

UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA 'JÚLIO DE MESQUITA FILHO'

TATIANA ROSSAFA PAULETTI

MEDIDAS DE EMARANHAMENTO PARA DETECÇÃO DE TRANSIÇÕES DE FASE
QUÂNTICAS EM SUPERREDES

ARARAQUARA SP

2021

TATIANA ROSSAFA PAULETTI

MEDIDAS DE EMARANHAMENTO PARA DETECÇÃO DE TRANSIÇÕES DE FASE
QUÂNTICAS EM SUPERREDES

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Mestre em Química no Programa de Pós-Graduação em Química, Instituto de Química de Araraquara, da Universidade Estadual Paulista 'Júlio de Mesquita Filho'.

Área de concentração: *Nanoestruturas e Nanomateriais*.

Orientador: Vivian Vanessa França.

ARARAQUARA SP

2021

FICHA CATALOGRÁFICA

P326m Pauletti, Tatiana Rossafa
Medidas de emaranhamento para detecção de transições
de fase quânticas em superredes / Tatiana Rossafa Pauletti. –
Araraquara : [s.n.], 2021
60 f. : il.

Dissertação (mestrado) – Universidade Estadual Paulista,
Instituto de Química
Orientador: Vivian Vanessa França

1. Matéria condensada. 2. Nanoestruturas.
3. Superestrutura como material. 4. Entropia (Teoria da
informação). 5. Transformações de fase (Física estatística).
I. Título.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: Medidas de emaranhamento para detecção de transições de fase quânticas em superredes.

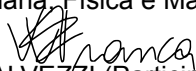
AUTORA: TATIANA ROSSAFA PAULETTI

ORIENTADORA: VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN

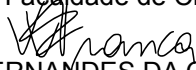
Aprovada como parte das exigências para obtenção do Título de Mestra em QUÍMICA, pela Comissão Examinadora:



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



Prof. Dr. ANDRE LUIZ MALVEZZI (Participação Virtual)
Departamento de Física / Faculdade de Ciências de Bauru - UNESP - Bauru



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

Araraquara, 06 de agosto de 2021

Aos meus queridos pais.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por nunca me abandonar!

Agradeço à Vivian, orientadora, pelos valiosos anos de aprendizado, dedicação e amizade. Agradeço principalmente pela paciência e pelo modelo de pesquisadora de excelência mostrado durante este tempo.

Agradeço a todos os antigos e novos membros do laboratório de simulações quânticas: Dani, Magali, Caio, Gabi, Tati Picoli, Gui, Murilo, Mari e Lucas. Principalmente ao Guilherme Canella, meu irmão de laboratório, que me ajudou durante todo o período de iniciação científica e mestrado com minhas (milhares) de dúvidas sobre programação.

Agradeço aos meus pais, Carla e Selmo, por nunca me deixarem desistir e sempre comemorar minhas pequenas e grandes vitórias, reconhecendo muito mais elas do que eu mesma. Se este trabalho foi concluído foi devido a vocês.

Agradeço à Beatriz Pauletti, minha irmã, por sempre me fazer sorrir e me apoiar em todos os momentos de minha vida.

Agradeço ao Igor, minha metade artística, por deixar meus dias mais alegres e coloridos com sua presença, apoio e amor.

Agradeço as minhas queridas avós, Maria Marina e Terezinha (em memória), por todos os momentos felizes da minha infância e pelos demais que se tornaram mais especiais com a presença de vocês! Sem dúvidas, vocês sempre serão exemplos de mulheres fortes que tenho orgulho de chamar de avó. À minha avó Terezinha, sempre sentirei sua falta.

Agradeço à minha família “buscapé”, por todo amor e carinho!

Agradeço aos meus amigos: Satiro, Maybi, Vitória, Dani, Hugo, André, Raissa, Juca e Lu pelos ótimos momentos e por sempre me apoiarem e me incentivarem a conquistar os meus sonhos.

Agradeço à família Vitulli, por todo amor e carinho. Em especial, à querida Helena (em memória), que trouxe em seus sorrisos amor e acolhimento, além de ótimas histórias acompanhadas com um bolinho.

Um agradecimento especial aos funcionários do GRID-UNESP pelo suporte e eficiência.

Agradeço aos funcionários do IQ-UNESP pela dedicação e trabalho duro, principalmente durante esta pandemia.

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

RESUMO

O emaranhamento, um dos fenômenos mais intrigantes da mecânica quântica, tornou-se uma grandeza chave que desempenha papel fundamental em vários tipos de processamento de informação quântica, por exemplo, tanto em protocolos de computador quântico e em estudos de nanoestruturas, como na detecção de transições de fase quântica e na investigação de propriedades de transporte. Assim, é fundamental determinar medidas adequadas para quantificar o grau de emaranhamento em um determinado sistema, bem como compreender seus benefícios e limitações. Este trabalho tem como objetivo comparar duas ferramentas utilizadas para medir o grau de emaranhamento, a entropia de von Neumann e a entropia linear. Essas grandezas foram investigadas em sistemas homogêneos e em superredes unidimensionais, descritos pelo modelo de Hubbard através dos métodos de DMRG (Grupo de Renormalização da Matriz Densidade) e DFT (Teoria do Funcional da Densidade). Encontramos diferenças na sensibilidade das duas medidas de emaranhamento às transições de fase quânticas.

Palavras-chave: Emaranhamento. Superredes. Entropia Linear. Entropia de von Neumann.

ABSTRACT

Entanglement, one of the most intriguing phenomena of quantum mechanics, has become a key quantity which plays a fundamental role in various types of quantum information processing, for example in quantum computer protocols and also in studies of nanomaterials, as for the detection of quantum phase transitions and for the investigation of transport properties. Therefore it is crucial to determine proper measures for quantifying the degree of entanglement in a given system, as well as to understand their benefits and limitations. This work aims to compare two tools used to measure the degree of entanglement, namely the von Neumann entropy and the linear entropy. These quantities were investigated in homogeneous systems and in superlattices as described by the Hubbard model, via DMRG (Density Matrix Renormalization Group) and DFT (Density Functional Theory). We found differences on the sensitivity of the two entanglement measures to the quantum phase transitions.

Keywords: Entanglement. Superlattices. Linear Entropy. von Neumann Entropy.

LISTA DE FIGURAS

2.1	Primeira foto realizada do fenômeno de emaranhamento quântico em que é possível observar as fases adquiridas com os quatro filtros de fase com diferentes orientações, $\Theta_2 = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ$, que são necessárias para realizar o teste de Bell. Fonte: Universidade de Glasgow/Science Advances [20].	16
2.2	Ilustração do modelo de Hubbard para uma cadeia de L sítios em que U_i é a interação Coulombiana intra-sítio, t_{ij} é a itinerância das partículas entre os sítios vizinhos em que $j = i \pm 1$. Fonte: Próprio autor.	21
2.3	Representação de um superbloco BBBB, subdividido em blocos (B). Estes blocos formam um "Sistema" (BB) e um "Universo". Modificado de [52].	26
2.4	Ilustração do método DMRG de tamanho finito para uma cadeia de 10 sítios com condição de contorno aberta (OBS). Modificado de [52].	27
2.5	Ciclo auto-consistente de Kohn e Sham. Fonte: Próprio autor.	33
3.1	Desvio percentual da entropia por sítio, em um sistema repulsivo de $U=2$	37
3.2	Desvio percentual da entropia por sítio, em um sistema repulsivo de $U=2$	39
3.3	Esquema de uma superrede de modulação $\Delta V = V_1 - V_0$. Fonte: Próprio autor.	40
3.4	Representação de um sistema homogêneo à esquerda e as distribuições de impurezas em superredes à direita. Modificado de [56].	40
3.5	Desvio percentual para superredes de $n=0.55$ e 36 sítios com $p:q=2:7, 3:6$ e $4:5$ em função da interação U	41
4.1	Análise das oscilações de Friedel para sistemas em $n=0.2$ em que as cadeias possuem $L=10, 40$ e 80 sítios sob variação da interação coulombiana fracamente ($U=2$), intermedária ($U=4$) e fortemente ($U=8$) interagente.	42
4.2	Emaranhamento de um único sítio com o restante da cadeia em função da posição deste sítio para uma cadeia de 10 sítios em sistemas repulsivos ($U > 0$).	44
4.3	Emaranhamento de um único sítio com o restante da cadeia em função da posição deste sítio para uma cadeia de 40 sítios em sistemas repulsivos ($U > 0$).	45
4.4	Emaranhamento de um único sítio com o restante da cadeia em função da posição deste sítio para uma cadeia de 80 sítios em sistemas repulsivos ($U > 0$).	46

4.5	Emaranhamento calculado via entropia linear e von Neumann para uma cadeia de 40 sítios em função da densidade para $U=4$ (parte superior) e sua primeira derivada (parte inferior)..	47
4.6	Comparação entre a entropia média, von Neumann (acima) e linear (abaixo), em função da cadeia (L).	48
5.1	Representação de uma superrede 2:7 via poços potenciais. Fonte: Próprio autor.	49
5.2	Análise comparativa dos efeitos da variação das modulações sobre a superrede com $U=4t$, $V=4t$, $L=36$ e $n=0.55$	50
5.3	Emaranhamento médio de superredes de 36 sítios e $n=0.55$ em função de interações repulsivas.	50
5.4	Comparação entre as entropias médias em função da interação coulombiana (U) para superredes com $n=0.55$ e 36 sítios de $p:q= 2:7$, $3:6$ e $4:5$, sob variação do potencial externo (V).	51
5.5	Comparação entre as entropias médias em função da interação coulombiana (U) para uma superrede 4:5 com $n=0.55$ e 36 sítios, sob um $V=2.5$	52

LISTA DE ACRÔNIMOS

DFT	Teoria do Funcional da Densidade
DMRG	Grupo de Renormalização da Matriz Densidade
EPR	Einstein, Podolsky e Rosen, artigo de 1935
NRG	Grupo de Renormalização Numérica
LDA	Aproximação de Densidade Local
LSOC	Parametrização para a energia do modelo de Hubbard
FN	Funcional Numericamente Exato

LISTA DE SÍMBOLOS

H	Espaço de Hilbert
Ψ	Função de onda
S	Entropia de von Neumann
Tr	Traço
ρ	Matriz densidade
$\hat{\rho}$	Operador densidade
p	Probabilidade de ocorrência do evento
I	Incerteza do evento
λ_i	Autovalores da matriz densidade
d	Dimensão
B	Entropia Linear
U	Interação Coulombiana
L	Número de sítios em uma cadeia
t_{ij}	Parâmetro de hopping
V_{ext}	Potencial externo
σ	Spin
n	Densidade total
N	Número de partículas referente às partículas $N \uparrow$ e $N \downarrow$
$\hat{H}$	Hamiltoniano
$H.c.$	Hermitiniano conjugado
∇	Laplaciano
n_0	Densidade no estado fundamental
E_0	Energia do estado fundamental
T	Energia cinética
V	Energia Potencial externa
F	Funcional Universal
E_H	Energia de Hartree
E_{XC}	Energia de troca e correlação
V_{KS}	Potencial de Kohn-Sham
V_H	Potencial de Hartree
V_{XC}	Potencial de Troca e Correlação
Φ	Orbitais de Kohn-Sham
$\hbar$	Constante de Planck
m	Massa da partícula descrita
n_{KS}	Densidade de Kohn-Sham

W	Probabilidades de ocupação em cada sítio $W_{\uparrow}, W_{\downarrow}, W_0, W_2$
E	Energia Total
e^{LSOC}	Parametrização LSOC para a energia do modelo de Hubbard
e_0	Energia do estado fundamental por sítio
M	Magnetização do sistema
$J_0(x)J_1(x)$	Funções de Bessel
Δ	Critério de convergência

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	13
2	FUDAMENTOS TEÓRICOS	16
2.1	EMARANHAMENTO	16
2.2	ENTROPIA	17
2.2.1	Entropia de von Neumann.	18
2.2.2	Entropia Linear	20
2.3	MODELO DE HUBBARD	21
2.4	TRANSIÇÕES DE FASE QUÂNTICAS	23
2.4.1	Transição Metal- Isolante	24
2.5	MÉTODOS	25
2.5.1	Grupo de Renormalização da Matriz de Densidade - DMRG.	25
2.5.2	Teoria Funcional da Densidade - DFT	28
3	DESEMPENHO DA DFT EM RELAÇÃO À DMRG.	36
3.1	PERFORMANCE DA DFT EM SISTEMAS HOMOGÊNEOS.	36
3.2	PERFORMANCE DA DFT EM SUPERREDES.	40
4	SISTEMAS HOMOGÊNEOS	42
5	SUPERREDES	49
6	CONCLUSÃO	53
7	REFERÊNCIAS	54

1 INTRODUÇÃO

O emaranhamento é tratado como uma das propriedades mais fascinantes e menos intuitivas da mecânica quântica. Tal propriedade faz uma distinção fundamental entre o mundo clássico e o mundo quântico e tem sido utilizada na implementação de algoritmos quânticos, em protocolos quânticos para computadores, na detecção de transições de fase quânticas e na caracterização de diversas propriedades de transporte [1,2].

Erwin Schrödinger [3] após a divulgação do famoso artigo EPR [4], demonstrou a imprevisibilidade da física quântica através do conceito de superposição. Este conceito é o ponto central da definição de emaranhamento em que o estado quântico de um sistema é dado por uma superposição de possíveis estados, cada qual com uma certa probabilidade de ser obtido em uma medida. Através destes artigos e de outros diversos estudos, como de Bell [5] e Werner [6], foi possível chegar a uma definição de emaranhamento, que matematicamente é descrito como a impossibilidade de fatorização dos estados dos subsistemas emaranhados. Esta definição nos demonstra que quando dois ou mais subsistemas estão emaranhados uma medida em um dos subsistemas instantaneamente afetará os demais subsistemas, independente da distância em que eles estão.

O emaranhamento é uma propriedade intrínseca da mecânica quântica e não possui nenhum análogo na física clássica. Devido a esta propriedade há um expressivo aumento das pesquisas no contexto da Informação Quântica desde a década de 80, o que propiciou o desenvolvimento de trabalhos importantes, tanto relacionados à compreensão de sua existência quanto em experimentos mais recentes, como o teletransporte quântico [7] e o computador quântico [8]. Além disso, o emaranhamento é também uma ótima ferramenta para detecção de transições de fase quânticas que têm sido explorada em sistemas desordenados [9,10] e superfluidos exóticos [11,12].

Contudo, para quantificar o emaranhamento em sistemas quânticos complexos via métodos envolvendo a função de onda do sistema nos deparamos com a conhecida barreira exponencial. A barreira exponencial é uma expressão em que os parâmetros necessários para descrever o sistema cresce exponencialmente com o número de partículas interagentes, impossibilitando os cálculos por métodos tradicionais. Uma estimativa da complexidade computacional de realizar este sistema é imaginarmos que um sistema Ψ em que em cada coordenada é descrita por 10 pontos de uma malha, porém, com N -elétrons presentes nesta malha o problema torna-se 3^N , tornando o número de parâmetros necessários para a descrição do problema igual a 10^{3N} . Portanto, estes valores crescem numa escala que impossibilita qualquer resolução exata via equação de Schrödinger.

Tendo em vista as dificuldades de se calcular sistemas quânticos complexos, modelos tem sido desenvolvidos para facilitar os cálculos através da simplificação do hamiltoniano. Para o

emaranhamento em sistemas sólidos e em átomos ultrafrios o modelo de Hubbard tem ganhado grande repercussão, uma vez que é uma simplificação para a descrição de elétrons itinerantes e interagentes.

Entretanto, mesmo com o hamiltoniano simplificado métodos exatos como a Grupo de Renormalização da Matriz de Densidade (DMRG) ainda se tornam bastante custosos, uma vez que seu método trata-se da redução da matriz densidade. A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) então torna-se uma ferramenta alternativa para sistemas de muitos corpos uma vez que prevê uma relação unívoca entre a função de onda e a densidade eletrônica, tornando um problema de $3N$ variáveis em um problema mais simples de apenas três variáveis (x , y e z). Esta simplificação faz grande diferença do ponto de vista do custo computacional, como veremos adiante na comparação entre cálculos via DFT e DMRG [13].

Neste trabalho investigaremos os sistemas bipartidos em estados puros descritos pelo modelo de Hubbard através dos métodos DMRG e DFT. Como ferramenta para a obtenção do emaranhamento utilizaremos a entropia linear e a entropia de von Neumann. Estudos recentes demonstram que as entropias de von Neumann e linear não possuem diferenças qualitativas entre si, o que para os autores se deve ao fato de que a entropia linear corresponde ao primeiro termo da expansão da entropia de von Neumann [14-18]. Porém, nenhum estudo até o momento realizou uma análise quantitativa das possíveis diferenças entre as entropias, em especial quanto à performance na detecção de transições de fase quânticas.

Este trabalho traz, portanto, uma análise comparativa a respeito do comportamento das distintas medidas de emaranhamento, entropia de von Neumann e entropia linear, em nanoestruturas homogêneas e em superredes. Através da compreensão de suas diferenças, vantagens e desvantagens será possível guiar futuros trabalhos quanto à escolha da medida mais adequada, dependendo do sistema e da aplicação desejada.

Assim, iniciaremos este trabalho através de um estudo teórico, que será apresentado no Capítulo 2. Introduziremos o conceito de emaranhamento quântico assim como as ferramentas utilizadas para mensurá-lo, a entropia de von Neumann e a entropia linear. Em seguida, será apresentado o modelo de Hubbard unidimensional que será usado como *framework* nesta pesquisa. Por fim, uma breve introdução sobre a DMRG seguido da DFT que será acompanhada pelos conceitos de aproximação de densidade local (LDA), o sistema de Kohn-Sham e da aproximação LSOC [19].

No Capítulo 3 apresentaremos os resultados da análise do desempenho da DFT em relação à DMRG aplicados em sistemas homogêneos e em superredes, buscando compreender suas diferenças para a escolha mais adequada do método para cada sistema.

No Capítulo 4, através de um estudo dos sistemas homogêneos iniciaremos nossa análise comparativa das entropias de von Neumann e linear médias sob este sistema com o intuito de compreender seus efeitos nas transições de fase quânticas.

Em seguida, no Capítulo 5 serão introduzidas as superredes e analisaremos o comportamento das entropias em diferentes modulações e periodicidades das superredes, buscando compreender suas diferenças. Por fim, no Capítulo 6 serão apresentadas as conclusões.

2 FUDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 EMARANHAMENTO

O emaranhamento é um ingrediente indispensável no desenvolvimento de tecnologias quânticas, por exemplo, na codificação superdensa, no teletransporte quântico e na criptografia quântica. Este fenômeno, sendo uma propriedade fundamental da natureza, foi fotografado pela primeira vez em 2019 pelos pesquisadores Moreau, Toninelli e Colaboradores da Universidade de Glasgow [20], como mostrado na Fig. (2.1).

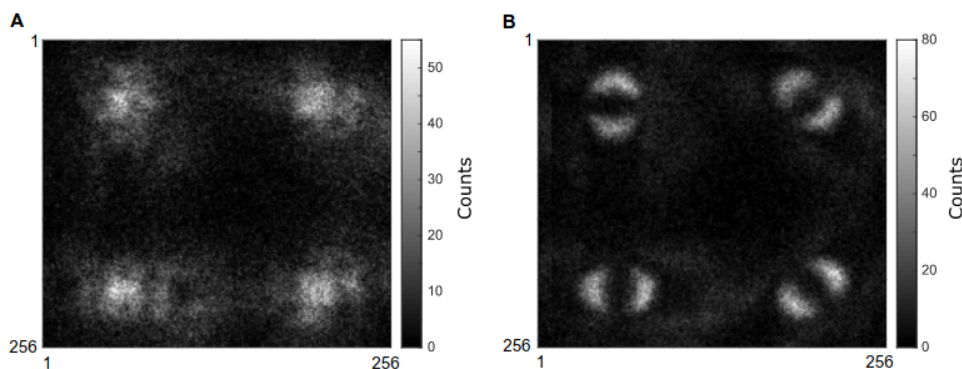


Figura 2.1: Primeira foto realizada do fenômeno de emaranhamento quântico em que é possível observar as fases adquiridas com os quatro filtros de fase com diferentes orientações, $\Theta_2 = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ$, que são necessárias para realizar o teste de Bell. Fonte: Universidade de Glasgow/Science Advances [20].

Porém, o que hoje é visto com encanto, no século XX era visto como uma "ação fantasmagórica à distância" que é intrínseca à superposição de estados do espaço de Hilbert. O espaço de Hilbert H , é definido como um espaço vetorial completo, complexo e provido de métrica (distância entre os vetores) [1, 2]. Assim, qualquer combinação linear entre os dois elementos deste espaço, H_A e H_B , por exemplo, é também um elemento pertencente a este espaço vetorial. Devido à sua grande importância esta propriedade agora adquire o status de princípio da superposição ou da linearidade da mecânica quântica [2].

Já em 1935, a discussão combinando o princípio de superposição com a teoria de localidade de um sistema físico, o famoso artigo de A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen (EPR) [4] demonstra que o emaranhamento de uma única partícula seria improvável, ou que as condições da realidade física vindas da mecânica clássica não eram compatíveis com a mecânica quântica.

Mesmo após a resolução do paradoxo EPR, pelo trabalho de J.Bell [5], foi somente com surgimento da teoria da informação quântica que o emaranhamento ganhou uma definição oficial, por Werner em 1989 [6].

Podemos descrever a definição de Werner com um exemplo simples, imagine um sistema subdividido em três subsistemas A, B e C, e estes estão emaranhados. Ao realizarmos uma medida em um destes subsistemas os demais serão afetados instantaneamente independente

da distância entre eles. Essa medida nos informará, com base no grau de emaranhamento dos subsistemas, se é possível obter mais ou menos informações dos estados dos demais subsistemas.

Na forma matemática esta definição reflete a impossibilidade de fatorização dos estados dos subsistemas emaranhados, ou seja [1, 2, 21]

$$|\Psi_{ABC}\rangle \neq |\Psi_A\rangle \otimes |\Psi_B\rangle \otimes |\Psi_C\rangle. \quad (2.1)$$

No caso da Eq. (2.1) os subsistemas A, B e C podem representar três partículas, um conjunto de partículas ou até mesmo diferentes graus de liberdade de uma mesma partícula do sistema ABC, em que ao realizarmos uma medida em A instantaneamente afetará os subsistemas BC.

Presupondo que há mais de três subsistemas em um sistema é necessário salientar que o emaranhamento não se limita a apenas estes subsistemas, como exemplificado anteriormente, mas sim a infinitos, não tendo um valor limite determinado [1, 2]. Assim, para medir a informação proveniente do sistema $|\Psi_{ABC}\rangle$ é necessário entender que dependendo do quão emaranhado os subsistemas estiverem é possível obter uma quantidade de informação maior ou menor grau de emaranhamento.

Para sistemas bipartidos AB em estado total puro, compreendemos bem a definição de emaranhamento, mas é possível quantificar o grau de emaranhamento?

Tal questão pode ser respondida através do trabalho de Vedral e colaboradores (1997) [22] onde eles demonstram que a entropia de von Neumann é uma forma adequada de se medir o emaranhamento em sistemas bipartidos em estado total puro, conforme descrito detalhadamente a seguir.

2.2 ENTROPIA

Shannon em seu artigo [23] faz o seguinte questionamento: *Podemos definir a quantidade que medirá, em certo sentido, quanta informação é "produzida" por tal processo, ou melhor, que tipo de informação é produzida?*

Esta questão com relação a um estado puro bipartite emaranhado pode ser respondida através da entropia. Pela definição de Shannon [23] a entropia pode ser compreendida como uma ferramenta para quantificar os recursos necessários para armazenar informação.

Deste modo introduziremos duas entropias que serão úteis para mensurar o emaranhamento do nosso sistema. São elas, a entropia de von Neumann, também conhecida como entropia de emaranhamento, introduzida por Bennett et al. [24] e que por consenso tornou-se a ferramenta mais adequada para medir o grau de emaranhamento em sistemas puros bipartites. A segunda entropia trata-se da entropia linear que corresponde ao termo linear da expansão da entropia de von Neumann.

2.2.1 Entropia de von Neumann

Originada da entropia de Shannon [23], através do conceito oriundo da Teoria da Informação, a entropia de von Neumann ou entropia de emaranhamento é uma medida de falta de conhecimento [25-27], ou de incerteza, dada pela expressão:

$$S(\rho) = -\text{tr}[\rho_A \log_2 \rho_A], \quad (2.2)$$

em que $\rho_A \equiv \text{tr}_B[\rho]$ é a matriz densidade reduzida do subsistema A, obtida pelo traço em B da matriz densidade do sistema total.

Por sua definição partir da equação de Shannon podemos obter a Eq. (2.2) sabendo que a entropia é a medida de falta de conhecimento [25] e que a informação I mensurada por ela deve estar relacionada com a incerteza de um evento ocorrer ou não,

$$I \equiv \frac{1}{p} \quad (2.3)$$

sendo p a probabilidade de ocorrência do evento A.

Uma das propriedades básicas que a entropia deve seguir na teoria da informação é que, para eventos independentes, deve ser aditiva e desta forma tem-se através da teoria das probabilidades que o conjunto de eventos independentes é o produto das probabilidades individuais, ou seja [25]

$$p_{12} = p_1 \times p_2. \quad (2.4)$$

Porém, relacionando este raciocínio a Eq. (2.3) temos,

$$I_{12} = \frac{1}{p_{12}} = \frac{1}{p_1 p_2} \neq \frac{1}{p_1} + \frac{1}{p_2} = I_1 + I_2, \quad (2.5)$$

esta equação implica que a probabilidade conjunta de eventos independentes é o produto das probabilidades individuais, ou seja, $p_{12} = p_1 \times p_2$, como descrito na Eq. (2.4).

Imagine que o evento A descrito anteriormente possua um conjunto de valores discretos de quantidade finita n que possuem uma certa probabilidade de ocorrer de p_i . Um exemplo é um *spin* que pode ter orientação $+\frac{1}{2}$ e orientação $-\frac{1}{2}$. A incerteza média do evento A ocorrer pode ser obtida pela informação média dos eventos individuais em que a distribuição de probabilidade é dada pela equação,

$$H(\{p_i\}) \equiv \sum_{i=1}^n p_i (-\log_2 p_i) = -\sum_{i=1}^n p_i \log_2 p_i. \quad (2.6)$$

A Eq. (2.6) é também conhecida pela entropia de Shannon e é muito importante na teoria da informação clássica, porém quando se trata da entropia de von Neumann estamos tratando da teoria da informação quântica e nesta tratamos de operadores de densidade ($\hat{\rho}$) [25].

Os operadores de densidade são hermitianos e positivos semidefinidos [25] e possuem traço da matriz igual a 1 em que os autovalores de $\hat{\rho}$ tornam-se distribuições de densidade de probabilidades.

A entropia de von Neumann pode então ser definida por

$$S(\rho) = -\sum_{i=1}^n \lambda_i \log_2 \lambda_i, \quad (2.7)$$

onde λ são os autovalores da matriz densidade reduzida do sistema A.

Podemos então resumir as condições impostas [26] para que a entropia seja uma medida de emaranhamento S como:

1. A entropia de von Neumann não é negativa, a entropia é zero somente se o estado do subsistema for puro.
2. Em um espaço de Hilbert d dimensional a entropia tem um valor máximo igual ao $\log_2 d$. A entropia é igual a $\log_2 d$ somente se o subsistema está no estado completamente misturado o $\lambda_i = \frac{1}{d}$
3. Supondo que um sistema AB esteja num estado puro. Então $S(A) = S(B)$, onde S(A) e S(B) são entropias das matrizes densidade reduzidas.
4. A entropia é aditiva, quando várias cópias do sistema estão presentes.

A única medida de emaranhamento que satisfaz todas as condições acima é a entropia de von Neumann. Outra forma de se obter esta entropia é através da medida de pureza [1], como visto abaixo.

Considere um sistema que possua dois subsistemas A e B e que seu estado total puro é $|\Psi_{AB}\rangle$, de forma que a matriz de densidade desse sistema seja então

$$\rho_{AB} = |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}|. \quad (2.8)$$

Se $|\Psi_{AB}\rangle$ for favorável, ou seja, se não houver emaranhamento entre os subsistemas A e B, então

$$|\Psi_{AB}\rangle = |\Psi_A\rangle \otimes |\Psi_B\rangle, \quad (2.9)$$

onde sua matriz de densidade total pode ser obtida por,

$$|\Psi_{AB}\rangle = |\Psi_A\rangle \otimes |\Psi_B\rangle = |\Psi_A\rangle|\Psi_B\rangle \otimes \langle\Psi_A|\langle\Psi_B| = |\Psi_A\rangle\langle\Psi_A| \otimes |\Psi_B\rangle\langle\Psi_B| = \rho_A \otimes \rho_B. \quad (2.10)$$

Sabendo que os subsistemas estão em um estado puro, não emaranhado, podemos obter a matriz densidade para cada um dos estados destes subsistemas descritos como $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$

$$\rho_A = \alpha_A |\alpha\rangle\langle\alpha| + \beta_A |\beta\rangle\langle\beta|, \quad (2.11)$$

sendo, $\alpha_{A(B)}$ e $\beta_{A(B)}$, as probabilidades de α e β , respectivamente,

$$\rho_B = \alpha_B |\alpha\rangle\langle\alpha| + \beta_B |\beta\rangle\langle\beta|, \quad (2.12)$$

Assim, sabendo que α e β são suas probabilidades podemos determinar que de fato a Eq. (2.9) demonstra que a medida de pureza em um subsistema em A (ou em um subsistema B) é uma medida de emaranhamento. Assim, para mensurar a medida de pureza em um determinado sistema é necessário realizar o cálculo do traço ao quadrado da matriz de densidade do sistema desejado [1].

Se o sistema desejado trata-se de um sistema puro, teremos que o traço da matriz elevado ao seu quadrado é igual a 1, porém se o sistema desejado é misto teremos o traço da matriz resultando um valor no intervalo entre $\frac{1}{d} \leq Tr [\rho^2] < 1$.

Assim, obtêm-se a entropia de von Neumann,

$$S_{A(B)} = -Tr[\rho_{A(B)} \log_2 \rho_{A(B)}] \quad (2.13)$$

Observe que as equações (2.7) e (2.13) referem-se a mesma entropia mudando apenas a forma com são obtidas.

2.2.2 Entropia Linear

Sugerida por Fano [28] como medida de informação para estados globais puros, a entropia linear é uma versão linearizada da entropia de von Neumann. A alta procura da utilização da entropia linear deve-se a ela ser uma ferramenta mais fácil de se utilizar, dado que não requer a diagonalização da matriz densidade. Já a entropia de von Neumann, por seus cálculos serem nas autobases das matrizes densidade reduzidas, cria-se uma certa dificuldade de se realizar cálculos analíticos.

A entropia linear é comumente descrita como

$$B = 1 - Tr [\rho^2], \quad (2.14)$$

em que Tr indica o traço da matriz total e é matematicamente descrita como,

$$Tr [\rho^2] = 1 - \sum_{x,x'=1}^d a|(\rho)x, x'|^2. \quad (2.15)$$

em que para um estado puro, a somatória com dimensão d é zero e para um estado maximamente misto deve ser igual a 1.

Como o objetivo principal deste trabalho é comparar as entropias, linear e von Neumann, é válido destacar que alguns trabalhos já foram desenvolvidos a este respeito em que ambas as entropias foram calculadas [14-18] sendo que nenhuma diferença qualitativa no comportamento das duas foi encontrada. Um fato relacionado ao vínculo entre tais medidas de emaranhamento é a existência de contribuições que uma impõe sobre a outra [29, 30]. Porém, como estes artigos tratavam de sistemas diferentes daqueles considerados neste estudo, vale destacar a importância e a complementariedade para estas pesquisas.

Vale ressaltar que as entropias não possuem a mesma amplitude ($0 \leq B \leq 1$ e $0 \leq S \leq 2$) e em ambos os casos a amplitude é variável, dependendo do sistema. Estas amplitudes são obtidas a partir da análise do operador de densidade do sistema tratado como uma representação de estado que demonstra que a amplitude em $B = 1 - \frac{1}{N}$ para a entropia linear e $S = \log_2 N$ para a entropia de von Neumann, onde N é o número total de possíveis estados quânticos [31].

Mesmo que as amplitudes das entropias difiram, muitos trabalhos as utilizam como medidas de emaranhamento, porém alguns, as utilizam como medida de decoerência, grandeza que quantifica a perda de emaranhamento devido às flutuações térmicas.

2.3 MODELO DE HUBBARD

Muito explorado em química e física, o modelo de Hubbard [32] é uma aproximação que descreve de forma simplificada o comportamento dos elétrons em sólidos, férmions em nanoestruturas e átomos frios em redes óticas [33]. Em sistemas fortemente correlacionados é capaz de prever a existência de gaps na transição metal isolante de Mott [34] e descrever fenômenos como superfluidez e estados exóticos da matéria.

O modelo de Hubbard unidimensional descreve a movimentação dos elétrons em uma cadeia de L sítios, sendo cada sítio a representação de um orbital eletrônico não degenerado que, respeitando ao Princípio de Pauli, poderá ser ocupado por no máximo dois *spins* opostos.

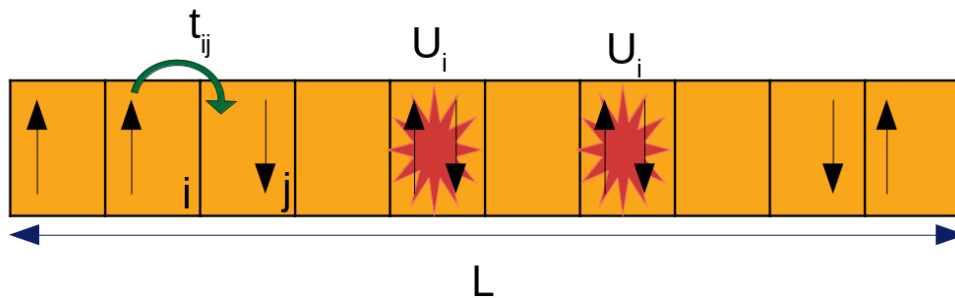


Figura 2.2: Ilustração do modelo de Hubbard para uma cadeia de L sítios em que U_i é a interação Coulombiana intra-sítio, t_{ij} é a itinerância das partículas entre os sítios vizinhos em que $j = i \pm 1$. Fonte: Próprio autor.

Observe o modelo dado pela Fig. (2.2), em que U_i , trata-se da interação Coulombiana entre duas partículas e t_{ij} da probabilidade de uma partícula se deslocar do sítio i para o sítio j , também conhecida como energia cinética ou *hopping*. No estudo de matéria condensada há uma competição entre a repulsão Coulombiana e a diminuição de energia cinética o que nos leva a afirmar que a itinerância das partículas na cadeia depende da energia cinética entre os sítios t_{ij} e da interação U_i .

Na Fig. (2.2), a probabilidade da partícula σ localizada no sítio i de mudar para o sítio j é pequena, dado que o custo energético para movê-la para o sítio j , tornando-o duplamente ocupado, é muito maior do que seu estado atual. Com o mesmo raciocínio, se no sítio i estiver duplamente ocupado e o sítio j vazio a partícula σ terá uma alta probabilidade de deslocar-se para o sítio vizinho. Já para sítio com *spin* igual ao da partícula σ a probabilidade passa ser nula. Em alguns estudos em que $U_i = U$, ou seja, que o valor de U aplicado é homogêneo por todos os sítios, consideramos a itinerância das partículas do sítio i para o sítio j de forma simétrica através de buracos ou da ausência de partículas.

O modelo de Hubbard descrito apenas com os elementos necessários para a descrição dos fenômenos de interesse, pode ser escrito através do seguinte Hamiltoniano:

$$\hat{H} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} \left(\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c \right) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} V_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma} \quad (2.16)$$

Em que t_{ij} é o parâmetro de *hopping*, $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger$ e $\hat{c}_{j\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação de partículas com *spin* σ no sítio i onde $\sigma = \uparrow, \downarrow$, H.c é o Hermitiniano conjugado, U_i é a interação Coulombiana entre duas partículas, $V_{i\sigma}$ é o potencial externo, $\sum_{i\sigma} \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle = n = N/L$ em que n é a densidade eletrônica, $N = N_\uparrow + N_\downarrow$ é o número total de partículas do sistema, N_σ é o número total de partículas com *spin* σ e $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma}$ trata-se do operador de densidade.

Como citado anteriormente, existe uma relação entre o *hopping* e a interação Coulombiana e estas dependem da distribuição de densidades das partículas na cadeia, como observado na Eq. (2.16). Porém, há uma dependência da distribuição de partículas com relação ao potencial externo e as condições de contorno aplicadas no sistema estudado.

No trabalho utilizamos a condição de borda aberta (OBS - *Open Boundary Condition*), em que a delimitação das bordas abertas resultará em uma distribuição de densidades afetada pela presença de bordas o que ocasionará nas chamadas Oscilações de Friedel. A ocorrência destas oscilações deve-se ao tamanho finito e a heterogeneidade entre os sítios da cadeia, consequentemente a densidade ou a magnetização, não serão meramente constantes, mas se tornarão inerentes da posição. De modo geral, exibirão oscilações características próximas aos limites da cadeia. É esperado que as oscilações decaiam algebricamente com a distância da fronteira, alcançando a homogeneidade (igual à densidade média em todos os sítios), para $L \rightarrow \infty$.

O modelo de Hubbard, no caso unidimensional e uniforme (com $L = \infty$), é exatamente solúvel, através da solução das integrais de Lieb-Wu [35]. Contudo, considerando possíveis

aplicações em nanoestruturas reais, é fundamental compreender as propriedades de sistemas finitos e heterogêneos. Faz-se necessário, portanto, métodos numéricos que serão descritos posteriormente.

2.4 TRANSIÇÕES DE FASE QUÂNTICAS

No dia-dia as transições de fase desempenham um papel fundamental para a natureza, estas incluem desde a fervura da água até a níveis mais complexos como o estudo de um supercondutor a partir das transições do metal em temperaturas baixas [36, 37].

Na física clássica, a transição de fase ocorre através de uma mudança abrupta no estado físico de uma substância, em que um sistema físico cruza a fronteira entre duas fases ($T \sim T_c$). A ocorrência destas mudanças deve-se a alteração das condições específicas de um sistema como a temperatura e pressão, influenciadas por flutuações microscópicas, chamadas flutuações quânticas [36-39].

No momento em que a temperatura (T) aproxima-se de $T = 0$, todas as oscilações térmicas desaparecem. Assim, as transições de fase não serão determinadas pelas flutuações térmicas, mas sim por flutuações quânticas. As flutuações quânticas estão presentes mesmo em temperatura zero, devido à relação de incerteza de Heisenberg e podem funcionar o suficiente para conduzir uma transição de uma fase para outra, ocasionando uma mudança macroscópica, ou da desordem de um sistema ordenado. Estas flutuações podem ser modificadas pelos parâmetros não térmicos como a pressão, concentração, campo magnético, etc. [36-38].

Um dos grandes desafios que as transições quânticas enfrentam, são ocasionados pelo pensamento de que as transições provenientes de $T = 0$ são apenas relevantes para pesquisas puramente teóricas e inacessíveis para experimentos. No entanto, tal pensamento logo é descartado através do alto interesse em pesquisas, principalmente na área da física da matéria condensada, que demonstram consequências não só experimentais mas também teóricas relevantes.

Nestes estudos, as transições de fase demonstram que os pontos críticos quânticos de temperatura zero são a solução para problemas que até o momento não possuíam resposta em muitos sistemas de matéria condensada [36-39]. Alguns exemplos podem ser vistos nos estudos de isoladores magnéticos de terras raras [40], compostos de férmions pesados [41, 42], supercondutores de alta temperatura [43, 44] e gases de elétrons bidimensionais [45, 46].

Tradicionalmente as transições de fase podem ser classificadas como transições contínuas e de primeira ordem. Imagine uma transição ferromagnética do ferro a 770°C em que o momento magnético desaparece continuamente ao se aproximar da transição de baixo, podemos entender esta transição como sendo uma transição contínua, onde as duas fases não coexistem na temperatura de transição, pois a transição de fase ocorre em um ponto onde as flutuações térmicas destroem a ordenação regular dos momentos magnético. Por outro lado, a passagem

da água a $0^{\circ}C$ para sua fase em vapor a $100^{\circ}C$, trata-se de transições de primeira ordem visto que, estas duas fases coexistem [37, 39].

Ao destacarmos sistemas próximos a uma transição de fase contínua, é possível classificar esta transição com um parâmetro de ordem. O parâmetro de ordem é uma quantidade termodinâmica que em uma fase desordenada é zero e em uma fase ordenada difere de zero e não é única. Mesmo que em alguns casos a escolha deste parâmetro é consideravelmente fácil (como no caso de uma transição ferromagnética onde o parâmetro é a magnetização) em outros casos encontrar este parâmetro é um tanto quanto complexo [37, 39].

2.4.1 Transição Metal- Isolante

As transições metal-isolantes são provocadas pela interação entre os elétrons nos sistemas, através da variação de parâmetros externos. Estas podem ser diferenciadas entre as transições em modelos de elétrons não interagentes, as decorrentes somente de efeitos de rede e as transições de elétrons interagentes. Estas transições podem ser subdivididas em primeira e segunda classe. A primeira classe, pode ser exemplificada a partir das transições de banda ou metal-isolador de Peierls, bem como as transições de Anderson conduzida por desordem. Já na segunda classe, é possível exemplificá-la através da transição de Mott [47] de elétrons em interação [37, 39].

Como representado no capítulo anterior o Hamiltoniano de Hubbard-1D, Eq. (2.16), representa as interações elétron-elétron (U), o *hopping* entre vizinhos (t) e a competição entre a energia cinética e a interação coulombiana. Esta competição, dependendo de quem se sobressair (t ou U), o sistema pode ter uma fase metálica (t superior a U) ou uma fase isolante de Mott (U superior a t). Também é possível incluir um termo de desordem na energia local do sistema ocasionando as transições de Anderson [39].

As transições de Anderson, trata-se de um modelo que considera apenas alguns termos da natureza dos estados eletrônicos em que a transição ocorre pela localização de elétrons desordenados não interagentes que na ausência de acoplamento *spin*-órbita ou campos magnéticos, todos os estados são localizados em uma e em duas dimensões espaciais para desordem arbitrariamente fraca.

Já as transições de Mott, trata-se de uma transição metal-isolante que ocorre devido às interações elétron-elétron. Em ambas as transições a condutividade desaparece na transição metal-isolante, sendo então possível distinguir um metal de um isolante. No modelo de Hubbard, Eq. (2.16), as transições de Mott são comumente estudadas pelas funções de parâmetros e dopagem, em que no caso unidimensional as técnicas fornecem respostas exatas [37-39].

Assim, podemos entender que as transições de Mott ocorrem quando um sistema em seu estado metálico, que conduz eletricidade devido aos elétrons itinerantes, sofre uma mudança de fase para o estado isolante, quando os elétrons localizam, devido à aplicação de parâmetros externos, como a dopagem, que ao atingirem um valor crítico ocasionam a mudança de fase. A partir deste conceito, iremos detectar as transições de fase quânticas em sistemas homogêneos

e superredes buscando compreender o desempenho das entropias linear e von Neumann em sua detecção.

2.5 MÉTODOS

2.5.1 Grupo de Renormalização da Matriz de Densidade - DMRG

A DMRG, é um método variacional desenvolvido através das ideias de grupo de renormalização numérica (NRG) [48, 49]. Trata-se uma técnica criada para obter a física de baixa energia de sistemas quânticos de muitos corpos com alta precisão, tornando-a, com o método Lanczos, uma das principais técnicas numéricas [50] e que tem sido muito utilizada nas áreas de sistemas complexos de química, física e ciências dos materiais.

A DMRG, baseia-se no intuito de simular sistemas quânticos fortemente correlacionados unidimensionais, porém, tem sido adaptado também para sistemas bidimensionais [51, 52], tornando o método adequado para as análises realizadas neste trabalho, em que, como discutido na seção anterior, o modelo que utilizaremos é o modelo de Hubbard unidimensional, descrito pelo hamiltoniano Eq. (2.16). Contudo, este método possui um grande obstáculo, o tamanho do espaço de Hilbert. Com o intuito de minimizar este problema a DMRG utiliza uma base na qual o estado fundamental seja representado por apenas alguns estados de base. Ou seja, de modo que possamos desconsiderar a contribuição de boa parte dos estados que compõem essa base, diminuindo assim a dimensão efetiva do espaço de Hilbert [50].

Tendo como partida o Hamiltoniano da Eq. (2.16), utilizado para quantificar os observáveis desejados a partir da construção de uma matriz da Hamiltoniana para um sistema finito de L sítios (sendo L o tamanho da cadeia). O Hamiltoniano de Hubbard será diagonalizado e a partir do seu espectro e seus autovalores será possível calcular os observáveis [52].

Como descrito anteriormente, um dos grandes obstáculos do método é o espaço de Hilbert e este pode ser reduzido através da minimização da dimensão do espaço dos estados à medida que ele cresce (trata-se da truncagem, que é inspirada pelos autoestados de uma matriz densidade), mas retém os graus de liberdade mais relevantes (que usualmente é o estado fundamental). Deste modo, podemos representar este estado da forma mais aproximada possível [50, 52].

A DMRG possui dois algoritmos conhecidos em que um trata de sistemas cuja o interesse está no limite termodinâmico, a chamada DMRG de tamanho infinito e de sistemas com o número de sítios fixos que é conhecida como a DMRG de sistemas finitos [51]. Como neste trabalho trataremos de sistemas com L finito, descreveremos a seguir apenas o algoritmo de sistemas finitos.

Ao observar o esquema da Fig. (2.3) é possível observarmos que método DMRG tem início através da subdivisão da cadeia(L) em blocos (B), estes blocos possuirão uma quantidade de sítios (podendo ter tamanhos iguais ou diferentes). Os Hamiltonianos referentes a todas as interações provenientes dos sítios do Bloco B , são denominadas H_{BB} , estas interações

devem-se a interação dos blocos entre seus vizinhos, devido aos sítios nas suas fronteiras. A partir destas interações é construído os operadores que atuam nestes sítios e por fim o sistema é diagonalizado [50, 52]. Como já descrito, o estado fundamental é utilizado para construir a matriz densidade do sistema L tomando o traço sobre os graus de liberdade do universo, a matriz densidade é então diagonalizada e seus autoestados de maior autovalor são utilizados para a truncagem, a este denominamos o nome de "*sweep*". Uma forma de se compreender estes passos são observarmos a 2.4 em que demonstramos a varredura para uma cadeia L de 10 sítios em um sistema finito [50-52].

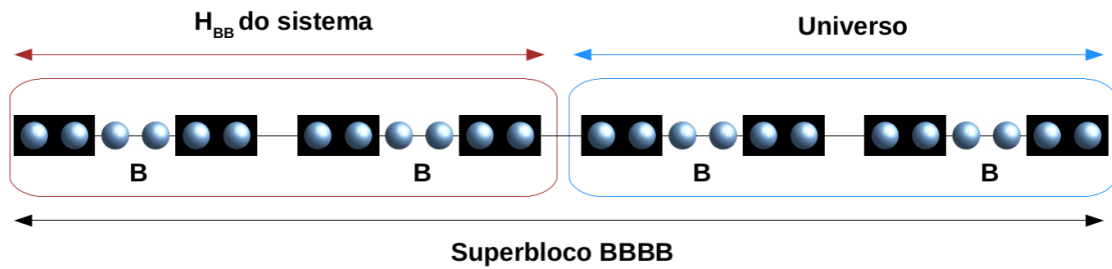


Figura 2.3: Representação de um superbloco BBBB, subdividido em blocos (B). Estes blocos formam um "*Sistema*" (BB) e um "*Universo*". Modificado de [52].

Na Fig. (2.4) observamos a formação de um sistema pequeno ($L = 4$), desenvolvido com o intuito de facilitar a construção do Hamiltoniano (H_{BB}) que pode ser calculado através do produto tensorial dos operadores. Em seguida observamos a formação de um bloco do seu lado direito e um bloco no seu lado esquerdo, porém, devido à truncagem o espaço de Hilbert permanece com o mesmo tamanho, até que o tamanho do sistema estudado (no caso, $L=10$) seja então alcançado, a este conjunto é dado o nome de superbloco [48, 52].

Obtido o superbloco, iniciaremos uma varredura para que o estado fundamental mais otimizado seja atingido. Assim, o bloco à direita começa a crescer à medida que o bloco à esquerda começa a diminuir, mantendo o número de sítios entre blocos fixos. Este processo continua até obtermos um único sítio no bloco à esquerda. O "*sweep*" contempla, portanto, esse processo em que o bloco à esquerda é calculado para todos os valores de L possíveis [51].

Mudando o sentido, damos início a uma nova varredura, agora no bloco da esquerda. Este bloco aumenta e o da direita diminui e os dados agora do bloco do lado esquerdo 'renormalizado' é armazenado para que possa ser utilizado como o bloco base para a realização do próximo sweep.

O processo de varredura irá se repetir algumas vezes até que a energia do estado fundamental convirja. Esta conversão normalmente ocorre quando os blocos têm novamente o mesmo tamanho (configuração simétrica) ou quando a diferença na energia esteja dentro de uma tolerância pré-definida [51]. Após a convergência é então possível utilizar o estado e sua energia para calcular os observáveis de interesse.

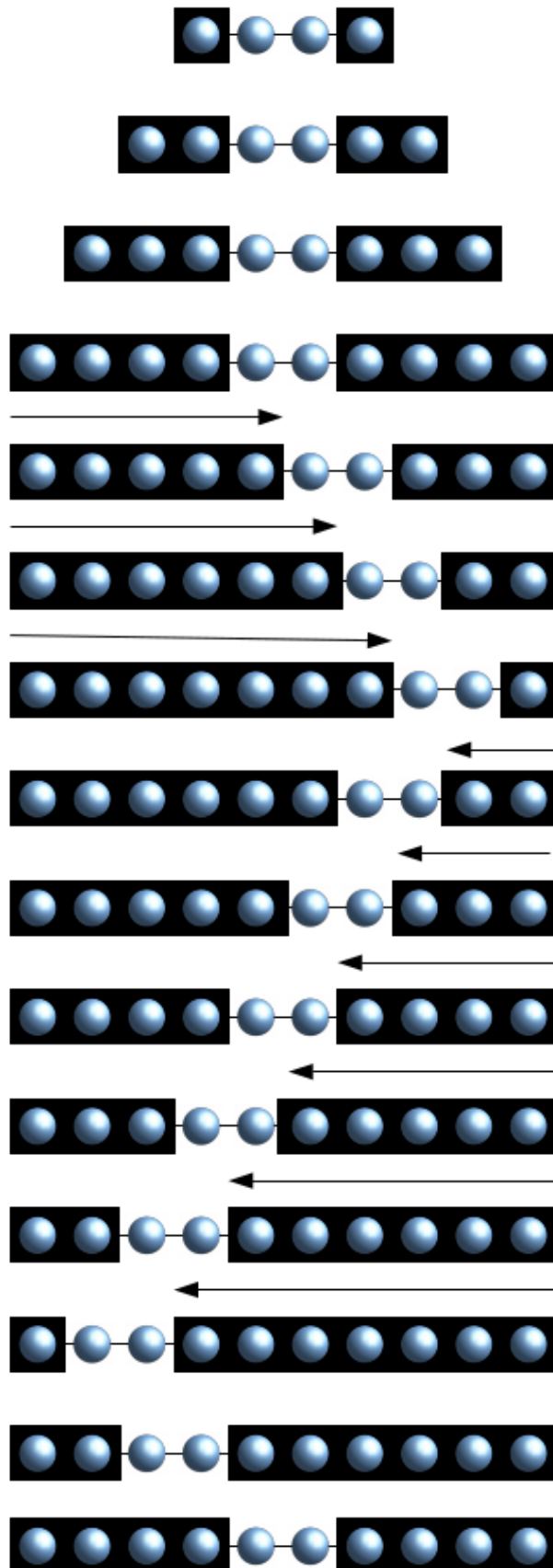


Figura 2.4: Ilustração do método DMRG de tamanho finito para uma cadeia de 10 sítios com condição de contorno aberta (OBS). Modificado de [52].

É possível obter a matriz densidade reduzida do sistema desejado partindo da base de ocupação de um sítio A, sendo os possíveis estados,

$$|n\rangle_A = |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |0\rangle \text{ ou } |\uparrow\downarrow\rangle, \quad (2.17)$$

em que $|0\rangle$ é o estado de ocupação onde o sítio encontra-se vazio, $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ são os sítios de ocupação de uma única partícula, *spin up* e *spin down*, respectivamente, e por fim temos $|\uparrow\downarrow\rangle$ que é a dupla ocupação de partículas com *spins* opostos em um único sítio, respeitando o princípio da exclusão de Pauli.

Com base na Eq. (2.17), a matriz densidade reduzida para um sítio A é dada por:

$$\rho_A = W_\uparrow |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + W_\downarrow |\downarrow\rangle\langle\uparrow| + W_2 |\uparrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\uparrow| + W_0 |0\rangle\langle 0|, \quad (2.18)$$

onde W_2 é a probabilidade de dupla ocupação, $W_\uparrow$ e $W_\downarrow$ a probabilidade de ocupação de uma única partícula e W_0 é a probabilidade de nenhuma ocupação [1].

Ao desenvolver a matriz de densidade reduzida, obtida pela varredura do método de DMRG, é possível obter a partir de sua diagonal principal as probabilidades de ocupação.

Pode-se obter a equação da entropia de von Neumann da seguinte forma:

$$S(L) = -W_2 \log_2 W_2 - W_\uparrow \log_2 W_\uparrow - W_\downarrow \log_2 W_\downarrow - W_0 \log_2 W_0, \quad (2.19)$$

enquanto a equação linear pode ser escrita como,

$$B(L) = 1 - W_2^2 - W_\uparrow^2 - W_\downarrow^2 - W_0^2. \quad (2.20)$$

Como o método de DMRG para sistemas unidimensionais é considerado numericamente exato, o utilizaremos para testar o desempenho dos cálculos de DFT nos sistemas estudados.

A DMRG trata-se de uma alternativa custosa computacionalmente, em que dependendo do tamanho do sistema a redução do espaço de Hilbert pode ser superada pelo crescimento exponencial o que necessitará de recursos de memória e tempo de execução altos, mesmo para sistemas relativamente pequenos [50, 52]. Por consequência, métodos aproximados como a DFT ganham destaque uma vez que, na maioria das vezes, consegue obter bons resultados em um tempo de processamento menor. Deste modo, iniciaremos uma breve introdução a DFT.

2.5.2 Teoria Funcional da Densidade - DFT

A teoria DFT, sigla para Density Functional Theory, é utilizada para compreender e prever as propriedades dos átomos, moléculas e sólidos e é atualmente uma das abordagens da mecânica quântica mais populares e bem-sucedidas utilizadas para o estudo dos materiais [13].

Esta teoria teve seu início através da reformulação da mecânica quântica, que tinha como base a função de onda, para a densidade eletrônica, esta ideia foi apresentada em 1964

por Walter Kohn e Hohenberg [53]. Contudo, a solução para a determinação da densidade para um sistema real só foi determinada em uma nova colaboração de Kohn com Sham [54], vamos então entender este método.

Dada a equação de Schrödinger que descreve toda a informação do sistema através de Ψ

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r_i) + U(r_i, r_j) \right] \Psi(r) = E \Psi(r), \quad (2.21)$$

onde, $\hbar^2$ é a constante de Planck, m é a massa da partícula descrita, ∇^2 é o Laplaciano de Ψ que trata-se da variação espacial da função de onda do conjunto $\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$, $U(r)$ é a descrição da interação elétron-elétron, $V(r)$ trata-se do potencial externo que é aplicado sobre a partícula. Do outro lado da igualdade, E trata-se da energia total do sistema.

Um dos maiores desafios da área é resolver problemas de muitos corpos utilizando-a, visto que com o aumento de elétrons no sistema o número de parâmetros para descrever a função de onda aumenta exponencialmente, dado que para um sistema de N elétrons, Ψ dependerá de $3N$ variáveis, como consequência gera um alto custo computacional, mesmo para sistemas mais simples. A DFT torna-se, então uma excelente ferramenta para sistemas de muitos corpos posto que gera resultados bons com tempo de processamento de cálculo computacional relativamente baixo. Por exemplo, para o modelo de Hubbard unidimensional enquanto um cálculo típico via DMRG em 16 núcleos leva alguns dias, o mesmo sistema pode ser obtido com DFT em poucos minutos. A validade do método, que é formalmente exato, é garantida pelo Teorema de Hohenberg-Kohn e sua implementação é viabilizada pelas equações de Kohn-Sham [1].

O trabalho desenvolvido por Hohenberg e Kohn (1964) demonstra a obtenção de maneira exata da energia do estado fundamental a partir da densidade eletrônica, através de dois teoremas. O primeiro teorema estabelece que um sistema de muitos elétrons em seu estado fundamental que tem sua densidade de carga $n(r)$ é determinada, a menos de uma constante aditiva, a partir do potencial externo $V(r)$.

Já o segundo teorema descreve que a partir da densidade exata do estado fundamental $n_0(r)$ é possível obter a energia fundamental mínima do funcional de energia $E_0[n_0(r)]$, ou seja, a energia do sistema em seu estado fundamental [53].

Os teoremas descritos acima demonstram ser possível obter a energia do estado fundamental a partir da densidade do estado fundamental, porém, Hohenberg e Kohn não desenvolveram um método para que isso fosse realizado de fato. O desenvolvimento de um método que possibilitou a obtenção da densidade do estado fundamental do sistema foi realizado por Kohn e Sham [53].

O grande diferencial deste método é a utilização da densidade eletrônica, $n(r)$ ao invés da função de onda de muitos corpos $\Psi(r_1, r_2, r_3 \dots r_N)$, que foi possível graças a prova de que todos os observáveis, isto é, todas as grandezas físicas que podemos medir em um sistema, são univocamente determinadas pela densidade $n(r)$, ou seja, são funcionais da densidade. Assim, em princípio, para conhecermos qualquer propriedade de um átomo, de uma molécula ou de um

sólido, só é necessário saber qual sua densidade eletrônica e, qual o funcional da densidade da propriedade desejada, enquanto o conhecimento da função de onda em si torna-se dispensável em DFT [1]. Isso porque a função de onda também é um funcional da densidade:

$$\Psi_0(r_1, r_2, r_3 \dots r_N) = \psi[n_0], \quad (2.22)$$

onde $n(r)$ é dada por

$$n(r) = N \int d^3r_2 \int d^3r_3 \dots \int d^3r_N. \quad (2.23)$$

Além disso, o estado fundamental do sistema pode ser encontrado minimizando a energia total em função da densidade,

$$E_0 = \min \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle, \quad (2.24)$$

$$= \langle \Psi[n_0] | \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} | \Psi[n_0] \rangle, \quad (2.25)$$

$$= E[n_0(r)]. \quad (2.26)$$

Em que o operador da energia potencial externa $\hat{V}$, depende do sistema e os operadores de energia cinética, $\hat{T}$ e de interação Coulombiana, $\hat{U}$, são chamados operadores universais por possuírem funcionais únicos para sistemas Coulombianos. Assim, na Eq. (2.26) se a função de onda é um funcional da densidade como consequência todo observável, descrito é também um funcional da densidade, podemos então determinar que a energia do estado fundamental do sistema interagente é descrito como

$$E[n] = T[n] + U[n] + V[n]. \quad (2.27)$$

Como uma consequência da minimização de energia,

$$E_0 = \min E[n] = \min [T[n] + U[n] + V[n]], \quad (2.28)$$

é obtida por,

$$\frac{\partial E[n]}{\partial n(r)} = \frac{\partial T[n] + U[n]}{\partial n(r)} + \frac{\partial V[n]}{\partial n(r)} = \frac{\partial F[n]}{\partial n(r)} + V[n]. \quad (2.29)$$

sendo, $F[n]$ o funcional universal independentemente $V(r)$.

Como não temos conhecimento de forma geral do funcional universal, é necessário realizar algumas aproximações para a energia cinética e a interação eletrônica para sistemas interagentes, assim, introduziremos a aproximação de densidade local, a LDA.

$$F[n] = T[n] + U[n] \quad (2.30)$$

Se aproximarmos a energia cinética do sistema pela energia cinética de um sistema não interagente,

$$T \approx -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N^{\sigma}} \langle \Psi_i^{\sigma} | \nabla^2 | \Psi_i^{\sigma} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\sigma} \sum_{i=1}^{N^{\sigma}} |\nabla \Psi_i^{\sigma}|^2, \quad (2.31)$$

e a energia de interação for aproximada pela energia clássica (Hartree),

$$U[n] \approx E_H = \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|}, \quad (2.32)$$

a energia de troca e correlação, pode ser definida de maneira a conter tudo o que se perde com as aproximações 2.31 e 2.32, sendo portanto:

$$E_{XC}[n] = T[n] - T_S[n] + U[n] - E_H[n], \quad (2.33)$$

é possível obter o funcional de energia para os sistemas interagentes como,

$$E[n] = T_S[n] + E_H[n] + E_{XC}[n] + V[n], \quad (2.34)$$

cuja minimização é dada por,

$$\frac{\delta E[n]}{\delta n(r)} = \frac{\delta T_S[n]}{\delta n(r)} + V_H(r) + V_{XC}(r) + V(r) = 0, \quad (2.35)$$

onde $V_H(r) = \delta E_H / \delta n(r)$ é o potencial de Hartree, $V_{XC}(r) = \delta E_{XC} / \delta n(r)$ é o potencial de troca e correlação e $V(r)$ é o potencial externo.

Neste caso, a LDA consiste em uma aproximação para a energia de troca e correlação dos elétrons em um sistema com distribuição heterogênea, que pode ser descrita pela equação abaixo,

$$E_{xc}^{LDA}[n(r)] = \int e_{xc}^{hom}[n]_{n \rightarrow n(r)} d^3r. \quad (2.36)$$

em que $n(r)$ é a densidade eletrônica no ponto r e e_{xc}^{hom} é a energia de troca e correlação por partícula com densidade n em um sistema homogêneo.

A LDA é uma boa aproximação para sistemas em que a densidade varie lentamente com a posição como no caso de materiais sólidos. Consta que para o modelo de Hubbard, no caso de cálculos para medidas de emaranhamento médio, a LDA possui desvios de $\sim 1\%$ o que a torna um método eficiente [1].

Contudo, é necessário obter o funcional de densidade para a energia de cadeias homogêneas, como será destacado nas etapas a seguir. Neste trabalho usaremos o funcional numericamente exato FN, solução numérica das integrais de Lieb-Wu [1, 13].

As equações de Kohn-Sham visam relacionar um sistema interagente com um sistema fictício não-interagente que possui densidade n e energia $E_{S[n]}$,

$$E_{S[n]} = T_{S[n]} + V_{KS[n]}, \quad (2.37)$$

uma vez que a energia de interação é nula para sistemas não interagentes.

É possível obter a minimização da energia do estado fundamental $E[n]$, com base no princípio variacional por,

$$\frac{\delta E_{S[n]}}{\delta n(r)} = \frac{\delta T_{S[n]}}{\delta n(r)} + V(r) = 0, \quad (2.38)$$

Sendo,

$$\frac{\delta V_{KS}[n]}{\delta n(r)} = V(r) = V_{KS}[n] \quad (2.39)$$

onde V_{KS} é o potencial de Kohn-Sham, que pode ser encontrado quando colocarmos as equações 2.35 e 2.38 em igualdade,

$$V_{KS} = V(r) + V_H(r) + V_{XC}(r). \quad (2.40)$$

Com base na Eq. (2.40) é possível obter o valor da densidade $n(r)$ do sistema de muitos corpos a partir da equação de Schrödinger para uma única partícula aplicada ao sistema de Kohn-Sham,

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{KS}(r) \right] \Phi_i(r) = \epsilon_i \Phi_i(r), \quad (2.41)$$

em que $\Phi_i(r)$ são os orbitais de Kohn-Sham e por construção $n(r) = n_{KS}(r)$ dada por,

$$n(r) = \sum_i^N |\Phi_i(r)|^2. \quad (2.42)$$

A partir dessas equações pode-se desenvolver o ciclo auto consistente de Kohn-Sham, como ilustra a Fig. (2.5).

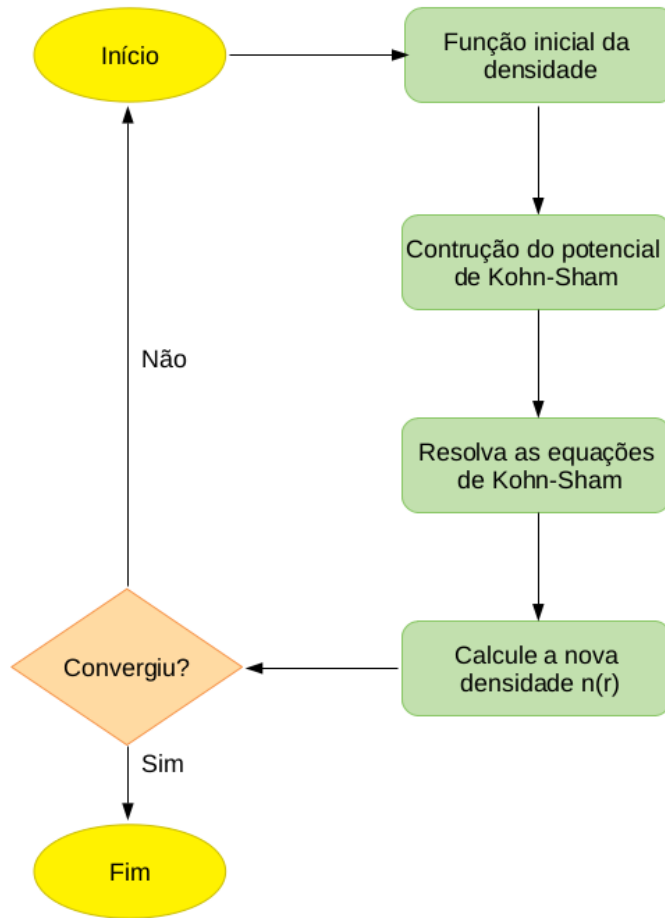


Figura 2.5: Ciclo auto-consistente de Kohn e Sham. Fonte: Próprio autor.

A Fig. (2.5), observamos uma dependência dos termos, ou seja, para se achar $n(r)$ é necessário resolver $\Phi_i(r)$, que no que lhe concerne só é obtido tendo conhecimento de $V_{KS}(r)$, que só é obtido através de $n(r)$, isso nos remete a um problema interdependente. Para que esse ciclo auto consistente seja realizado é necessário iniciar os cálculos a partir de uma função tentativa de densidade $n(r)$. Essa densidade é então utilizada nas equações de Kohn-Sham e com isso gera uma nova densidade, que será utilizada como uma função tentativa para o próximo ciclo. Deste modo, o ciclo finaliza quando $|n(r) - n_0(r)| < \Delta$, onde Δ é o critério de tolerância, obtendo assim a energia $E_0[n_0(r)]$ do sistema [13].

Vejamos agora como obter as entropias via cálculos de DFT.

A partir de um sistema A na Eq. (2.17), a matriz densidade reduzida para este sistema foi dada Eq. (2.18), em que

$$W_2 = \langle \Psi | \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow | \Psi \rangle, \quad (2.43)$$

$$W_\uparrow = \langle \Psi | \hat{n}_\uparrow | \Psi \rangle - W_2, \quad (2.44)$$

$$W_{\downarrow} = \langle \Psi | \hat{n}_{\downarrow} | \Psi \rangle - W_2, \quad (2.45)$$

$$W_0 = 1 - W_2 - W_{\uparrow} - W_{\downarrow} \quad (2.46)$$

Derivando o Hamiltoniano, com relação a U e usando o teorema de Hellman-Feynman [55] para a energia em seu estado fundamental, temos:

$$\langle \Psi | \frac{d\hat{H}}{dU} | \Psi \rangle = \frac{dE_0}{dU}, \quad (2.47)$$

$$\langle \Psi | \frac{d\hat{H}}{dU} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} | \Psi \rangle, \quad (2.48)$$

$$\frac{\delta E_0}{\delta U} = L \langle \Psi | \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} | \Psi \rangle, \quad (2.49)$$

$$\frac{\delta E_0}{\delta U} = L W_2, \quad (2.50)$$

Assim, ao igualarmos as equações é possível obter a probabilidade de dupla ocupação em função da energia,

$$W_2 = \frac{\delta e_0}{\delta U}, \quad (2.51)$$

em que e_0 é a energia do estado fundamental por sítio.

A partir destas relações é possível obter em função de e_0 , n e M as demais probabilidades, permitindo-se portanto a obtenção das entropias via DFT:

$$W_{\uparrow} = \frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{dU} + \frac{M}{2}, \quad (2.52)$$

$$W_{\downarrow} = \frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{dU} - \frac{M}{2}, \quad (2.53)$$

$$W_0 = 1 - n + \frac{\delta e_0}{\delta U}, \quad (2.54)$$

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

Substituindo as Eq. (2.52), (2.53), (2.54) e (2.51) na Eq. (2.13) obtemos,

$$S^{DFT} = - \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{dU} + \frac{M}{2} \right) \log_2 \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{dU} + \frac{M}{2} \right) - \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{dU} - \frac{M}{2} \right) \log_2 \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{dU} - \frac{M}{2} \right) - \left(1 - n + \frac{\delta e_0}{dU} \right) \log_2 \left(1 - n + \frac{\delta e_0}{dU} \right) - \frac{\delta e_0}{dU} \log_2 \frac{\delta e_0}{dU}. \quad (2.55)$$

Substituindo as Eq. (2.52), (2.53), (2.54) e (2.51) na Eq. (2.14) obtemos,

$$B^{DFT} = 1 - \left(\frac{\delta e_0}{dU} \right)^2 - \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{dU} + \frac{M}{2} \right)^2 - \left(\frac{n}{2} - \frac{\delta e_0}{dU} - \frac{M}{2} \right)^2 - \left(1 - n + \frac{\delta e_0}{dU} \right)^2. \quad (2.56)$$

Note, contudo, que as equações ainda dependem da derivada da energia em função da interação. Para obter essa derivada iremos usar o funcional aproximado LSOC [19] para a energia.

A LSOC é uma aproximação de densidade local proposta por Lima e colaboradores (2003) para a energia do modelo de Hubbard unidimensional.

$$e^{LSOC}(n, U) = - \frac{2\beta(U)}{\pi} \sin \left(\frac{\pi n}{\beta(U)} \right), \quad (2.57)$$

onde $\beta(U)$ é determinado a partir da igualdade abaixo,

$$- \frac{2\beta(U)}{\pi} \sin \left(\frac{\pi}{\beta} \right) = -4 \int_0^\infty dx \frac{J_0(x) J_1(x)}{x \left[1 + \exp \left(\frac{Ux}{2} \right) \right]}, \quad (2.58)$$

onde, $J_0(x)J_1(x)$ são as funções de Bessel de ordem zero e um, respectivamente.

Assim, com base nos conhecimentos dos métodos aqui empregados com suas contribuições e desvantagens, iniciaremos a discussão dos resultados a partir de uma análise comparativa dos métodos (DFT com LDA e DMRG), buscando a melhor alternativa para os sistemas aqui estudados.

3 DESEMPENHO DA DFT EM RELAÇÃO À DMRG

A DFT é de grande utilidade para os estudos de sistemas de muitos corpos em física, química e ciência dos materiais, visto que permite um aumento da complexidade do modelo a um baixo custo computacional, muitas vezes trazendo resultados com alta eficiência que, para métodos exatos, exigiriam maior custo computacional. Porém, como já citado anteriormente, uma de suas desvantagens é a necessidade de boa aproximação para o funcional de troca e correlação, é então necessário cuidado com sua aplicação em determinados sistemas ou moléculas dado que a energia calculada por este método pode ser maior ou menor que o valor de energia real devido à utilização de aproximações durante a realização dos cálculos de energia. Este capítulo é dedicado à investigação do desempenho da DFT perante o método exato DMRG para sistemas homogêneos, em que as únicas inomogeneidades se devem às condições de contorno aberta (OBC - *Open Boundary Conditions*). A validação da eficiência deste método será crucial para o estudo de sistemas heterogêneos, como as superredes que serão abordadas posteriormente.

É importante salientar que os sistemas analisados neste capítulo via DMRG foram obtidos para cálculos realizados em um *cluster* de computadores do GridUnesp - que está localizado no Núcleo de Computação Científica da Unesp, no IFT - já os dados de DFT foram realizados em um *desktop* moderno, porém, convencional. Ambos os códigos, de DMRG e DFT, para o modelo de Hubbard já estavam implementados no grupo.

3.1 PERFORMANCE DA DFT EM SISTEMAS HOMOGÊNEOS

Tendo como conjunto de dados as densidades produzidas via DMRG e DFT (com LDA), iniciaremos nossas análises através da Fig. (3.1) que trata dos desvios percentuais da densidade, para um sistema repulsivo ($U > 0$) e densidades de $n = 0.2, 0.6$ e 1 , obtidos para cadeias de 10, 40 e 80 sítios através da seguinte equação:

$$Desvio(\%) = \frac{|n_{DMRG} - n_{DFT}|}{n_{DMRG}} \times 100 \quad (3.1)$$

Ao observarmos a tendência do desvio percentual em uma cadeia diminuta, como em $L = 10$, notamos um alto desvio percentual nos centros e nas bordas do sistema com densidade $n = 0.2$ e à medida que a densidade tende a $n = 1$ os desvios são minimizados aproximando-se de zero. Isso ocorre porque à medida que n se aproxima de $n=1$ o sistema se torna um isolante de Mott [34], com densidades $n \approx$ constante em todos os sítios, portanto, a LDA se torna essencialmente exata.

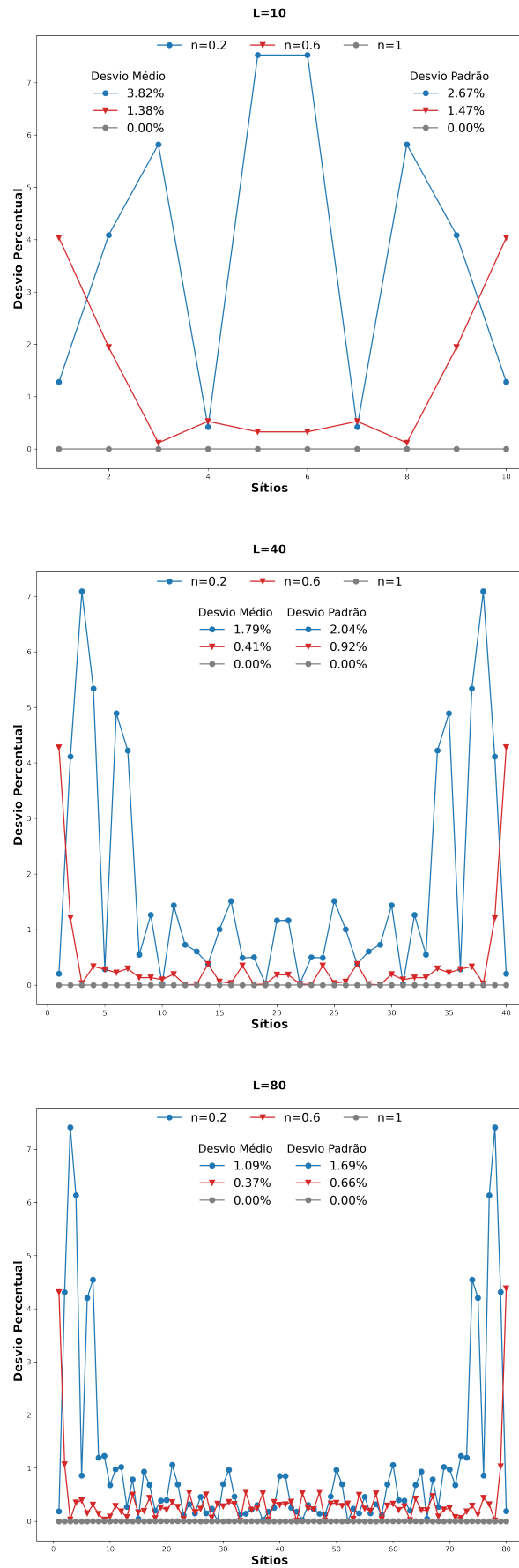


Figura 3.1: Desvio percentual da entropia por sítio, em um sistema repulsivo de $U=2$.

Com esta primeira análise em mãos poderíamos concluir que a DFT (com LDA) trata-se de um método que apresenta resultados ruins para cadeias diminutas, em especial nos sítios centrais da cadeia. Uma forma de minimizar os desvios são a partir do desenvolvimento ou aplicação de aproximações não locais mais robustas no cálculo de DFT. Entretanto, ao observarmos o desempenho da DFT (com LDA) em relação a cadeias maiores, como $L=40$ e $L=80$, notamos que a medida que L cresce os desvios são reduzidos, devido à minimização dos efeitos de bordas, tornando o método uma boa escolha para cadeias maiores.

Na Fig. (3.2) apresentamos os desvios das grandezas de interesse neste trabalho: a entropia linear média e a entropia de von Neumann média, ambas usadas para quantificar o emaranhamento médio de um único sítio da cadeia em relação ao restante. Observamos que mesmo com a LDA, a aproximação mais simples, o cálculo DFT fornece bons resultados com desvios inferiores a 8%. Com isso, podemos observar que os resultados apresentam-se satisfatórios para cadeias intermediárias, o que nos mostra um excelente desempenho da DFT como medida de emaranhamento, quando comparada a um método exato, como a DMRG.

Devido ao bom desempenho dos sistemas homogêneos faremos uma análise sobre o desempenho de sistemas heterogêneos com o intuito de observar sua performance utilizando a DFT para que nas próximas etapas possam ser investigados via DFT (com LDA).

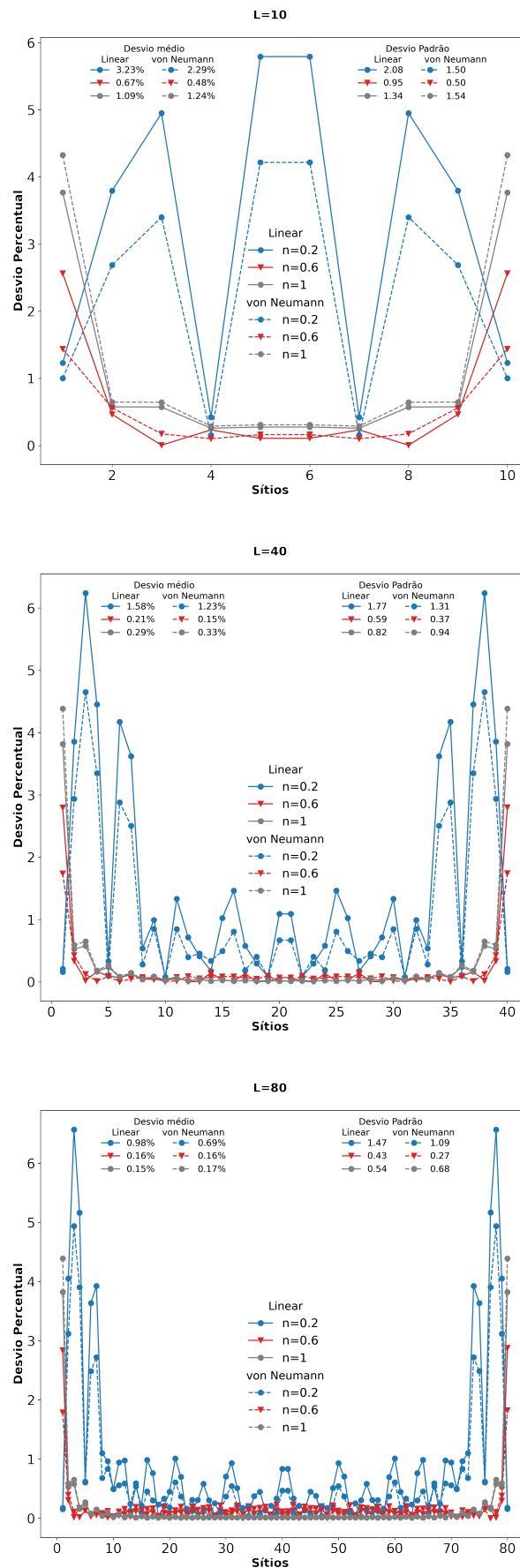


Figura 3.2: Desvio percentual da entropia por sítio, em um sistema repulsivo de $U=2$.

3.2 PERFORMANCE DA DFT EM SUPERREDES

A análise anterior tratava-se de materiais com bordas, porém, sem heterogeneidades externas. No entanto, com o intuito de se compreender os materiais mais próximos à realidade é essencial ampliar a análise para materiais heterogêneos. Em particular, iremos comparar os métodos para um sistema cuja heterogeneidade é provocada pela junção periódica de mais de um material, as chamadas superredes.

Experimentalmente superredes são facilmente produzidas com a deposição de átomos/moléculas, distintos seguindo uma periodicidade específica. Computacionalmente, as superredes podem ser realizadas através da modulação no potencial externo (V) ou na interação eletrônica (U). Como apresentado na Fig. (3.3) iremos simular nossas superredes através de uma modulação em V , mantendo U fixo.

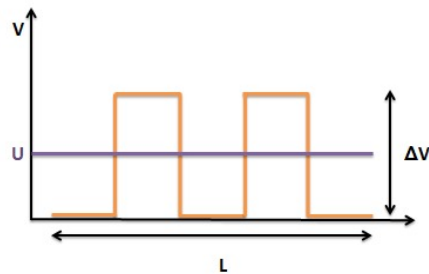


Figura 3.3: Esquema de uma superrede de modulação $\Delta V = V_1 - V_0$. Fonte: Próprio autor.

Como é possível verificar na Fig. (3.3), enquanto U mantém-se constante V varia de um V_0 a um determinado V_1 , essas variações simulam materiais distintos que possuem potenciais diferentes. Com relação à periodicidade usaremos a notação $p:q$, em que p é o número de sítios com potencial V_0 e q o número de sítios com potencial V_1 .

Na Fig. (3.4), é possível observar um esquema que exemplifica uma superrede com $p:q=2:7$. Perceba que para uma cadeia de L sítios a variação de V se repetirá até $L/(p+q)$ vezes, até completar L sítios.

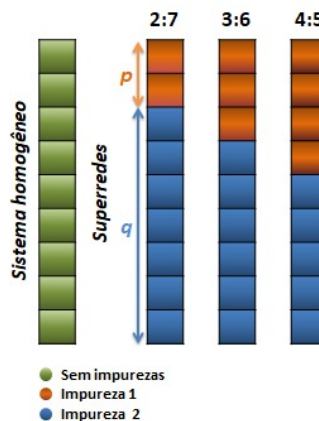


Figura 3.4: Representação de um sistema homogêneo à esquerda e as distribuições de impurezas em superredes à direita. Modificado de [56].

Na Fig. (3.5) é possível observar os desvios percentuais das entropias médias pela interação Coulombiana calculados via Eq. (3.1). Nota-se que o desvio cresce com o aumento de U e V , chegando a desvios superiores a 20% em alguns casos. Podemos entender que o alto desvio percentual possa ser causado por uma maior ou menor sensibilidade da DFT as variações de U e/ou V , o que poderia acarretar dificuldades em nosso trabalho.

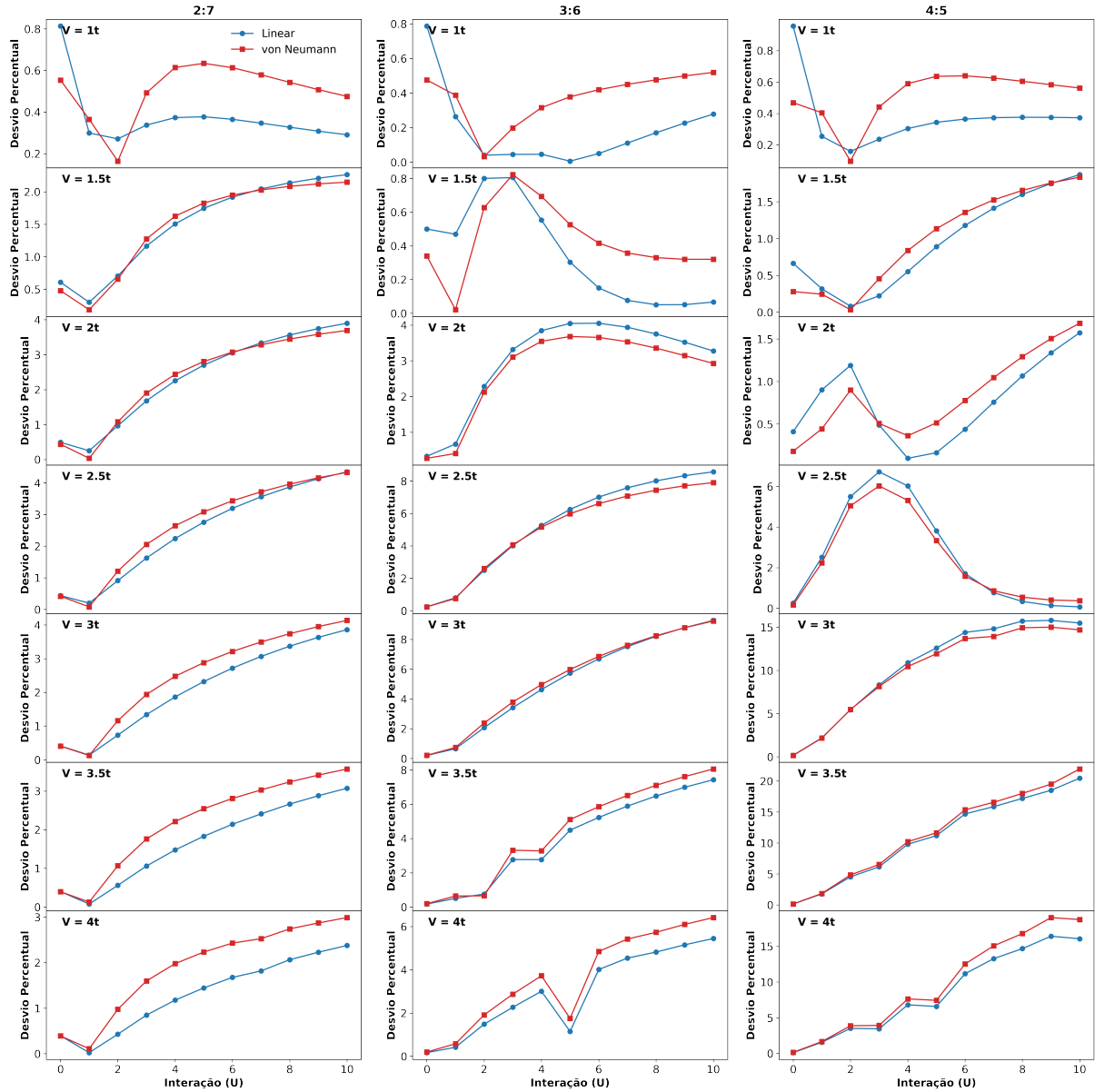


Figura 3.5: Desvio percentual para superredes de $n=0.55$ e 36 sítios com $p:q=2:7$, $3:6$ e $4:5$ em função da interação U .

Assim, como o foco deste trabalho trata-se de uma análise quantitativa das diferenças das entropias em superredes, a DFT (com LDA) torna-se uma ferramenta inadequada resultando assim na utilização da DMRG como método mais adequado.

4 SISTEMAS HOMOGÊNEOS

O comportamento oscilatório que se deve às chamadas oscilações de Friedel, que surgem devido às bordas e/ou impurezas, é observado na Fig. (4.1). Nesta análise, proveniente de cálculos via DMRG, é possível determinar que à medida que L cresce ocorre uma queda da amplitude das oscilações que independe da interação coulombiana (U). No entanto, a frequência das oscilações dependem de U , alterando à medida que U aumenta.

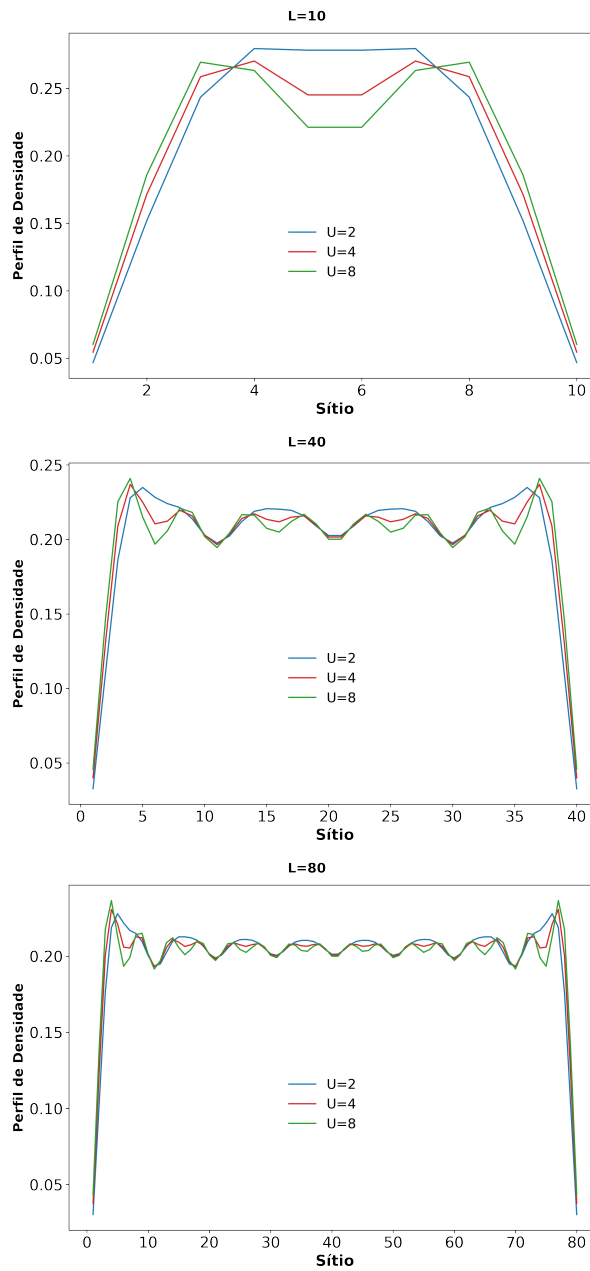


Figura 4.1: Análise das oscilações de Friedel para sistemas em $n=0.2$ em que as cadeias possuem $L=10, 40$ e 80 sítios sob variação da interação coulombiana fracamente ($U=2$), intermédiaria ($U=4$) e fortemente ($U=8$) interagente.

Em um sistema não interagente, em $U = 0$, é observado um regime de oscilações igual a $2K_F$, com $K_F = \frac{\pi N}{L}$, já em um sistema fortemente interagente observa-se um regime de transição, com oscilações de $4K_F$ no limite de $U \rightarrow \infty$. Esta mudança de comportamento com o aumento de U , pode ser observada na Fig. (4.1), é ocasionada pela ocupação de um elétron em cada sítio, e à medida que $U \rightarrow \infty$ esses elétrons comportam-se como férmions sem *spin* não interagentes.

O comportamento do emaranhamento via DFT obtido pelas duas entropias, de von Neumann e linear, em função do tamanho da cadeia (L) foram analisados como observado nas Figs. (4.2), (4.3) e (4.4) para $n=0.2$, 0.6 e 1 buscando compreender as diferenças das entropias com relação as transições de fase quânticas.

Ao analisarmos as figuras Figs. (4.2), (4.3) e (4.4) observamos que o emaranhamento que aumentava monotonicamente com a densidade para o regime fracamente interagente ($U=2$), apresenta uma quebra desse comportamento em interações intermediárias ($U=4$) e forte ($U=8$): encontramos valores muito próximos para $n=0.6$ e $n=1$ para $U=4$, enquanto para $U=8$ o emaranhamento é maior para $n=0.6$ do que para $n=1$. Essa não monotonicidade do emaranhamento é conhecida e indica a transição metal-isolante de Mott [34], causada justamente pela interação em $n=1$ [1].

Como tratamos de sistemas com $U > 0$, a transição é marcada no emaranhamento por uma diminuição acentuada em $n=1$, em contraste com um decréscimo vagaroso em $n < 1$. Em $n < 1$, como o sistema comporta-se como um metal é possível observar um elevado grau de emaranhamento, devido à grande itinerância de partículas mesmo em sistemas com interações fortes. De outro modo, em $n=1$ o sistema possui comportamento de um material isolante, provocando o congelamento dos graus de liberdade de carga das partículas, o que ocasiona uma diminuição do emaranhamento no sistema.

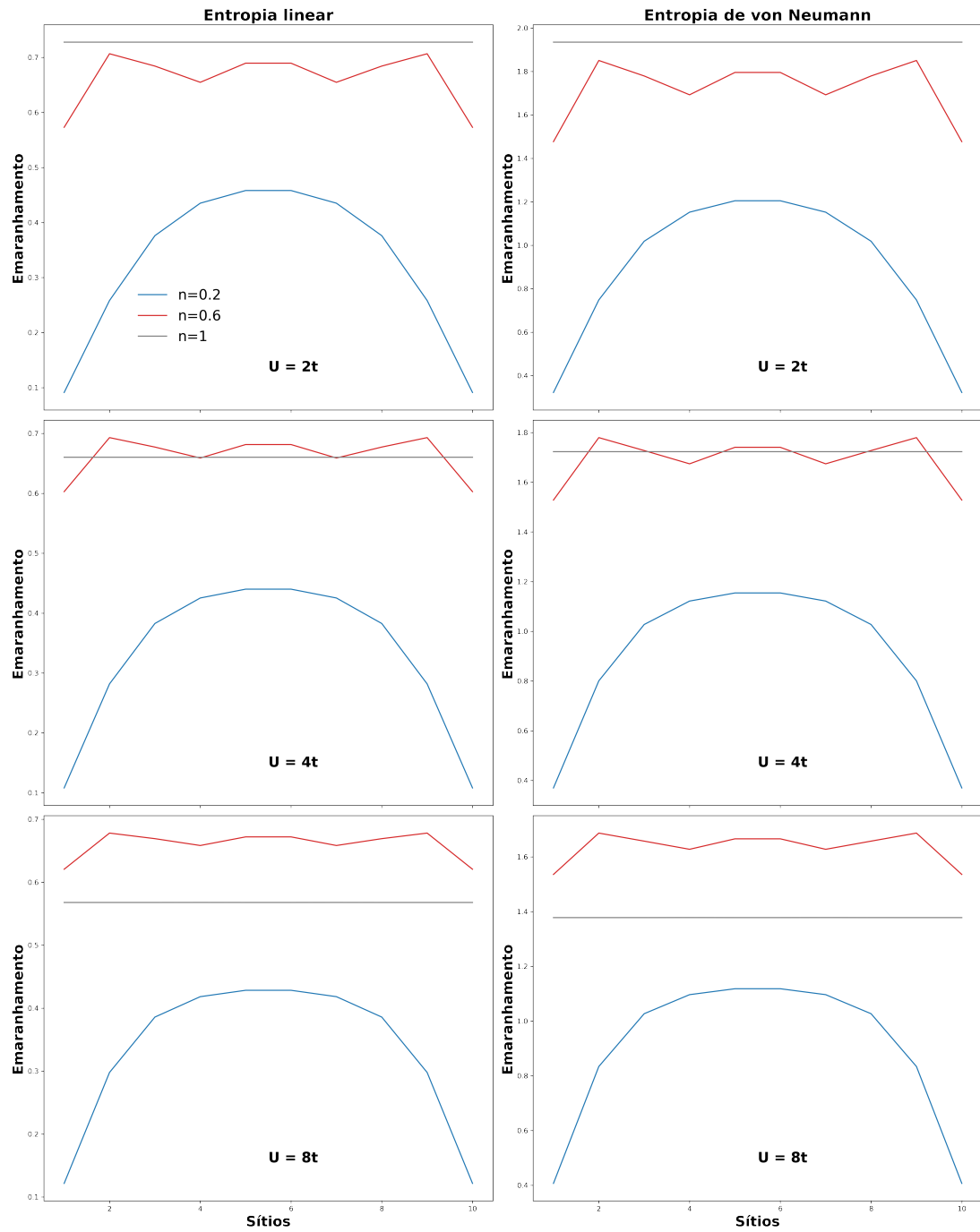


Figura 4.2: Emaranhamento de um único sítio com o restante da cadeia em função da posição deste sítio para uma cadeia de 10 sítios em sistemas repulsivos ($U > 0$).

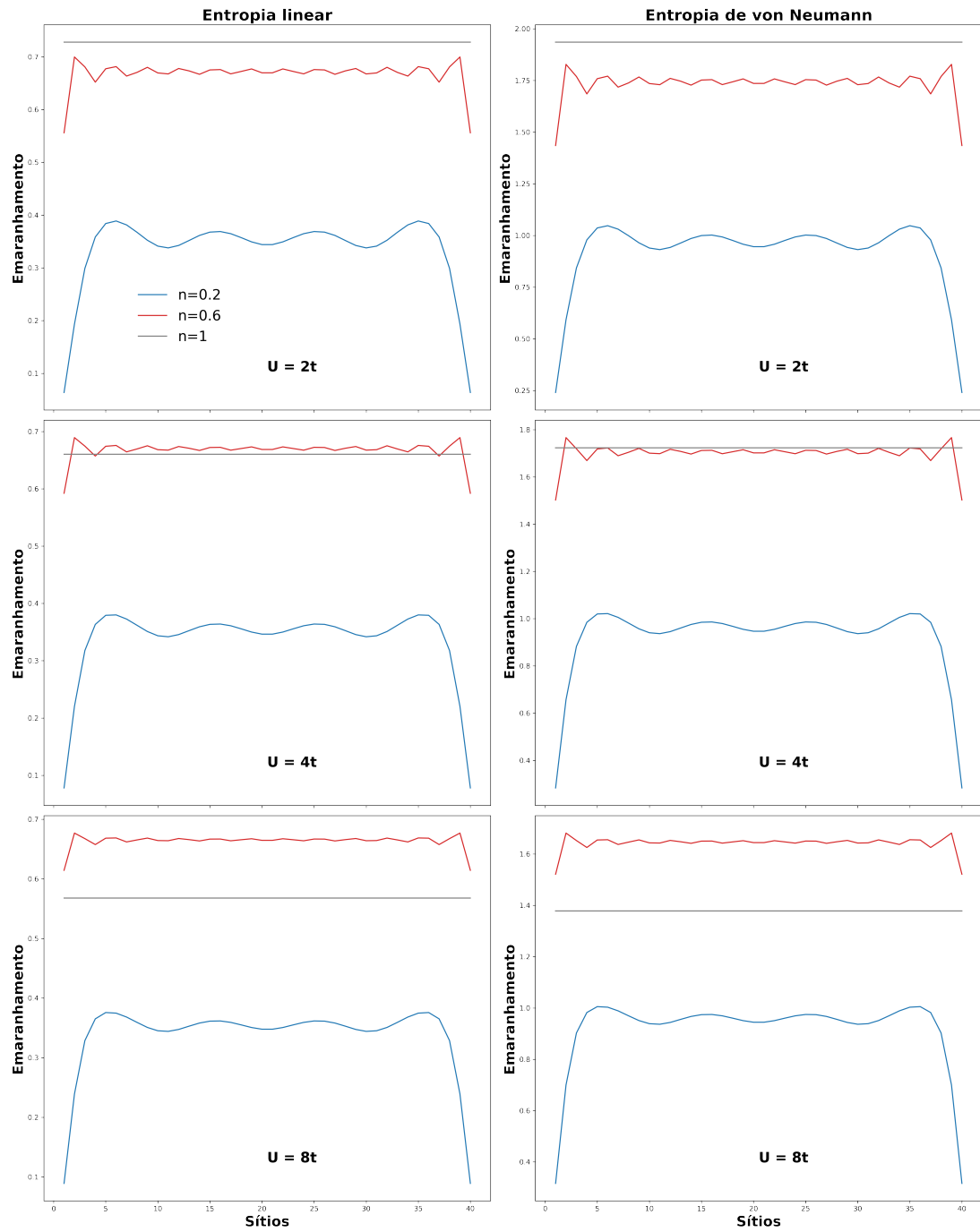


Figura 4.3: Emaranhamento de um único sítio com o restante da cadeia em função da posição deste sítio para uma cadeia de 40 sítios em sistemas repulsivos ($U > 0$).

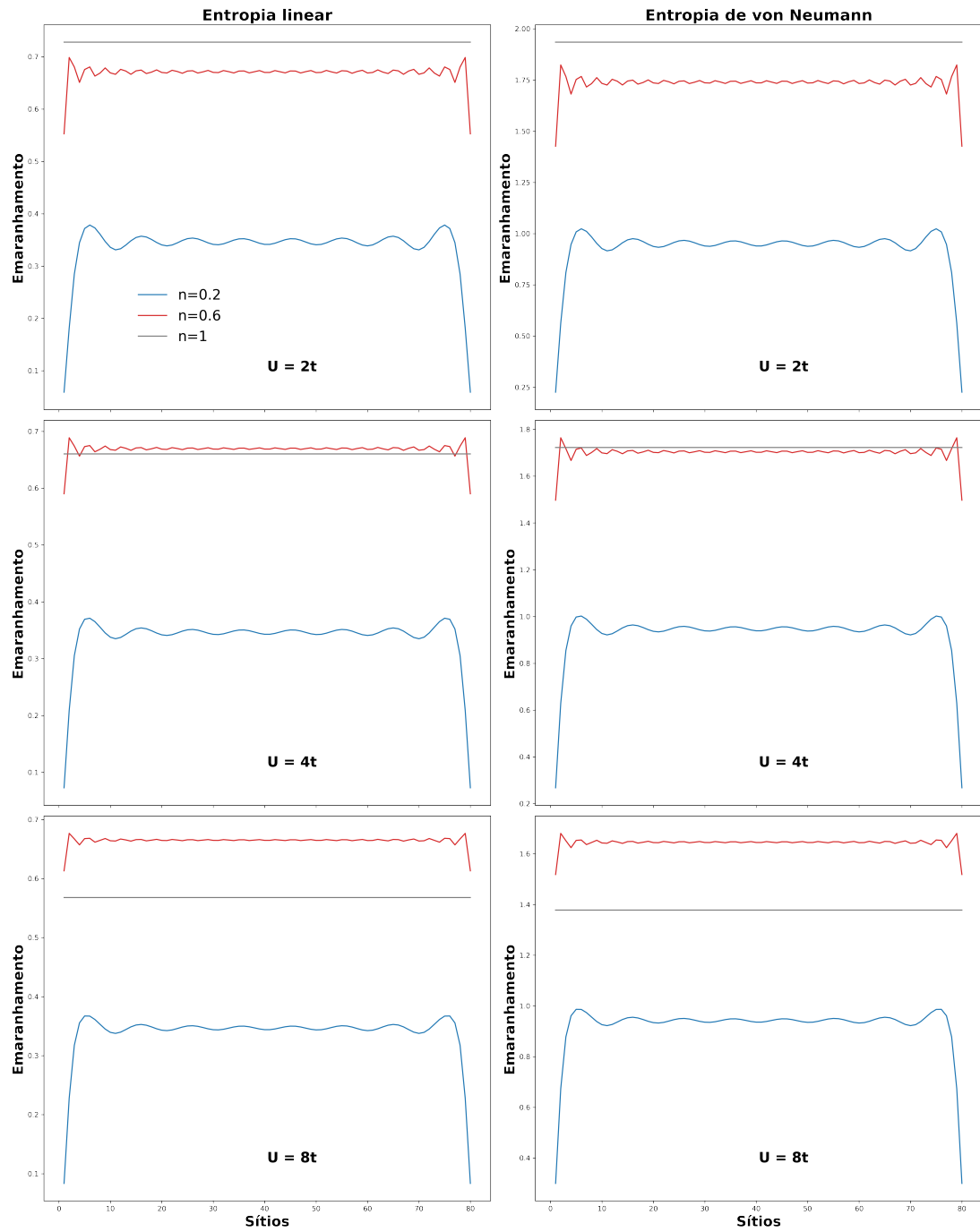


Figura 4.4: Emaranhamento de um único sítio com o restante da cadeia em função da posição deste sítio para uma cadeia de 80 sítios em sistemas repulsivos ($U > 0$).

Entretanto, quando comparamos a capacidade das duas entropias em detectar a interação para a qual surge essa quebra de monotonicidade, nossos resultados para $U=4$ sugerem que há uma maior sensibilidade da entropia linear à medida que o sistema se aproxima

da transição em $n=1$, visto que a não monotonicidade já está presente em $U=4$ para entropia linear e ainda não (embora bem próxima) para a entropia de von Neumann.

Na Fig. (4.5), analisamos este cenário através do emaranhamento médio da cadeia em função da densidade e de fato, como mostram as entropias e suas primeiras derivadas, há uma diferença (ainda que suave, uma vez que estamos considerando apenas grandezas médias) entre o ponto de inflexão do emaranhamento medido pela entropia linear e pela entropia de von Neumann, confirmando nossa hipótese de que a entropia linear de certa forma antecipa a transição metal-isolante (em U e em n).

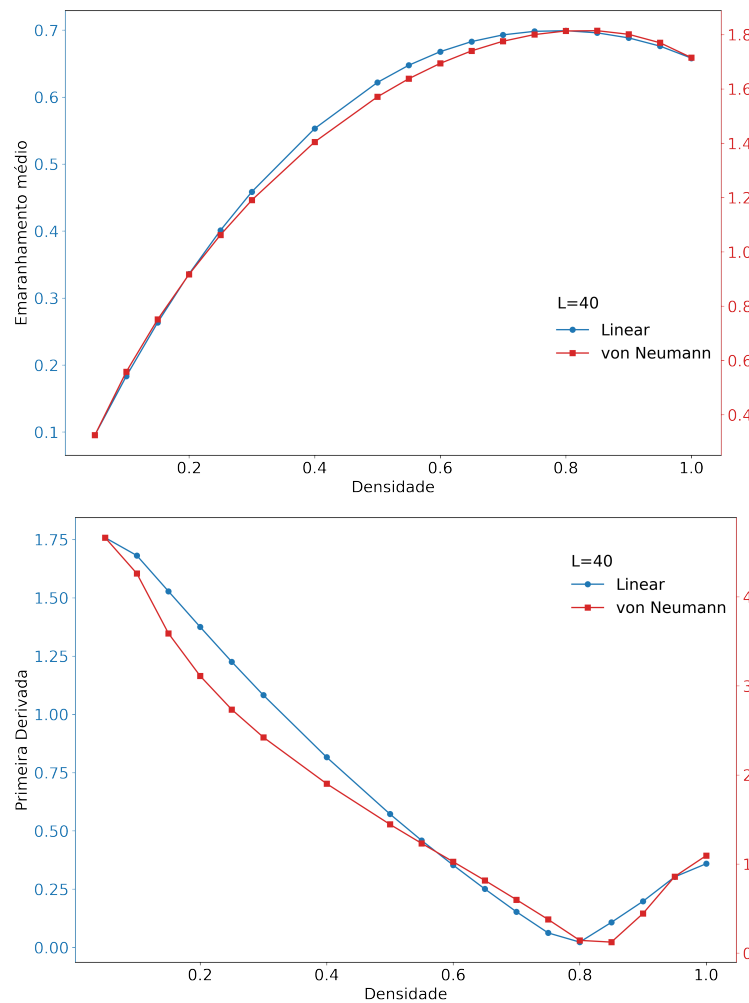


Figura 4.5: Emaranhamento calculado via entropia linear e von Neumann para uma cadeia de 40 sítios em função da densidade para $U=4$ (parte superior) e sua primeira derivada (parte inferior).

No entanto, ao observarmos a Fig. (4.6), a aparente antecipação da entropia linear em detectar a transição, na verdade reflete um efeito de tamanho finito. Enquanto a entropia linear apresenta um comportamento não monotônico com a interação para $L \lesssim 35$, a entropia de von Neumann só apresenta não monotonicidade para $L \lesssim 6$.

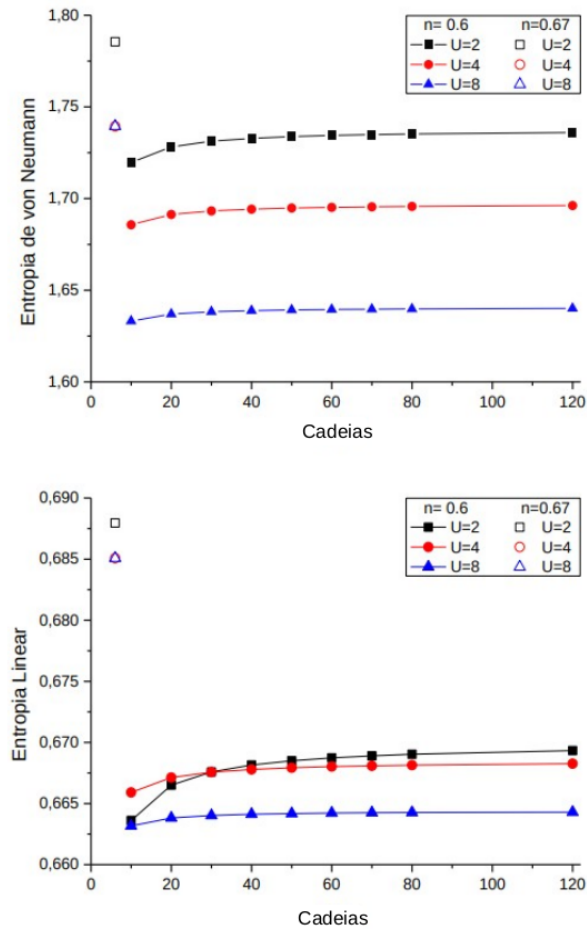


Figura 4.6: Comparação entre a entropia média, von Neumann (acima) e linear (abaixo), em função da cadeia (L).

Podemos concluir que a entropia linear é mais susceptível aos efeitos de borda (devido ao tamanho finito), que a entropia de von Neumann. Para o caso exclusivo de cadeias finitas essa pior desempenho da entropia linear poderia ser superada simplesmente adotando-se cadeias maiores.

No entanto, considerando importantes aplicações de emaranhamento em sistemas heterogêneos, como cadeias desordenadas [9, 10] e superredes [56], efeitos semelhantes aos de bordas, agora produzidos por impurezas, poderão definir criticamente a qualidade da entropia linear na descrição do sistema e suas transições de fase. O próximo capítulo tratará da investigação do desempenho da entropia linear em comparação à entropia de von Neumann em superredes.

Podemos concluir que, para sistemas homogêneos ao compararmos as entropias médias verificamos que a entropia linear é mais susceptível aos efeitos de borda, quando comparada a entropia de von Neumann, provocando transições de fase com resultados equivocados. Estes efeitos de tamanho finito pode ser minimizado adotando cadeias maiores que $L \lesssim 35$.

5 SUPERREDES

As superredes, também chamadas heteroestruturas, podem ser definidas como uma junção periódica de mais de um material. De acordo com Paiva e dos Santos [57], nas últimas décadas estas estruturas tem sido alvo de grande interesse tecnológico para o aprimoramento de dispositivos. Devido a este fato as superredes tem sido vastamente estudadas para compreender a origem dos fenômenos presentes nesta classe de materiais [57].

Trataremos neste capítulo o caso particular de uma superrede de 36 scom duas subredes, em que uma das subredes tem potencial zero, $V_1 = 0$, e a outra possui potencial $V_0 = V_{EXT}$, sendo $V_{EXT} = 1$ a 4 variando de 0.5 a 0.5 em que as superredes terão periodicidades iguais a 2:7, 3:6 e 4:5.

Para maior intuição sobre os fenômenos estudados, é comum a representação de superredes através de potenciais de confinamentos de estados, os chamados poços de potenciais, como pode ser observado na representação de uma superrede de $p:q=2:7$ descrita na Fig. (5.1).

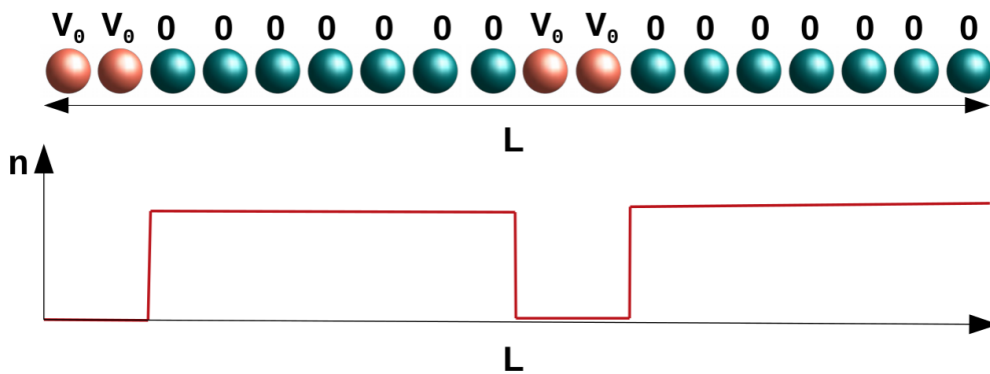


Figura 5.1: Representação de uma superrede 2:7 via poços potenciais. Fonte: Próprio autor.

Como observado por Paiva e dos Santos [57, 58], a densidade referente a camada V_1 possui densidade maior que a camada V_0 , esse fenômeno se deve pelos elétrons sofrerem forte repulsão devido ao potencial repulsivo V nos sítios em que V_{EXT} é aplicado. Buscando sítios livres de V , os elétrons tendem a migrar para os sítios vizinhos provocando valores máximos de emaranhamento transferidos das subredes de potenciais repulsivos para as subredes livres.

É possível afirmar que ao mantermos V_1 e V_0 fixos, e variando as periodicidades, $p:q$ a densidade aumenta nos sítios livres à medida que os sítios com impurezas aumentam (ou seja, p aumenta). Estas afirmações, na prática, podem ser vistas através da análise do perfil de densidade nas superredes, como mostra a Fig. (5.2).

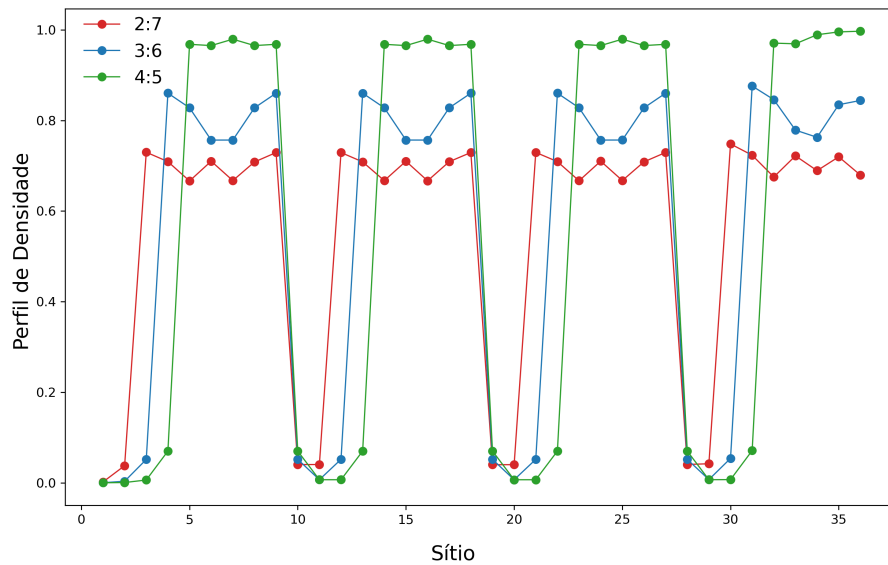


Figura 5.2: Análise comparativa dos efeitos da variação das modulações sobre a superrede com $U=4t$, $V=4t$, $L=36$ e $n=0.55$.

Na Fig. (5.3) é possível observar o comportamento das entropias médias, linear e von Neumann, em função da interação. Na literatura, para $U > 0$ deve-se observar uma diminuição lenta do emaranhamento médio a medida que U torna-se mais repulsivo, isto se deve ao fato dos sistemas estudados possuírem $n < 1$, mais especificamente $n = 0.55$. Como consequência o comportamento apresentado é classificado como metálico visto que a baixa densidade provoca, mesmo em altas interações, uma alta itinerância entre as partículas e por consequência um alto grau de emaranhamento [1].

Assim, podemos observar que a entropia de von Neumann possui um comportamento muito semelhante ao encontrado na literatura [1], enquanto a entropia linear apresenta um aumento do emaranhamento até o momento em que ela aparentemente mantém-se a valor constante [1].

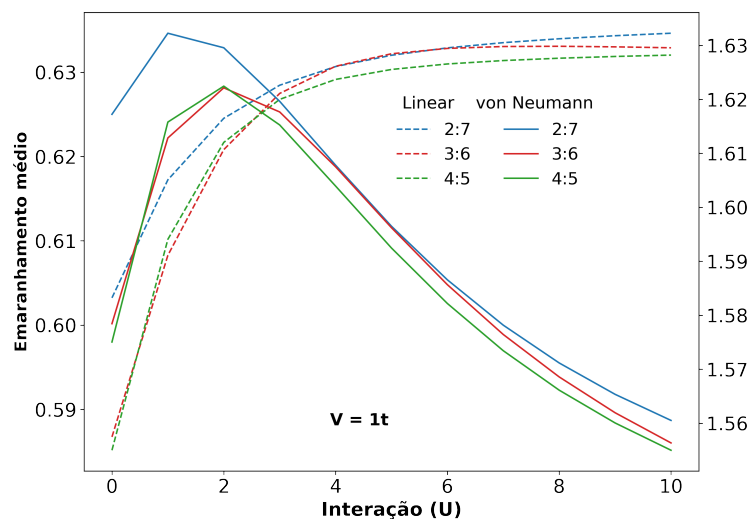


Figura 5.3: Emaranhamento médio de superredes de 36 sítios e $n=0.55$ em função de interações repulsivas.

Tomemos esta diferença como estímulo para o estudo das superredes através de diversos potenciais, buscando compreender os diferentes fenômenos observados nestas entropias, como pode ser visto na Fig.(5.4) em que é possível reparar o comportamento de cada superrede separadamente, via cálculos de DMRG.

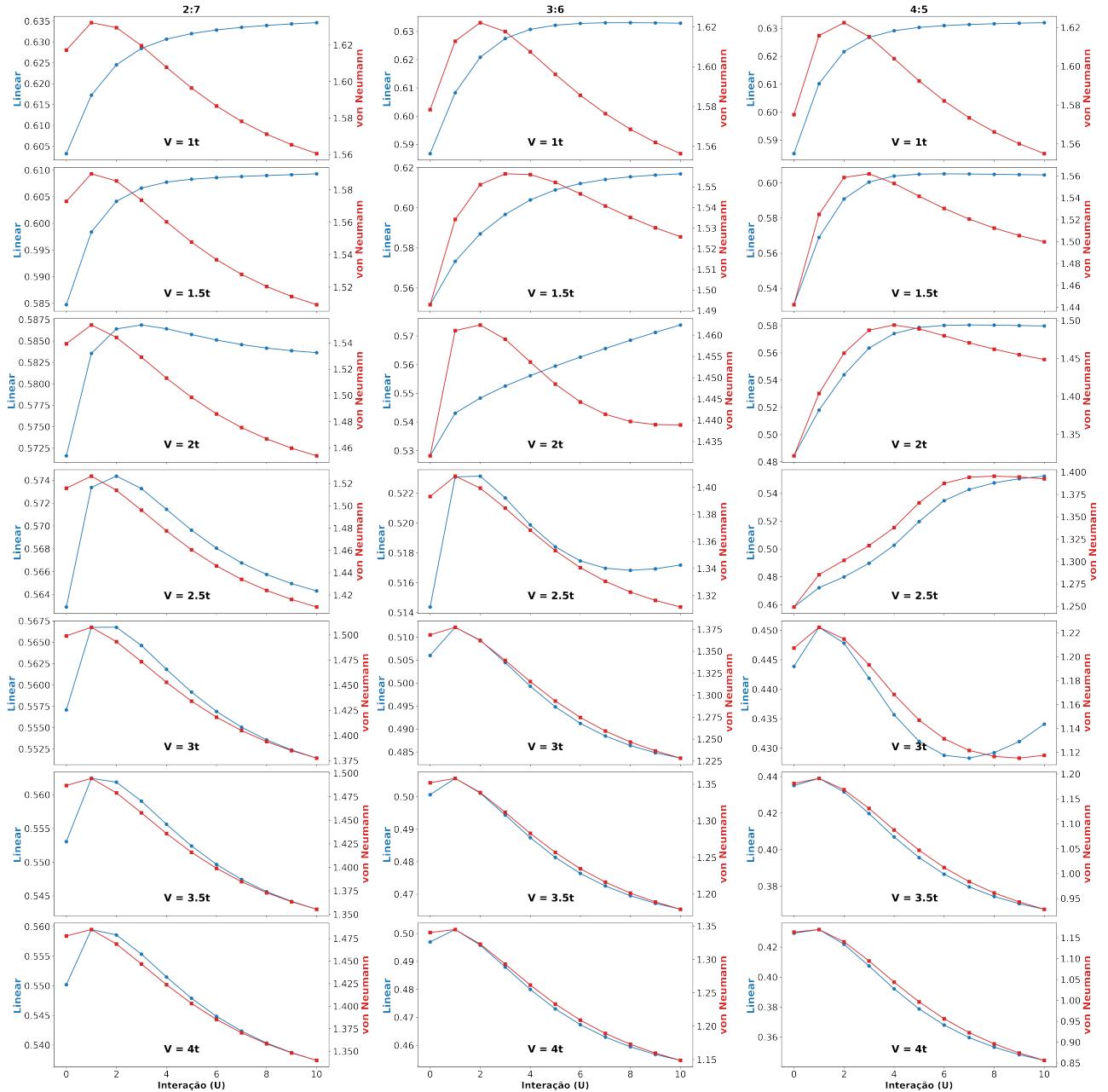


Figura 5.4: Comparação entre as entropias médias em função da interação coulombiana (U) para superredes com $n=0.55$ e 36 sítios de $p:q= 2:7, 3:6$ e $4:5$, sob variação do potencial externo (V).

Ao olharmos a Fig. (5.4) observamos que o emaranhamento máximo ocorre no sistema onde V é menor, em nosso caso quando $V=1$. Por consequência à medida que aumentamos a intensidade de V do sistema ocorre uma restrição da itinerância das partículas, ocasionando uma interrupção da comunicação entre os sítios limitando assim os graus de liberdade do sistema e como resultado, o emaranhamento tende a diminuir.

A queda do emaranhamento também pode ser vista nas diferentes proporções de periodicidade p, q no sistema, em que a medida que a superrede tende a um material com periodicidades próximas, isto é $p \sim q$ representando um material de 50% de impureza, seu emaranhamento cai, visto que a quantidade de impurezas é máxima e por consequência as restrições também aumentam. Note que para $C > 50\%$ de concentração de impurezas repulsivas o sistema se comporta como se tivesse $100 - C$ impurezas atrativas, dado que a predominância será de sítios com $V > 0$ em contraste à minoria com $V = 0$.

O comportamento distinto entre as entropias linear e von Neumann na Fig. (5.4) no intervalo entre $V = 1$ a $V = 2.5$, pode estar relacionado à falta de sensibilidade da entropia linear à pequenos efeitos e nas modulações de V no sistema, visto também na Fig. (5.3).

Este fato fica mais evidente ao observarmos o intervalo $V = 2.5$ a $V = 3.5$, na qual é possível notar que ao aumentarmos o valor da impureza repulsiva (V) a entropia linear tende a um comportamento semelhante ao da entropia de von Neumann quando o sistema torna-se mais repulsivo.

Em $V = 2.5$ na superrede 4:5 o comportamento das entropias sugere um decréscimo tardio do emaranhamento. Como observado na Fig. (5.5), ao analisarmos este sistema com U s mais repulsivos, mais especificamente $U = 15$ e 20 observamos que de fato, a queda do emaranhamento é mais tardia, que demonstra certa peculiaridade das superredes 4:5 quando comparadas as demais em mesmo V . Entretanto, a entropia linear demora ainda mais para captar este comportamento.

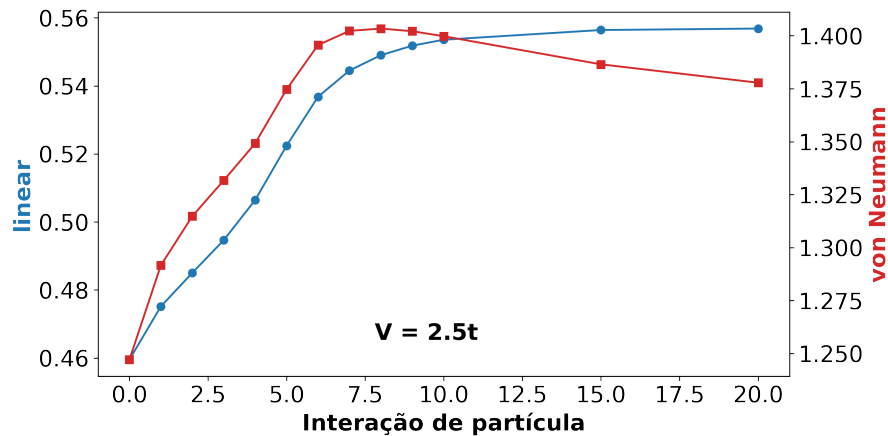


Figura 5.5: Comparação entre as entropias médias em função da interação coulombiana (U) para uma superrede 4:5 com $n=0.55$ e 36 sítios, sob um $V=2.5$

Assim, podemos entender que o comportamento distinto da entropia linear deve-se a sua baixa sensibilidade as variações das periodicidades e modulações de V e em função de U , gerando resultados pouco confiáveis em sistemas heterogêneos de baixa interação e potencial.

6 CONCLUSÃO

Foi proposto neste trabalho o estudo comparativo entre duas medidas de emaranhamento, sendo elas a entropia linear e a entropia de von Neumann, para quantificar o grau de emaranhamento de sistemas descritos pelo modelo de Hubbard unidimensional. Iniciamos nossa investigação com o estudo comparativo dos métodos (DFT com LDA e DMRG) tanto quanto ao seu perfil de densidade quanto às entropias. Foi possível concluir que a DFT (com LDA) apresenta-se como uma boa ferramenta para o estudo de sistemas homogêneos, principalmente para cadeias longas, com desvios médios inferiores a 3%. Por outro lado, demonstrou-se uma ferramenta pouco eficiente quando analisada sua performance em superredes, uma vez que em alguns casos seus desvios são superiores a 20%.

Ao explorarmos estas entropias em sistemas homogêneos demonstramos que as entropias apresentam pequenas diferenças no regime de densidades próximas à transição de fase quântica de metal para isolante. Este fenômeno revelou-se, entretanto um artefato da entropia linear devido a uma maior sensibilidade aos efeitos de borda ocasionando uma falsa antecipação da transição de fase.

Ao analisarmos as superredes observamos comportamentos distintos entre as entropias, linear e von Neumann, em especial para modulações V e interações U menores e periodicidade próximas ($p \sim q$). Assim, foi possível concluir que a entropia linear não é uma medida apropriada de emaranhamento em superredes de periodicidades próximas e baixas modulações V , sendo mais eficientes em modulações maiores.

7 REFERÊNCIAS

1. FRANÇA, Vivian V. Emaranhamento em Sistemas de Muitos Férmions. Tese Doutorado - Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008.
2. RIGOLIN, Gustavo Garcia. Estados quânticos emaranhados. Tese Doutorado - Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2005.
3. SCHRÖDINGER, Erwin. The present status of quantum mechanics. *Die Naturwissenschaften*, v. 23, n. 48, p. 1-26, 1935.
4. EINSTEIN, Albert; PODOLSKY, Boris; ROSEN, Nathan. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete?. *Physical review*, v. 47, n. 10, p. 777, 1935.
5. BELL, John S. On the einstein podolsky rosen paradox. *Physics Physique Fizika*, v. 1, n. 3, p. 195, 1964.
6. WERNER, Reinhard F. Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model. *Physical Review A*, v. 40, n. 8, p. 4277, 1989.
7. URSIN, Rupert et al. Quantum teleportation across the Danube. *Nature*, v. 430, n. 7002, p. 849-849, 2004.
8. BARENDT, Rami et al. Digitized adiabatic quantum computing with a superconducting circuit. *Nature*, v. 534, n. 7606, p. 222-226, 2016.
9. CANELLA, Guilherme A. ; FRANÇA, Vivian V. Entanglement in disordered superfluids: The impact of density, interaction and harmonic confinement on the Superconductor–Insulator transition. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 545, p. 123646, 2020.
10. 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. 1-6, 2019.
11. FRANÇA, Vivian V. Entanglement and exotic superfluidity in spin-imbalanced lattices. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 475, p. 82-87, 2017.
12. FRANÇA, Vivian V. Entanglement and exotic superfluidity in one-dimensional spin-imbalanced lattices. In: *APS March Meeting Abstracts*. 2016. p. E27. 014.

13. CAPELLE, Klaus. A bird's-eye view of density-functional theory. *Brazilian journal of physics*, v. 36, p. 1318-1343, 2006..
14. FUJISAKI, Hiroshi; MIYADERA, Takayuki; TANAKA, Atushi. Dynamical aspects of quantum entanglement for weakly coupled kicked tops. *Physical Review E*, v. 67, n. 6, p. 066201, 2003.
15. SCOTT, Andrew J.; CAVES, Carlton M. Entangling power of the quantum baker's map. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, v. 36, n. 36, p. 9553, 2003.
16. BANDYOPADHYAY, Jayendra N.; LAKSHMINARAYAN, Arul. Entanglement production in coupled chaotic systems: Case of the kicked tops. *Physical Review E*, v. 69, n. 1, p. 016201, 2004.
17. BANDYOPADHYAY, Jayendra N.; LAKSHMINARAYAN, Arul. Testing statistical bounds on entanglement using quantum chaos. *Physical review letters*, v. 89, n. 6, p. 060402, 2002
18. BUSCEMI, Fabrizio; BORDONE, Paolo; BERTONI, Andrea. Linear entropy as an entanglement measure in two-fermion systems. *Physical Review A*, v. 75, n. 3, p. 032301, 2007.
19. LIMA, N. A. et al. Density functionals not based on the electron gas: Local-density approximation for a luttinger liquid. *Physical review letters*, v. 90, n. 14, p. 146402, 2003.
20. MOREAU, Paul-Antoine et al. Imaging Bell-type nonlocal behavior. *Science advances*, v. 5, n. 7, p. eaaw2563, 2019.
21. BRÜNNER, Tobias et al. Entanglement enhancement in spatially inhomogeneous many-body systems. *Physical Review A*, v. 87, n. 3, p. 032311, 2013.
22. VEDRAL, Vlatko et al. Quantifying entanglement. *Physical Review Letters*, v. 78, n. 12, p. 2275, 1997.
23. SHANNON, Claude Elwood. A mathematical theory of communication. *The Bell system technical journal*, v. 27, n. 3, p. 379-423, 1948.
24. BENNETT, Charles H. et al. Concentrating partial entanglement by local operations. *Physical Review A*, v. 53, n. 4, p. 2046, 1996.
25. MAZIERO, Jonas. Entendendo a entropia de von Neumann. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 37, 2015.
26. NIELSEN, Michael A.; CHUANG, Isaac L. Quantum computation and quantum information. *Phys. Today*, v. 54, n. 2, p. 60, 2001.

27. VON NEUMANN, John. Proof of the ergodic theorem and the H-theorem in quantum mechanics. *The European Physical Journal H*, v. 35, n. 2, p. 201-237, 2010.
28. FANO, Ugo. Description of states in quantum mechanics by density matrix and operator techniques. *Reviews of modern physics*, v. 29, n. 1, p. 74, 1957.
29. ADESSO, Gerardo; ILLUMINATI, Fabrizio; DE SIENA, Silvio. Characterizing entanglement with global and marginal entropic measures. *Physical Review A*, v. 68, n. 6, p. 062318, 2003.
30. ŻYCZKOWSKI, Karol. Rényi extrapolation of Shannon entropy. *Open Systems & Information Dynamics*, v. 10, n. 03, p. 297-310, 2003.
31. ANGELO, Renato Moreira et al. Aspectos quânticos e clássicos da dinâmica de emaranhamento em sistemas hamiltonianos. 2003.
32. 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
33. CAMPO JR, Vivaldo L. et al. Quantitative determination of the Hubbard model phase diagram from optical lattice experiments by two-parameter scaling. *Physical review letters*, v. 99, n. 24, p. 240403, 2007.
34. MOTT, Nevill F. The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, v. 62, n. 7, p. 416, 1949.
35. LIEB, Elliott H.; WU, F. Y. The one-dimensional Hubbard model: a reminiscence. *Physica A: statistical mechanics and its applications*, v. 321, n. 1-2, p. 1-27, 2003.
36. GREINER, Markus et al. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *nature*, v. 415, n. 6867, p. 39-44, 2002.
37. OLIVEIRA, Luis Gustavo Soares de et al. Estudo da relação entre emaranhamento e transições de fases quânticas em sistemas de spins interagentes.
38. SACHDEV, Subir. Quantum phases and phase transitions of Mott insulators. In: *Quantum magnetism*. Springer, Berlin, Heidelberg, 2004. p. 381-432.
39. VOJTA, Matthias. Quantum phase transitions. *Reports on Progress in Physics*, v. 66, n. 12, p. 2069, 2003.
40. BITKO, D.; ROSENBAUM, T. F.; AEPPLI, G. Quantum critical behavior for a model magnet. *Physical review letters*, v. 77, n. 5, p. 940, 1996.

41. COLEMAN, Piers. Theories of non-Fermi liquid behavior in heavy fermions. *Physica B: Condensed Matter*, v. 259, p. 353-358, 1999.
42. VON LÖHNEYSEN, Hilbert. Non-Fermi-liquid behaviour in the heavy-fermion system. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 8, n. 48, p. 9689, 1996.
43. DAGOTTO, Elbio. Correlated electrons in high-temperature superconductors. *Reviews of Modern Physics*, v. 66, n. 3, p. 763, 1994.
44. SACHDEV, Subir. Quantum criticality: competing ground states in low dimensions. *Science*, v. 288, n. 5465, p. 475-480, 2000.
45. SONDHI, Shivaji Lal et al. Continuous quantum phase transitions. *Reviews of modern physics*, v. 69, n. 1, p. 315, 1997.
46. KRAVCHENKO, S. V. et al. Scaling of an anomalous metal-insulator transition in a two-dimensional system in silicon at $B = 0$. *Physical Review B*, v. 51, n. 11, p. 7038, 1995.
47. MOTT, Nevill Francis; FRIEDMAN, L. Metal-insulator transitions in VO_2 , Ti_2O_3 and $\text{Ti}_{2-x}\text{V}_x\text{O}_3$. *Philosophical Magazine*, v. 30, n. 2, p. 389-402, 1974..
48. WHITE, Steven R. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Physical review letters*, v. 69, n. 19, p. 2863, 1992.
49. SCHOLLWÖCK, Ulrich. The density-matrix renormalization group. *Reviews of modern physics*, v. 77, n. 1, p. 259, 2005.
50. MALVEZZI, André Luiz. An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems. *Brazilian journal of physics*, v. 33, p. 55-72, 2003.
51. DE MEDEIROS, Marcos HL. O Método DMRG. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 2016.
52. DOURADO, Guilherme AM. Modelo de kondo-hubbard atrativo para ordenamento de momentos magnéticos locais em supercondutores. Trabalho de Conclusão de Curso - Faculdade de Ciências, Universidade Estadual Paulista "Júlio De Mesquita Filho", Bauru, 2021.
53. HOHENBERG, Pierre; KOHN, Walter. Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, v. 136, n. 3B, p. B864, 1964.
54. KOHN, Walter; SHAM, Lu Jeu. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, v. 140, n. 4A, p. A1133, 1965..
55. HELLMANN, H. Einführung in die Quantenchemie. Texte imprimé. F. Deuticke, 1937.

56. JAMES, Alyn DN; AICHHORN, Markus; LAVEROCK, James. Quantum confinement induced metal-insulator transition in strongly correlated quantum wells of SrVO₃ superlattices. *Physical Review Research*, v. 3, n. 2, p. 023149, 2021.
57. PAIVA, Thereza; DOS SANTOS, Raimundo R. Metal-insulator transition in one-dimensional Hubbard superlattices. *Physical Review B*, v. 58, n. 15, p. 9607, 1998.
58. PAIVA, Thereza; DOS SANTOS, Raimundo R. Electronic correlations in one-dimensional superlattices. *Physical review letters*, v. 76, n. 7, p. 1126, 1996.