não apresentaram valores coincidentes para combinações reais de V e U .

Para capturar com maior profundidade os mecanismos que regem a itinerância eletrônica ao longo da cadeia, estudos adicionais são necessários, nos quais incluem a maneira em que o potencial elétrico é aplicado, a intensidade do campo magnético externo e a dopagem do sistema. Esses estudos poderão contribuir para o desenvolvimento de um modelo mais robusto e abrangente, capaz de descrever com precisão como a interação entre os potenciais molda a dinâmica do sistema. Este trabalho oferece, assim, uma base promissora para a compreensão da física dos sistemas fortemente correlacionados, abrindo caminho para novos avanços teóricos e aplicações em dispositivos quânticos.

Bibliografia

- [1] DRUDE, Paul. Zur elektronentheorie der metalle. **Annalen der Physik**, v. 312, n. 3, p. 687-692, 1902.
- [2] BLOCH, Felix. Über die quantenmechanik der elektronen in kristallgittern. **Zeitschrift für physik**, v. 52, n. 7, p. 555-600, 1929.
- [3] MOROSAN, Emilia et al. Strongly correlated materials. **Advanced Materials**, v. 24, n. 36, p. 4896-4923, 2012.
- [4] ANISIMOV, Vladimir Ilich. Electronic structure of strongly correlated materials. In: **AIP Conference Proceedings**. American Institute of Physics, p. 3-134, 2010.
- [5] DAGOTTO, E.; TOKURA, Y. Strongly correlated electronic materials: present and future. **Mrs Bulletin**, v. 33, n. 11, p. 1037-1045, 2008.
- [6] BROOKS, M. S. S.; ERIKSSON, O.; JOHANSSON, B. From the transition metals to the rare earths—via the actinides. **Journal of alloys and compounds**, v. 223, n. 2, p. 204-210, 1995.
- [7] JOHANSSON, Börje. Structural and electronic relationships between the lanthanide and actinide elements. **Hyperfine Interactions**, v. 128, n. 1, p. 41-66, 2000.
- [8] EDWARDS, P. P. et al. The metal–insulator transition: a perspective. **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences**, v. 356, n. 1735, p. 5-22, 1998.
- [9] MOTT, Nevill F. Metal-insulator transition. **Reviews of Modern Physics**, v. 40, n. 4, p. 677, 1968.
- [10] IMADA, Masatoshi; FUJIMORI, Atsushi; TOKURA, Yoshinori. Metal-insulator transitions. **Reviews of modern physics**, v. 70, n. 4, p. 1039, 1998.

-
- [11] LEE, Yoon Jung et al. Nanoelectronics using metal–insulator transition. **Advanced Materials**, v. 36, n. 5, p. 2305353, 2024.
- [12] GEBHARD, Florian; GEBHARD, Florian. Metal—insulator transitions. **Springer Berlin Heidelberg**, 1997.
- [13] KULKARNI, Sulabha K.; KULKARNI, Sulabha K. Nanotechnology: principles and practices. **Springer**, 2015.
- [14] TIWARI, Jitendra N.; TIWARI, Rajanish N.; KIM, Kwang S. Zero-dimensional, one-dimensional, two-dimensional and three-dimensional nanostructured materials for advanced electrochemical energy devices. **Progress in Materials Science**, v. 57, n. 4, p. 724-803, 2012.
- [15] GIAMARCHI, Thierry. Quantum physics in one dimension. **Clarendon press**, 2003.
- [16] KARMAKAR, Sachindra Nath; MAITI, Santanu Kumar; JAYEETA, Chowdhury (Ed.). Physics of zero-and one-dimensional nanoscopic systems. **Springer Science and Business Media**, 2007.
- [17] HUBBARD, John. Electron correlations in narrow energy bands. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences**, v. 276, n. 1365, p. 238-257, 1963.
- [18] HUBBARD, Paul S. Theory of nuclear magnetic relaxation by spin-rotational interactions in liquids. **Physical Review**, v. 131, n. 3, p. 1155, 1963.
- [19] ECKSTEIN, Martin; WERNER, Philipp. Damping of Bloch oscillations in the Hubbard model. **Physical review letters**, v. 107, n. 18, p. 186406, 2011.
- [20] BHOWAL, Sayantika; SATPATHY, Sashi. Electric field tuning of the anomalous Hall effect at oxide interfaces. **npj Computational Materials**, v. 5, n. 1, p. 61, 2019.
- [21] RACHEL, Stephan; LE HUR, Karyn. Topological insulators and Mott physics from the Hubbard interaction. **Physical Review B**, v. 82, n. 7, p. 075106, 2010.

-
- [22] LALOUX, Laurent; GEORGES, Antoine; KRAUTH, Werner. Effect of a magnetic field on Mott-Hubbard systems. **Physical Review B**, v. 50, n. 5, p. 3092, 1994.
- [23] FRAHM, Holger; KOREPIN, Vladimir E. Correlation functions of the one-dimensional Hubbard model in a magnetic field. **Physical Review B**, v. 43, n. 7, p. 5653, 1991.
- [24] BALCERZAK, Tadeusz; SZAŁOWSKI, Karol. Hubbard pair cluster in the external fields. Studies of the magnetic properties. **Physica A**, v. 499, p. 395-406, 2018.
- [25] FULDE, Peter; FERRELL, Richard A. Superconductivity in a strong spin-exchange field. **Physical Review**, v. 135, n. 3A, p. A550, 1964.
- [26] LARKIN, A. I.; OVCHINNIKOV, Yu N. Nonuniform state of superconductors. **Soviet Physics-JETP**, v. 20, n. 3, p. 762-762, 1965.
- [27] DE PICOLI, Tatiana; D'AMICO, Irene; FRANÇA, Vivian V. Metric-space approach for distinguishing quantum phase transitions in spin-imbalanced systems. **Brazilian Journal of Physics**, v. 48, p. 472-476, 2018.
- [28] LIAO, Y. et al. Spin-imbalance in a one-dimensional Fermi gas. **Nature**, v. 467, n. 7315, p. 567-569, 2010.
- [29] NIELSEN, Michael A.; CHUANG, Isaac L. Quantum computation and quantum information. **Cambridge university press**, 2010.
- [30] MALVEZZI, André Luiz. An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems. **Brazilian journal of physics**, v. 33, p. 55-72, 2003.
- [31] DAUL, S.; NOACK, R. M. DMRG study of ferromagnetism in a one-dimensional Hubbard model. **Zeitschrift für Physik B Condensed Matter**, v. 103, p. 293-295, 1996.
- [32] WHITE, Steven R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. **Physical review letters**, v. 69, n. 19, p. 2863, 1992.

-
- [33] JÖRDENS, Robert et al. A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice. **Nature**, v. 455, n. 7210, p. 204-207, 2008.
- [34] VITALI, Ettore et al. Metal-insulator transition in the ground state of the three-band Hubbard model at half filling. **Physical Review B**, v. 99, n. 16, p. 165116, 2019.
- [35] LEE, Yoon Jung et al. Nanoelectronics using metal–insulator transition. **Advanced Materials**, v. 36, n. 5, p. 2305353, 2024.
- [36] GIRVIN, Steven M.; YANG, Kun. Modern condensed matter physics. **Cambridge University Press**, 2019.
- [37] SIMON, Steven H. The Oxford solid state basics. **OUP Oxford**, 2013.
- [38] BULAEVSKII, L. N. et al. Electronic orbital currents and polarization in Mott insulators. **Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics**, v. 78, n. 2, p. 024402, 2008.
- [39] POTTHOFF, M.; NOLTING, W. Metallic surface of a Mott insulator–Mott insulating surface of a metal. **Physical Review B**, v. 60, n. 11, p. 7834, 1999.
- [40] SACHDEV, Subir; SENGUPTA, K.; GIRVIN, S. M. Mott insulators in strong electric fields. **Physical Review B**, v. 66, n. 7, p. 075128, 2002.
- [41] SHACKLETON, Henry et al. Quantum phase transition at nonzero doping in a random t-j model. **Physical Review Letters**, v. 126, n. 13, p. 136602, 2021.
- [42] SACHDEV, Subir. Quantum phase transitions. **Physics world**, v. 12, n. 4, p. 33, 1999.
- [43] KURDESTANY, Jamshid Moradi; SATPATHY, S. Mott metal-insulator transition in the doped Hubbard-Holstein model. **Physical Review B**, v. 96, n. 8, p. 085132, 2017.

-
- [44] DE FRANCO, Caterina; TOCCHIO, Luca F.; BECCA, Federico. Metal-insulator transitions, superconductivity, and magnetism in the two-band Hubbard model. **Physical Review B**, v. 98, n. 7, p. 075117, 2018.
- [45] ALTUNBULAK, Murat; KLYACHKO, Alexander. The Pauli principle revisited. **Communications in Mathematical Physics**, v. 282, p. 287-322, 2008.
- [46] TOKURA, Yoshinori; YASUDA, Kenji; TSUKAZAKI, Atsushi. Magnetic topological insulators. **Nature Reviews Physics**, v. 1, n. 2, p. 126-143, 2019.
- [47] DASKALAKIS, Constantinos; DIKKALA, Nishanth; KAMATH, Gautam. Testing ising models. **IEEE Transactions on Information Theory**, v. 65, n. 11, p. 6829-6852, 2019.
- [48] BAXTER, Rodney J. Exactly solved models in statistical mechanics. **Elsevier**, 2016.
- [49] IEMINI, Fernando; MACIEL, Thiago O.; VIANNA, Reinaldo O. Entanglement of indistinguishable particles as a probe for quantum phase transitions in the extended Hubbard model. **Physical Review B**, v. 92, n. 7, p. 075423, 2015.
- [50] VIEIRA, D. et al. Friedel oscillations in one-dimensional metals: From Luttinger's theorem to the Luttinger liquid. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 320, n. 14, p. e418-e420, 2008.
- [51] CANELLA, Guilherme A.; FRANÇA, Vivian V. Superfluid-Insulator Transition unambiguously detected by entanglement in one-dimensional disordered superfluids. **Scientific reports**, v. 9, n. 1, p. 15313, 2019.
- [52] CANELLA, G. A.; FRANÇA, V. V. Mott-Anderson metal-insulator transitions from entanglement. **Physical Review B**, v. 104, n. 13, p. 134201, 2021.
- [53] SZAŁOWSKI, Karol; BALCERZAK, Tadeusz. Magnetocaloric and electrocaloric properties of the Hubbard pair cluster. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, v. 527, p. 167767, 2021.

- [54] COE, J. P.; D'AMICO, I.; FRANÇA, V. V. Uniqueness of density-to-potential mapping for fermionic lattice systems. **Europhysics Letters**, v. 110, n. 6, p. 63001, 2015.
- [55] CIRAC, J. Ignacio; ZOLLER, Peter. Goals and opportunities in quantum simulation. **Nature physics**, v. 8, n. 4, p. 264-266, 2012.
- [56] HAUKE, Philipp et al. Can one trust quantum simulators. **Reports on Progress in Physics**, v. 75, n. 8, p. 082401, 2012.
- [57] YOUNG, Nicholas. An introduction to Hilbert space. **Cambridge university press**, 1988.
- [58] CARVALHO, Isaac Martins. **Quenches em sistemas interagentes unidimensionais: formação de ordenamentos de carga e spin**. 2022. Tese (Doutorado em Física) – Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, 2022.
- [59] TINCANI, Leonildo. Density Matrix Renormalization Group and Quantum Information applied to Quantum Critical Phenomena in One-Dimensional Systems. **2008**.
- [60] DE MEDEIROS, Marcos HL. O Método DMRG. **Tese de Doutorado**. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 2016.
- [61] MALVEZZI, André Luiz. An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems. **Brazilian journal of physics**, v. 33, p. 55-72, 2003.
- [62] FRANÇA, Vivian Vanessa; CAPELLE, Klaus. **Emaranhamento em sistemas fermiônicos fortemente correlacionados**. Caderno de Resumos, 2006.
- [63] NOACK, Reinhard M.; MANMANA, Salvatore R. Diagonalization-and numerical renormalization-group-based methods for interacting quantum systems. In: **AIP Conference Proceedings**. American Institute of Physics, p. 93-163, 2005.

- [64] HENN, Vivian Vanessa França. **Emaranhamento em Sistemas de Muitos Férmions**. 2008. Dissertação (Mestrado em Física) – Instituto de Física, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2008.
- [65] EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?. **Physical Review**, v. 47, p. 777, 1935.
- [66] BELL, John S. On the einstein podolsky rosen paradox. **Physics Physique Fizika**, v. 1, n. 3, p. 195, 1964.
- [67] MOREAU, Paul-Antoine et al. Imaging Bell-type nonlocal behavior. **Science Advances**, v. 5, n. 7, p. eaaw2563, 2019.
- [68] FRANÇA, V. V.; CAPELLE, Klaus. Entanglement in spatially inhomogeneous many-fermion systems. **Physical review letters**, v. 100, n. 7, p. 070403, 2008.
- [69] DE PICOLI, Tatiana; D'AMICO, Irene; FRANÇA, Vivian V. Metric-space approach for distinguishing quantum phase transitions in spin-imbalanced systems. **Brazilian Journal of Physics**, v. 48, p. 472-476, 2018.
- [70] PAN, J.-W. et al. Experimental entanglement swapping: Entangling photons that never interacted. **Physical Review Letters**, v. 80, n. 18, p. 3891, 1998.
- [71] LUKIN, M. D.; IMAMOGLU, A. Nonlinear optics and quantum entanglement of ultraslow single photons. **Physical Review Letters**, v. 84, n. 7, p. 1419, 2000.
- [72] ZUKOWSKI, M. et al. Independent photons and entanglement. a short overview. **International Journal of Theoretical Physics**, v. 38, n. 1, p. 501, 1999.
- [73] MAIR, A. et al. Entanglement of the orbital angular momentum states of photons. **Nature**, v. 412, p. 313, 2001.
- [74] ZANARDI, Paolo. Quantum entanglement in fermionic lattices. **Physical review A**, v. 65, n. 4, p. 042101, 2002.

-
- [75] FRANÇA, V. V.; PRATAVIERA, G. A. Stability and entanglement in optical-atomic amplification of trapped atoms: The role of atomic collisions. **Physical Review A**, v. 75, n. 4, p. 043604, 2007.
- [76] ARISA, D.; FRANÇA, V. V. Linear mapping between magnetic susceptibility and entanglement in conventional and exotic one-dimensional superfluids. **Physical Review B**, v. 101, n. 21, p. 214522, 2020.
- [77] BARTOSCH, Lorenz; DE SOUZA, Mariano; LANG, Michael. Scaling Theory of the Mott Transition and Breakdown of the Grüneisen Scaling Near a Finite-Temperature Critical End Point. **Physical review letters**, v. 104, n. 24, p. 245701, 2010.
- [78] SQUILLANTE, Lucas et al. Grüneisen parameter as an entanglement compass and the breakdown of the Hellmann-Feynman theorem. **Physical Review B**, v. 108, n. 14, p. L140403, 2023.