

MURILO A. GARCIA SILVA

Assinaturas de transições de fase quânticas via entropia média e típica

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

Orientadora: Profa. Dra. Vivian Vanessa França.

Instituto de Química, UNESP
Araraquara, 2023

S586a Silva, Murilo Alexandre Garcia
Assinaturas de transições de fase quânticas via entropia
média e típica / Murilo Alexandre Garcia Silva. -- Araraquara,
2023
47 f. : il.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual Paulista
(Unesp), Instituto de Química, Araraquara
Orientadora: Vivian Vanessa França

1. Materiais nanoestruturados. 2. Entropia quântica. 3.
Transições metal-isolante. 4. Desordem. 5. Simulação
(Computadores). I. Título.

Sistema de geração automática de fichas catalográficas da Unesp. Biblioteca do
Instituto de Química, Araraquara. Dados fornecidos pelo autor(a).

Essa ficha não pode ser modificada.

CERTIFICADO DE APROVAÇÃO

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: "Assinaturas de transições de fase quânticas via entropia média e típica"

AUTOR: MURILO ALEXANDRE GARCIA SILVA

ORIENTADORA: VIVIAN VANESSA FRANÇA HENN

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

Vivian Vanessa Franca
Henn:03730507982

Digitally signed by Vivian Vanessa Franca
Henn:03730507982
Date: 2023.03.31 11:00:13 -03'00'

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

Prof^a. Dr^a. TAMIRIS TREVISAN NEGRI BORGES (Participação Virtual)
Departamento de Matemática e Educação / Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo - IFSP - Araraquara

Prof. Dr. VALDECI PEREIRA MARIANO DE SOUZA (Participação Virtual)
Departamento de Física / Instituto de Geociências e Ciências Exatas - UNESP - Rio Claro

Araraquara, 31 de março de 2023

DADOS CURRICULARES

IDENTIFICAÇÃO

Nome: Murilo Alexandre Garcia Silva

Nome em citações bibliográficas: GARCIA, M.; GARCIA, M.A.; SILVA, M.A.G.

ENDEREÇO PROFISSIONAL

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

FORMAÇÃO ACADÊMICA

2021 - 2023: Mestrado em Química

- Instituto de Química de Araraquara, Universidade Estadual Paulista - UNESP, Araraquara.
- Dissertação: Assinaturas de transição de fase quânticas via entropia média e típica.
- Orientadora: Prof. Dra. Vivian Vanessa França.

2017 - 2021: Licenciatura em Química

- Faculdade de Ciências e Tecnologia - UNESP, Presidente Prudente.
- Trabalho de Conclusão de curso: Análise das percepções dos docentes de química do ensino médio em relação aos pressupostos da BNCC.
- Orientador: Prof. Dr. Gustavo Bizarria Gibin.

PARTICIPAÇÃO EM EVENTOS CIENTÍFICOS

- 2022 - XXXVI Encontro de Física do Norte e Nordeste. Apresentação de poster: *Quantum phase transitions in distinct disordered landscapes*. Fortaleza, Ceará.
- 2022 - Quantum Technologies meet density-functional theory. Apresentação de poster: *Quantum phase transitions in distinct disordered landscapes*. Instituto Internacional de Física, Rio Grande do Norte, Brasil.
- 2022 - Workshop Quantum Matter and Entanglement. Apresentação oral: *Emaranhamento como forma de detectar transições de fase quânticas em sistemas unidimensionais*. Instituto de Física, UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil.

- 2022 - Workshop on New Horizons in Quantum Correlated Materials.
Apresentação de poster: *Quantum phase transitions in distinct disordered landscapes*. International Centre for Theoretical Physics, South American Institute for Fundamental Research, São Paulo, Brasil.
- 2022 - Encontro de Outono 2022 da Sociedade Brasileira de Física. Apresentação de poster: *Quantum phase transitions in distinct disordered landscapes*. São Paulo, Brasil.

Agradecimentos

Como de praxe, gostaria de iniciar esta seção agradecendo primeiramente a mim mesmo, pois sem mim nada disso seria possível. Quando uma decisão é tomada, devemos aprender a lidar com as consequências sejam elas boas ou ruins. Iniciar um curso de pós-graduação num período neo-pré-iluminista de fato é uma decisão bastante corajosa: a incerteza de bolsas, de recursos básicos e do 'que será o dia de amanhã após tudo isso daqui' foram fatores ponderáveis durante o período de Brasil arcaico que iniciei este estágio que hoje finalizo.

Felizmente, durante todo o processo conquistamos pessoas que nos fortalecem e nos reerguem quando tudo parece fadado a um fracasso iminente, além daqueles que já trazemos de outros momentos.

Estas pessoas, como minha mãe Vivian, minha irmã Mariana, meu padrasto Fernando, e meu bom companheiro Oliver, o cão, foram essenciais para que eu tivesse um lugar de descanso à quilômetros de distância de Araraquara, foram e continuarão sendo meu pouso e poso para todo sempre.

Agradeço com todo o carinho e gratidão também à minha orientadora, uma mulher extremamente qualificada, dedicada e exemplo de orientadora, Profa. Dra. Vivian Vanessa França. Sua orientação e conversas durante as nossas horas de reuniões sempre me deixavam mais tranquilo e faziam com que eu desejasse encontrar-me novamente com a senhora, já que aquele elefante branco da tensão da relação orientador-orientado não pensava nem ao menos em existir. Agradeço à senhora e à agência de fomento também pelas viagens de congresso que me permitiram conhecer mais lugares do Brasil que eu já havia conhecido em tão pouco tempo de existência - foram experiências que guardarei para sempre em minhas lembranças.

Agradeço também aos meus amigos de longa data que conquistei durante a minha vida e graduação, como Gabriela, Millena, Bianca, Beatriz, Clara, Isabela e Vinicius e que até hoje são companheiros para um café da tarde na cantina da UNESP ou ainda naquela doceria tão famosa da cidade.

Em especial, agradeço ao meu amigo João Antônio por ouvir por horas a fio as histórias mais impossíveis criadas pela minha mente entendiada e ainda dar risada, mesmo que forçadamente, e ao Nick, o labrador, pelos passeios que demos na vizinhança e carinho que só um cachorro pode nos proporcionar diariamente. Juntamente a estes dois, agradeço a irradiante Raiane, pelo humor ácido, risadas, reclamações, caronas e idas aos cafés da cidade, vocês sempre estarão em meu coração.

Não posso deixar de agradecer aos colegas de trabalho, como a Tatiana, que tanto me ensinou, ensina e continuará ensinando aqueles que chegam, recebendo a todos com café e bolachinhas de nata, ao Guilherme, pela paciência em ensinar programação a um jovem químico, ao Daniel pelas risadas e humor questionável e a todos os outros membros do grupo que convivi durante este período.

Ainda que meu apreço pela cidade em que conclui este estágio não seja de tão benfazejo, a agradeço, pois senão fosse por ela, não teria conhecido meus amigos Otávio, Weslei e Gabriela, os quais sou eternamente grato pelas horas que passamos juntos rindo, comendo e festando. Sem vocês eu teria surtado - mais do que já surtei!

Sou imensamente grato à minha terapeuta Franciele, que está presente em minha vida há quatro anos e que tem me ajudado no processo de auto conhecimento, gestão de crise e me feito desejar fazer algo com amor e vontade, como ela mostrar ter nas curtas sessões quinzenais, que, principalmente, tem me mostrado que terapia não é somente sobre apagar incêndios, mas também sobre reflorestar a mata.

Finalmente, agradeço à agência de fomento, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq, pelo financiamento para que este capítulo na minha caminhada acadêmica fosse de dedicação exclusiva, e à FAPESP pelos recursos utilizados durante estes anos ímpares.

If I have seen further, it is by standing on the shoulders of giants.

— Sir Isaac Newton

Resumo

Em nanomateriais, sólidos e átomos frios, uma das propriedades quânticas que se destacam, tanto fundamentalmente quanto do ponto de vista de futuras aplicações, é o emaranhamento quântico. Processos quânticos envolvendo estados emaranhados têm recebido grande atenção, tanto em computação, criptografia e teletransporte quânticos, quanto em áreas como nanofísica, nanobiologia e spintrônica. Emaranhamento também tem sido usado para caracterizar o fenômeno de localização em sistemas metálicos. Quando um metal é exposto à desordem, ou seja, a uma distribuição aleatória de impurezas, é possível que ocorra uma transição de fase quântica e o metal se torne um isolante. Essa transição metal-isolante induzida pela desordem é chamada de localização de Anderson, dada a localização do estado quântico do sistema. Estados quânticos localizados são identificados por uma redução substancial do emaranhamento naquele regime de parâmetros em torno do valor crítico da transição. Além das várias formas de simular a desordem, podemos também explorar várias formas de trabalhar com o emaranhamento. Podemos obter o grau de emaranhamento via média aritmética ou média geométrica e observar que ambos apresentam resultados diferentes nos fenômenos de transições de fase quânticas supracitados. Além disso, a forma de implementar a desordem também influencia no comportamento de tais fenômenos.

Palavras-chave: nanomateriais, emaranhamento, transição de fase quântica, entropia média, entropia típica.

Abstract

In nanomaterials, solids and cold atoms, one of the quantum proprieties that highlights, not only in terms of basic concepts but also from the perspective of future applications, is the quantum entanglement. Quantum processes involving entangled states have received great attention, when applied to computation, cryptography, quantum teleportation and other fields, such as nanophysics, nanobiology and spintronic. Entanglement has also been used to characterize the phenomenon of localization in metallic systems. When a metal is exposed to a disorder, i.e. a random distribution of impurities, it is possible that a quantum phase transition occurs and the metal becomes an insulator. This metal-insulator transition induced by disorder is called Anderson localization, given the localization of the quantum state of the system. Quantum localized states are identified by a substantial reduction of the entanglement in the regime of parameters around the critical value of the transition. Beyond the several ways of simulating disorder, we may also explore some ways of working with entanglement. We may obtain the entanglement degree via either arithmetic mean or geometric mean and watch that both present different results in the quantum phase transitions mentioned above. Besides, the way of implementing disorder may also influence in those transition phenomena.

Keywords: nanomaterials, entanglement, quantum phase transition, average entropy, typical entropy.

Lista de Figuras

1	Ilustração de uma cadeia de tamanho L do modelo de Hubbard, destacando a dupla ocupação máxima por sítio com interação intra-sítio U_i , e a itinerância das partículas entre sítios adjacentes, representada pelo termo t_{ij}	23
2	Emaranhamento <i>médio</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes interações intra-sítios e sem desordem (Mott MIT).	30
3	Emaranhamento <i>típico</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes interações intra-sítios e sem desordem (Mott MIT).	30
4	Emaranhamento <i>médio</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e concentração $C = 50\%$ e sem interação intra-sítios (Anderson MIT).	31
5	Emaranhamento <i>típico</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e concentração $C = 50\%$ e sem interação intra-sítios (Anderson MIT).	32
6	Emaranhamento <i>médio</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e concentração, com interação intra-sítios $U = -5t$ (Mott Anderson MIT).	35
7	Emaranhamento <i>típico</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e concentração, com interação intra-sítios $U = -5t$ (Mott Anderson MIT).	35
8	Emaranhamento <i>médio</i> em função da intensidade da impureza V atrativas $V < 0$ de diferentes concentrações C , para sistema não-interagente e densidade $n = 1.0$.	37
9	Emaranhamento <i>típico</i> em função da intensidade da impureza V atrativas $V < 0$ de diferentes concentrações C , para sistema não-interagente e densidade $n = 1.0$.	37
10	Ilustração da distribuição dos potenciais V entre os sítios da cadeia para a desordem intrínseca.	38
11	Amplitude do valor de desordem $ V $ em função de uma cadeia de 10 sítios.	39
12	Emaranhamento <i>médio</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem sem interação intra-sítio, $U = 0$ (Anderson MIT).	40

13	Emaranhamento <i>típico</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem sem interação intra-sítio, $U = 0$ (Anderson MIT).	40
14	Emaranhamento <i>médio</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e interação intra-sítio, $U = 1t$ (Mott-Anderson MIT).	41
15	Emaranhamento <i>típico</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e interação intra-sítio, $U = 1t$ (Mott-Anderson MIT).	41
16	Emaranhamento <i>médio</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e interação intra-sítio, $U = 5t$ (Mott-Anderson MIT).	42
17	Emaranhamento <i>típico</i> em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e interação intra-sítio, $U = 5t$ (Mott-Anderson MIT).	42

Sumário

1	Introdução	13
1.1	Transições de fase quânticas	14
1.1.1	Transição metal-isolante	15
2	Fundamentos Teóricos	17
2.1	Emaranhamento	17
2.1.1	Entropia Média	19
2.1.2	Entropia Típica	20
2.2	Hamiltoniano de Hubbard	22
2.3	Teoria do Funcional da Densidade	24
3	Resultados	28
3.1	Emaranhamento Médio <i>versus</i> Típico	29
3.2	Emaranhamento <i>versus</i> Intensidade de desordem	36
3.3	Emaranhamento no potencial intrínseco de desordem	38
4	Conclusões	43
	Referências	45

1 Introdução

Definida por Einstein como ação fantasmagórica à distancia [12], o emaranhamento ainda permanece como objeto de pesquisas fundamentais relacionadas a informação quântica, computação quântica, criptografia e sistemas de muitos férmions devido a sua capacidade de armazenar, transmitir e processar a informação.

De maneira simples, podemos ilustrar o emaranhamento como um sistema composto por no mínimo dois subsistemas A e B , os quais, por sua vez, são ditos emaranhados desde que uma medida exercida em A tenha efeitos observados em B , e vice-versa.

Matematicamente, podemos definir o emaranhamento como a impossibilidade de fatorização dos estados de subsistemas emaranhados: $|\Psi_{AB}\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ em que $|\psi_i\rangle$ é o estado do subsistema i e $|\Psi_{AB}\rangle$ é o estado do subsistema total. Desta forma, qualquer medida realizada em um dos subsistemas, A ou B , afeta instantaneamente os demais, o que permite a extração de informação de todos os subsistemas a partir da medida de apenas um deles.

Além da descrição qualitativa, o emaranhamento é uma ferramenta quantitativa, ou seja, é possível definir o grau de emaranhamento de um sistema, de forma que um sistema pode estar mais ou menos emaranhado. Portanto, podemos obter mais ou menos informação de B ao medir A , dependendo do grau de emaranhamento entre eles.

Por exemplo, para um sistema bipartido e com estado total puro, há grandezas já bem definidas que permitem quantificar o grau de emaranhamento em sistemas fortemente correlacionados, como a entropia de von Neumann ou entropia de emaranhamento [26] e a concorrência [29].

A entropia de von Neumann para um sistema bipartido, A e B , pode ser calculada a partir da função traço da matriz densidade total nos graus de liberdade de um dos subsistemas. Se aplicado a um sistema formado por duas partículas, cada qual em uma superposição de estados de spin $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$, ao efetuar uma medida sob a partícula A , o resultado da medida irá nos informar o estado da partícula B . Como resultado, podemos obter um subsistema puro, isto é, bem definido e com probabilidade unitária, cujo emaranhamento será nulo, ou ainda, um subsistema misto cujo emaranhamento dependerá do grau de emaranhamento, ou seja, quando todos os possíveis estados da matriz densidade tiverem igual probabilidade de existir, haverá emaranhamento máximo. Quando houver um grau intermediário de mistura, emaranhamento será intermediário.

Um sistema formado por elétrons pode ser descrito por modelos que simulem o com-

portamento itinerante e interativo de partículas em uma cadeia. Um exemplo é o Hamiltoniano de Hubbard, que descreve cadeias com sítios ocupados por elétrons ou íons[17]. Este modelo teórico é uma ferramenta bastante útil no estudo de transições de fase quânticas causadas por interação coulombiana - transição de Mott - ou potenciais aleatórios aplicados aos sítios - transição de Anderson.

Para cadeias com até 20 sítios, o hamiltoniano de Hubbard pode ser solucionável, mas para cadeias de tamanho intermediário, a solução exata se torna inviável. No entanto, podemos utilizar da Teoria do Funcional da Densidade (DFT - do inglês Density Functional Theory) para obter várias propriedades do Hamiltoniano.

Trabalhos anteriores mostram que o emaranhamento pode ser investigado a estas cadeias de forma a estudar propriedades de muito férmions. Assim, simulando um sistema de partículas itinerantes através da solução do hamiltoniano de Hubbard via DFT podemos detectar transições de fase quânticas a partir da aplicação da entropia de emaranhamento [22]. Neste trabalho, além de explorar a entropia de emaranhamento média, analisamos uma outra abordagem para quantificar o emaranhamento: a entropia típica [11], visto que ela evidência a contribuição típica dos estados eletrônicos próximos ao limite da transição de fase.

Diante disto, o objetivo deste trabalho foi analisar as transições de fase quântica via entropia de emaranhamento média e típica, definidas matematicamente como média aritmética e geométrica, respectivamente. Para isso, utilizamos do argumento teórico da TMT-DMFT (do inglês, *Typical-medium Theory Mean-field Theory*) [15, 4] para obter o emaranhamento típico, a Teoria do Funcional da Densidade, DFT [20, 9] e o modelo unidimensional descrito por Hubbard.

1.1 Transições de fase quânticas

Na linha de pesquisa de nanoestruturas e nanomateriais, a física do estado sólido é essencial, pois busca compreender as propriedades térmicas, mecânicas, magnéticas e óticas de materiais sólidos a partir do microscópico, isto é, investigando a origem das forças que mantêm os átomos juntos num sólido e nos níveis de energia permitidos dos elétrons num sólido, a mobilidade eletrônica, entre outros [13]. Tais estudos fornecem bases para desenvolvimento de teorias como de bandas dos sólidos, que pode ser aplicada ao estudo de materias condutores, isolantes e semicondutores.

As diferentes estruturas de banda definem as características de cada material. Por

exemplo, condutores, que possuem a banda de valência próxima a banda de condução, livre de um *gap* de energia que os separem, apresentam uma diminuição da condutividade elétrica com o aumento da temperatura. Já a condutividade elétrica dos semicondutores, os quais apresentam um pequeno *gap* de energia entre bandas de valência e condução, aumenta com o aumento da temperatura. E, por último, os isolantes não apresentam condutividade elétrica devido ao grande *gap* de energia entre as duas bandas.

A condutividade elétrica nos sólidos é explicada pela mobilidade randômica dos elétrons na rede cristalina do metal, pois os elétrons colidem com imperfeições na rede, as quais são produzidas devido a agitação térmica dos íons em torno de suas posições de equilíbrio na rede ou com íons de impurezas da rede, conseqüentemente, afetando a condutividade. Além disso, outros fatores externos como temperatura e pressão podem alterar a itinerância eletrônica em um material e, conseqüentemente, alterar comportamentos macroscópicos, fazendo um material que antes era condutor agora apresentar comportamento isolante, ou vice-versa. Este fenômeno de mudança de estrutura microscópica e de comportamento é chamado de transição de fase quântica.

Uma transição de fase pode ser de dois tipos: clássica ou quântica. A primeira pode ocorrer devido a fatores como temperatura e pressão, e são amplamente conhecidos, por exemplo, a transição de fase sólido-líquido ou líquido-gás da água, desencadeada pelo aumento de flutuações térmicas quando a temperatura se aproxima da temperatura crítica. O segundo é a transição de fase quântica que ocorre mesmo à temperatura zero absoluto, regime em que as flutuações térmicas diminuem e surgem as flutuações quânticas devido ao princípio da incerteza de Heisenberg, e pode ser induzida por parâmetros não-térmicos, como densidade eletrônica, campo magnético, força de interação ou impurezas.

1.1.1 Transição metal-isolante

Para o caso de um metal, a transição de fase quântica metal-isolante, MIT (do inglês, *Metal-insulator transition*), quando ocorre à temperatura zero, pode ser de dois tipos: Mott [24], induzida por correlação eletrônica, e Anderson [3], induzida por desordem.

Hubbard mostrou em seu modelo [19] que uma transição de Mott pode ocorrer em uma rede semi preenchida com partículas fortemente interagentes. Por outro lado, a transição do tipo Anderson é caracterizada por um sistema de elétrons não interagentes, sendo induzida, portanto, por algum tipo de desordem [15]. A presença de desordem também leva à localização da função de onda do elétron devido à diferença de energia entre os

sítios vizinhos que impede o transporte de cargas pela rede [4].

Além disso, a combinação dos dois mecanismos de localização de MIT não é uma relação trivial, ou seja, trabalhos recentes [15, 4, 7, 6] mostraram que a combinação dos dois pode levar a uma relevância maior de um dos mecanismos, Mott ou Anderson, e deslocamento do ponto crítico em que ocorre um mecanismo ou o outro [5].

Houveram avanços significativos na descrição teórica destes mecanismos, de forma isolada ou combinada [8]. No entanto, a maioria destes estudos foram realizados utilizando a teoria do campo médio dinâmico, DMFT (do inglês, *Dynamical Mean-field Theory*) [14] e a teoria típica média, TMT-DMFT [15, 4], que apesar de conseguir tratar bem a correção eletrônica em sistemas de muitos corpos é um método bastante custoso computacionalmente.

Os fundamentos teóricos deste trabalho são apresentados no capítulo 2, onde descrevemos primeiramente o modelo de Hubbard, seguido pela descrição sobre DFT, onde incluímos a versão da DFT utilizada para o modelo de Hubbard, e a parte final reserva-se a apresentar a definição de emaranhamento e como o aplicamos para o modelo de Hubbard.

Por fim, no capítulo 3, apresentamos os resultados do trabalho, onde verificamos as diferentes assinaturas da transição de fase metal-isolante quantificada pela entropia média e entropia típica e, no capítulo 4, apresentamos as conclusões finais e perspectivas futuras.

2 Fundamentos Teóricos

Reservamos este capítulo aos fundamentos teóricos essenciais para a compreensão dos resultados desta dissertação. Iniciamos descrevendo a entropia de emaranhamento qualitativa e quantitativamente, diferenciando-as entre entropia típica e média. Em seguida, apresentamos o modelo de Hubbard, que permite modelar uma rede com elétrons itinerantes e com o seu *hopping* e, por fim, conceitos básicos da DFT e a DFT aplicada ao modelo de Hubbard.

2.1 Emaranhamento

Emaranhamento é uma propriedade exclusiva da mecânica quântica, que se manifesta como um observável de mensurabilidade não-trivial, porém capaz de identificar, quantificar e controlar a informação em um sistema, portanto, bastante útil em diversas áreas, como informação quântica, computação quântica e na descrição de sistemas multipartidos, como será feito neste trabalho.

Um sistema emaranhado é descrito como a impossibilidade de fatorização dos estados dos subsistemas emaranhados. Assim, se três subsistemas A , B e C , estão emaranhados entre si, então o estado total $|\Psi_{ABC}\rangle$ não é fatorizado no produto dos estados individuais:

$$|\Psi_{ABC}\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \otimes |\psi_C\rangle, \quad (1)$$

onde $|\psi_i\rangle$ é o estado do subsistema i . A não fatorização faz com que ao se perturbar uma das partes através de uma medida por exemplo, as demais também mudarão instantaneamente seus estados iniciais. Essa característica permite que sejam extraídas informações sobre os estados dos demais subsistemas considerando apenas medidas efetuadas sobre um deles. Tal fenômeno ocorre independentemente da distância entre os subsistemas.

As informações de um sistema emaranhado podem ser retiradas considerando métodos quantitativos. Para sistemas multipartidos, ou seja formado por mais de dois subsistemas, com estado total puro existem grandezas como concorrência [29]. Já para um sistema bipartido e estado total puro, a quantidade apropriada para a medida do grau de emaranhamento é a *entropia de von Neumann* ou a *entropia de emaranhamento*.

A matriz densidade de um sistema bipartido com estado total puro $|\Psi_{AB}\rangle$ é

$$\rho_{AB} = |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}|. \quad (2)$$

A entropia de emaranhamento deste sistema é definida, portanto, como

$$S_A = -\text{Tr}[\rho_A \log_2 \rho_A], \quad (3)$$

sendo, ρ_A a matriz densidade reduzida do subsistema A , que é obtida a partir do traço da matriz densidade total nos graus de liberdade do subsistema B

$$\rho_A = \text{Tr}_B [\rho_{AB}]. \quad (4)$$

Visto que podemos obter informação de um subsistema a partir de um outro, a quantificação do emaranhamento permite, portanto, a igualdade abaixo, desde que seja recíproco em um sistema composto por apenas duas partes,

$$S_A = S_B = -\text{Tr}[\rho_B \log_2 \rho_B], \quad (5)$$

onde ρ_B é a matriz densidade reduzida do sistema B , descrita como

$$\rho_B = \text{Tr}_A [\rho_{AB}], \quad (6)$$

obtido, por sua vez, através da matriz densidade total sob o traço nos graus de liberdade de A .

Importante ressaltar que a base 2 do logaritmo não influencia qualitativamente, apenas outras formas, como $\ln$ ou $\log$, poderiam ser usadas, pois diferentes bases acarretam diferentes escalas para a entropia. A escala da entropia irá depender da dimensão d da base de estados, isto é, dependerá do número de estados possíveis do subsistema.

O emaranhamento será mínimo quando o subsistema for puro

$$S_A^{\min} = S_B^{\min} = 0, \quad (7)$$

ou seja, estiver em um estado bem definido, com probabilidade unitária, enquanto que os outros estados têm probabilidade nula.

Já o emaranhamento máximo,

$$S_A^{\max} = S_B^{\max} = -\log_2 \left(\frac{1}{d} \right), \quad (8)$$

ocorrerá quando o subsistema for maximamente misto, isto é, quando todos os estados d possíveis da matriz $\rho_{A(B)}$ apresentarem igual probabilidade $1/d$ de ocorrer. Para graus intermediários de mistura entre os d possíveis estados, S será intermediário.

Dado esta relação entre S e a pureza, é muito comum usar alternativamente a grandeza entropia linear - que define a pureza como medida de emaranhamento.

A entropia linear é uma descrição linearizada da entropia de von Neumann, obtida a partir do primeiro termo de expansão desta. Portanto, descrita como

$$L = 1 - \text{Tr}[\rho^2], \quad (9)$$

onde, Tr é o traço da matriz total, matematicamente descrito como,

$$Tr[\rho^2] = 1 - \sum_{z,x'=1}^d a |(\rho)x, x'|^2. \quad (10)$$

A variação da probabilidade de estado da entropia linear é entre 0 a 1, enquanto a von Neumann, como mencionado, varia entre 0 a 2.

2.1.1 Entropia Média

A descrição de emaranhamento até este momento se fez geral, isto é, definiu-se entropia de emaranhamento qualitativamente, como uma propriedade intrínseca a um sistema, e quantitativamente, ao definir entropia de von Neumann como forma de medir o grau de emaranhamento de um sistema. Este sistema, portanto, pode ser de dois tipos: homogêneo e inhomogêneo, sendo o último o sistema utilizado nesta pesquisa.

Sistemas inhomogêneos são essenciais na modelagem teórica, pois são eles que se aproximam da realidade dos materiais responsáveis pelo desenvolvimento tecnológico. Para simular inhomogeneidades, podemos considerar, por exemplo, o efeito das bordas sobre os sistemas finitos, a presença de impurezas, como ocorre nos sistemas desordenados, junção de diferentes materiais, como acontece nas superredes, ou ainda a presença de um potencial externo inhomogêneo, como o potencial harmônico de uma rede óptica de um ponto quântico [17].

Dado a necessidade de simular materiais mais realistas, devemos considerar ferramentas que permitam o estudo do emaranhamento nestes sistemas inhomogêneos. O teorema de Hohenberg-Kohn (HK) [20, 9] define a entropia S como um funcional da densidade, $S = S[n(r)]$, e, portanto, podemos concluir que se conhecemos a forma exata do funcional $S[n(r)]$ para um determinado sistema inhomogêneo, a entropia de emaranhamento seria determinada exclusivamente por meio da distribuição de densidade $n(r)$ deste sistema.

Este funcional descrito em [17] foi obtido a partir da aproximação LDA (do inglês, *Local Density Approximation*), por esta ser umas das mais simples para o tratamento de energia, e para modelo de Hubbard inhomogêneo, ele é expresso como

$$S[n_i, m, U] \approx S^{LDA}[n_i, m, U] = \sum_i^L S^{hom}(n, m, U)|_{n \rightarrow n_i}, \quad (11)$$

onde L é o número total de sítios, o somatório representa a discretização do sistema em sítios com uma distribuição discreta de densidades n_i .

Após a obtenção de um funcional $S = S[n(r)]$, podemos aplicar ao sistema desordenado, cuja desordem é disposta em sítios específicos ou aleatório da rede com L sítios por

meio de um potencial externo

$$V_i = V_j \delta_{i,j}, \quad (12)$$

onde $\delta_{i,j}$ é a delta de Kronecker. Este potencial pode ser do tipo atrativo, $V < 0$, ou repulsivo, $V > 0$, provocando efeitos diferentes na distribuição de densidade numa cadeia de $L = 100$ sítios.

Trabalhos anteriores já mostraram que o emaranhamento pode ser uma maneira de detectar transições de fase quânticas, *QPT* (do inglês, *Quantum Phase Transitions*) [22, 23]. Da mesma forma, em sistemas inomogêneos, o emaranhamento médio também serve aos objetivos de detectar *QPT*, como mostraram [7, 6, 5, 8], em que se utiliza da média aritmética do emaranhamento. No entanto, como será discutido na próxima seção, outros métodos teóricos, como DMFT, sugerem que os valores médios de determinadas grandezas físicas não descrevem os sistemas adequadamente na fronteira de transição.

2.1.2 Entropia Típica

Mesmo após anos de pesquisa, ainda restam muitas dúvidas sobre as transições de fase metal-isolante causadas por desordem. O processo físico que descreve este fenômeno foi explicado pela primeira vez por Anderson [1], ao atribuir à localização da função de onda eletrônica como responsável pela MIT.

Para estudar tal transição, sabe-se que as aproximações de campo médio são efetivas para descrever teorias de localização, além de fornecerem um parâmetro de ordem que se relaciona com a densidade de estados e, portanto, útil para o estudo da MIT, já que este parâmetro permite distinguir diferentes fases e, conseqüentemente, delinear um diagrama de fase completo [4].

No entanto, com o intuito de descrever um parâmetro de ordem local apropriado e auto-consistente desenvolveu-se uma teoria de campo médio diferente do descrito anteriormente, chamado de Teoria Típica Média (TMT, do inglês *Typical Medium Theory*), que, se aplicada as Teorias de Campo Médio Dinâmicos (DMFT) de sistemas fortemente correlacionados, permite calcular os valores típicos da densidade local de estados eletrônicos (LDOS - do inglês, *local density of states*) que desaparecem quando aproxima-se do limite da transição de fase.

Anderson descreve a transição metal-isolante como resultado da localização da função de onda eletrônica, isto é, os elétrons itinerantes da rede perdem energia cinética e se tornam localizados em sítios adjacentes à presença das impurezas. Esta mobilidade eletrônica

pode ser medida a partir da taxa finita de escape determinada pela LDOS, que, por sua vez, mede a amplitude local das funções de ondas dos elétrons. O valor desta taxa é calculado por $\tau^{-1} \sim t^2 \rho$, sendo t o termo de *hopping* de um sítio e ρ , a densidade local de estados do sítio adjacente.

No entanto, sabemos que ao se aproximar do limite da transição, os valores típicos da LDOS desaparecem e apenas os valores médios são considerados. Para que o primeiro seja considerado calcula-se a taxa *típica* de escape determinada a partir da densidade local *típica* dos estados (TDOS), um parâmetro de ordem útil para a localização de Anderson que mede diretamente a condutividade dos elétrons.

A taxa típica de escape é calculada a partir da média geométrica

$$\rho_{typ} = \exp[\langle \ln \rho \rangle] \quad (13)$$

onde $\langle \ln \rho \rangle$ representa a média aritmética da desordem. A localização de Anderson ocorre em sistemas formado por partículas não interagentes, portanto, a teoria típica média satisfaz a necessidade ao considerar a desordens fortes presentes no sistema, mas apresenta problemas, já que não reproduz corretamente expoentes críticos em qualquer dimensão.

Quanto à formulação da auto-consistência da TMT, considerou-se o "método de cavidade" descrito em [11] e obteve-se a equação para calcular o parâmetro de ordem típica do TDOS:

$$\rho_{typ}(\omega) = \exp \left[\int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) \right] \quad (14)$$

Podemos, portanto, quantificar a contribuição da desordem ao calcular o valor típico próximo ao limite de transição aplicando a teoria da TMT ao DFT através da entropia de von Neumann. Essa abordagem é possível, pois a única restrição exigida pela TMT é que ela seja aplicada a um sistema descrito a partir de energias locais [11].

Portanto, para uma cadeia com L sítios, a entropia de von Neumann Típica pode ser descrita em função da equação (14) como:

$$S_{typ} = \exp \left[\frac{1}{L} \sum_i \ln(S_i) \right], \quad (15)$$

onde S_{typ} é a entropia de von Neumann típica, L , a quantidade de sítios e S_i , a entropia de von Neumann local por sítio. Já a entropia Linear, pode ser reescrita como

$$\bar{L}_{typ} = \exp \left[\frac{1}{L} \sum_i \ln(L_i) \right], \quad (16)$$

onde $\bar{L}$ é a entropia linear típica, L , a quantidade de sítios e L_i , a entropia linear local por sítio.

Para obter o valor da entropia típica para um sistema, devemos calcular o emaranhamento local a partir da entropia de von Neumann aplicada em cada um dos sítios da cadeia, em seguida, fazemos a média do logaritmo natural das entropias locais e, finalmente, aplicamos o exponencial ao valor médio obtido.

Assim, considerando o desaparecimento da contribuição típica na fronteira da transição de fase em sistemas desordenados, podemos aplicar a entropia de von Neumann típica e calcular o emaranhamento típico, de forma que os limites próximos a transição sejam considerados.

2.2 Hamiltoniano de Hubbard

A física do estado sólido busca responder questões envolvendo materiais tanto da ótica experimental quanto teórica. Um das formas de abordar estas questões é a partir do movimento dos elétrons pela rede cristalina [13]. Para isto, utilizam-se de modelos teóricos simplificados, como o modelo de Hubbard, que descreve a essência da física de elétrons em sólidos [16].

O Hamiltoniano de Hubbard unidimensional descreve uma cadeia formada por L sítios, com elétrons distribuídos de acordo com o Princípio de Exclusão de Pauli, podendo ter até dois elétrons por sítios com spins opostos. As partículas num mesmo sítio i experimentam uma interação Coulombiana U_i , além da probabilidade de *hopping*, ou seja, probabilidade t_{ij} de se deslocar de um sítio i para um sítio vizinho. Ainda, a cadeia pode sofrer efeitos de um potencial externo $v_{i\sigma}$ elétrico ou magnético, onde $\sigma = \uparrow, \downarrow$ é a orientação de spin. Assim, o Hamiltoniano de Hubbard unidimensional é dado por

$$\hat{H} = -t_{ij} \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} v_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (17)$$

onde $\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{i\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação de partículas com spin σ no sítio i , $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ é o operador densidade, definido como $n = N/L$, sendo $N = N_\uparrow + N_\downarrow$ o número total de partículas do sistema.

O termo de hopping, t_{ij} , e a interação, U_i , descrevem a probabilidade de itinerância dos elétrons pela cadeia entre sítios adjacentes. Isto é, se no sítio i há uma partícula com spin σ , a probabilidade de uma partícula nos sítios vizinhos $j = i \pm 1$ migrar para o sítio i será nula, se ela tiver o mesmo spin σ , e baixa, se ela estiver sozinha no sítio j , já que o custo energia necessário para manter 2 partículas no sítio i será maior, devido a barreira energética de interação, U_i . Por outro lado, se um sítio está duplamente ocupado e o

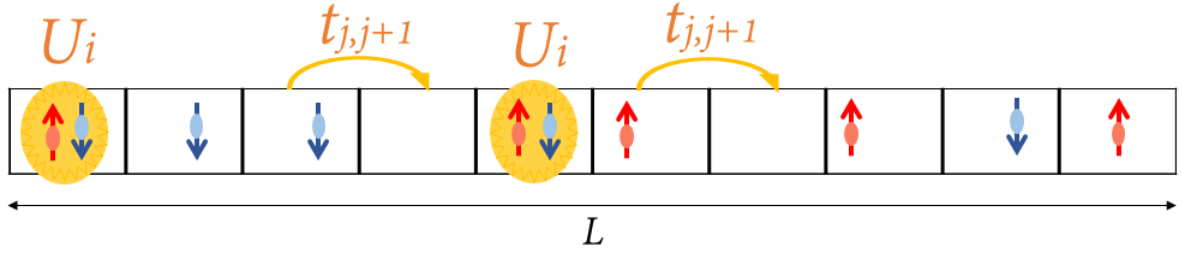


Figura 1: Ilustração de uma cadeia de tamanho L do modelo de Hubbard, destacando a dupla ocupação máxima por sítio com interação intra-sítio U_i , e a itinerância das partículas entre sítios adjacentes, representada pelo termo t_{ij}

adjacente está vazio, a probabilidade de *hopping* para o sítio vazio será alta, tendendo à configuração de mais baixa energia. Este sistema pode ser ilustrado pela Figura 1.

Outro termo que interfere nas probabilidades de itinerância e interação é a densidade, n , das partículas na cadeia, que, por sua vez, depende das condições de contorno e de potencial externo, $v_{i\sigma}$. Para o caso em que o potencial aplicado a uma cadeia de tamanho infinito valer zero, o sistema será homogêneo, ou seja, a distribuição de densidade n_i será uniforme e todos os sítios serão equivalentes, com $U_i = U$ e $t_{ij} = t$. Quanto as condições de contorno em um sistema finito, se ela for do tipo periódica (PBC - do inglês *periodic boundary conditions*), a distribuição será homogênea e se for aberta, (OBC - do inglês, *open boundary conditions*), a distribuição de densidade será afetada pela presença de bordas, apresentando oscilações de Friedel [2]. Para o caso em que potencial é diferente de zero, $v_{i\sigma} \neq 0$, a distribuição será inhomogênea e dependente da forma de $v_{i\sigma}$.

O hamiltoniano de Hubbard é exatamente solúvel por meio de uma diagonalização numérica, desde que a sua rede seja constituído por até 20 sítios. No limite termodinâmico, $L \rightarrow \infty$, em que a cadeia ainda é homogênea, a energia por sítio do estado fundamental pode ser obtida através da solução exata Bethe-Ansatz [24, 27].

Já para o caso em que a cadeia tem tamanho intermediário, $20 \ll L \ll \infty$, existem soluções exatas, como a DMRG (do inglês *Density Matrix Renormalization Group*, mas que é bastante custosa computacionalmente. No entanto, é possível extrair propriedades do Hamiltoniano através da DFT. Esta união se dá a partir da aproximação da densidade local, LDA (do inglês, *local-density approximation*), que fornece uma equação para se obter a energia e a distribuição de densidades de cadeias com tamanhos intermediários, descrita no tópico seguinte.

2.3 Teoria do Funcional da Densidade

Técnicas teóricas de simulação são uma vasta área de pesquisa e buscam resolver, em suma, o problema de muitos corpos levantado por Schrödinger ao formular a equação de onda do elétron [13]. Podem ser citados como exemplos de métodos Dynamical Mean Field Theory, DMFT [15, 4], Quantum Monte Carlo, QMC [28, 10], e Density Functional Theory, DFT [7, 6, 5, 8]. Cada método tem a sua vantagem e desvantagem, e este trabalho utiliza da DFT que aplicado ao modelo de Hubbard se mostra uma alternativa com baixo custo computacional na solução do problema de Schrodinger.

A Teoria do Funcional da Densidade [20] destaca-se como uma ferramenta poderosa na investigação de sistemas interagentes e espacialmente inomogêneos. Tendo como pilar o teorema de Hohenberg-Kohn (HK) [18], cálculos de DFT exploram a relação unívoca entre a densidade de partícula única $n(r)$ do estado fundamental e a função de onda de N partículas interagentes. A simplificação computacional é imensa, pois substitui-se uma função $3N$ -dimensional por outra de apenas 3 coordenadas, justificando a popularidade da DFT no tratamento de sistemas quânticos complexos.

Formalmente o tratamento DFT é exato: uma vez conhecida a função $n(r)$ do sistema e o funcional da densidade de qualquer observável, a obtenção desta grandeza a partir da função densidade será exata. Porém o teorema HK não provê qualquer indicação de como ambos, funcional e densidade, podem ser obtidos.

Graças ao esquema proposto por Kohn e Sham [21], $n(r)$ pode ser obtida auto consistentemente através do mapeamento entre o sistema interagente e um sistema auxiliar, fictício, não-interagente, cujo potencial efetivo é ajustado para reproduzir a densidade do sistema interagente. Este potencial depende, contudo, da energia de troca e correlação do sistema que, como a maioria dos funcionais da densidade, não é conhecida de forma geral. Apenas neste estágio, devido à necessidade de aproximar a energia de troca e correlação, é que o cálculo DFT torna-se aproximado.

De acordo com o teorema de Kohn e Sham, a energia fundamental do sistema pode ser determinada pela sua minimização

$$E_0 = \min \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi[n_0] | \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} | \Psi[n_0] \rangle = E[n_0(r)], \quad (18)$$

em que o operador do potencial externo V depende do sistema e os operadores de energia cinética T e U são chamados de operadores universais. A minimização mostra que a energia mínima é um funcional da densidade. Como todo observável pode em princípio

ser obtido através da função de onda e este se relaciona de forma unívoca com a densidade, todo observável é também um funcional da densidade tal qual a energia. Portanto, a energia do estado fundamental do sistema interagente é dada por

$$E[n] = T[n] + U[n] + V[n]. \quad (19)$$

Como consequência, a minimização da energia E_0 é obtida por

$$\begin{aligned} \frac{\partial E[n]}{\partial n(r)} &= \frac{\partial T[n] + U[n]}{\partial n(r)} + \frac{\partial V[n]}{\partial n(r)} \\ 0 &= \frac{\partial T[n] + U[n]}{\partial n(r)} + V(r) \end{aligned} \quad (20)$$

Visto que a solução exata do funcional universal $F[n]$ não pode ser obtida,

$$F[n] = T[n] + U[n] \quad (21)$$

faz-se aproximações para a obtenção da energia de troca e correlação. Um exemplo desta aproximação é a *Local Density Approximation*, LDA, que consiste em incluir uma aproximação para a energia de troca dos elétrons em um sistema com distribuição heterogênea, descrito pela equação (22)

$$E_{xc}^{LDA}[n(r)] = \int e_{xc}^{hom}[n] d^3r|_{n \rightarrow n(r)}, \quad (22)$$

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. Considerando a energia cinética como se fosse pertencente a um sistema não interagente T_s e a energia de interação aproximada pela interação eletrostática - energia de Hartree, E_H -, a energia de troca e correlação pode ser definida de maneira a conter tudo que se perde com as aproximações, definindo-se como

$$E_{XC}[n] = F[n] - (T_s[n] + E_H[n]), \quad (23)$$

ou ainda,

$$E_{XC}[n] = T[n] - T_s[n] + U[n] - E_H[n] \quad (24)$$

É possível obter o funcional de energia para os sistemas interagentes como

$$E[n] = T_s[n] + E_H[n] + E_{XC}[n] + V[n] \quad (25)$$

Portanto, observa-se que a LDA é uma aproximação adequada a sistemas cuja a densidade varia lentamente com a posição como ocorre em materiais sólidos. Além do termo

da energia mínima, o esquema Kohn-Sham permite, através da minimização da energia do estado fundamental, relacionar a densidade $n(r)$ com a função de onda a fim de comprovar a possibilidade de se obter todos observáveis a partir da DFT, superando-se o problema de muitos corpos e o alto custo computacional para a solução da equação de onda de Schrodinger.

Para relacionar densidade e função de onda, faz-se a minimização da energia fundamental $E[n]$ do sistema não interagente,

$$\frac{\partial E[n]}{\partial n(r)} = \frac{\partial T[n]}{\partial n(r)} + v(r) = 0,$$

onde,

$$\frac{\partial V[n]}{\partial n(r)} = v(r) = V_{KS}, \quad (26)$$

sendo v_{KS} o potencial de Kohn-Sham, escrito como

$$V_{KS} = v_H(r) + v_{XC}(r). \quad (27)$$

A partir desta relação pode-se 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 KS

$$\left[-\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + v_{KS}(r) \right] \phi_i(r) = \varepsilon_i \phi_i(r), \quad (28)$$

em que $\phi_i(r)$ são os orbitais de Kohn-Sham, sendo $n(r) = n_{KS}(r)$, dado por

$$n(r) = \sum_i |\phi_i(r)|^2. \quad (29)$$

Diante das equações apresentadas, define-se um ciclo auto consistente de Kohn-Sham. De forma geral, inicialmente determina-se um valor arbitrário dentro de um intervalo aceitável para a densidade $n(r)$, que por sua vez é aplicada nas equações de Kohn-Sham gerando uma nova densidade, que por sua vez, será utilizada como uma nova densidade para o próximo ciclo. O ciclo finaliza quando a densidade chute for igual a densidade final após o ciclo Kohn-Sham, ou seja, quando $n(r) = n_0(r)$, dentro de um critério de convergência, ou seja, de uma tolerância predefinida.

Para aplicar a DFT aos modelos, é preciso reformulá-la para cada modelo. O Hamiltoniano de KS para o modelo de Hubbard é

$$H_{KS} = -t \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i \nu_i^{eff} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} \quad (30)$$

onde ν_i^{eff} é o potencial efetivo do sistema KS,

$$\nu_i^{eff} = \nu^{eff}[n_i] = \nu[n_i] + \nu_H[n_i] + \nu_{XC}[n_i], \quad (31)$$

sendo, $\nu[n_i]$ o potencial externo, $\nu_H[n_i] = Un_i/2$ o potencial de Hartree e $\nu_{XC}[n_i] = \delta E_{XC}[n_i]/\delta n_i$ o potencial de troca e correlação.

Mesmo que a formulação da DFT para o modelo de Hubbard seja formalmente exata, não sabemos a forma de $E_{XC}[n_i]$, logo precisamos de uma aproximação. Neste trabalho adotaremos a aproximação BA-LDA para obter a energia de troca e correlação [25], que utiliza de uma aproximação local baseada na solução de Lieb-Wu [24] para o ansatz de Bethe.

Em suma, a aproximação BA-LDA é determinada a partir de uma aproximação LDA para a energia de troca e correlação, partindo de uma proposta parametrizada para a energia total por sítio do sistema homogêneo [17]. Assim, uma vez que temos uma expressão analítica para a energia total por sítio, mesmo que aproximada, podemos obter uma aproximação BA para a energia de troca e correlação por sítio do sistema homogêneo

$$\begin{aligned} e_{XC}(n, U) &\approx e_{XC}^{BA}(n, U) = e^{BA}(n, U) - t_s - e_H \\ e_{XC}^{BA}(n, U) &= \frac{-2t\beta(U)}{\pi} \text{sen} \left(\frac{\pi n}{\beta(U)} \right) + \frac{4t}{\pi} \text{sen} \left(\frac{\pi n}{2} - \frac{Un^2}{4} \right). \end{aligned} \quad (32)$$

Agora, tendo a equação (32), uma expressão analítica para a densidade de energia de troca e correção, podemos construir uma LDA para E_{XC} do sistema homogêneo

$$E_{XC}[n] \approx E_{XC}^{BA-LDA}[n, U] = \sum_i^N e_{XC}^{BA}(n, U)|_{n \rightarrow n_i}. \quad (33)$$

Para um sistema cuja densidade seja maior que $n = 1$, é necessário fazer a transformação partícula-buraco. Nesta região, a concentração de partículas é maior que a concentração de sítios vazios, que por sua vez começam a contribuir para a itinerância eletrônica. Para aplicar esta transformação, além de um termo adicional $U(n - 1)$, devemos substituir n_i por $2 - n_i$, de forma que a energia total do estado fundamental será

$$e^{BA}(n, U) = U(n - 1) - \frac{2t\beta(U)}{\pi} \text{sen} \left(\frac{\pi(2 - n)}{\beta(U)} \right). \quad (34)$$

O próximo capítulo reserva-se para a apresentação e discussão dos resultados, considerando toda a fundamentação teórica descrita nesta seção.

3 Resultados

Esta seção se dedica a descrever os resultados da entropia típica, comparando-a com a entropia média. Avaliaremos as transições de fase metal-isolante, tanto no regime de Mott (devido às interações repulsivas, $U > 0$) quanto no regime de Anderson (devido à desordem do tipo atrativa, $V < 0$), além da combinação dos dois regimes, Mott-Anderson (devido à interação repulsiva e desordem atrativa). Já há na literatura estudos sobre transições de fase metal-isolante via entropia média [5, 6, 8]. A novidade deste trabalho é analisar a eficiência da entropia típica, descrita na seção (2.1.2), para descrever as diferentes transições.

As transições de fase quânticas descritas neste trabalho ocorrem em sistemas desordenados, ou seja, sistemas em que um potencial elétrico externo, também chamado de impureza ou desordem, está distribuído randomicamente pela cadeia de spins. Esta desordem leva um sistema metálico a uma localização em que os graus de liberdade de spin são congelados, fazendo com que a probabilidade de itinerância eletrônica vá a zero, tornando o sistema um isolante.

A desordem implementada no sistema foi de dois tipos: extrínseca ou point-like e intrínseca. A primeira tem a sua randomicidade associada à sua disposição de valores de impurezas V fixos pela cadeia, e a cada nova amostra gerada, temos uma disposição de impurezas distribuídas pela rede totalmente diferente da anterior, o que requer que sejam gerados no mínimo 100 amostras para cada grupo de parâmetro. Ainda para a desordem extrínseca, existe a variável da concentração, que nos permite controlar a quantidade de impurezas presentes no sistema, fazendo com que pelo menos um sítio da cadeia receba um valor de $V \neq 0$, enquanto os outros recebam um valor de $V = 0$. A concentração pode ser calculada como:

$$C_{\%} = \frac{n^o \text{ de } V}{L} \cdot 100. \quad (35)$$

Já para o segundo tipo de desordem, a intrínseca, observamos que a randomicidade se dá pela variação de valores de V pela cadeia, ou seja, o potencial aplicado no sistema varia de $-V$ até $+V$. Ainda, todos os sítios da cadeia recebem um valor de $V \neq 0$, ao contrário da impureza extrínseca, o que faz com que a variável da concentração seja descartada nesta forma de implementação de desordem.

3.1 Emaranhamento Médio *versus* Típico

Nesta seção, exploramos a desordem extrínseca, de modo que possamos comparar o comportamento da média e típica com o que já temos na literatura via emaranhamento médio [7, 5, 8].

A primeira análise considera apenas um metal, que ao atingir o semi-preenchimento torna-se um isolante, devido à interação repulsiva: regime de Mott. Neste sistema, a ausência de desordem anula a atuação da entropia típica, fazendo com que os valores de entropia média e típica sejam os mesmos, como mostram as Figuras 2 e 3.

Este resultado ocorre pois um sistema apenas interagente pode ser considerado homogêneo (exceto por efeito de bordas), ou seja, a interação repulsiva é igualmente distribuída pela cadeia. Como a característica da entropia típica é justamente ponderar a contribuição dos potenciais externos pontuais aplicados na cadeia, para o sistema homogêneo a entropia típica não consegue capturar qualquer comportamento que a média já não faça.

Tanto a média (Figura 2) quanto a típica (Figura 3) mostram uma assinatura da transição de Mott caracterizada por uma queda no emaranhamento com o aumento da interação U , no ponto de densidade média $n = 1$. Observamos em ambas as figuras, que o emaranhamento apresenta um mínimo local para valores de $U \gtrsim 2t$, que se torna mais acentuado conforme o valor da interação aumenta. Esta densidade é definida como a *densidade crítica*, n_C^U .

Para $U \rightarrow \infty$ observamos que a entropia satura em $L = 0.5$ em n_C^U , pois o aumento da interação U congela os graus de liberdade das partículas em relação à probabilidade de *hopping* entre os sítios. No entanto, apesar das partículas estarem congeladas/localizadas nos sítios, o emaranhamento para $U \rightarrow \infty$ não é zero, pois ainda existem os graus de liberdade de spin disponíveis, o que resulta num tipo de localização parcial.

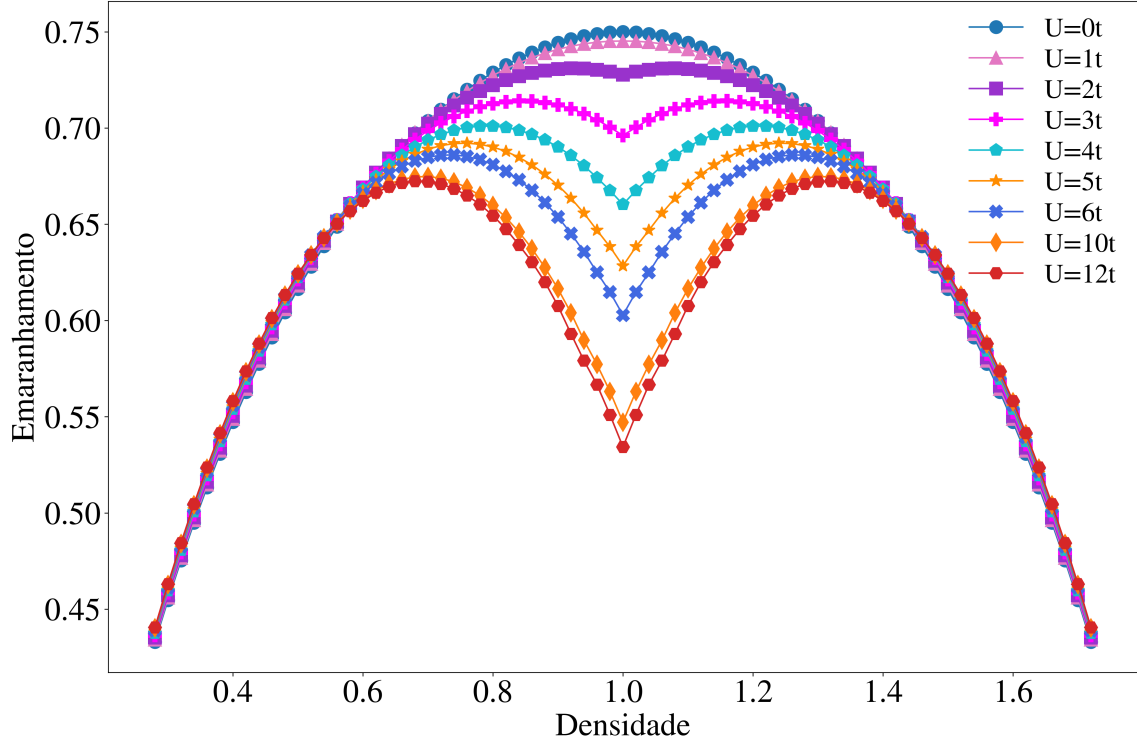


Figura 2: Emaranhamento *médio* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes interações intra-sítios e sem desordem (Mott MIT).

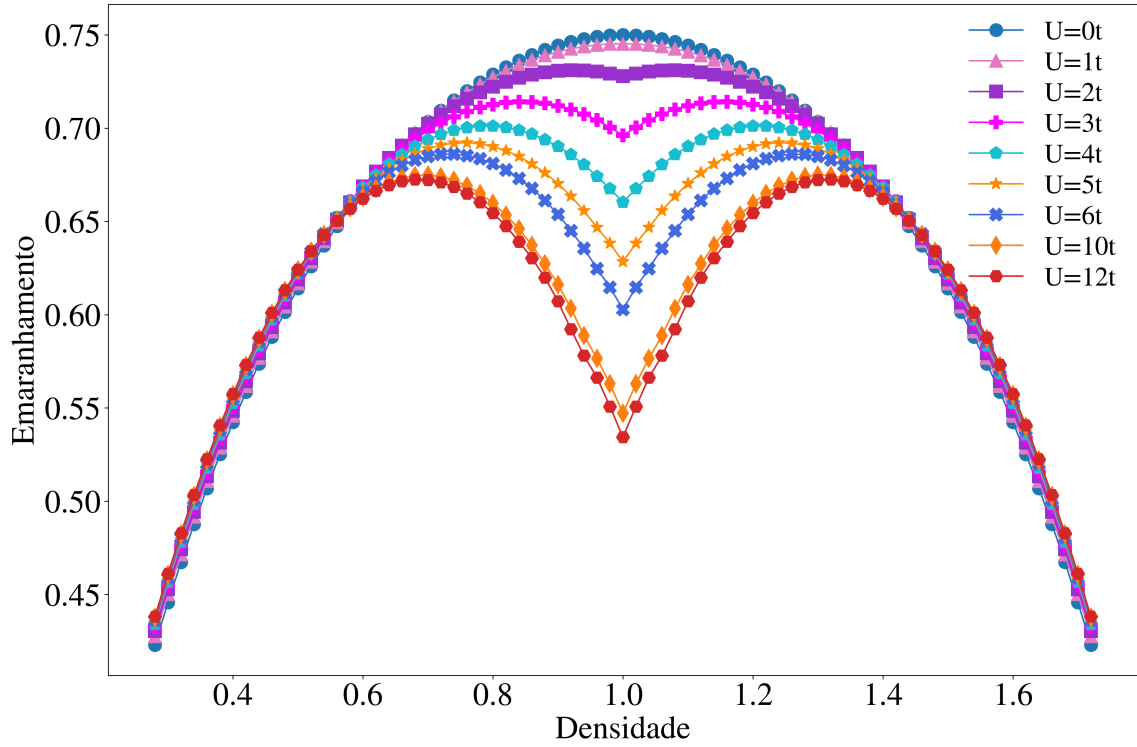


Figura 3: Emaranhamento *típico* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes interações intra-sítios e sem desordem (Mott MIT).

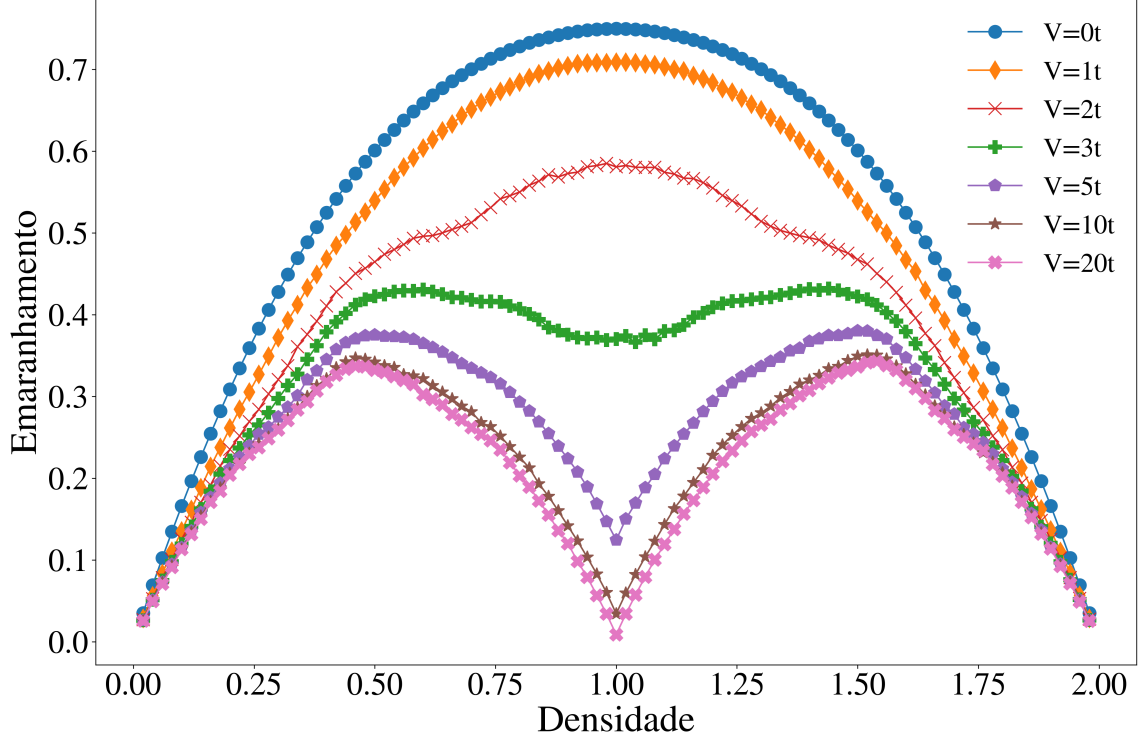


Figura 4: Emaranhamento *médio* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e concentração $C = 50\%$ e sem interação intra-sítios (Anderson MIT).

Já para a transição MIT de Anderson, observamos bastante diferença no comportamento das entropias média e típica, como mostram as Figuras 4 e 5. A presença de uma desordem do tipo *point-like*, seja atrativa, $V < 0$ ou repulsiva, $V > 0$, influencia de maneira semelhante num sistema sem interação, $U = 0$. Portanto, consideramos apenas um sistema com desordem repulsiva.

Para o emaranhamento médio, Figura 4, podemos observar uma queda no emaranhamento com o aumento da intensidade de desordem, com mínimo de emaranhamento na densidade crítica $n_C^V = 2C/100$ para valores de $V \gtrsim 3t$. A queda no grau de emaranhamento para qualquer valor de densidade é a assinatura que caracteriza a localização de Anderson, em outras palavras, a desordem atrativa congela os graus de liberdade das partículas o que favorece a dupla ocupação nos sítios com impurezas, diminuindo o emaranhamento. Já o valor mínimo em n_C^V reflete um estado totalmente localizado, caracterizado pela localização das partículas no espaço real (todas as partículas estão em dupla ocupação nos sítios sem impurezas) quando a desordem é suficientemente forte.

Já para o emaranhamento típico, observamos um comportamento bastante diferente. A Figura 5 ainda mostra uma localização em etapas, ou seja, a localização, ao passo

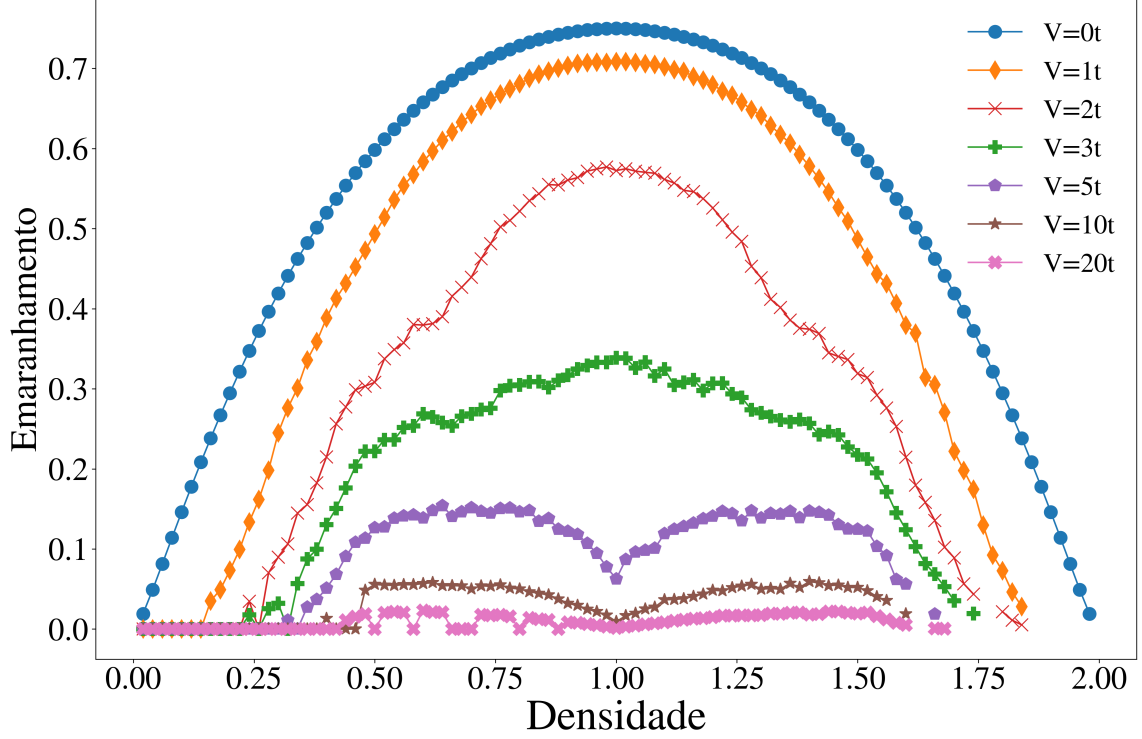


Figura 5: Emaranhamento *típico* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e concentração $C = 50\%$ e sem interação intra-sítios (Anderson MIT).

que a intensidade de desordem aumenta, ocorre aos poucos. Assim como para o caso da média, a localização ocorre para valores de intensidade $V \gtrsim 3t$. No entanto, observamos que os picos que apareciam em $n = 0.4$ e $n = 1.6$ desaparecem para o caso da típica, o que pode indicar para os valores de desordem $V \gtrsim 3t$, que o sistema já está localizado completamente para qualquer n e não somente em $n_C^V = 1$.

Finalmente, analisamos o comportamento da transição MIT na presença de ambos desordem V e interação U na perspectiva do emaranhamento médio, Figura 6, e típico, Figura 7.

A Figura 6 mostra que para uma desordem fraca ($V = -1t$) o perfil de emaranhamento é semelhante ao caso "clean" ($C = 0$ e $V = 0$), ou seja, a densidade crítica associada a Mott continua em $n_C^U = 1$ e o mínimo de Anderson, n_C^V , não aparece. Com o aumento da concentração de impurezas, ocorre um deslocamento da densidade crítica da transição de Mott para valores $n_C^{U \rightarrow V} > 1$, indicativo de que a densidade efetiva nos sítios sem impurezas ($n_{V=0}$) é menor que n , já que, como as partículas estão localizadas nos sítios com impurezas ($V < 0$), é necessário uma densidade $n > 1$ para satisfazer a relação $n_{V=0} = 1$. Portanto, a posição da densidade crítica para $n_C^{U \rightarrow V}$ pode ser obtida a partir

da equação 36

$$n_C^{U \rightarrow V} = 1 + \frac{C}{100}. \quad (36)$$

Na Figura 7, observamos que a entropia típica assinala o mesmo comportamento da entropia média para uma desordem fraca ($V = -1t$). Com o aumento da intensidade e concentração de impurezas, observamos que a típica também captura um deslocamento da transição de Mott, $n_C^{U \rightarrow V} > 1$, mas que difere de entropia média ao apresentar uma diminuição do emaranhamento após a região deslocada.

Observamos também na Figura 6, que a densidade crítica de transição de Anderson sofre um deslocamento para regiões de densidade abaixo do estado semipreenchido. A posição dessa localização está associada a concentração de impurezas no sistema e pode ser definida matematicamente como

$$n_C^{V \rightarrow U} = \frac{2C}{100}, \quad (37)$$

ou seja, ao aumentar a concentração de impurezas no sistema, observamos que a densidade crítica $n_C^{V \rightarrow U}$ se desloca para regiões de densidades próximas ao estado semipreenchido, pois a posição da localização do sistema é influenciada pela concentração. Além disso, para uma mesma concentração, $C = 25\%$, mas diferentes valores de V a localização demorou a acontecer: para uma intensidade de desordem menor, $V = -10t$, a localização não foi completa, ou seja, não observamos o emaranhamento indo a zero na região de densidade crítica, isso ocorreu apenas quando a desordem foi maior, em $V = -20t$. Tal comportamento é influência da interação U presente no sistema.

Para o emaranhamento típico, Figura 7, observamos algumas semelhanças com o caso da média. Inicialmente, a típica assinala o fenômeno de Mott em $n_C^U = 1$ e o Mott deslocado, $n_C^{U \rightarrow V}$, também é destacado pela típica, porém com uma assinatura mais sutil que no caso do emaranhamento médio. Já para o caso de Anderson, observamos que a localização foi completa para os valores de $V = -10t$ e $V = -10t$ para a concentração de $C = 25\%$, diferentemente da entropia média, em que a localização foi parcial para uma desordem mais fraca.

Este resultado sugere portanto que a entropia média é mais sensível aos diferentes graus de localização, distinguindo regimes de emaranhamento para $n < n_C^{V \rightarrow U}$ mesmo para concentrações mais baixas, enquanto no emaranhamento típico isso só ocorre para concentrações mais elevadas.

Por fim, observamos uma plataforma em $n < 1$, para qualquer concentração e intensidade de desordem quantificados via emaranhamento médio, já para o caso da típica, não observamos tal comportamento de maneira tão acentuada. O surgimento da plataforma está associada à presença de U e V presentes nos sistema e a dificuldade de conexão entre as partículas devido à distância média dos sítios com impurezas,.

Observamos que para o caso da entropia média, ao aumentar a concentração, a plataforma se torna mais larga, além de apresentar um valor de emaranhamento maior, devido à diminuição da distância média entre sítios com impurezas, aumentando portanto a conectividade entre partículas. Já do ponto de vista da entropia típica, a plataforma surge de maneira mais suave e apenas para altos valores de concentração, $C = 40\%$, o que indica que o valor típico é menos sensível à localização no sistema Mott-Anderson, pois não captura a competição entre U e V , além de capturar de modo retardado o efeito da distância média entre os sítios com impurezas.

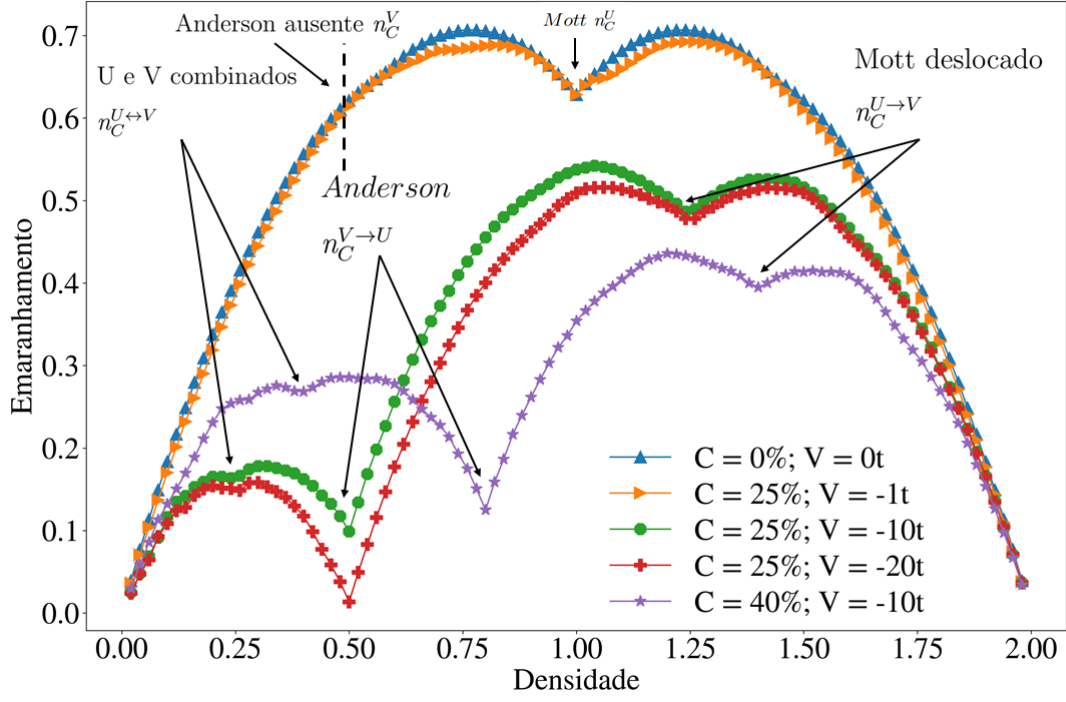


Figura 6: Emaranhamento *médio* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e concentração, com interação intra-sítios $U = -5t$ (Mott Anderson MIT).

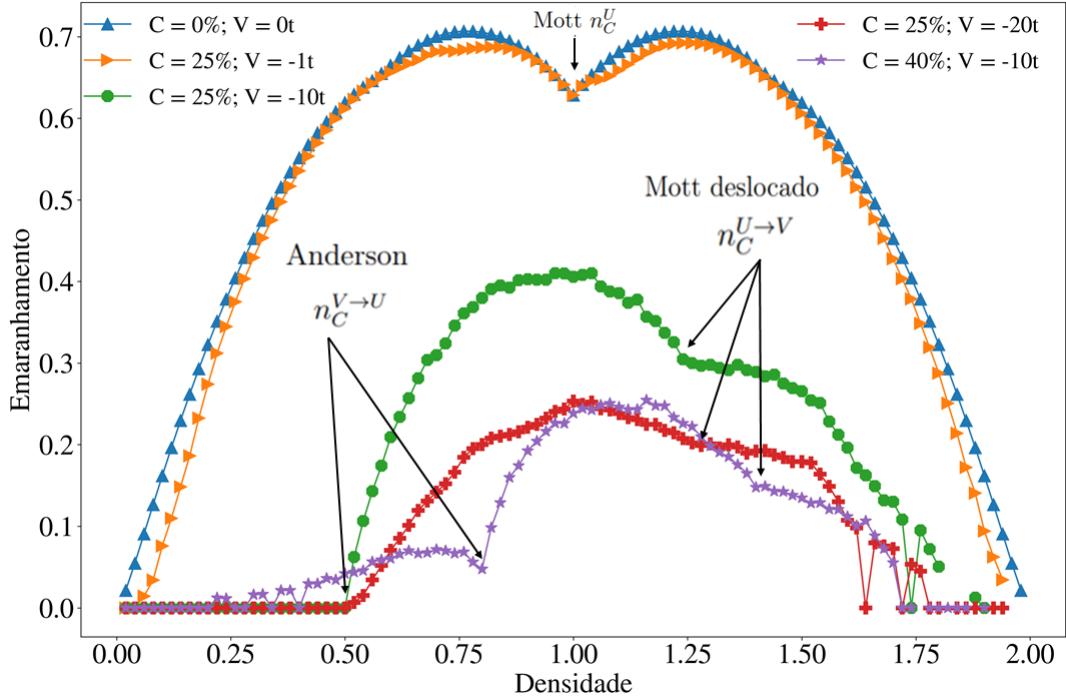


Figura 7: Emaranhamento *típico* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e concentração, com interação intra-sítios $U = -5t$ (Mott Anderson MIT).

3.2 Emaranhamento *versus* Intensidade de desordem

Assinaturas da Anderson MIT pode ser verificadas na Figura 8 e Figura 9, onde consideramos a entropia média e a entropia típica para quantificar emaranhamento, respectivamente. A transição se justifica diante de dois comportamentos: a diminuição do emaranhamento em função do aumento da intensidade de desordem, apresentando curvas com comportamento não-monotônicos, e saturação do emaranhamento quando a desordem é desligada.

A entropia média (Figura 8) justifica a transição visto que observamos uma saturação do emaranhamento para uma intensidade de desordem $V = 0$, em outras palavras, observamos que a transição metal-isolante apresenta uma não-monotonicidade na concentração crítica ($C = 50\%$) com valor de emaranhamento saturando em zero, indicando um estado de localização total do sistema (Anderson MIT), como mostra a Figura 8.

Para o caso do emaranhamento típico, a Figura 9 revela que o comportamento é semelhante ao emaranhamento médio, com concentração crítica em $C = 50\%$. Mas observamos que para um V fixo, o grau de localização computado pelo emaranhamento típico é maior do que o grau de localização via emaranhamento médio. Este resultado sugere portanto que há uma maior sensibilidade do emaranhamento típico ao grau de localização do sistema.

A desordem aplicada nos sistemas descritos nesta seção foi do tipo extrínseca somente, visto que a variável da concentração permite a confecção das Figuras 8 e 9 de impureza. Para o caso da desordem intrínseca não conseguimos plotar o mesmo gráfico, visto que a variável da concentração não existe. A concentração está associada a distribuição de V pela rede e, como no segundo caso de desordem, todos os sítios recebem um potencial externo, a concentração não pode ser calculada. Portanto, seção seguinte, discutiremos os fenômenos de transição de fase metal-isolante para a desordem intrínseca.

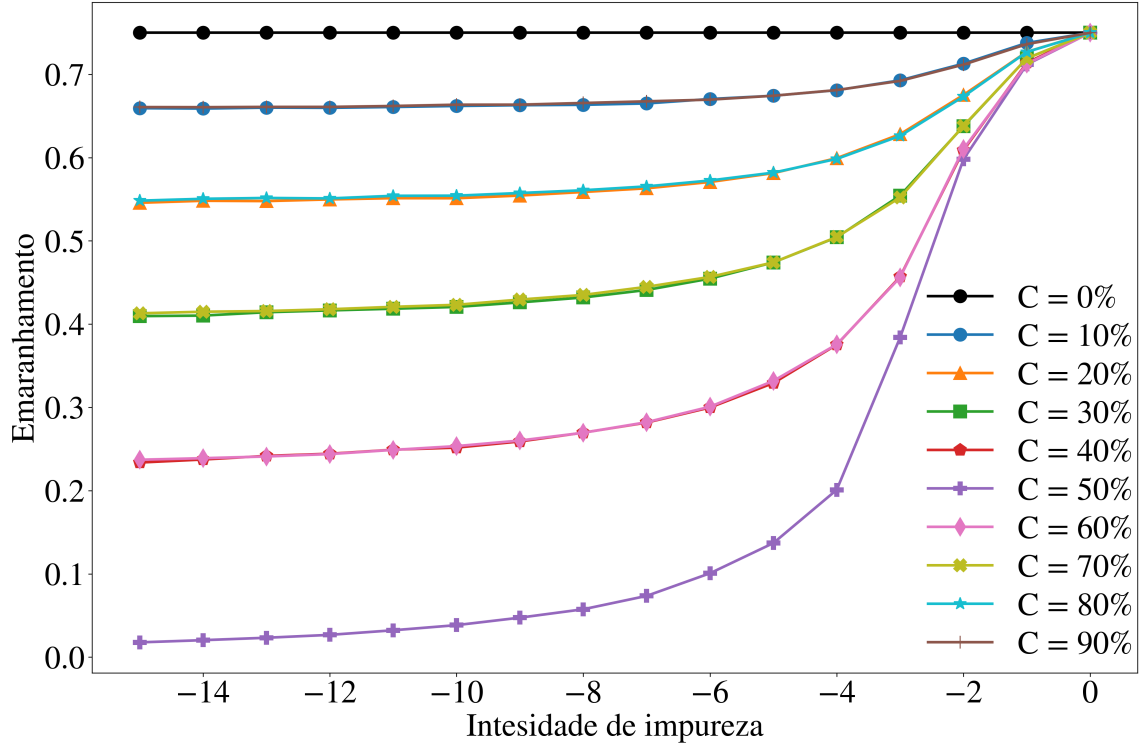


Figura 8: Emaranhamento *médio* em função da intensidade da impureza V atrativas $V < 0$ de diferentes concentrações C , para sistema não-interagente e densidade $n = 1.0$.

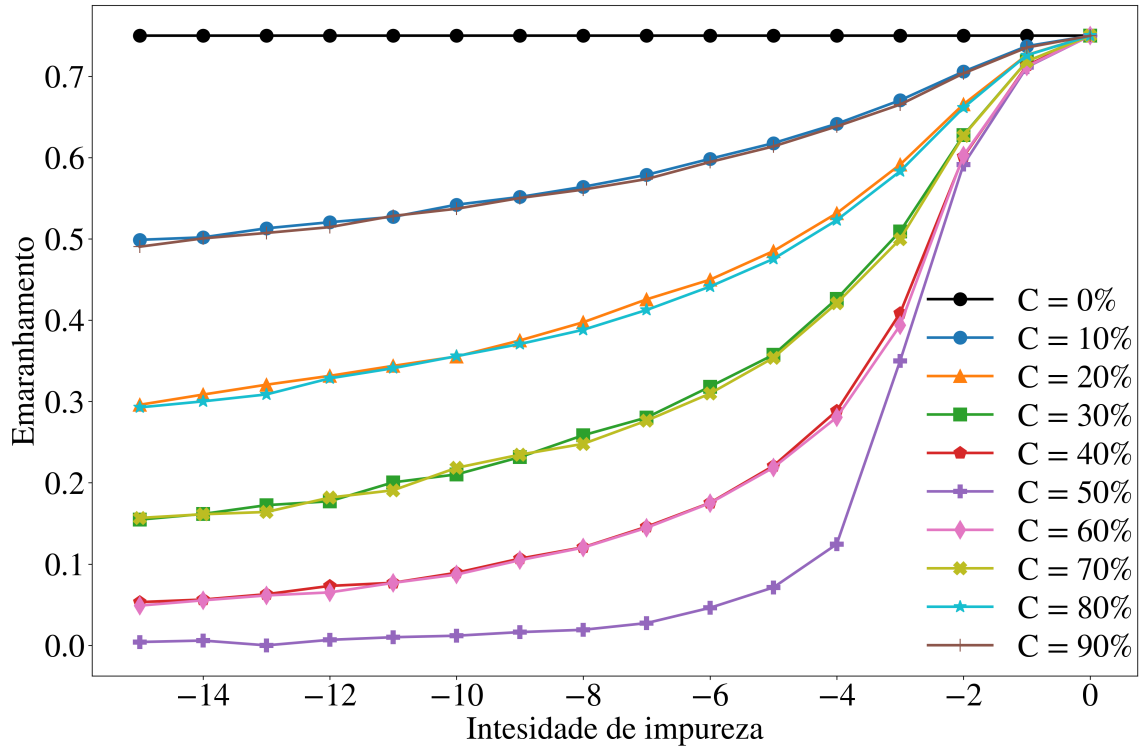


Figura 9: Emaranhamento *típico* em função da intensidade da impureza V atrativas $V < 0$ de diferentes concentrações C , para sistema não-interagente e densidade $n = 1.0$.

3.3 Emaranhamento no potencial intrínseco de desordem

As transições de fase quânticas descritas previamente foram obtidas a partir da presença de uma impureza definida como *point-like*, definida como um valor fixo de V distribuído de forma aleatória pela cadeia em sítios pontuais. A quantidade de impurezas presentes na cadeia pode ser controlada, logo, além da influência da intensidade de V , a concentração C também influenciou nas MI Anderson e Mott-Anderson.

Uma outra forma de implementar um sistema desordenado, definida como intrínseca, consiste em aplicar por toda a cadeia um potencial V de intensidade aleatória dentro de uma faixa $-V$ até $+V$, cujos alcances máximo e mínimo dependem do valor em módulo de $|V|$. A Figura 10 ilustra como o potencial intrínseco é distribuído por toda a cadeia para um dado valor $|V|$.

-1.9	-0.8	1.4	-0.2	1.3	0.6	-1.5	1.9	0.3	-1.7
------	------	-----	------	-----	-----	------	-----	-----	------

Figura 10: Ilustração da distribuição dos potenciais V entre os sítios da cadeia para a desordem intrínseca.

A Figura 11 exemplifica como $|V|$ varia de um valor negativo até um valor positivo, tendo todos os sítios um valor de potencial aplicado. Ao contrário do potencial *point-like*, este potencial não pode ter a sua concentração determinada, o que diminui em uma unidade a quantidade de variáveis possíveis de se analisar as MIT para esta forma de desordem. Outra característica desta desordem é a ausência de repetição de amostras, enquanto a outra desordem gera novas distribuições de potencial V a cada novo cálculo, o que requer uma média de todas as 100 amostras obtidas, a desordem intrínseca já fornece os dados do sistema para os parâmetros de densidade, n , interação, U e desordem, V , após um único cálculo, diminuindo, portanto, o custo computacional e a quantidade de dados gerados.

A Figura 12 apresenta a transição MI Anderson a partir do emaranhamento médio, enquanto que a Figura 13 descreve o sistema a partir do emaranhamento típico.

Ao contrário do que se observa na Figura 4 para a entropia média e da Figura 5 para a entropia típica, o potencial intrínseco não apresenta uma densidade crítica associada a um emaranhamento mínimo, ou seja, esta forma de desordem não é forte o suficiente para localizar o sistema completamente em uma densidade específica, apenas um valor de V muito alto é capaz de localizar o sistema integralmente, como vemos no caso da

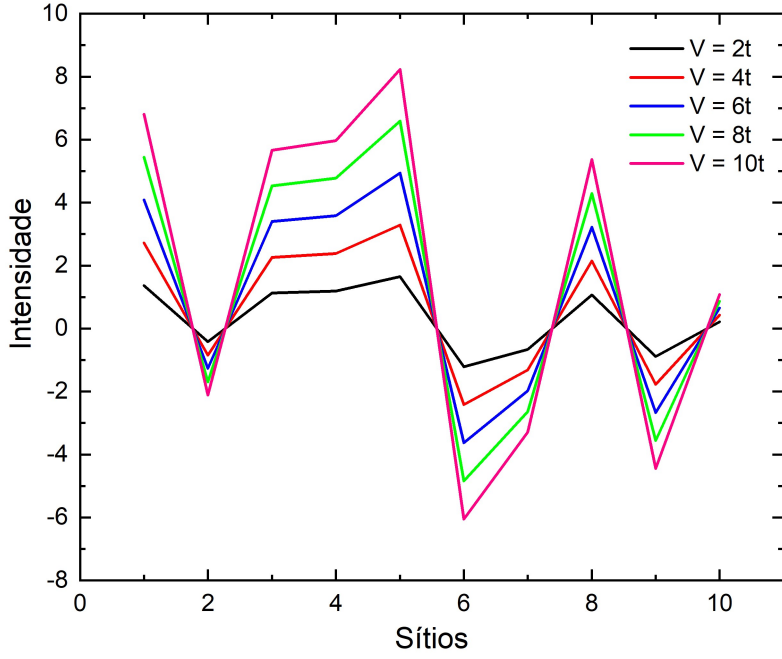


Figura 11: Amplitude do valor de desordem $|V|$ em função de uma cadeia de 10 sítios.

típica, onde a partir de $V > 3t$, os graus de liberdade dos spins no começo da cadeia são congelados e observa-se a localização a partir desta região, conforme a intensidade de V aumenta.

Ao ligarmos a interação, porém considerando baixa repulsão, como mostram as Figuras 14 e 15, o sistema não apresenta uma densidade crítica de localização total, ou seja, para uma interação repulsiva pequena, o sistema se assemelha ao estado "*clean*", visto na Figura 13.

Já para uma interação mais intensa, $U = 5t$, observamos uma localização parcial na densidade crítica $n = 1.0$, que desaparece quando a intensidade da desordem aumenta, $V = 3t$. Este mínimo de emaranhamento médio e típico corresponde ao isolante de Mott, dominante para V pequeno. À medida que V aumenta surge uma disputa entre U e V , que impede que o sistema se torne completamente localizado, já que após o aumento da intensidade de desordem, a densidade crítica desaparece, sugerindo que a desordem se sobrepõe à interação.

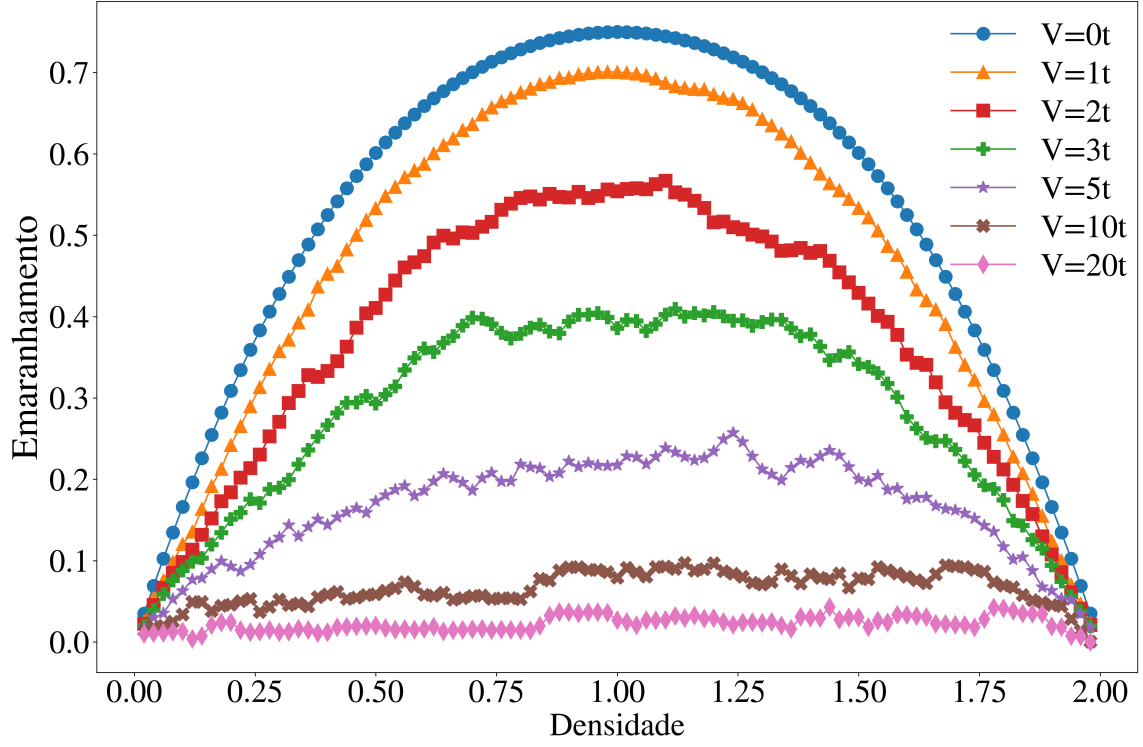


Figura 12: Emaranhamento *médio* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem sem interação intra-sítio, $U = 0$ (Anderson MIT).

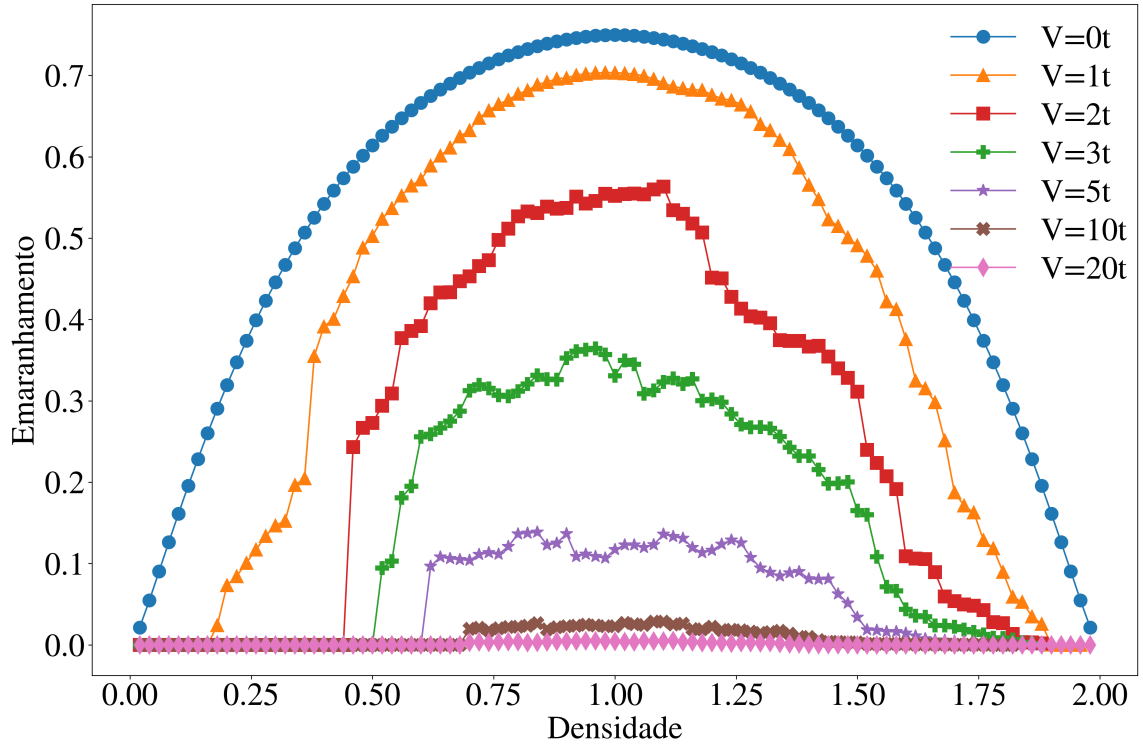


Figura 13: Emaranhamento *típico* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem sem interação intra-sítio, $U = 0$ (Anderson MIT).

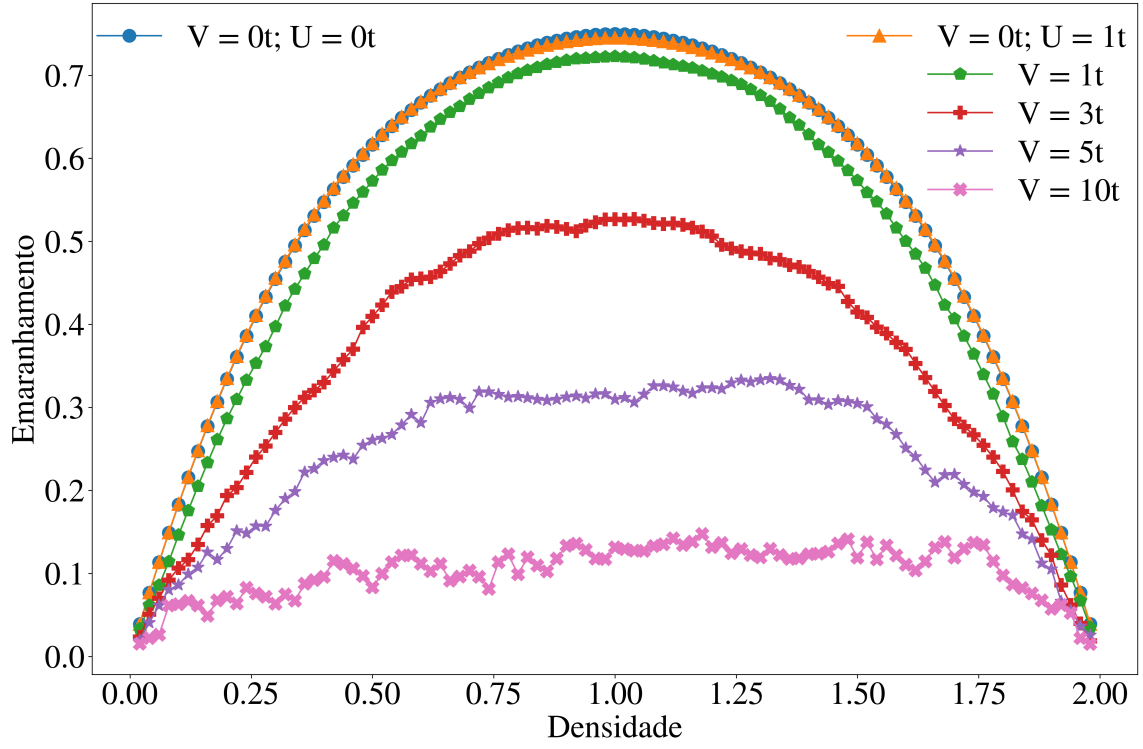


Figura 14: Emaranhamento *médio* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e interação intra-sítio, $U = 1t$ (Mott-Anderson MIT).

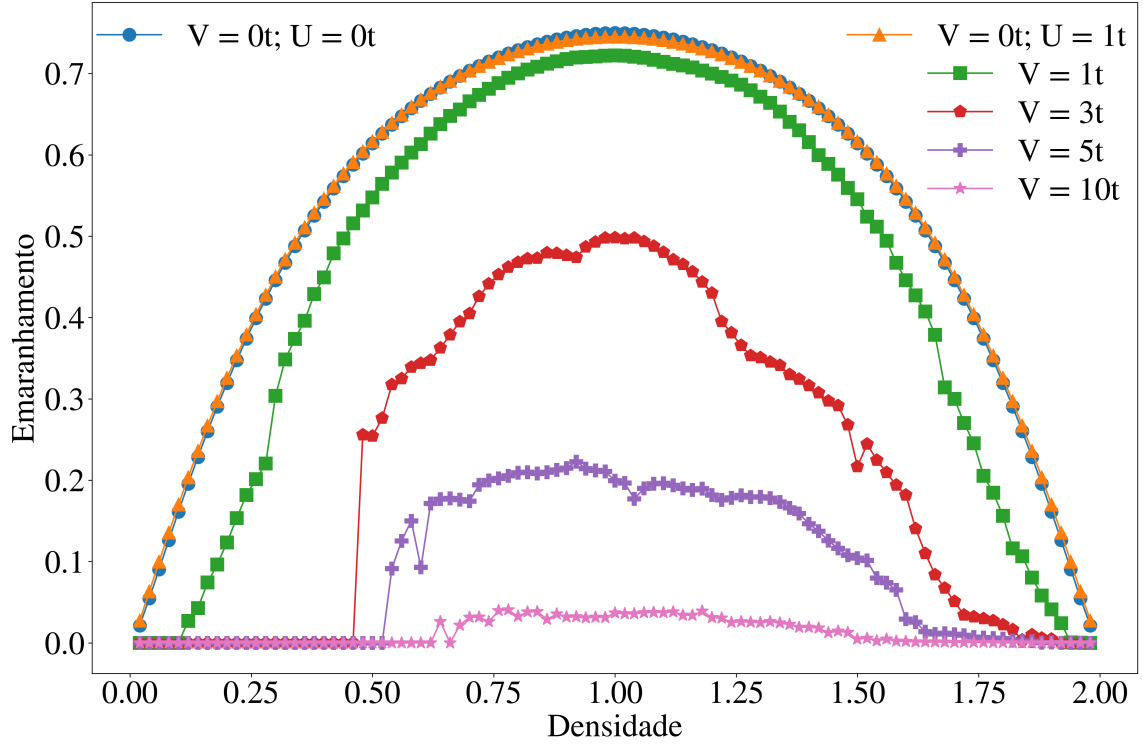


Figura 15: Emaranhamento *típico* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e interação intra-sítio, $U = 1t$ (Mott-Anderson MIT).

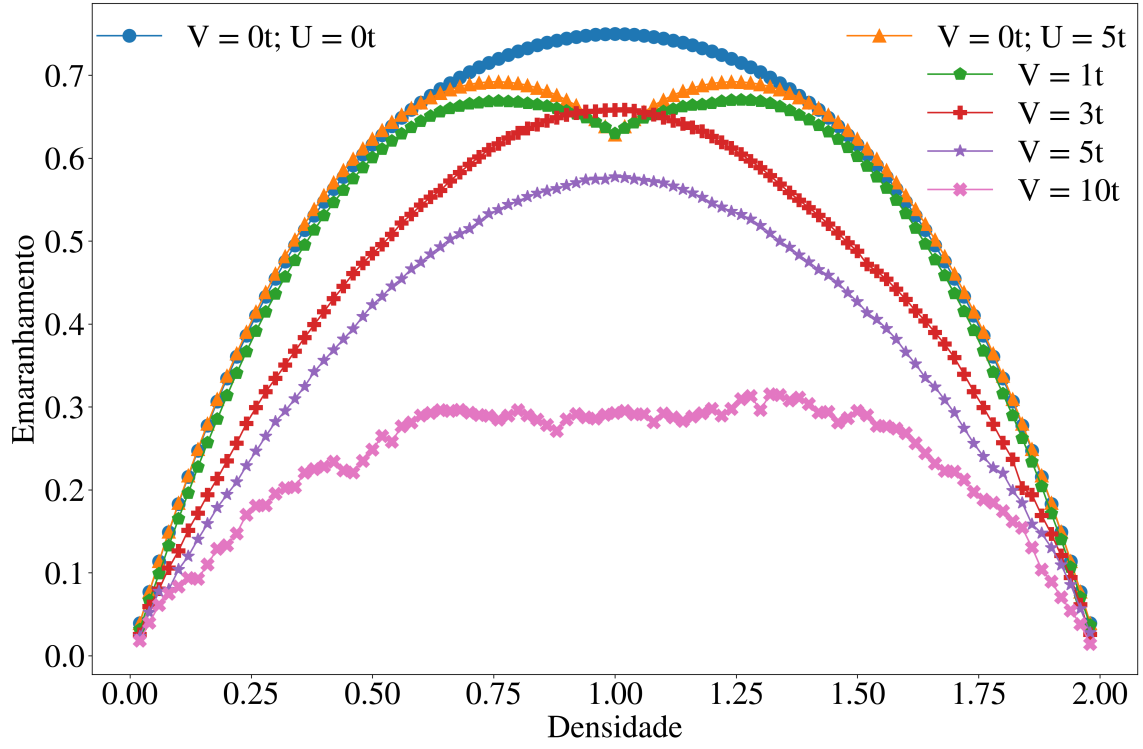


Figura 16: Emaranhamento *médio* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e interação intra-sítio, $U = 5t$ (Mott-Anderson MIT).

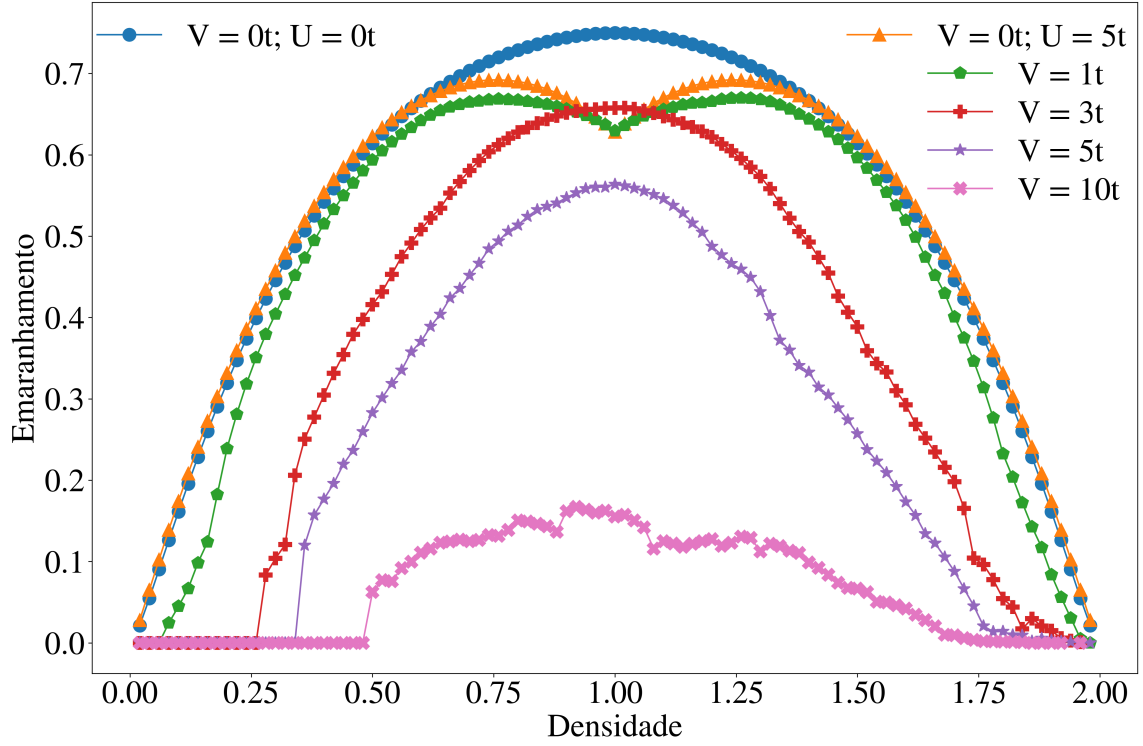


Figura 17: Emaranhamento *típico* em função da densidade de partículas n para sistemas com diferentes intensidades de desordem e interação intra-sítio, $U = 5t$ (Mott-Anderson MIT).

4 Conclusões

No primeiro capítulo, introduzimos os conceitos de transições de fase quânticas, em particular, como se relacionam ao emaranhamento, DFT e modelo de Hubbard unidimensional, o qual permite simular uma cadeia de elétrons, que por sua vez, é extremamente útil do ponto de vista teórico para o estudo de transições quânticas. Em particular neste trabalho consideramos a transição metal-isolante governada tanto por interação Coulombiana quanto por desordem.

No capítulo 2, desenvolvemos as ideias principais que fundamentam este trabalho, como o Hamiltoniano de Hubbard, a Teoria do Funcional da Densidade, as formas de calcular emaranhamento – por meio da entropia de von Neumann ou Linear – e as formas de analisar essas entropias em sistemas desordenados – via média aritmética ou geométrica/típica.

No capítulo 3, descrevemos os resultados obtidos ao resolver uma cadeia longa unidimensional descrita pelo Hamiltoniano de Hubbard via DFT e quantificar o emaranhamento via entropias média e típica. Ao comparar com os resultados descritos em [5, 8] que utilizam do emaranhamento médio, observamos que o emaranhamento típico foi capaz de capturar as transições de fase quântica em sistemas de Mott, Anderson e Mott-Anderson. Em um sistema de Mott, ou seja, uma transição desencadeada apenas por interações Coulombianas, portanto livre de impurezas, a entropia típica reproduziu essencialmente os mesmos aspectos da entropia média.

Já no regime de Anderson, em que a transição é desencadeada por impurezas em um sistema não-interagente, o emaranhamento típico e médio divergiram: enquanto a entropia média apresenta um mínimo de emaranhamento na densidade crítica $n_C^V = 2C/100$ para valores de desordem $V > 3t$, a típica assinala a mesma densidade crítica apenas quando a intensidade de desordem é $V > 5t$. Além disso, a típica captura uma localização total do sistema para densidades pequenas já a partir de $V > 1t$, enquanto que essa localização completa não ocorre na média. Tal comportamento permite concluir que a típica pode ser mais sensível ao identificar a localização de partículas em um sistema fracamente desordenado.

Para o caso da transição Mott-Anderson, observamos um comportamento bastante diverso entre as duas. Na entropia média, observamos deslocamentos da transição de Mott para regiões de densidade maior, além de uma plataforma abaixo do estado semi-preenchido e uma localização parcial de Anderson para qualquer valor de concentração de

impurezas. Já a entropia típica, mesmo que ainda possamos observar o Mott deslocado, o mínimo característico é mais sutil. Além disso verificamos que a plataforma de emaranhamento não é capturada pelo valor típico para concentrações baixas, o que significa que neste regime a entropia média é mais sensível que a entropia típica. A entropia típica apenas detectou localização parcial de Anderson para um valor elevado de concentração de impurezas.

Na seção 3.2, discutimos especificamente a transição de Anderson para o estado semi-preenchido. Observamos que ambas as entropias apresentam um comportamento semelhante, no entanto, para o caso da *típica*, a localização foi maior que a *média*, ou seja, o grau de emaranhamento capturado pela *típica* mostra que o sistema está mais localizado do que assinala a entropia *média*.

Na última seção deste trabalho, estudamos como os mesmos regimes - Anderson e Mott-Anderson - se comportam frente a um tipo de desordem diferente, a desordem intrínseca. Estas impurezas, ao contrário da *point-like*, estão presentes em todos os sítios e são tanto atrativas quanto repulsivas, pois têm intensidade aleatoria entre $-V$ a $+V$. A entropia típica captura uma localização do sistema para densidades baixas para V fracos, enquanto que a média apenas captura o mesmo comportamento quando $V = 20t$. Para o caso Mott-Anderson, podemos observar que a *típica* novamente assinala localização completa dentro da região de baixa densidade para valores pequenos de V , enquanto que a *média* só o faz de maneira parcial para V elevado.

Referências

- [1] Philip W Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical review*, 109(5):1492, 1958.
- [2] G Bedürftig, B Brendel, Holger Frahm, and RM Noack. Friedel oscillations in the open hubbard chain. *Physical Review B*, 58(16):10225, 1998.
- [3] D Belitz and TR Kirkpatrick. The anderson-mott transition. *Reviews of modern physics*, 66(2):261, 1994.
- [4] Helena Bragança, MCO Aguiar, J Vučičević, D Tanasković, and V Dobrosavljević. Anderson localization effects near the mott metal-insulator transition. *Physical Review B*, 92(12):125143, 2015.
- [5] GA Canella and VV França. Mott-anderson metal-insulator transitions from entanglement. *Physical Review B*, 104(13):134201, 2021.
- [6] Guilherme A Canella and Vivian V França. Superfluid-insulator transition unambiguously detected by entanglement in one-dimensional disordered superfluids. *Scientific reports*, 9(1):1–6, 2019.
- [7] Guilherme A Canella and Vivian V França. Entanglement in disordered superfluids: The impact of density, interaction and harmonic confinement on the superconductor–insulator transition. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 545:123646, 2020.
- [8] Guilherme Arantes Canella. Transições de fase quânticas em nanoestruturas desordenadas. 2021.
- [9] Klaus Capelle. A bird’s-eye view of density-functional theory. *Brazilian journal of physics*, 36:1318–1343, 2006.
- [10] Natanael C Costa, Kazuhiro Seki, Seiji Yunoki, and Sandro Sorella. Phase diagram of the two-dimensional hubbard-holstein model. *Communications Physics*, 3(1):80, 2020.
- [11] V Dobrosavljević, AA Pastor, and BK Nikolić. Typical medium theory of anderson localization: A local order parameter approach to strong-disorder effects. *Europhysics Letters*, 62(1):76, 2003.

- [12] Albert Einstein, Boris Podolsky, and Nathan Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical review*, 47(10):777, 1935.
- [13] Robert Eisberg and Robert Resnick. Física quântica, ed. *Campus, Rio de Janeiro*, 1979.
- [14] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Reviews of Modern Physics*, 68(1):13, 1996.
- [15] Nathan Giovanni, Marcello Civelli, and Maria CO Aguiar. Anderson localization effects on the doped hubbard model. *Physical Review B*, 103(24):245134, 2021.
- [16] Shi-Jian Gu, Shu-Sa Deng, You-Quan Li, and Hai-Qing Lin. Entanglement and quantum phase transition in the extended hubbard model. *Physical review letters*, 93(8):086402, 2004.
- [17] Vivian Vanessa França Henn. *Emaranhamento em Sistemas de Muitos Férmions*. PhD thesis, Universidade de São Paulo, 2008.
- [18] Pierre Hohenberg and Walter Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136(3B):B864, 1964.
- [19] John Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands iii. an improved solution. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 281(1386):401–419, 1964.
- [20] Walter Kohn. Nobel lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*, 71(5):1253, 1999.
- [21] Walter Kohn and Lu Jeu Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A):A1133, 1965.
- [22] Daniel Larsson and Henrik Johannesson. Entanglement scaling in the one-dimensional hubbard model at criticality. *Physical review letters*, 95(19):196406, 2005.
- [23] Daniel Larsson and Henrik Johannesson. Single-site entanglement of fermions at a quantum phase transition. *Physical Review A*, 73(4):042320, 2006.

- [24] Elliott H Lieb and Fa-Yueh Wu. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Physical Review Letters*, 20(25):1445, 1968.
- [25] Neemias Alves de Lima, Marcelo Ferreira Silva, Luiz Nunes de Oliveira, and Klaus Capelle. Density functionals not based on the electron gas: Local-density approximation for a luttinger liquid. *Physical review letters*, 90(14):146402, 2003.
- [26] Michael A Nielsen and Isaac Chuang. *Quantum computation and quantum information*. American Association of Physics Teachers, 2002.
- [27] Masao Ogata and Hiroyuki Shiba. Bethe-ansatz wave function, momentum distribution, and spin correlation in the one-dimensional strongly correlated hubbard model. *Physical Review B*, 41(4):2326, 1990.
- [28] Thereza Paiva and Raimundo R Dos Santos. Metal-insulator transition in one-dimensional hubbard superlattices. *Physical Review B*, 58(15):9607, 1998.
- [29] Frank Verstraete, Koenraad Audenaert, Jeroen Dehaene, and Bart De Moor. A comparison of the entanglement measures negativity and concurrence. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 34(47):10327, 2001.