

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA “JÚLIO DE MESQUITA FILHO”
INSTITUTO DE QUÍMICA

Daniel Arisa Moraes e Silva

Estudo de Superfluidez Heterogênea em Nanoestruturas

Araraquara – SP

Julho, 2019

Daniel Arisa Moraes e Silva

Estudo de Superfluidez Heterogênea em Nanoestruturas

Dissertação apresentada ao Instituto de Química, Universidade Estadual Paulista, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Química.

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

Araraquara – SP

Julho, 2019

FICHA CATALOGRÁFICA

S586e Silva, Daniel Arisa Moraes e
Estudo de superfluidez heterogênea em nanoestruturas /
Daniel Arisa Moraes e Silva. – Araraquara : [s.n.], 2019
51 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista,
Instituto de Química

Orientador: Vivian Vanessa França Henn

1. Supercondutividade. 2. Entropia quântica.
3. Susceptibilidade magnética. 4. Nanoestruturas.
5. Magnetização. I. Título.



UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA

Câmpus de Araraquara



CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

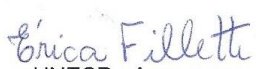
TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: "Estudo de superfluidez heterogênea em nanoestruturas"

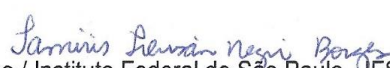
AUTOR: DANIEL ARISA MORAES E SILVA

ORIENTADORA: VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN

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

Prof^a. Dr^a. VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN 
Departamento de Físico Química / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Prof^a. Dr^a. ERICA REGINA FILLETTI NASCIMENTO 
Departamento de Físico-Química / Instituto de Química - UNESP - Araraquara

Prof^a. Dr^a. TAMIRIS TREVISAN NEGRI 
Departamento de Matemática e Educação / Instituto Federal de São Paulo - IFSP - Araraquara

Araraquara, 29 de julho de 2019

DADOS CURRICULARES

Daniel Arisa Moraes e Silva

Departamento de Físico-Química, Instituto de Química de Araraquara - UNESP.
Endereço: Rua Prof. Francisco Degni, 55 - Jardim Quitandinha - Araraquara/SP - CEP 14800 - 060.

E-mail: daniel.arisa4@gmail.com

Formação Acadêmica

2017 – 2019: Mestrado em Química

- Instituto de Química de Araraquara, Universidade Estadual Paulista – UNESP, Araraquara.
- Dissertação: Estudo de Superfluidez Heterogênea em Nanoestruturas.
- Orientadora: Prof.^a Dr.^a Vivian Vanessa França.

2011 – 2016: Bacharelado em Química

- Instituto de Química de Araraquara, Universidade Estadual Paulista – UNESP, Araraquara.
- Título: Utilização de técnicas da Mecânica Quântica aplicadas em Teletransporte.
- Orientadora: Prof.^a Dr.^a Vivian Vanessa França.

Experiência Profissional e Didática

2012 – 2018: Núcleo de Divulgação Científica Alquimia

- Coordenador do Setor Projetos e Eventos.

2016 – 2019: Cursinho Geração Near

- Professor da disciplina de Física no cursinho pré-vestibular, 2016 – 2017.
- Professor da disciplina de Química no cursinho pré-vestibular, 2018 – 2019.

2016 – 2019: CUCA – Curso Unificado do Campus de Araraquara

- Professor da disciplina de Biologia/Química Orgânica no cursinho pré-vestibular, 2016.
- Professor da disciplina de Química - Geral no cursinho pré-vestibular, 2017 – 2019.

Participação em Eventos Científicos

- Participação no School and Workshop on Density Functional Theory and Quantum Information Theory – IFT Unesp São Paulo, 23 – 28 de outubro, 2017.
- Palestra Ministrada no MosTre Unesp – Instituto de Química de Araraquara, Universidade Estadual Paulista – UNESP, Araraquara, novembro de 2017.

Agradecimentos

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

Aos meus amigos e companheiros Gui, Caio, Tati e Magali, que tornaram esse processo mais prazeroso. Em especial à Tati Picolli que me ajudou muito no início do mestrado.

Aos Profs. Drs. Denis Godoi, Amadeu Bego, Rodrigo Marques, Érica Regina, Marco Cebim, Ian Castro, Humberto Milagre, Luciana Massi, Alexandre Campos, Cibele Rosenfeld, e Rondinelli Herculano, por terem colaborado para meu aprendizado e amadurecimento. Em especial à Prof. Ms. Thalita, que influenciou diretamente a minha decisão em prestar o doutorado.

Ao meu pai Ivan por todo apoio e companheirismo que sempre foram o alicerce da minha vida, assim sempre me proporcionando as oportunidades de poder estudar e trabalhar com o que eu mais gosto.

À minha boadrasta Helena por todo apoio e companheirismo, sempre me aconselhando e cuidando de mim nos momentos mais turbulentos.

Agradeço ao meu grande irmão Lucas por todo o companheirismo e todos os nossos roles que sempre fizemos durante toda a nossa vida.

Aos meus padrinhos De e Caco pelo imenso apoio dado tanto nessa época como durante toda a vida.

Às minhas primas/irmãs Nati e Juju por todas as aventuras que passamos, além do eterno companheirismo.

À minha avó Elza por todo o carinho e companheirismo, além dos vários cafés e risadas.

Aos meus grandes amigos Careca, Lê, Rober, Lucão, Márcio, Gu, Leozera, Alfredo, Marcelo, Karol, Ari, Aninha, Preta, Dexter, Maguila, Seu Lino, Manaus, Mira, Jen, Will, Irã, Barney, Harley, Lost e Joana por todos os momentos incríveis que passamos.

Aos meus filhos Nóia, Oliver, Chloe, Valentina e Milo por fazerem a minha vida incrível.

Aos integrantes dos projetos de extensão que participei: Near, Cuca e Alquimia, por todo o aprendizado e pelas diversas discussões que me retiravam da bolha universitária e me inseriam no mundo concreto, além dos bons momentos juntos.

Aos meus queridos alunos que sempre valorizaram o meu trabalho e a minha pessoa, tornando assim os dias das aulas os melhores dias da semana.

À todos do CETEC pela incrível oportunidade e confiança cedidas à mim, além das amizades e do bom ambiente de trabalho.

Em especial ao meu neném Bia por sempre estar ao meu lado e por todos os esses anos incríveis que passamos juntos.

*“Somos feitos de poeira de estrelas. Nós somos uma maneira
de o cosmos se autoconhecer”.
(Carl Sagan).*

Resumo

A superfluidez convencional, cuja descrição foi desenvolvida em 1957 por Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS), é fundamentada em um sistema não polarizado e na ausência de campos magnéticos. Porém outros regimes de superfluidez foram propostos na presença de campos magnéticos ou de população de spin desbalanceada. Neste caso, haveria a coexistência de magnetismo e superfluidez. Tais fenômenos de superfluidez heterogênea têm atraído a atenção de diversas áreas da ciência, pois também podem explicar a existência de propriedades não-convencionais como, por exemplo, variações súbitas no período de rotação de estrelas de nêutrons. Devido às diversas propostas existentes para o fenômeno de superfluidez heterogênea, há grande controvérsia em relação aos regimes de parâmetros em que o fenômeno se manifesta e se mantém estável. Diversos cálculos exatos e aproximados têm sido realizados a fim de detectar e descrever tais fases, como DMRG (Density Matrix Renormalization Group) e DFT (Density Functional Theory). Nessa monografia, através de cálculos exatos de DMRG, exploramos as propriedades de superfluidez exótica em modelos de nanoestruturas. Investigamos em particular a propriedade de emaranhamento quântico, conhecida por revelar os parâmetros em que transições de fase quânticas ocorrem. Nossos resultados demonstram que o emaranhamento de sistemas superfluidos é um bom parâmetro para a detecção da fase FFLO e que pode ser quantificado experimentalmente em superfluidos através de sua surpreendente relação linear com a susceptibilidade magnética, encontrada também neste trabalho.

Palavras chave: Supercondutividade, fase FFLO, superfluidez heterogênea, emaranhamento, susceptibilidade magnética, nanoestruturas.

Abstract

Conventional superfluidity, whose description was developed in 1957 by Bardeen-Cooper-Schrieffer (BCS), is based on a non-polarized system and the absence of magnetic fields. However, other superfluidity regimes were proposed in the presence of magnetic fields or spin-imbalanced population. In this case, there would be the coexistence of magnetism and superfluidity. Such phenomenon of heterogeneous superfluidity has attracted attention of several scientific areas, as they may also explain the existence of unconventional properties such as, for example, sudden variations in the period of neutron stars rotation. Due to the several proposals for the phenomenon of heterogeneous superfluidity, there is great controversy regarding the parameter regimes in which the phenomenon manifests itself and remains stable. Several exact and approximate calculations have been performed to detect and describe such phases, such as DMRG (Density Matrix Renormalization Group) and DFT (Density Functional Theory). In this monograph, through exact DMRG calculations, we explore the properties of exotic superfluidity in nanostructures models. We investigate in particular the quantum entanglement property known to reveal the parameters in which quantum phase transitions occur. Our results demonstrate that entanglement of superfluid systems is a good parameter for detecting the FFLO phase and that it can be quantified experimentally in superfluids by exploring its surprising linear relation with the magnetic susceptibility, also found in this work.

Keywords: superconductivity, FFLO phase, inhomogeneous superfluidity, entanglement, magnetic susceptibility, nanostructures.

Lista de Figuras

Figura 1– (a) Resistividade em função da temperatura de um metal. (b) Representação do efeito Meissner – Ochsenfeld.

Figura 2 – Distorção da rede cristalina ocasionando a formação de um par de Cooper.

Figura 3 – Cálculos DFT e DMRG para cadeias de tamanho $L = 80$ com condições de limite aberto, descrevendo as probabilidades de ocupação para elétrons desemparelhado $w_{\uparrow}$ e emparelhados $w_{\uparrow\downarrow}$ em função da polarização P .

Figura 4 – Núcleo de uma estrela de nêutrons, formado por superfluidos de prótons e nêutrons.

Figura 5 – Pulsar de uma estrela de nêutrons, formado a partir do intenso campo magnético, gerado da alta frequência de rotação da estrela.

Figura 6 – Modelo de Hubbard para uma cadeia de L sítios.

Figura 7 – Matriz de densidade dividida em partes na formação de um superbloco DMRG.

Figura 8 – Emaranhamento como função da interação Coulombiana em um sistema formado por $L = 10$ sítios e densidade $n = 1$.

Figura 9 – Emaranhamento em função da interação Coulombiana em um sistema formado por $L = 10$ sítios e para densidades $n = 1$ e $n = 0.6$.

Figura 10 – Emaranhamento em função da interação Coulombiana em um sistema formado por $L = 20$ sítios e densidades $n = 0.2$, $n = 0.3$ e $n = 0.5$.

Figura 11 – Emaranhamento em função da polarização em um sistema formado por $L = 80$ sítios, para densidade $n = 0.2$ sob interações $U = -2t$, $U = -4t$ e $U = -8t$.

Figura 12 – Emaranhamento em função da polarização em um sistema formado por $L = 80$ sítios, para densidade $n = 0.5$ sob interações $U = -2t$, $U = -4t$ e $U = -8t$.

Figura 13 – Emaranhamento em função da polarização em um sistema formado por $L = 80$ sítios, para densidade $n = 0.7$ sob interações $U = -2t$, $U = -4t$ e $U = -8t$.

Figura 14 – Energia em função da polarização para $U = -2t$ em densidades variadas.

Figura 15 – Energia em função da magnetização para $U = -4t$, $L = 80$ e densidades variadas.

Figura 16 – Energia em função da magnetização para $U = -8t$, $L = 80$ e densidades variadas.

Figura 17 – Derivada parcial da energia em relação à polarização para $n = 0.2$ em interações variadas.

Figura 18 – Derivada parcial da energia em relação à polarização para $n = 0.5$ em interações variadas.

Figura 19 – Derivada parcial da energia em relação à polarização para $n = 0.7$ em interações variadas.

Figura 20 – Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética. A fase magnética ($U > 0$) varia exponencialmente em relação ao emaranhamento enquanto a fase superfluidez varia linearmente.

Figura 21 – Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética do regime atrativo.

Figura 22 – Susceptibilidade magnética em função da interação U do regime atrativo.

Figura 23 – Emaranhamento em função da interação U sob o regime $P < P_c$.

Figura 24 – Emaranhamento em função da interação U sob o regime $P > P_c$.

Figura 25 – Susceptibilidade magnética em função da interação U sob o regime $P < P_c$.

Figura 26 – Susceptibilidade magnética em função da interação U sob o regime $P > P_c$.

Figura 27 – Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética sob o regime $P < P_c$.

Figura 28 – Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética sob o regime $P > P_c$.

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Valores de polarização crítica para várias densidades e interações, em um sistema com potencial externo $V = 0$ sob os cálculos de DMRG e DFT.

Sumário

1	Introdução	13
2	Fundamentos Teóricos.....	14
2.1	Superfluidez Convencional: Teoria BCS	14
2.2	Superfluidez não-Convencional: Fase FFLO	17
2.3	Modelo de Hubbard.....	21
2.4	Emaranhamento.....	23
2.5	DMRG – Density Matrix Renormalization Group.....	24
3	Metodologia.....	25
4	Resultados e Discussões	27
4.1	Simulações de Superfluidez Homogênea	27
4.2	Simulações de Superfluidez Heterogênea	30
5	Conclusões.....	47
6	Bibliografia.....	47

1 Introdução

Após sua primeira observação em 1911, a supercondutividade ganhou muita atenção devido ao seu comportamento inesperado em relação à condutividade comum [1]. Em um condutor a passagem de corrente elétrica implica a interação dos elétrons itinerantes da corrente com os fônons da rede cristalina, resultando em perda energética dos elétrons, associada à resistência R do material. Em um supercondutor a corrente elétrica é conduzida sem qualquer resistência e, portanto, não há perda energética. Isso só é possível abaixo de uma certa temperatura crítica, T_c , cujo valor depende do material. Formulada pelos físicos Bardeen, Cooper e Schrieffer, a teoria BCS [2] descreve que, para $T < T_c$, elétrons têm uma interação efetiva atrativa, assim formando pares, conhecidos como pares de Cooper.

Assim, teoricamente seria possível manter uma corrente em um circuito fechado por milhares de anos [3]. Ao resfriar o metal até uma determinada temperatura crítica T_c , uma transição da fase condutora normal ($R \neq 0$) para a fase supercondutora ($R = 0$) é observada [3]. A maioria dos metais que se comportam como supercondutores tem suas temperaturas críticas muito baixas, próximas do zero absoluto [3-4]. Independentemente do tipo de material a superfluidez deixa de se manifestar se a temperatura estiver acima de T_c . A superfluidez pode também desaparecer se for exposta a um campo magnético externo intenso ou por uma polarização induzida [2], ambos acarretando no desbalanço da população de spins.

Décadas depois da primeira observação de supercondutividade, fora previsto um novo regime de superfluidez sob a presença de magnetismo, esta fase caracterizada por uma superfluidez heterogênea ficou conhecida como fase FFLO (Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov) [5-6]. Experimentalmente há apenas evidências indiretas desta fase, mas já foi comprovado que este regime pode ser apenas observado quando a polarização, ou seja, a medida da orientação vetorial dos vetores campo elétrico e campo magnético, for no máximo $P^{\max} = 1/3$ para qualquer densidade ou interação [7].

A fim de se compreender melhor o regime FFLO, diversas metodologias foram desenvolvidas e empregadas na investigação de superfluidez heterogênea. O emaranhamento é conhecido por descrever fenômenos críticos em geral, como transições de fases quânticas por exemplo [8]. Apesar de ser um recurso mais comumente aplicado na área de informação quântica e na maioria das vezes exigir um alto desempenho computacional, tem-se demonstrado muito eficaz na área de matéria condensada [8-9]. Além disso, o modelo de Hubbard [10] é muito popular por descrever de maneira simplificada a itinerância de elétrons em sólidos e nanoestruturas, ou seja, estruturas com pelo menos uma dimensão entre 1 – 100nm [10]. Portanto o estudo do emaranhamento em cadeias de Hubbard, pode revelar os parâmetros em que transições de fase quânticas ocorrem [11-12], tendo em vista sua aplicação tanto em sistemas homogêneos quanto em heterogêneos.

Nessa dissertação, as propriedades de superfluidez exótica em cadeias unidimensionais de Hubbard foram investigadas através de cálculos de DMRG (Density Matrix Renormalization Group). Procuramos detectar os regimes de parâmetros para os quais a nanoestrutura transita da fase de superfluidez exótica para a fase não superfluida. Os fundamentos teóricos para estes estudos estão contidos no Capítulo 2 onde serão abordados a superfluidez convencional e exótica, o modelo de Hubbard, DMRG e o emaranhamento. No Capítulo 3 é apresentada a metodologia detalhada. No Capítulo 4 são apresentados os resultados e discussões. As conclusões são descritas no Capítulo 5.

2 Fundamentos Teóricos

2.1 Superfluidez Convencional: Teoria BCS

Após ter sido observada pela primeira vez em 1911 por Onnes, a supercondutividade ganhou grande destaque devido a sua natureza peculiar [1]. Até então todos os materiais condutores apresentavam resistência quando submetidos a uma corrente elétrica. Em contraste, os supercondutores romperam essa hegemonia

por representar um sistema em que a resistividade, ou seja, a resistência específica de cada material, é nula [1,4]. Os materiais metálicos ao serem resfriados a temperaturas muito baixas, a partir de uma determinada temperatura crítica, apresentam uma transição de fase termodinâmica, da fase normal (condutora) para a fase supercondutora [3], como ilustrado na Figura 1a.

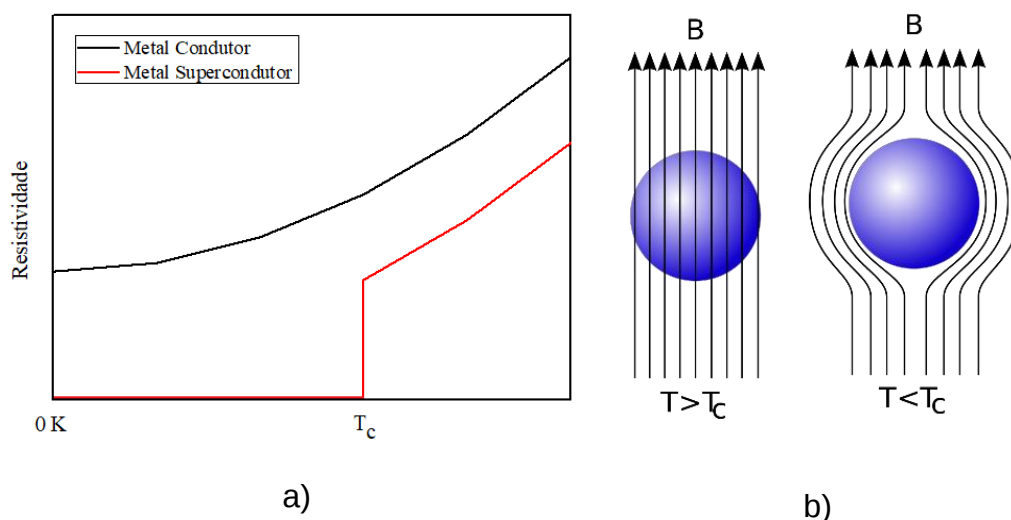


Figura 1 – (a) Resistividade em função da temperatura de um metal. Se o metal não apresenta supercondutividade a resistividade se aproxima de um valor finito a 0K enquanto que para um supercondutor, a resistividade desaparece no ponto T_c . (b) Representação do efeito Meissner – Ochsenfeld. Se uma amostra inicialmente a uma temperatura acima de T_c e sob um campo magnético (esquerda) for resfriada e depois submetida à um campo magnético (direita), então o campo magnético não poderá adentrar no material. Fonte: Próprio autor.

Como a condutividade é inversamente proporcional à resistividade $\sigma = 1/\rho$, a condutividade de um metal supercondutor tende ao infinito, já que não apresenta resistência. Experimentalmente verifica-se [13] que um campo B moderado aplicado a um supercondutor é expelido para fora da amostra, como ilustra a Figura 1b. Esse fenômeno é conhecido como efeito Meissner – Ochsenfeld.

Diversos elementos e substâncias abaixo de suas determinadas temperaturas críticas apresentam transição da fase comum para supercondutora. O nióbio apresenta uma das temperaturas críticas mais altas dos elementos (9,2K), enquanto que o tungstênio apresenta uma das mais baixas (0,01K). Alguns elementos necessitam condições especiais para manifestarem a fase supercondutora como o

ferro, que necessita estar submetido a altas pressões além da baixa temperatura. Na década de 80 a área de superfluidez deu um imenso salto devido à descoberta dos supercondutores de altas temperatura, sendo caracterizado por materiais cerâmicos como $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ (92K) e $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_8$ (135K) por exemplo [3].

A gama de materiais supercondutores é altamente extensa, apesar de ainda não serem completamente compreendidos. Esses incluem supercondutores orgânicos, fulerenos e supercondutores de férmions pesados, em que a interação elétron-elétron, que será abordada posteriormente, é intensa. Alguns ainda apresentam propriedades exóticas como a coexistência de magnetismo e superfluidez, tendo em vista que a magnetização teoricamente anula a fase superfluida.

O efeito Meissner – Ochsenfeld foi considerado por muitas décadas a prova definitiva para o regime de superfluidez, mas em 1957 Bardeen, Cooper e Schrieffer (BCS) publicaram a primeira teoria da supercondutividade em nível microscópico [2]. A teoria BCS, que explica uma série de importantes fenômenos experimentais, foi postulada para sistemas à baixas temperaturas e na ausência de campos magnéticos externos.

A descrição quântica de nanoestruturas requer o tratamento dos fônons que se equivalem a partículas cujo movimento vibratório é quantizado. Em mecânica clássica os fônons são análogos aos modos normais de vibração, em que cada parte de uma rede oscila com a mesma frequência. A passagem de uma corrente elétrica em metais acarreta na interação Coulombiana entre os elétrons e os fônons da rede [14]. Os fônons são atraídos para regiões próximas dos elétrons, como ilustra a Figura 2, produzindo uma perda energética por parte do elétron, por distorcer a rede e aumentar a vizinhança positiva ao redor do elétron. Em um condutor comum esta perda energética é convertida em calor resultando na resistência do material; porém em um supercondutor, o fônão transfere a energia recém-adquirida para um segundo elétron assim não havendo perdas [2-4].

Essa troca de energia através da rede distorcida resulta em uma interação efetiva atrativa entre os elétrons, denominado interação U. Dois destes elétrons, que necessariamente têm seus spins opostos devido ao princípio de exclusão de Pauli [15], em que dois férmions idênticos não podem ocupar o mesmo estado quântico

simultaneamente, são chamados de pares de Cooper ou pares BCS [2]. Os elétrons emparelhados podem manter seu movimento acoplado até certa distância, chamado de comprimento de coerência, sendo relativo à cada material.

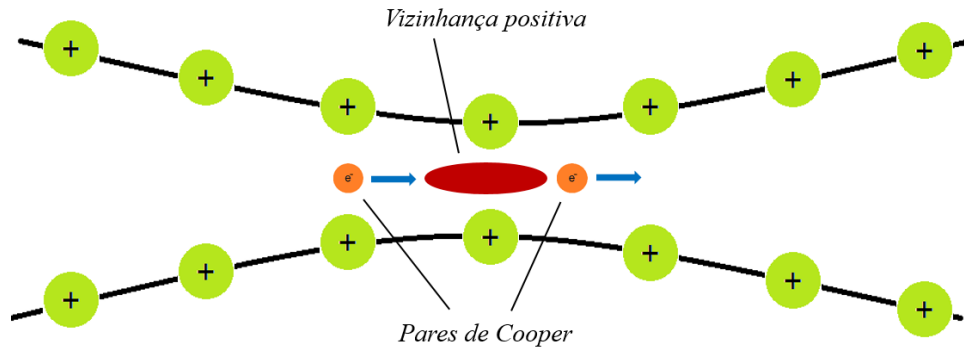


Figura 2 – Distorção da rede cristalina ocasionando a formação de um par de Cooper. Os elétrons itinerantes distorcem a rede assim perdendo energia para o fônon, que por sua vez transmite essa mesma energia para um segundo elétron, favorecendo a formação dos pares. Fonte: Próprio autor.

Segundo a teoria BCS o fenômeno de superfluidez convencional depende dos pares de Cooper, cuja formação é esperada ser homogênea na amostra. Além disso, por causa do efeito Meissner, acreditava-se que campos magnéticos e/ou população desbalanceada de spin jamais coexistiram com a superfluidez, e que campos muito intensos romperiam o fenômeno de supercondutividade [2-4].

2.2 Superfluidez não-Convencional: Fase FFLO

Em 1964 fora previsto uma nova fase supercondutora sob a presença de campos magnéticos, em que haveria a coexistência de superfluidez e magnetismo na mesma amostra. Esta fase caracterizada por uma superfluidez heterogênea foi denominada fase FFLO, devido a duas publicações independentes, uma de Fulde e Ferrel [5]; e a outra de Larkin e Ovchinnikov [6]. Sob a presença de um campo magnético externo moderado, a orientação dos spins se altera resultando em uma polarização não nula no material. A polarização também pode ser induzida internamente devido a população de spin desbalanceada [16], ou seja, $N_{\uparrow} \neq N_{\downarrow}$. A medida que a polarização se intensifica menor a probabilidade de formar um par de Cooper ($w_{\uparrow\downarrow}$) e maior a probabilidade de estar desemparelhado ($w_{\uparrow\uparrow}$).

Considerando uma cadeia de L sítios (que posteriormente será detalhada), descrevendo um sistema fortemente atrativo e utilizando cálculos exatos (DMRG) [17-18] e aproximados (DFT – Density Functional Theory) [19-20], na Figura 3 é possível observar a manifestação da superfluidez quando houver alta probabilidade de dupla ocupação de um sítio ($w_{\uparrow\downarrow}$), devido ao favorecimento da formação dos pares de Cooper [7]. A intersecção das curvas refere-se à polarização máxima (P_c) em que é possível observar a superfluidez heterogênea, pois a partir deste ponto o desbalanceamento eletrônico favorecerá os estados desemparelhados ($w_{\uparrow}$) inibindo a formação dos pares.

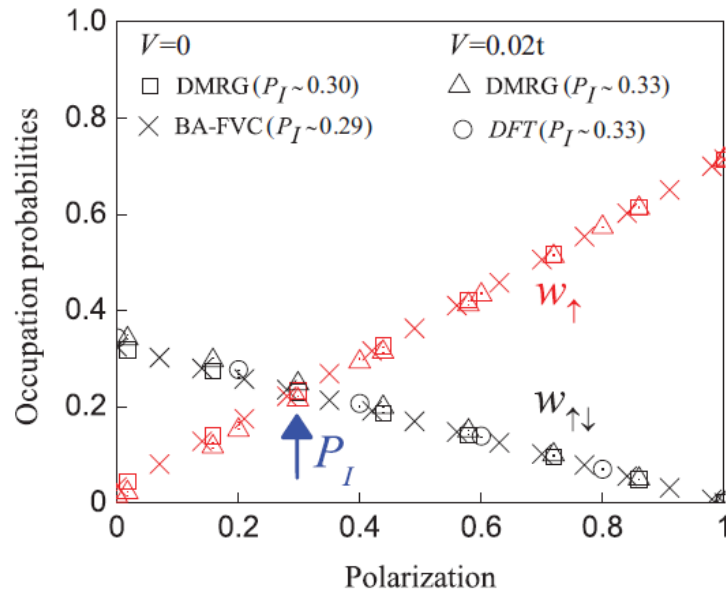


Figura 3 – Cálculos DFT e DMRG para cadeias de tamanho $L = 80$ com condições de limite aberto, descrevendo as probabilidades de ocupação para elétrons desemparelhado $w_{\uparrow}$ e emparelhados $w_{\uparrow\downarrow}$ em função da polarização P . Fonte: V. V. França, D. Horndlein and A. Buchleitner (2012).

A baixa probabilidade de ocupação para $w_{\downarrow}$ favorece o emparelhamento no regime FFLO, pois à medida que a polarização se intensifica, resultado do gradual desbalanceamento da população de spin, o sistema adquire duas vias de inversão: o estado desemparelhado inverte-se o spin de down para up e, o estado pareado tem seu par rompido [21]. A via do estado desemparelhado é favorecida energeticamente em relação à do estado pareado, devido ao custo adicional de se quebrar um par de

Cooper. Assim a polarização é gradualmente formada resultando na ausência de superfluidez [7].

Outros testes que mostram a transição da fase supercondutora para a normal foram efetuados [7]. Verificou-se que para que a fase FFLO seja observada, a polarização do sistema não pode ser superior a $P^{\max} = 1/3$. Entretanto a região de polarização crítica não é o único parâmetro que caracteriza o regime de superfluidez heterogênea. Baixas densidades e interações podem inibir a manifestação da fase FFLO, pois pequenos valores de polarização podem ocasionar uma transição direta da fase BCS para a fase normal. Densidades como $n = 0.2$, isto é, 20% de preenchimento de partículas em uma dada cadeia, só é possível observar o regime FFLO, sob intensas interações atrativas [7,16,21]. Na Tabela 1 observa-se que interações atrativas muito baixas ($|U|$ pequeno) invalidam a fase ($P_c = 0$).

Tabela 1 – Valores de polarização crítica para várias densidades e interações, em um sistema com potencial externo $V = 0$ sob os cálculos de DMRG e DFT. Para interações fracas e densidades fracas a polarização é nula: o sistema transita diretamente da fase BCS para a não superfluida, sem apresentar fase FFLO.

Parâmetros		Polarização Crítica P_c	
	n	DMRG	DFT
$U = -8t$	0.2	0.28	0.30
	0.5	0.29	0.29
	0.7	0.29	0.29
	1.0	0.31	0.31
$U = -4t$	0.2	0.17	0.13
	0.5	0.19	0.20
	0.7	0.21	0.26
	1.0	0.27	0.00
$U = -2t$	0.2	0.00	0.00
	0.5	0.00	0.00
	0.7	0.07	0.00
	1.0	0.19	0.18

A compressão da fase FFLO pode auxiliar nos estudos de fenômenos exóticos da natureza, como os pulsares da estrela de nêutrons. Estima-se que o núcleo de uma estrela de nêutrons seja composto por um superfluido de nêutrons [22]. Como no momento do colapso da estrela houve a conservação de momento, a rotação da estrela é de intensa frequência (43 000 rpm), assim resultando em um campo magnético igualmente intenso [23]. Assim a estrela de nêutrons é o perfeito exemplo da coexistência de magnetismo e superfluidez, além de também representar um superfluido a altíssimas temperaturas [22].

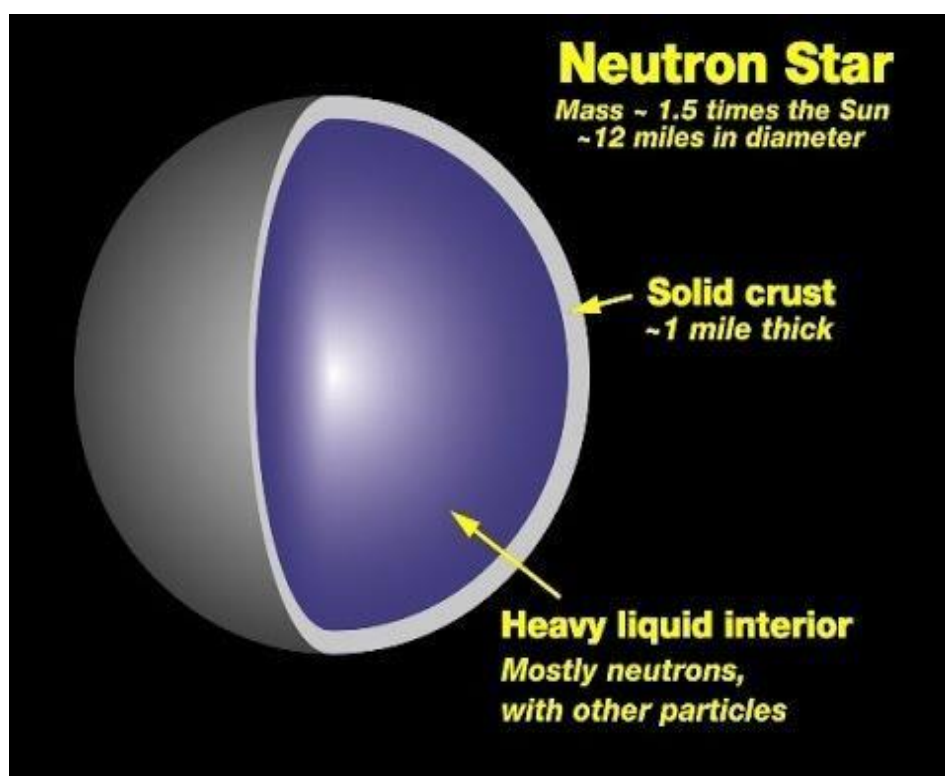


Figura 4 – Núcleo de uma estrela de nêutrons, formado por superfluidos de prótons e nêutrons. Fonte: <http://www.astronomie.nl>.

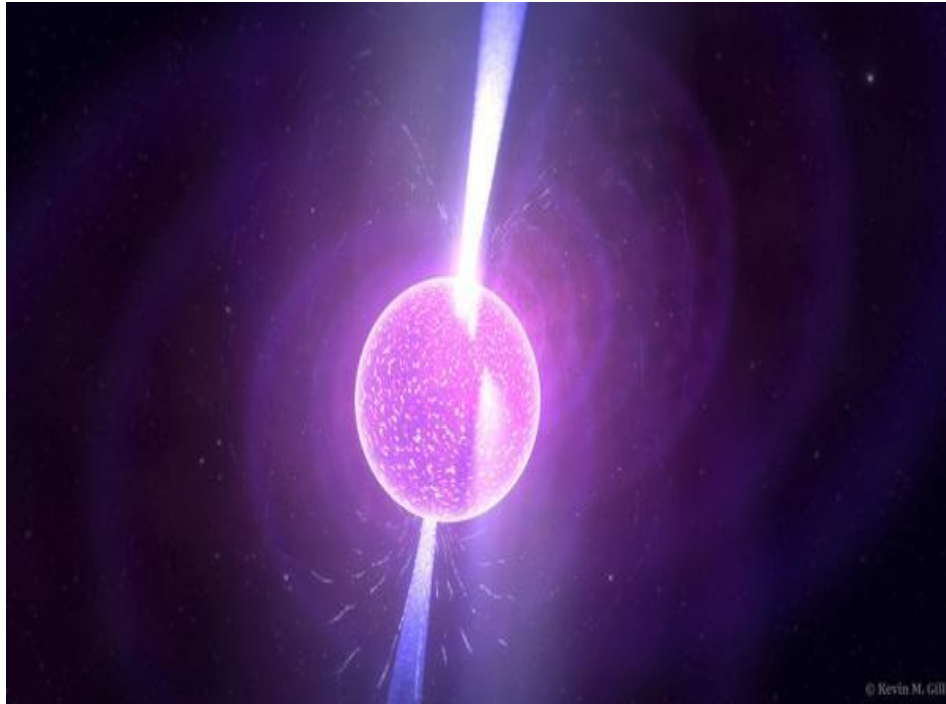


Figura 5 – Pulsar de uma estrela de nêutrons, formado a partir do intenso campo magnético, gerado da alta frequência de rotação da estrela. Fonte: <http://www.astronomy.com>.

2.3 Modelo de Hubbard

O modelo de Hubbard descreve de maneira aproximada a interação e itinerância de elétrons em sólidos e nanoestruturas. É o modelo mais simples quando se trata de elétrons interagentes em uma cadeia, no caso unidimensional de L sítios, em que cada sítio representa um orbital não-degenerado [24], ou seja, o espaço em que há determinada probabilidade do elétron estar presente. Devido ao princípio de exclusão de Pauli [15], dois ou mais férmions (partículas com spin semi-inteiro) não podem ocupar o mesmo sítio. Assim, cada sítio tem quatro possíveis estados quânticos de ocupação: duas partículas com spins opostos, uma partícula com spin up, uma partícula com spin down e nenhuma partícula [24-25].

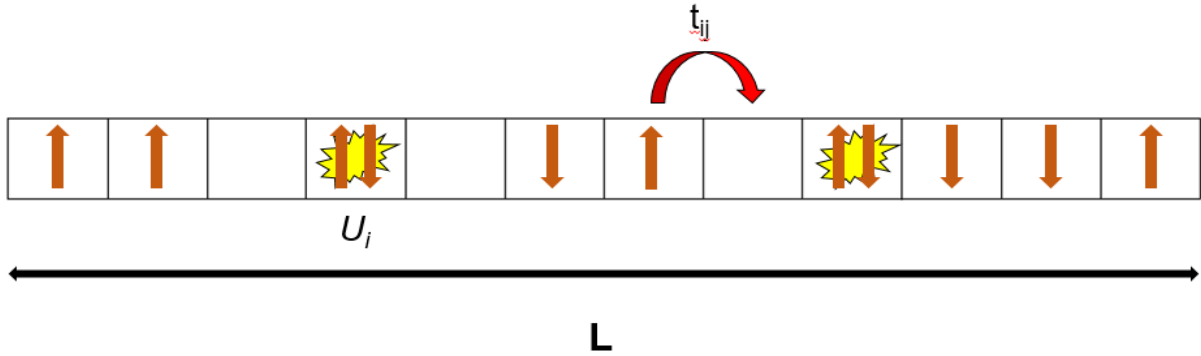


Figura 6 – Modelo de Hubbard para uma cadeia de L sítios, em que cada sítio é preenchido por até duas partículas de spin semi-inteiro, resultando em uma interação Coulombiana. As partículas que não estiverem acopladas em um sítio estão sujeitas a transitar a um sítio vizinho, se este estiver desocupado. Fonte: Próprio autor.

A aproximação mais simples a ser feita para a interação entre os elétrons é restringi-los ao caso em que ambos estejam no mesmo sítio e descartar a interação entre elétrons de sítios vizinhos. Além disso, restringe-se também a itinerância a sítios vizinhos, como ilustra a Figura 6. Sendo a interação Coulombiana num dado sítio i definida como U_i , a probabilidade de deslocamento de um sítio i para um j como t_{ij} , o potencial externo $v_{i\sigma}$, $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}$ os operadores de criação e destruição e $\hat{n}_{i\sigma}$ o operador número de partículas de spin σ no sítio i , o hamiltoniano Hubbard [24] é dado por:

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

O primeiro termo, o *hopping*, é capaz de descrever a itinerância eletrônica e, portanto, o comportamento metálico da nanoestrutura. O segundo termo, o termo de Coulomb por si só favoreceria momentos magnéticos locais, ao reduzir a probabilidade da observação de um segundo elétron (com spin oposto) em único sítio já ocupado. Já o terceiro termo pode ser utilizado para simular heterogeneidades espaciais como presença de impurezas, potenciais confinantes, potenciais periódicos, desordem, etc.

O conhecimento dos parâmetros t e U não são suficientes para caracterizar o sistema. Também é preciso ter conhecimento da dimensionalidade do sistema,

(unidimensional, bidimensional ou tridimensional) as condições de contorno (rede aberta ou fechada), a densidade n do sistema e a temperatura. A interação e a itinerância dependem da distribuição dos elétrons ao longo da cadeia, que por sua vez, depende das condições de contorno e do potencial externo. O sistema é considerado homogêneo quando apresentar potencial externo uniforme, seu tamanho for infinito ou apresentar condições de contorno periódicas. Porém ao apresentar condição de contorno aberta e/ou potencial externo, a distribuição será heterogênea pois a presença das bordas e do potencial irão afetar a distribuição.

Um dos principais problemas no estudo de sistemas de muitos corpos é o fato de que o espaço de Hilbert (composto por todos os possíveis estados quânticos do sistema) cresce exponencialmente com o tamanho da cadeia, assim tendo 4^L graus de liberdade, em que L é o tamanho da cadeia [8,9,11,12]. Propriedades de simetria podem ser utilizadas a fim de diminuir o custo computacional dos cálculos, entretanto, mesmo um grande fator de redução será eventualmente superado pelo crescimento exponencial, assim exigindo uma alta performance computacional. Portanto também é vantajoso se trabalhar com sistemas unidimensionais [11]. Para sistemas de poucas dimensões flutuações quânticas são mais acentuadas, por isso sistemas 1D têm recebido prioridade nos estudos de FFLO [11-12].

2.4 Emaranhamento

O emaranhamento é um fenômeno exclusivo da física quântica e com grande potencial de aplicação em processos de informação quântica. Quando dois ou mais subsistemas pertencentes a um mesmo sistema quântico estão emaranhados, uma medida realizada em um deles afeta instantaneamente o estado quântico dos outros [26]. Este fenômeno independe da distância em que os subsistemas se encontram e da quantidade de subsistemas emaranhados.

Einstein denominou o fenômeno como uma "ação fantasmagórica à distância" [27], que com base no conceito de localidade da física clássica, viola sua teoria da relatividade restrita. Porém as previsões contra intuitivas da mecânica quântica foram verificadas experimentalmente. Demonstrou-se que o problema estava na concepção

clássica de "realismo local": estados emaranhados formam um mesmo sistema delocalizado.

No caso do modelo de Hubbard, se definirmos o subsistema A como um único sítio emaranhado com o subsistema B sendo o restante da cadeia, a entropia de von Neumann fornecerá o emaranhamento:

$$S_B = S_A = - \text{Tr} [\rho_A \log_2 \rho_A], \quad (2)$$

em que $\rho_{A(B)} = \text{Tr}_{B(A)} [\rho]$ é a matriz densidade reduzida do subsistema A (B) obtida pelo traço parcial da matriz densidade do sistema total $\rho = |\psi_0\rangle \langle \psi_0|$ com relação ao subsistema B (A).

2.5 DMRG – Density Matrix Renormalization Group

Como citado anteriormente, o problema em aumentar o número de sítios L de uma cadeia é que os graus de liberdade aumentam exponencialmente com 4^L , assim exigindo muito desempenho computacional. Density Matrix Renormalization Group (DMRG) é um método iterativo que reduz os graus de liberdade de uma cadeia e é atualmente o método mais eficiente para sistemas unidimensionais. O método constitui em dividir o sistema em dois blocos mais dois sítios no meio, assim formando um superbloco, como ilustra a Figura 7. No momento em que o superbloco atingir $L/2$ sítios, o bloco esquerdo é ampliado, mas à direita um superbloco com o número menor de sítios é utilizado para manter constante o número de sítios do superbloco. Assim que o tamanho do bloco da direita atingir um único sítio o procedimento é interrompido [17-18].

Uma varredura do sistema é efetuada a fim de calcular todos os tamanhos possíveis do bloco esquerdo. Assim que uma varredura é realizada inicia-se novamente com um pequeno bloco esquerdo, porém a partir de agora, todas as informações sobre a melhor representação do bloco serão registradas desde que fora calculado na varredura anterior [18]. Assim que for determinado uma base ideal para um dado tamanho do bloco esquerdo, o resultado é armazenado e utilizado na próxima varredura representando o melhor estado que descreve o bloco inteiro. Dessa

forma é possível aumentar o sistema sem aumentar exponencialmente o espaço de Hilbert.

Em seguida escolhe-se o bloco que representará o sistema completo, normalmente sendo o estado fundamental. O conhecimento deste produz uma visão geral de um sistema, especialmente se envolver temperaturas baixas. Quando o estado fundamental do superbloco for calculado, os estados que menos contribuem para o estado fundamental são descartados [17].

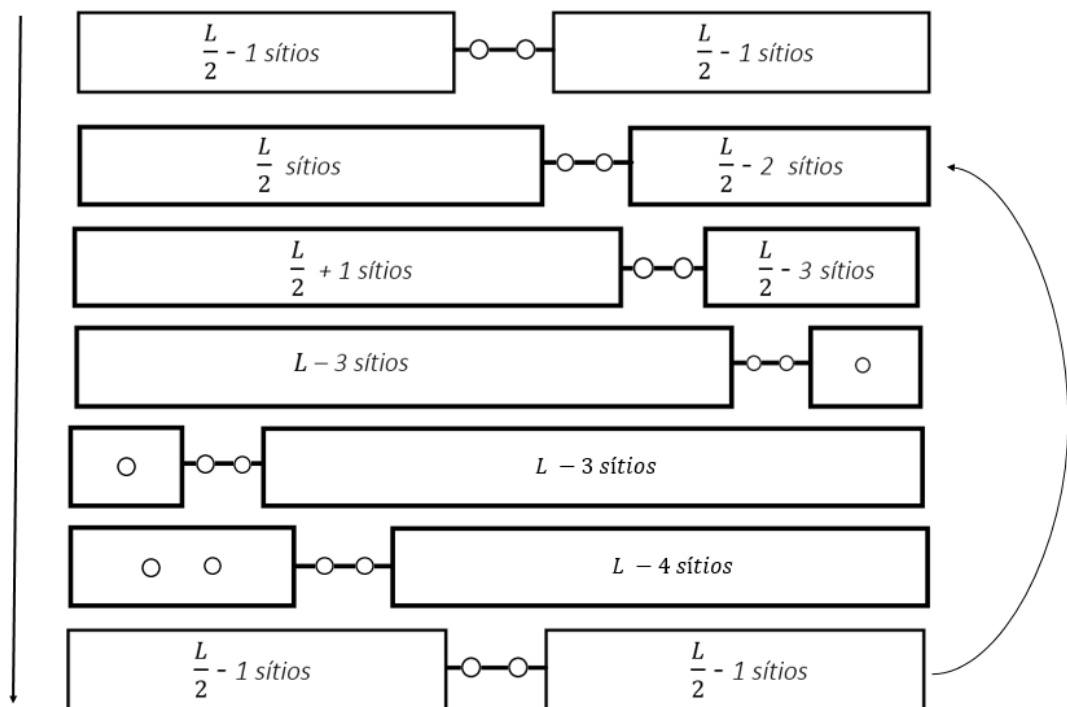


Figura 7 – Matriz de densidade dividida em partes na formação de um superbloco DMRG. O superbloco ao atingir $L/2$ sítios, inicia-se a ampliação do bloco esquerdo até o tamanho do bloco da direita atingir um único sítio. Uma varredura então é efetuada a fim de se calcular todos os tamanhos possíveis do bloco esquerdo. Fonte: Próprio autor.

3 Metodologia

Devido ao alto custo computacional exigido pelos cálculos de DMRG aplicados ao modelo de Hubbard, fora utilizado o Grid da Unesp, cluster de computadores de

alto desempenho localizado no IFT – UNESP São Paulo. Utilizando um terminal no próprio IQ – UNESP Araraquara, os scripts desenvolvidos (linguagem C++) descrevem uma nanoestrutura unidimensional de L sítios aplicados ao modelo de Hubbard. O cálculo de DMRG fornece a energia total do sistema, as densidades e probabilidades de ocupação dos sítios, para uma dada densidade média, ou fator de preenchimento, definida por:

$$n = \frac{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}{L} \quad (3)$$

sendo $N_{\uparrow}$ e $N_{\downarrow}$ o número de partículas de spin up e down respectivamente, com n variando entre $0 \leq n \leq 2$. Considerando os quatro possíveis estados quânticos de ocupação para cada sítio ($w_{\uparrow\downarrow}$, $w_{\uparrow}$, $w_{\downarrow}$ e w_0) aplicados a entropia de emaranhamento, temos que:

$$S = -w_{\uparrow\downarrow} \log_2 w_{\uparrow\downarrow} - w_{\uparrow} \log_2 w_{\uparrow} - w_{\downarrow} \log_2 w_{\downarrow} - w_0 \log_2 w_0. \quad (4)$$

Assim quantificando o emaranhamento para cada sítio, calcula-se uma média a fim de se obter o resultado médio de um único sítio. A entropia varia de $S = 0$ até $S^{\max} = 2$, sendo que para atingir $S^{\max}$ é necessária uma condição específica de densidade $n = 1$, magnetização $m = 0$ e $U = 0$ [28]. Isso acontece neste caso pois, na ausência de interação intra-sítio e magnetização, a distribuição eletrônica ao longo da cadeia é homogênea, e assim a probabilidade dos quatro possíveis estados de ocupação são idênticas: $w_{\uparrow\downarrow} = w_{\uparrow} = w_{\downarrow} = w_0 = 1/4$.

O comportamento do emaranhamento será analisado em função da variação dos parâmetros no regime em que ocorre a superfluidez exótica FFLO. Como tal regime é obtido com $U < 0$ e com população de spin desbalanceada, a polarização será quantificada por:

$$P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}. \quad (5)$$

Sob a presença de uma população de spin desbalanceada é possível quantificar a susceptibilidade magnética χ , que se relaciona com a energia total E por:

$$\chi^{-1} = \frac{\partial^2 E(n, m, U)}{\partial m^2} \quad (6)$$

onde $m = n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ é a magnetização, relacionada com a polarização por $nP = m$. Estudos experimentais em materiais magnéticos [29, 30, 31] sugerem uma conexão entre emaranhamento e susceptibilidade. Como nossas amostras superfluidas têm também magnetismo, iremos buscar compreender a relação entre as grandezas χ e S .

Antes de submeter os scripts é necessário definir o número L de sítios da cadeia de Hubbard, alterando um diretório específico do programa. Cada script é definido por um determinado U e n , no qual $n_{\uparrow}$ e $n_{\downarrow}$ variam. O programa então calcula a energia total do sistema e as probabilidades $w_{\uparrow\downarrow}$, $w_{\uparrow}$, $w_{\downarrow}$ e w_0 para cada sítio. Assim com esses valores adimensionais calcula-se uma média aritmética para então implementá-la na Eq. (4). Dessa forma cada energia, interação, polarização e susceptibilidade magnética estará em função de um determinado valor de emaranhamento.

4 Resultados e Discussões

4.1 Simulações de Superfluidez Homogênea

Iniciamos o estudo investigando o comportamento do emaranhamento em superfluidos convencionais. A Figura 8 mostra o emaranhamento em função da interação U , para um sistema composto por 10 sítios com 10 elétrons ($N_{\uparrow} = 5$ e $N_{\downarrow} = 5$). Como já citado anteriormente, nas condições de ausência de magnetização e densidade $n = 1$, observa-se a manifestação de emaranhamento máximo $S^{\max} = 2$ em $U = 0$ [10-11], devido a igualdade da probabilidade dos quatro possíveis estados quânticos de ocupação. A partir do emaranhamento máximo, à medida que a interação se intensifica positivamente, há uma brusca queda no emaranhamento pois a repulsão entre os elétrons impossibilita a probabilidade de dupla ocupação do sítio. De forma inversa, à medida que a interação se intensifica negativamente, a atração entre os elétrons favorece a probabilidade de dupla ocupação resultando na queda de emaranhamento.

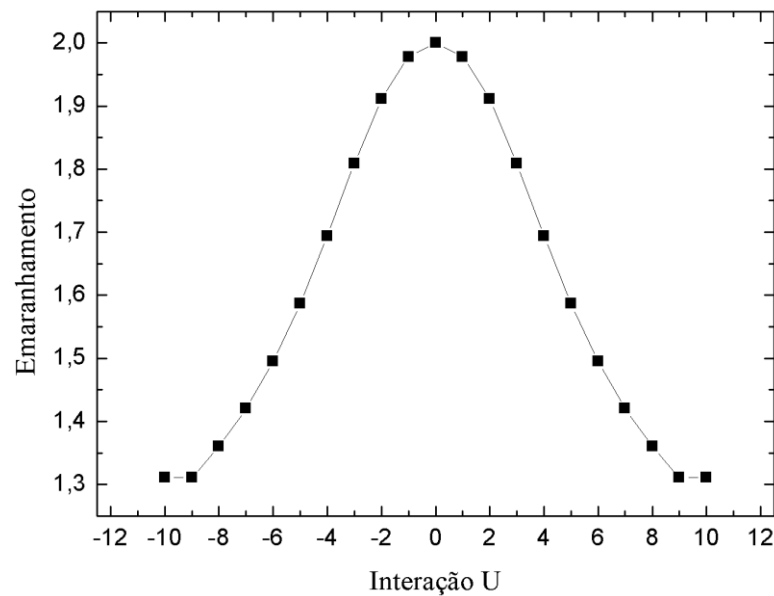


Figura 8 – Emaranhamento como função da interação Coulombiana em um sistema formado por $L = 10$ sítios e densidade $n = 1$. Nesta densidade quando não há interação ($U = 0$) a entropia de emaranhamento atinge seu valor máximo, $S^{\max} = 2$, devido a igualdade das probabilidades de ocupação por sítio: $w_{\uparrow\downarrow} = w_{\uparrow} = w_{\downarrow} = w_0 = 1/4$. Fonte: Próprio autor.

A Figura 9 mostra a comparação da curva da Figura 8 com o comportamento de um sistema de densidade $n = 0.6$ ($N_{\uparrow} = 3$ e $N_{\downarrow} = 3$). Este sistema também apresenta emaranhamento máximo em $U = 0$, porém abaixo de $S^{\max}$ pois para $n \neq 1$ as probabilidades jamais se tornam idênticas. Na região atrativa o emaranhamento é maior com o aumento da densidade, mas para interações repulsivas, o comportamento com a densidade não é monotônico. Neste regime de $U > 0$ e $n < 1$, o sistema está em uma fase metálica, portanto, apesar da intensa repulsão, o sistema apresenta intensa itinerância, mantendo assim o emaranhamento elevado. Para $n = 1$ o sistema está na fase isolante, assim, com intensa repulsão os graus de liberdade são congelados, resultando na queda do emaranhamento.

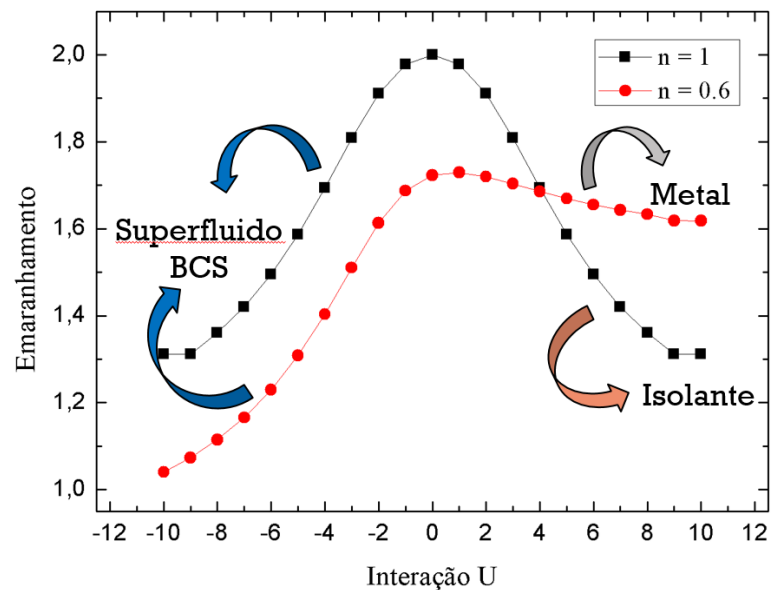


Figura 9 – Emaranhamento em função da interação Coulombiana em um sistema formado por $L = 10$ sítios e para densidades $n = 1$ e $n = 0.6$. A curva de menor densidade apresenta entropia máxima quando não há interação, mas não atinge seu valor máximo tendo em vista que este fenômeno só ocorre para densidade $n = 1$. Fonte: Próprio autor.

A Figura 10 descreve um sistema de $L = 20$ sítios com densidades variadas ($n = 0.2$, $n = 0.3$ e $n = 0.5$). Observa-se que o emaranhamento tem seu ápice em $U = 0$ para todas as densidades. Como todos os sistemas têm $n \neq 1$, o estado isolante não é observado e a fase metálica é presente nas três curvas, assim mantendo o emaranhamento elevado na região repulsiva. Para o caso $n = 0.2$ observa-se que o grau de emaranhamento é praticamente o mesmo para qualquer $U > 0$. Na região atrativa, a intensa interação apresenta baixo emaranhamento, pois ao se congelar os graus de liberdade a dupla ocupação é favorecida. Assim essa região é caracterizada pelo estado de superfluidez homogênea.

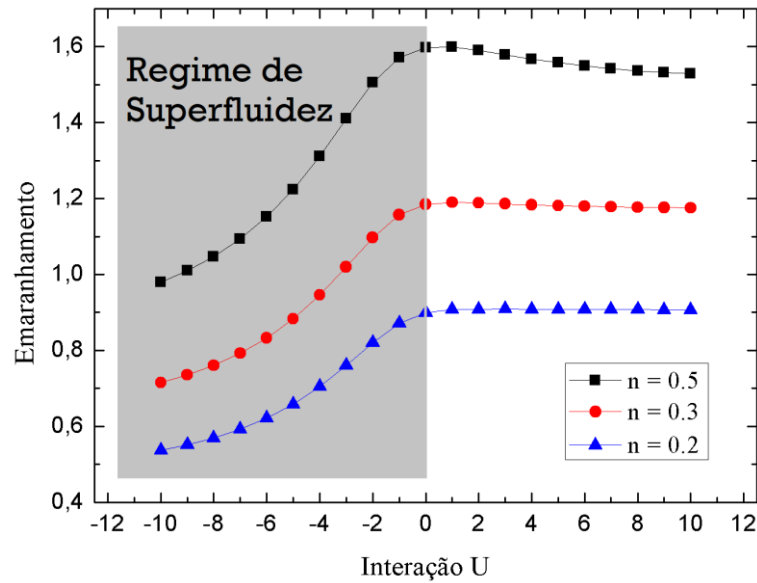


Figura 10 – Emaranhamento em função da interação Coulombiana em um sistema formado por $L = 20$ sítios e densidades $n = 0,2$, $n = 0,3$ e $n = 0,5$. Na região atrativa, caracteriza-se o regime de superfluidez por favorecer a formação dos pares BCS. Na região repulsiva o sistema é metálico, e para densidades suficientemente baixas ($n = 0,2$) a interação torna-se pouco relevante para as probabilidades. Fonte: Próprio autor.

4.2 Simulações de Superfluidez Heterogênea

Os cálculos da entropia de emaranhamento em função da polarização ($0 < P < 1$) foram executados para uma cadeia de $L = 80$ sítios, variando os parâmetros de densidade n e interação U . A fim de encontrar uma possível relação entre o regime FFLO e o emaranhamento, a Figura 11 mostra que o emaranhamento diminui na região FFLO se comparado à fase normal. É possível observar também o grau de importância da interação, pois à medida que U se intensifica menor o emaranhamento. Apesar de estar em um regime diferente, o efeito da interação na fase FFLO é semelhante ao da fase de superfluidez homogênea, pois a intensidade da interação diminui os graus de liberdade dos elétrons assim impedindo a itinerância. Em ambos os regimes de superfluidez, homogênea e heterogênea, este comportamento se deve ao favorecimento de $w_{\uparrow\downarrow}$ caracterizando um mecanismo de emparelhamento. Mas note que a entropia de emaranhamento máxima não coincide com a polarização crítica máxima $P^{\max} = 1/3$, tendo em vista que para $S^{\max}$ os quatro estados possíveis de

ocupação devem ter a mesma probabilidade; enquanto que a $P^{\max}$ apenas depende da igualdade de $w_{\uparrow\downarrow}$ e $w_{\uparrow}$, assim independente dos outros estados ($w_{\downarrow}$ e w_0).

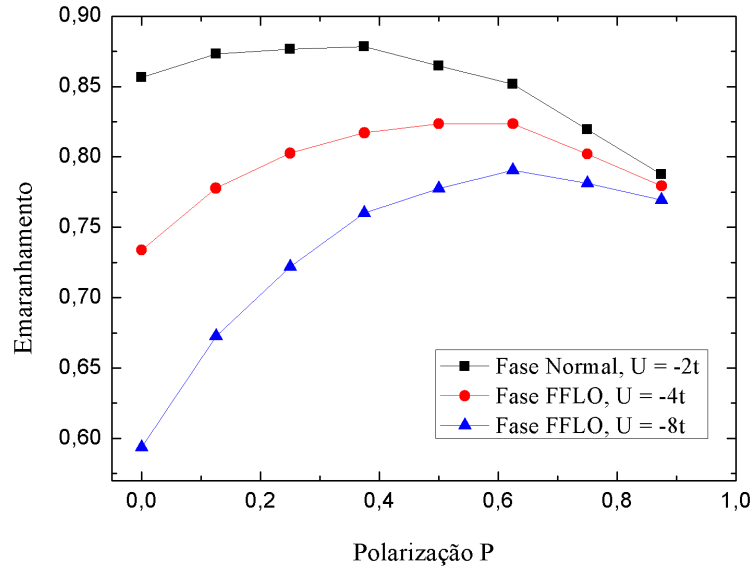


Figura 11 – Emaranhamento em função da polarização em um sistema formado por $L = 80$ sítios, para densidade $n = 0.2$ sob interações $U = -2t$, $U = -4t$ e $U = -8t$. Apesar de ser atrativo, interações muito fracas como $U = -2t$ não caracterizam regimes de superfluidez heterogênea tendo em vista a não formação dos pares BCS (ver Tabela 1). Fonte: Próprio autor.

A Figura 11 também indica um comportamento não monotônico do emaranhamento com P para os casos FFLO. As Figuras 12 e 13 comprovam esta não monotonicidade do emaranhamento em relação a polarização na fase FFLO, assim sendo possível distinguir o regime FFLO da fase normal. Dessa forma é possível estabelecer uma relação direta entre o emaranhamento e a superfluidez heterogênea.

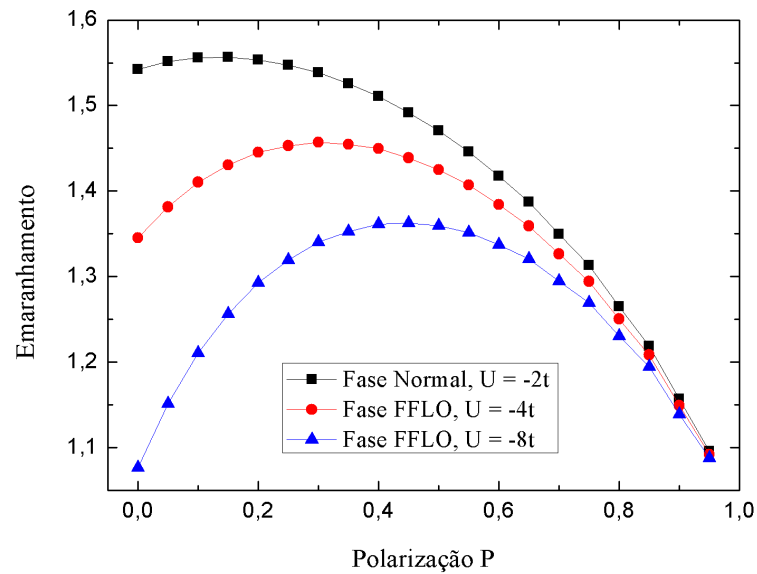


Figura 12 – Emaranhamento em função da polarização em um sistema formado por $L = 80$ sítios, para densidade $n = 0.5$ sob interações $U = -2t$, $U = -4t$ e $U = -8t$. Fonte: Próprio autor.

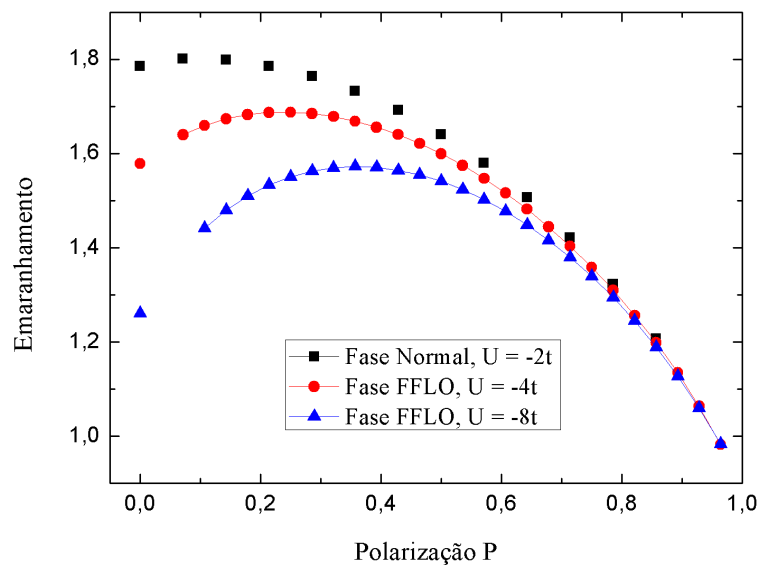


Figura 13 – Emaranhamento em função da polarização em um sistema formado por $L = 80$ sítios, para densidade $n = 0.7$ sob interações $U = -2t$, $U = -4t$ e $U = -8t$. Fonte: Próprio autor.

A Figura 14 mostra o comportamento da energia em função da polarização para densidades variadas sob interação constante. Parte do hamiltoniano do sistema é definido em termos de interação eletrônica, dessa forma o aumento da densidade

acarreta na diminuição da energia (torna-se mais negativa) devido ao maior impacto do aumento da interação. As três densidades apresentam um comportamento crescente. À medida que a polarização aumenta, menor a probabilidade de dupla ocupação de um sítio assim diminuindo gradativamente a intensidade da interação, resultando no aumento da energia. As três curvas convergem para a mesma região (região em que $P=1$), em que a energia é definida majoritariamente em termos de *hopping*, já que a população de spin se encontra totalmente desbalanceada resultando na ausência de interação.

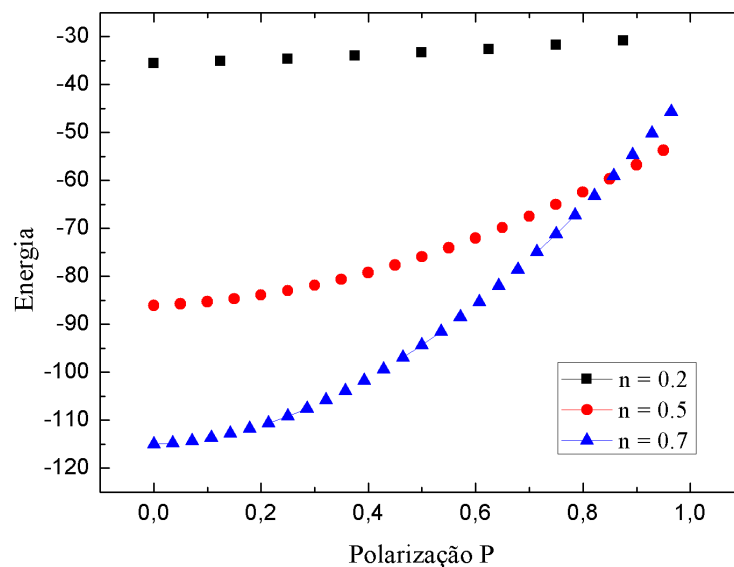


Figura 14 – Energia em função da polarização para $U = -2t$ em densidades variadas. À medida que a polarização se intensifica, menor a influência da interação, resultando no aumento da energia. As três curvas convergem para a mesma região próxima da polarização máxima, em que a energia é definida majoritariamente em termos de *hopping*. Fonte: Próprio autor.

Dessa forma é possível observar o regime de superfluidez heterogênea, pois à medida que a energia aumenta com a polarização, a formação de pares é desfavorecida devido à baixa interação. As Figuras 15 e 16 apresentam o mesmo comportamento, porém estas sob interação mais intensa, resultando na intensificação da taxa de variação de ambos os gráficos. Como já citado, em regiões próximas da magnetização máxima a energia é definida majoritariamente em termos de *hopping*,

dessa forma independente da interação ou da densidade, nos três gráficos as curvas convergem para a mesma região.

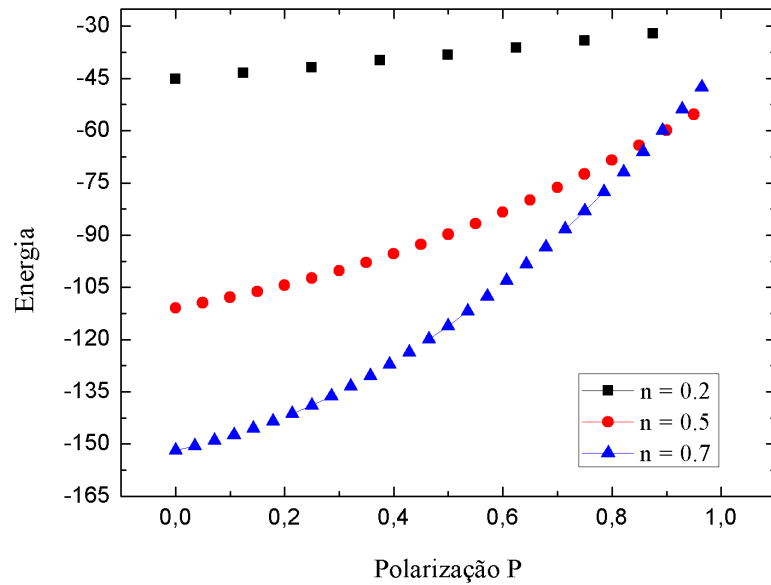


Figura 15 – Energia em função da magnetização para $U = -4t$, $L = 80$ e densidades variadas. Fonte: Próprio autor.

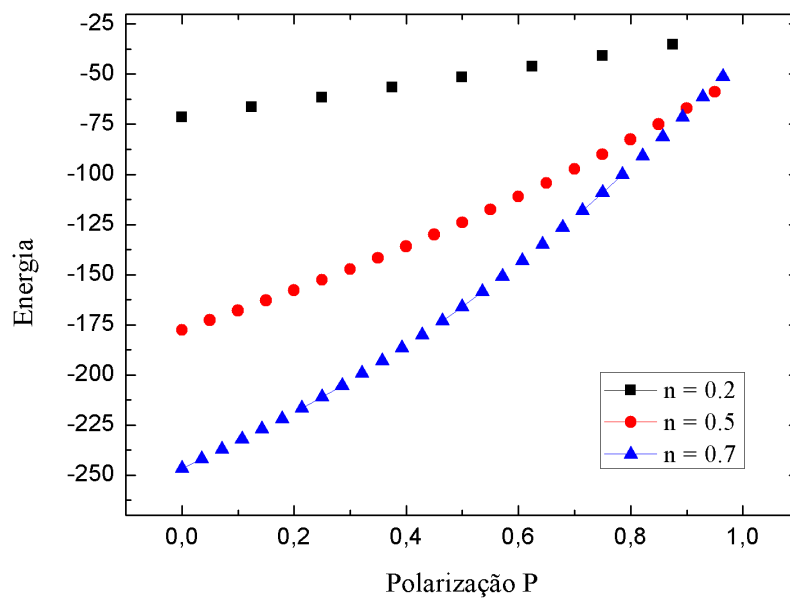


Figura 16 – Energia em função da magnetização para $U = -8t$, $L = 80$ e densidades variadas. Fonte: Próprio autor.

Para confirmar a intensificação da taxa de variação da energia em relação à polarização à medida que a interação aumenta, foram calculadas as derivadas parciais $\frac{\partial E(n,P,U)}{\partial P}$. As figuras 17, 18 e 19 confirmam que para uma densidade fixa, a taxa de variação aumenta gradativamente conforme a interação e a polarização aumentam.

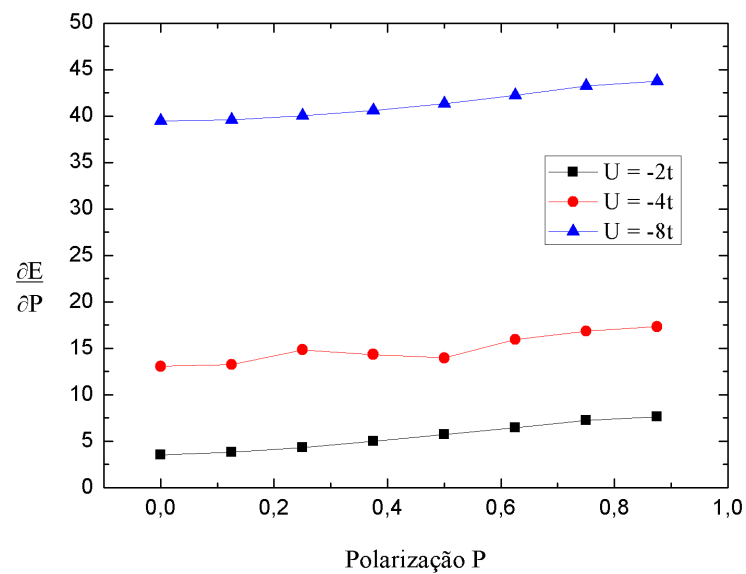


Figura 17 – Derivada parcial da energia em relação à polarização para $n = 0.2$ em interações variadas. Fonte: Próprio autor.

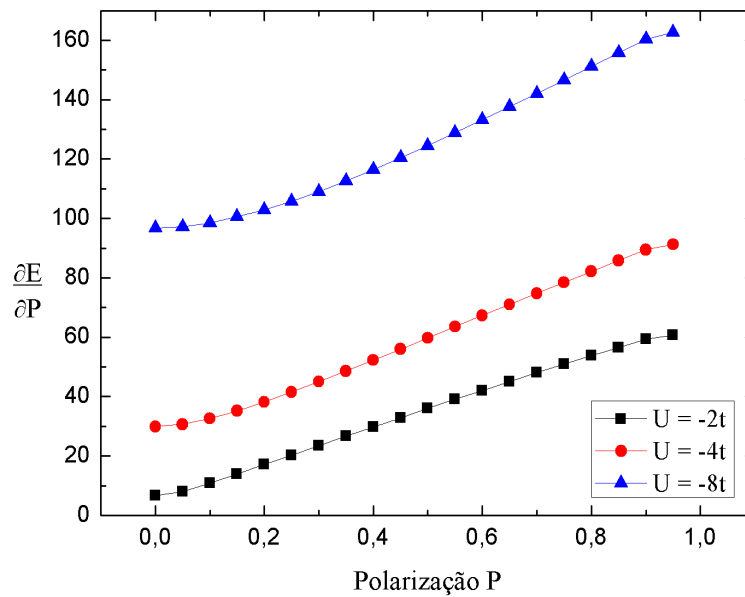


Figura 18 – Derivada parcial da energia em relação à polarização para $n = 0.5$ em interações variadas. Fonte: Próprio autor.

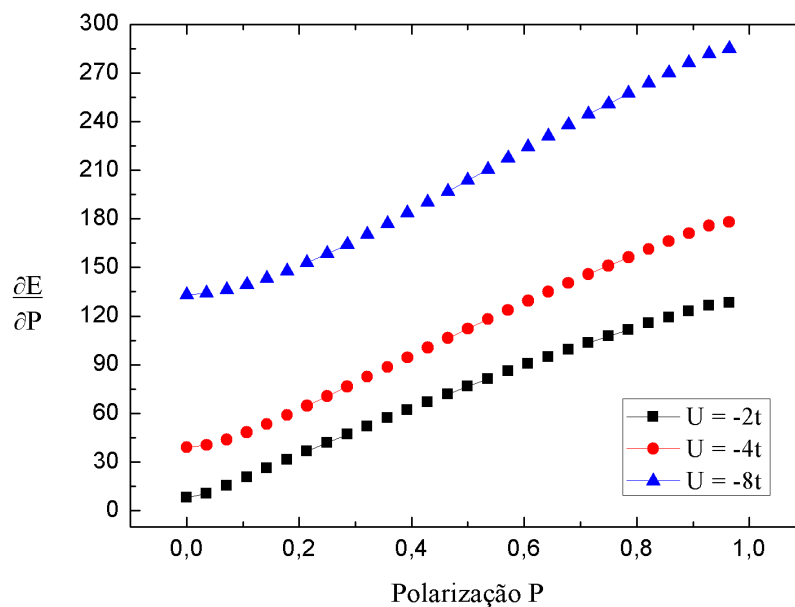


Figura 19 – Derivada parcial da energia em relação à polarização para $n = 0.7$ em interações variadas. Fonte: Próprio autor.

Para quantificar a susceptibilidade magnética, através da Eq. (6) e assim relacionar com o emaranhamento, fixamos a densidade e a interação, e calculamos a

segunda derivada da energia em função da magnetização. O processo é repetido para vários valores de U . Cada valor de U corresponde a um valor de emaranhamento em $m = 0$, assim sendo possível mapear o emaranhamento em função da susceptibilidade. Na Figura 20 observa-se que o emaranhamento diminui com o aumento da susceptibilidade. Além disso à medida que a densidade diminui, o emaranhamento diminui, mas a relação entre S e χ permanece a mesma. Estes dados no regime atrativo foram comparados com o regime repulsivo $U > 0$ para $n = 1$. Apesar da interação ser oposta e a susceptibilidade variar em escalas muito diferentes, observa-se o mesmo comportamento decrescente do emaranhamento. Contudo, enquanto para $U > 0$ o decaimento é exponencial, para $U < 0$ observamos que o emaranhamento cai linearmente conforme a susceptibilidade, como ressalta a Figura 21.

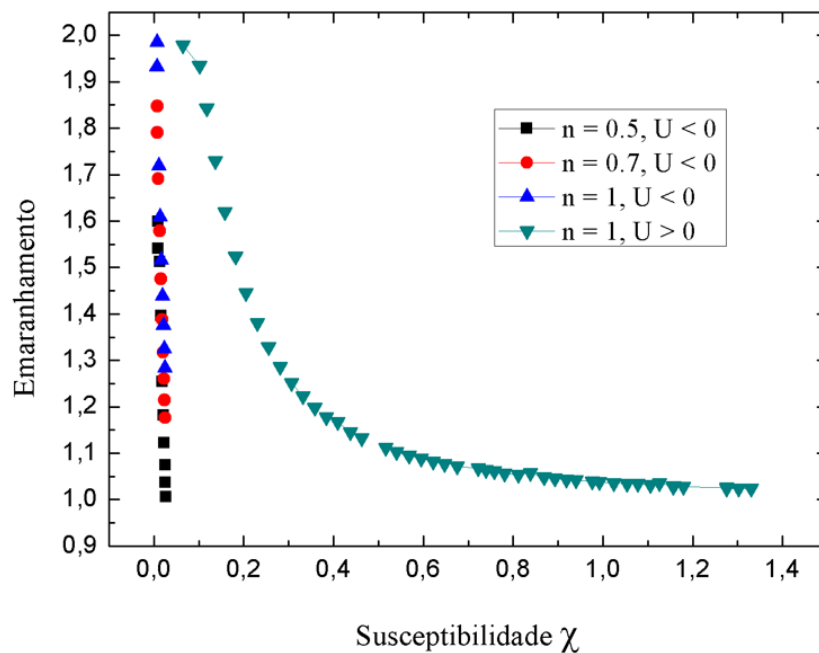


Figura 20 – Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética. A fase magnética ($U > 0$) varia exponencialmente em relação ao emaranhamento enquanto a fase superfluidez varia linearmente. Fonte: Próprio autor.

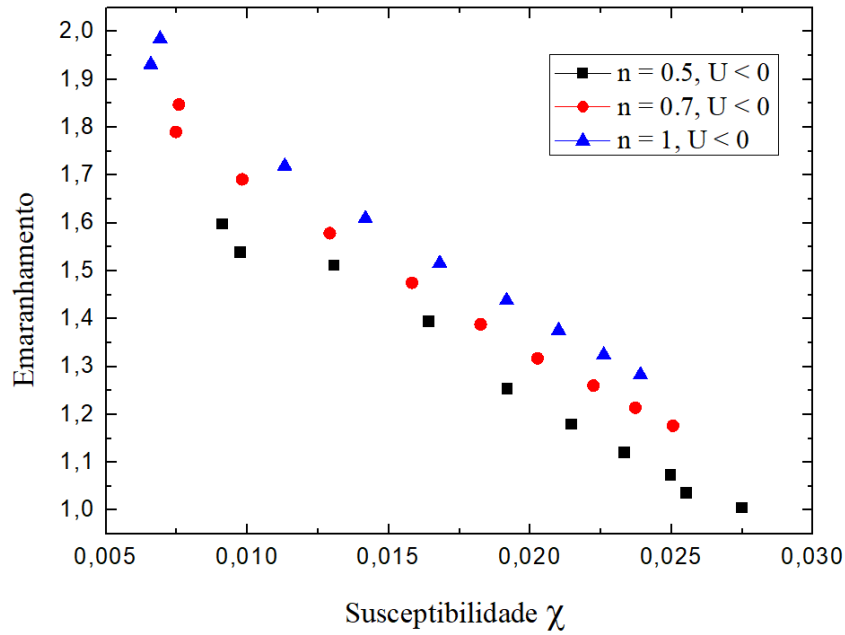


Figura 21 – Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética do regime atrativo. O comportamento linear observado pode indicar uma possível relação intrínseca entre emaranhamento e susceptibilidade magnética. Fonte: Próprio autor.

Para melhor compreender este impressionante comportamento linear entre S e χ no regime de superfluidez exótica, iniciamos uma análise analítica. Exploramos a energia FVC [32],

$$E^{FVC}(n, m, U) = -\frac{2\beta}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) \quad (7)$$

que é uma aproximação analítica para o funcional da energia do Hubbard. Como a susceptibilidade magnética é quantificada através da segunda derivada parcial da energia em função da magnetização, ao derivarmos a energia FVC, podemos obter uma expressão analítica para a susceptibilidade magnética. Na Eq. (7), os parâmetro $\beta(n, m, U)$ e $\gamma(n, m, U)$ são definidos por:

$$\beta(n, m, U) = \beta(U)^{\alpha(n, m, U)}, \quad (8)$$

$$\gamma(n, m, U) = 2 \exp \left[\frac{U^{1/2}}{1 - (m/n)^{3/2}} \right], \quad (9)$$

onde,

$$\alpha(n, m, U) = \left[\frac{n^2 - m^2}{n^{15/8}} \right]^{U^{1/3}} \quad (10)$$

Assim, a derivada parcial de segunda ordem da energia em relação a magnetização, torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E}{\partial m^2} = & -\frac{2\beta''}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) + \frac{2\beta'}{\pi} \cos\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) \left[\frac{\pi n \beta'}{\beta^2} \right] \\ & + \frac{2\beta'}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) \left[\frac{\pi}{\gamma} - \frac{\pi m \gamma'}{\gamma^2} \right] + \frac{2\beta'}{\pi} \cos\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \left[\frac{\pi n \beta'}{\beta^2} \right] \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) \\ & + \frac{2\beta}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \left[\frac{\pi n \beta'}{\beta^2} \right]^2 \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) - \frac{2\beta}{\pi} \cos\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) \left[\frac{2\pi n \beta'^2}{\beta^3} - \frac{\pi n \beta''}{\beta^2} \right] \\ & - \frac{2\beta}{\pi} \cos\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \left[\frac{\pi n \beta'}{\beta^2} \right] \sin\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) \left[\frac{\pi}{\gamma} - \frac{\pi m \gamma'}{\gamma^2} \right] \\ & + \frac{2\beta}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) \left[\frac{\pi}{\gamma} - \frac{\pi m \gamma'}{\gamma^2} \right]^2 \\ & + \frac{2\beta}{\pi} \sin\left(\frac{\pi n}{\beta}\right) \sin\left(\frac{\pi m}{\gamma}\right) \left[-\frac{\pi \gamma'}{\gamma^2} - \frac{\pi m \gamma''}{\gamma^2} - \frac{\pi \gamma'}{\gamma^2} + \frac{\pi 2m \gamma'^2}{\gamma^3} \right] \end{aligned} \quad (11)$$

Em que:

$$\beta' = \beta \alpha' \log(\beta) \quad (12)$$

$$\beta'' = \beta' \alpha' + \beta \alpha'' \quad (13)$$

Como a energia de Hubbard também é calculada em termos de itinerância, deve-se considerar a interação partícula-buraco, assim tornando possível descrever a

energia de um sistema atrativo em termos de um sistema repulsivo [33]. Dessa forma a Eq. (7) é descrita como:

$$E^{FVC_{atrativo}} = \frac{Un}{2} + \frac{3Um}{2} - \frac{2\beta}{\pi} \sin\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \quad (14)$$

Dessa forma a susceptibilidade magnética para o regime atrativo torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E}{\partial m^2} = & -\frac{2\beta''}{\pi} \sin\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \\ & -\frac{4\beta'}{\pi} \cos\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \left[-\frac{\pi\beta'}{\beta^2}\right] \left[-\frac{\pi}{\beta} + \frac{\pi m\beta'}{\beta^2}\right] \\ & +\frac{4\beta'}{\pi} \sin\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \sin\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \left[-\frac{\pi|n-1|\gamma'}{\gamma^2}\right] \\ & +\frac{2\beta}{\pi} \sin\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \left[-\frac{\pi\beta'}{\beta^2}\right]^2 \left[-\frac{\pi}{\beta} + \frac{\pi m\beta'}{\beta^2}\right]^2 \\ & +\frac{4\beta}{\pi} \cos\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \sin\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \left[-\frac{\pi\beta'}{\beta^2}\right] \left[-\frac{\pi}{\beta} + \frac{\pi m\beta'}{\beta^2}\right] \left[-\frac{\pi|n-1|\gamma'}{\gamma^2}\right] \\ & +\frac{2\beta'}{\pi} \sin\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \sin\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \left[-\frac{\pi|n-1|\gamma'}{\gamma^2}\right]^2 \\ & -\frac{2\beta}{\pi} \cos\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \cos\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \left[\frac{2\pi(1-m)(\beta')^2}{\beta^3} - \frac{\pi(1-m)\beta''}{\beta^2} + \frac{2\pi\beta'}{\beta^2}\right] \\ & -\frac{2\beta}{\pi} \sin\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \sin\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \left[-\frac{2\pi|n-1|(\gamma')^2}{\gamma^3}\right] \\ & -\frac{2\beta}{\pi} \sin\left(\frac{\pi(1-m)}{\beta}\right) \sin\left(\frac{\pi|n-1|}{\gamma}\right) \left[-\frac{\pi|n-1|\gamma''}{\gamma^2}\right] \end{aligned} \quad (15)$$

Podemos então analisar o comportamento da susceptibilidade magnética em função da interação U via a expressão analítica FVC e assim comparar com os resultados exatos obtidos via DMRG, como apresentamos na Figura 22. Observa-se que há grande divergência entre os resultados das duas metodologias. Isso reflete uma falha do funcional FVC em reproduzir a curvatura da energia em função da magnetização. Note que a expressão FVC foi construída e otimizada para reproduzir aproximadamente os valores numéricos da energia exata, não necessariamente a inclinação e a curvatura da curva. Por isso é natural que a FVC eventualmente sobre-estime e para outras magnetizações subestime os resultados exatos, o que irá refletir em inclinação e curvatura incorretas. Dessa forma, para se obter melhores resultados, seria necessário otimizar e refinar a performance do funcional FVC ou utilizar outros métodos, como por exemplo o recente uso de Redes Neurais Artificiais para a obtenção numérica da energia [34] mas com custo computacional bem inferior ao custo de DMRG.

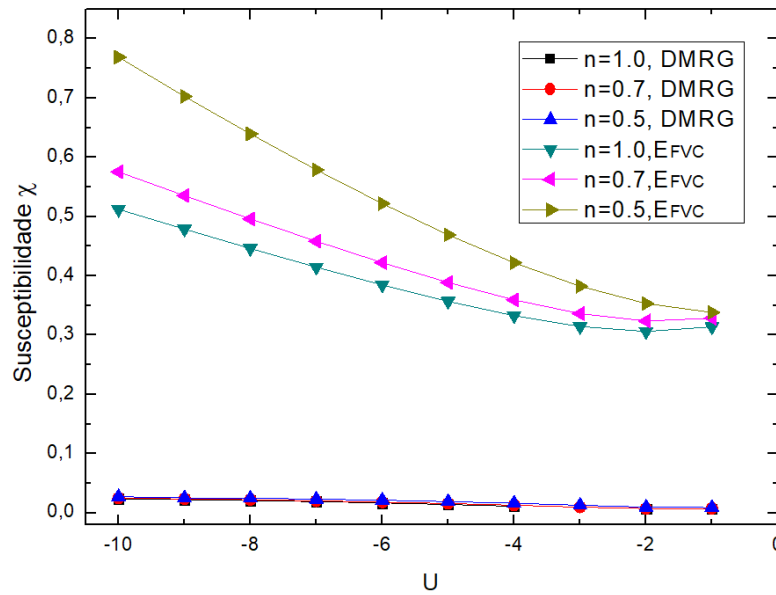


Figura 22 – Susceptibilidade magnética em função da interação U do regime atrativo obtida numericamente via DMRG e analiticamente via FVC. Fonte: Próprio autor.

Neste trabalho focamos, contudo, em explorar a relação intrínseca entre emaranhamento e susceptibilidade nos demais regimes de polarização. Ou seja, além da análise em $P=0$, consideramos também o emaranhamento e a susceptibilidade magnética para um superfluido exótico, com $P < P_c$, e para o regime normal, com $P > P_c$, como mostram as Figuras 23 a 26.

A principal diferença encontrada entre os regimes FFLO ($P < P_c$, Figs. 23 e 25) e normal ($P > P_c$, Figs. 24 e 26) é o comportamento das grandezas em relação à densidade média de partículas. Para $P < P_c$, regime de superfluidez exótica, ambos emaranhamento e susceptibilidade tem comportamento monotônico com a densidade: para um dado U o emaranhamento sempre aumenta com o aumento da densidade enquanto a susceptibilidade sempre diminui. Já no regime normal, $P > P_c$, ambos emaranhamento e susceptibilidade apresentam comportamento não-monotônico com a densidade.

Este comportamento não-monotônico do emaranhamento com a densidade já havia sido observado anteriormente [7] em sistemas metálicos, ou seja, para $U > 0$. Naquele caso a não-monotonicidade com n deve-se à aproximação do isolante de Mott, que ocorre em $n = 1$ e $U > 0$, e é caracterizado por um *gap* na energia, devido a repulsão da carga eletrônica. Em $n = 1$ o sistema tem seus graus de liberdade reduzidos, pois custa energia adicionar mais que uma partícula por sítio e, portanto, o emaranhamento é reduzido. Assim observa-se emaranhamento máximo para $n \sim 0,8$.

Aqui no nosso caso temos $U < 0$, então não é possível observar o *gap* de Mott. Mas para $P > P_c$ a população desbalanceada de spin gera uma redução análoga nos graus de liberdade do sistema, pois devido ao princípio de exclusão de Pauli não podemos acomodar mais do que um elétron com mesmo spin em um dado sítio. Portanto o efeito é muito parecido com o *gap* de Mott, mas em vez de ser devido a repulsão entre a carga eletrônica (devido a $U > 0$), pode ser pensado como uma repulsão entre os spins (devido ao princípio de Pauli). Denominamos assim esse regime como isolante *Mott-like*.

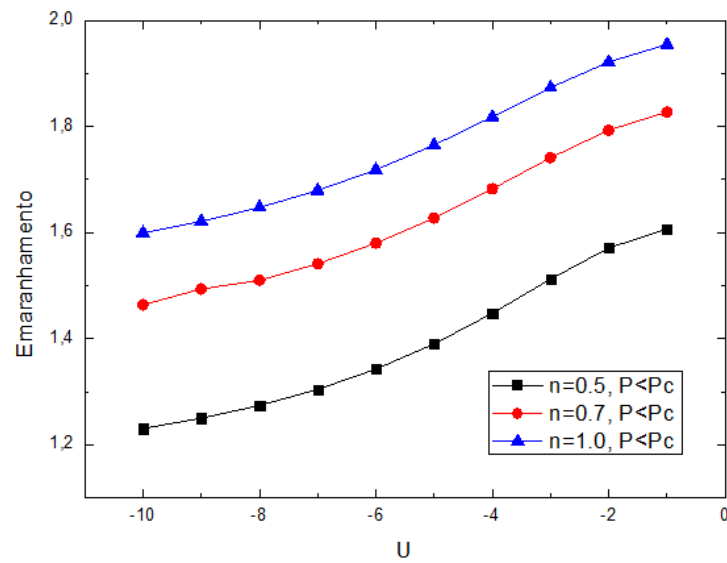


Figura 23 – Emaranhamento em função da interação U sob o regime $P < P_c$. Fonte: Próprio autor.

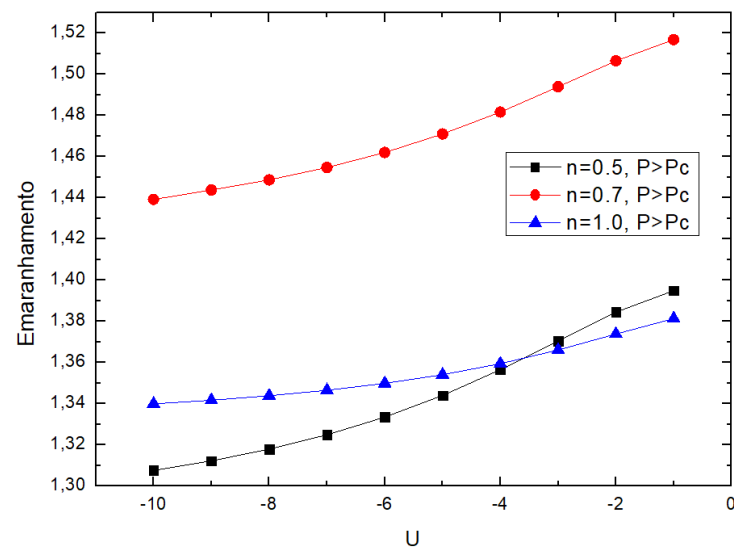


Figura 24 – Emaranhamento em função da interação U sob o regime $P > P_c$. Fonte: Próprio autor.

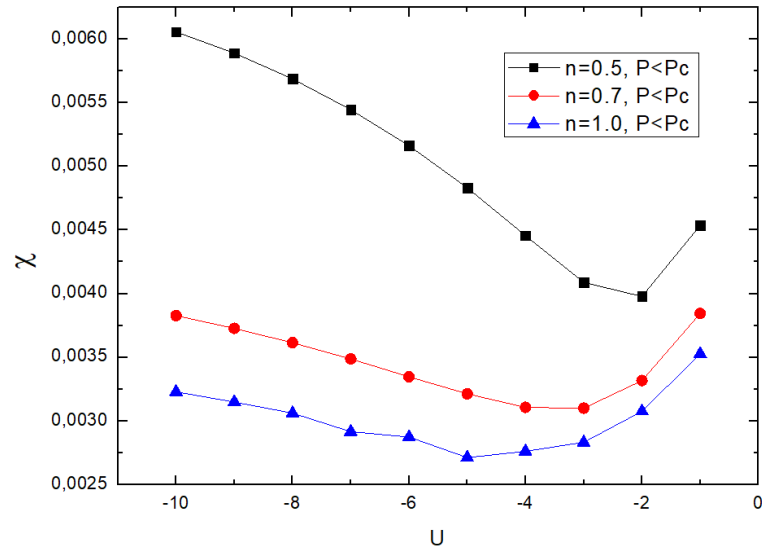


Figura 25 – Susceptibilidade magnética em função da interação U sob o regime $P < P_c$.

Fonte: Próprio autor.

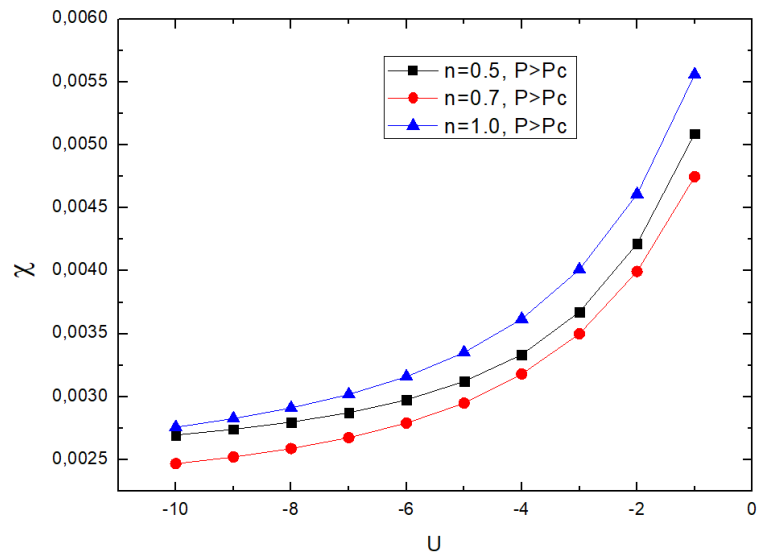


Figura 26 – Susceptibilidade magnética em função da interação U sob o regime $P > P_c$.

Fonte: Próprio autor.

Com relação à susceptibilidade, há uma grande diferença que merece destaque entre as Figs. 25 e 26 e o caso repulsivo ($U > 0$ na Fig. 20): o sistema atrativo é bem menos suscetível à polarização em todos os casos, isto é, para $P = 0$ ($U < 0$ na Fig. 20), $P < P_c$ e $P > P_c$. Mas enquanto a susceptibilidade decai monotonicamente com $|U|$ para $P > P_c$ (Fig. 24), há uma não-monotonicidade para $P < P_c$ (Fig. 25). Para $P < P_c$ e no regime fracamente atrativo a susceptibilidade cai, mas à medida que $|U|$ aumenta (conhecido *crossover* BCS-BEC) o sistema se torna mais suscetível à polarização.

Estes resultados confirmam a intrínseca diferença entre as fases superfluida exótica e normal não-superfluida.

Nas Figuras 27 e 28 apresentamos os mesmos resultados de $P < P_c$ e $P > P_c$ (correspondente às Figuras 23 a 26), porém relacionando emaranhamento em função da susceptibilidade, através do mapeamento via interação, de forma semelhante ao que fizemos anteriormente para $P=0$ (Fig. 21).

A Fig. 27 mostra que no regime exótico, $P < P_c$, a não-monotonicidade da susceptibilidade com a interação se reflete também em um comportamento não-monotônico entre emaranhamento e susceptibilidade. Mas de forma semelhante ao que obtivemos para o regime de superfluidez convencional, $P=0$, observamos que existe uma região em que as curvas são praticamente lineares. Ou seja, o comportamento linear entre emaranhamento e susceptibilidade está presente em qualquer regime superfluido, seja ele exótico ou convencional.

Em contraste, a Fig. 28 revela que no regime normal (não-superfluido), $P > P_c$, a relação entre emaranhamento e susceptibilidade é não-linear. Além disso a não-monotonicidade do emaranhamento com a densidade, observada anteriormente (Fig. 24) e associada ao fenômeno de *Mott-like*, se reflete em um comportamento igualmente não-monotônico na relação entre emaranhamento e susceptibilidade em função da densidade.

Todos esses resultados comprovam, portanto, que o comportamento linear entre emaranhamento e susceptibilidade magnética não é um artefato ou um caso específico, mas que se manifesta em todo tipo de superfluido, convencional e exótico, ao menos em alguns regimes de parâmetros. Isso sugere portanto que experimentos com materiais superfluidos poderiam ser usados para medida de emaranhamento através da medição de susceptibilidade magnética.

Adicionalmente, nossos resultados revelam que é possível distinguir claramente as fases FFLO e normal através da análise do comportamento de emaranhamento e de susceptibilidade, ambos constituindo-se portanto uma maneira de testar/verificar a fase de sistemas experimentalmente.

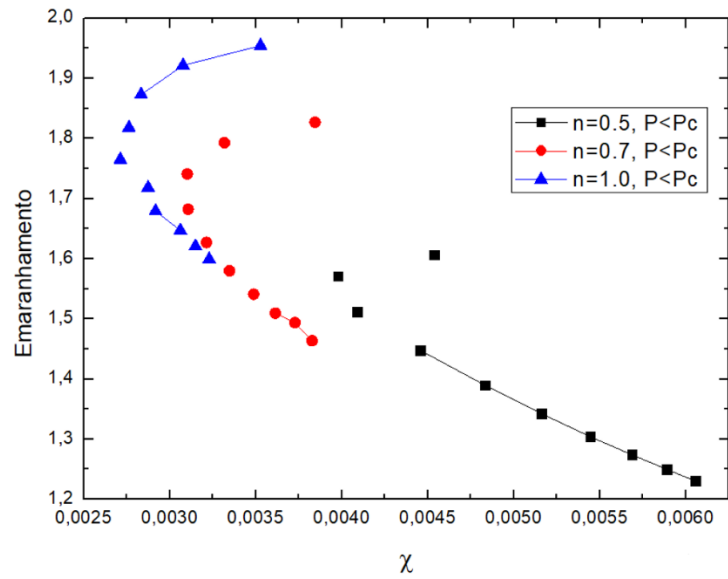


Figura 27 – Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética sob o regime $P < P_c$. Fonte: Próprio autor.

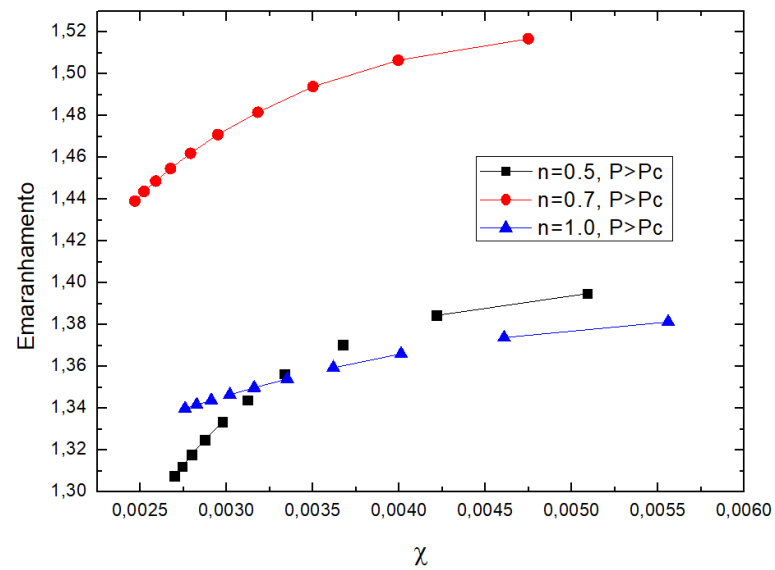


Figura 28 – Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética sob o regime $P > P_c$. Fonte: Próprio autor.

5 Conclusões

Nossos resultados demonstram que o emaranhamento de sistemas superfluidos é um bom parâmetro para a detecção da fase FFLO, já que apresenta um comportamento não-monotônico à medida que a polarização se intensifica. Além disso, a análise da relação entre emaranhamento e susceptibilidade mostrou uma surpreendente relação linear entre as grandezas, tanto no regime de superfluidade convencional quanto no regime FFLO, em contraste com o decaimento exponencial de sistemas magnéticos e o crescimento logarítmico na fase normal não-superfluida. Este resultado é de grande importância do ponto de vista experimental, em que se tem acesso facilmente à susceptibilidade magnética, mas cuja medição experimental de emaranhamento está em atual debate. O relacionamento linear entre as grandezas sugere que é possível estimar uma a partir da outra, a menos de um fator multiplicativo.

6 Bibliografia

- [1] H. K. Onnes, The Superconductivity of Mercury, Comm. Phys. Lab. Univ., Leiden, 122-124 (1911).
- [2] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Microscopic Theory of superconductivity, Phys. Rev. 106, 162 (1957).
- [3] J. F. Annett, Superconductivity, Superfluids and Condensates, Oxford University Press (2004).
- [4] M. Tinkham, Introduction to superconductivity, Dover Books on Physics, Vol I (2004).
- [5] P. Fulde and R. A. Ferrell, Superconductivity in a Strong Spin-Exchange Field Phys. Rev. 135, A550 (1964).

- [6] A. Larkin and Y. N. Ovchinnikov, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 47, 1136, Sov. Phys. JETP 20, 762 (1965).
- [7] V. V. França, D. Hördlein and A. Buchleitner, Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov critical polarization in one-dimensional fermionic optical lattices, Phys. Rev. A 86, 033622 (2012).
- [8] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki, Quantum entanglement, Rev. Mod. Phys. 81, 865, (2009).
- [9] V. V. França and K. Capelle, Entanglement in Spatially Inhomogeneous Many-Fermion Systems, Phys. Rev. Lett. 100, 070403 (2008).
- [10] Y. Xia, P. Yang. One-dimensional Nanostructures: Synthesis, Characterization and Applications. Advanced Materials Rev. v. 15, n.5 (2003).
- [11] S. J. Gu, S. S. Deng, Y. Q. Li, H. Q. Lin, Entanglement and quantum phase transition in the extended Hubbard model. Physical Review Letters, v. 93, n.8 (2004).
- [12] D. Larsson, H. Johannesson, Entanglement Scaling in the One-Dimensional Hubbard Model at Criticality, Phys. Rev. Lett. 95, n.19, 196406 (2005).
- [13] W. Meissner and R. Ochsenfeld, A new effect when superconductivity occurs, Natural Sciences, vol. 21, Issue 44, pp. 787–788 (1933).
- [14] F. Giustino, Electron-phonon interactions from first principles, Rev. Mod. Phys. 89, 015003 (2017).
- [15] Pauli, W., On the connexion between the completion of electron groups in an atom with the complex structure of spectra". In: TER HAAR, D. (ed.). The old quantum theory. Oxford, Pergamon, p. 184-203 (1967).
- [16] J. Wang, Y. Che, L. Zhang and Q. Chen, Instability of Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov states in atomic Fermi gases in three and two dimensions, Phys. Rev. B 97, 134513 (2018).
- [17] A. L. Malvezzi, "An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems," Brazilian journal of physics, vol. 33, no. 1, pp. 55–72 (2003).
- [18] M. Tezuka and M. Ueda, Density-Matrix Renormalization Group Study of Trapped Imbalanced Fermi Condensates, Phys. Rev. Lett. 100, 110403 (2008).

- [19] W. Kohn, Nobel Lecture: Electronic structure of matter - wave functions and density functionals, *Rev. Mod. Phys.* 71, 1253 (1999).
- [20] P. Hohenberg and W. Kohn, Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.* 136, B864 (1964).
- [21] V. V. França, Entanglement and exotic superfluidity in spin-imbalanced lattices, *Physica A* 475, 82 (2017).
- [22] D. Page, M. Prakash, J. M. Lattimer, A. W. Steiner. Rapid Cooling of the Neutron Star in Cassiopeia A Triggered by Neutron Superfluidity in Dense Matter. *Phys. Rev. Lett* 106: 081101, (2011)
- [23] Hessels J.W.T., Ransom S. M. et al (2006) A Radio Pulsar Spinning at 716 Hz, *Science*, 311, (1901).
- [24] J. Hubbard, Electron Correlations in Narrow Energy Bands *Proc. R. Soc. London, Ser. A* 276, 238 (1963).
- [25] J. P. Coe, V. V. França, and I. D'Amico, Hubbard model as an approximation to the entanglement in nanostructures, *Phys. Rev. A* 81, 052321 (2010).
- [26] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh, and V. Vedral, Entanglement in many-body systems, *Rev. Mod. Phys.* 80, 517 (2008).
- [27] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen, Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? *Phys. Rev.* 47, 777 (1935).
- [28] V. V. França, K. Capelle, Entanglement of strongly interacting low-dimensional fermions in metallic, superfluid, and antiferromagnetic insulating systems, *Phys. Rev. A* 74, 042325 (2006).
- [29] Ghosh, S. et al. Entangled quantum state of magnetic dipoles. *Nature*, v. 425, p.48 (2003).
- [30] Berger, L.; Friedberger, S. A.; Schriempf, J. T. Magnetic susceptibility of $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$ at low temperature. *Physical Review*, v. 132, n. 3, p. 1057 (1963).
- [31] Brunkner Caslav; Vedral, V.; Zeilinger, A. Crucial role of quantum entanglement in bulk properties of solids. *Physical Review A*, v.73, n. 1, p. 012110 (2006).

[32] V. V. França; D. Vieira; K. Capelle, Simple parameterization for the ground-state energy of the infinite Hubbard chain incorporating Mott physics, spin-dependent phenomena and spatial inhomogeneity, *New Journal of Physics* 14, 073021 (2012).

[33] Elliott H. Lieb.; F. Y. W. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett.* 21, v.20, n.25 (1968).

[34] C. A. Custodio; E. R. Filletti; V. V. França. Artificial neural networks for density-functional optimizations in fermionic systems. *Scientific Reports* 9, 1886 (2019).