

Vivian Vanessa França Henn

*Emaranhamento em Sistemas de Muitos  
Férmions*

São Carlos - SP

2008

Vivian Vanessa França Henn

*Emaranhamento em Sistemas de Muitos  
Férmions*

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Área de Concentração: Física Básica  
Orientador: Prof. Dr. Klaus Capelle

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO  
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS

São Carlos - SP

2008

AUTORIZO A REPRODUÇÃO E DIVULGAÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO, POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Biblioteca e Informação IFSC/USP

Henn, Vivian Vanessa França

Emaranhamento em sistemas de muitos fêmiões/Vivian Vanessa França Henn; orientador Klaus Capelle.-- São Carlos, 2008.

131 p.

Tese (Doutorado em Ciências - Área de concentração: Física Básica) - Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo.

1. Emaranhamento. 2. Informação quântica. 3. Nanoestruturas. 4. Sistemas fortemente correlacionados. 5. Modelo de Hubbard. I. Título.



## FOLHA DE APROVAÇÃO

Vivian Vanessa França Henn

Tese apresentada ao Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Doutor em Ciências. Área de Concentração: Física Básica.

Aprovada em: 25/11/2008

### Comissão Julgadora

Prof. Dr. Klaus Werner Capelle

Instituição: IFSC/USP

Assinatura

Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa

Instituição: IFSC/USP

Assinatura

Prof. Dr. Salomon Sylvain Mizrahi

Instituição: UFSCar

Assinatura

Prof. Dr. Celso Jorge Villas Bôas

Instituição: UFSCar

Assinatura

Prof. Dr. Marcelo Silva Sarandy

Instituição: UFF

Assinatura

Ao Querido *Emanuel*.

# *Agradecimentos*

ao Prof. Dr. Klaus Capelle, pela orientação e amizade, por seu jeito motivador de ensinar e pesquisar e, especialmente, por sua paciência.

aos Prof. Drs. Gilberto Prativiera, Salomon Mizrahi, Paulo Emmel, Cesar Constantino, Nelson Studart, Marcos de Oliveira, Miled Moussa, Reginaldo Napolitano, Luis Marcassa, Valter Líbero, Luiz Nunes, J. Carlos Egues, Francisco Alcaraz, Valtencir Zucolotto, Vivaldo Campo e Irene D'Amico, que de maneiras bem distintas, como professor, avaliador ou colaborador, contribuíram para meu aprendizado e amadurecimento profissional.

à minha família e aos amigos, pelo apoio e companheirismo. Em especial ao amigo Fabiano, por sua contribuição na revisão final da tese.

ao meu marido, Emanuel, que esteve sempre ao meu lado, apoiando e incentivando cada pequeno passo do meu Doutorado. Por seu rigoroso senso crítico na leitura da tese, que certamente contribuiu muito para torná-la mais clara. Obrigada, meu amor, por seu carinho, atenção e paciência, especialmente nas tempestades geradas pela combinação TPM + confecção de tese.

“Science cannot solve the ultimate mystery of nature. And that is because, in the last analysis, we ourselves are a part of the mystery that we are trying to solve.”

*Max Planck*

# *Resumo*

FRANÇA, V. V. **Emaranhamento em Sistemas de Muitos Férmions**. Tese (Doutorado) - Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008.

Neste trabalho exploramos o emaranhamento em sistemas de muitos férmions. Para o estudo de sistemas inomogêneos, propusemos uma aproximação de densidade local (LDA) para a entropia de emaranhamento de um único sítio com o restante do sistema e uma LDA para o emaranhamento entre blocos de sítios. Analisamos as contribuições universal e não-universal do emaranhamento entre blocos e obtivemos uma expressão para o termo não-universal. Usando o modelo de Hubbard unidimensional, investigamos o emaranhamento em nanoestruturas eletrônicas, quantificando o emaranhamento de um único sítio com relação ao restante da cadeia via entropia de emaranhamento. Para o modelo de Hubbard homogêneo estudamos o comportamento do emaranhamento em função da densidade, da magnetização, da interação eletrônica e de campos magnéticos externos. Encontramos que o emaranhamento é sensível às fases metálica, isolante e supercondutora. Observamos um platô de emaranhamento na região do *gap* de spin e verificamos que susceptibilidade magnética e emaranhamento estão intrinsecamente relacionados. Obtendo as energias e densidades do modelo de Hubbard inomogêneo através da Teoria do Funcional da Densidade e usando nossa proposta LDA para a entropia de emaranhamento, exploramos o comportamento do emaranhamento na presença de diversas inomogeneidades: superredes, impurezas e confinamento harmônico. Verificamos que o emaranhamento sempre diminui com a inomogeneidade, embora os efeitos de cada inomogeneidade sejam completamente diferentes. Encontramos uma relação entre energias de troca e correlação, de Hartree e cinética, capaz de prever quantitativamente o emaranhamento em função de qualquer das inomogeneidades.

Palavras-chave: Emaranhamento. Informação quântica. Nanoestruturas. Sistemas fortemente correlacionados. Modelo de Hubbard.

# *Abstract*

FRANÇA, V. V. **Entanglement in Many-Fermions Systems.** Thesis (Doctoral) - Instituto de Física de São Carlos - Universidade de São Paulo, São Carlos, 2008.

In this work we investigated entanglement in many-fermions systems. To explore inhomogeneous systems we proposed a local density approximation (LDA) for the single-site entanglement entropy. We analysed the universal and nonuniversal contributions to block-block entanglement and obtained an expression for the nonuniversal term. We employ a description in terms of the one-dimensional Hubbard model to investigate the entanglement in electronic nanostructures and to quantify the single-site entanglement with respect to the rest of the chain by means of the entanglement entropy. For the homogeneous Hubbard model we studied the entanglement behavior as a function of density, magnetization, electronic interaction and external magnetic fields. We found that the entanglement is sensitive to the metallic, insulating and superconducting phases. We observed an entanglement plateau in the region of the spin gap and verified that magnetic susceptibility and entanglement are intrinsically related. Energies and densities of the inhomogeneous Hubbard model, obtained from Density Functional Theory, combined with our proposal of an LDA for the entanglement entropy, were used to explore the behavior of the entanglement entropy in the presence of several inhomogeneities: superlattices, impurities and harmonic confinement. We verified that entanglement always decreases with the inhomogeneity, although the effect of each inhomogeneity is completely different. For the same model we found a relation of exchange-correlation, Hartree and kinetic energies, able to predict quantitatively the entanglement as a function of any inhomogeneity.

Keywords: Entanglement. Quantum information. Nanostructures. Strongly correlated systems. Hubbard model.

# *Lista de Figuras*

- Figura 1 - Ilustração de um sistema subdividido em três subsistemas. As partes  $A, B$  e  $C$  estarão emaranhadas se o estado total não for o produto dos estados dos subsistemas. . . . . 26
- Figura 2 - Ilustração de uma cadeia de tamanho  $L$  do modelo de Hubbard. Cada sítio pode ser ocupado por até duas partículas, com interação intra-sítio  $U_i$ . A itinerância das partículas entre sítios vizinhos é representada pelo termo  $t_{ij}$ , com  $j = i \pm 1$ . . . . . 33
- Figura 3 - O *hopping* de uma partícula do sítio  $i$  para o sítio  $j$ , através da operação  $\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i$ , é ilustrado juntamente com o movimento simétrico de um buraco, do sítio  $j$  para o sítio  $i$ , através da operação  $\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j$  onde  $\hat{b}_i^\dagger = (-1)^i \hat{c}_i$  e  $\hat{b}_i = (-1)^i \hat{c}_i^\dagger$  são operadores de criação e aniquilação de buracos. . . . . 34
- Figura 4 - Ilustração da aproximação LDA para um sistema unidimensional. Para cada intervalo  $dr'$  calcula-se a função homogênea  $\sigma^{hom}(n)$ , substituindo  $n$  por  $n(r')$ . . . . . 38
- Figura 5 - Susceptibilidade magnética em função da temperatura de um material ferromagnético ( $LiHo_{0.045}Y_{0.955}F_4$ ). Dados experimentais e ajustes com três diferentes tratamentos: clássico, semi-clássico e totalmente quântico. Figura extraída do artigo Nature **425**, 48 (2003). . . . . 46
- Figura 6 - Derivada da energia com relação a  $U$ ,  $\partial e_0(n, m = 0, U)/\partial U$ , em função da interação em  $n = 0.2$ ,  $n = 0.5$  e  $n = 1$ . . . . . 52

*Lista de Figuras*

- Figura 7 - Entropia de emaranhamento  $S^{hom}(n, m = 0, U)$  de um único sítio do modelo de Hubbard homogêneo com densidade:  $n = 0.2$ ,  $n = 0.5$  e  $n = 1.0$ , em função da interação intra-sítio  $U$ . . . . . 53
- Figura 8 - Entropia de emaranhamento  $S^{hom}(n, m = 0, U)$  de um único sítio do modelo de Hubbard homogêneo em função da densidade  $n$  para os casos: não interagente ( $U = 0$ ), atrativo ( $U = -8$ ) e repulsivo ( $U = 8$ ). . . . . 56
- Figura 9 - (a) Densidade em função do potencial químico  $\mu$ ; (b) entropia de emaranhamento  $S^{hom}(n, U)$  em função do potencial químico para os casos: não interagente ( $U = 0$ ) e atrativo com  $U = -16$  e  $U = -8$ . . . 58
- Figura 10 - (a) Densidade em função do potencial químico  $\mu$ ; (b) entropia de emaranhamento  $S^{hom}(n, U)$  em função do potencial químico para os casos: não interagente ( $U = 0$ ) e repulsivo com  $U = 8$  e  $U = 16$ . . . . 59
- Figura 11 - Emaranhamento em função do campo magnético externo  $h$  em  $n = 1$  e interações  $U$ : nula, atrativa e repulsiva. . . . . 61
- Figura 12 - Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética para o modelo de Hubbard em  $n = 1$ . . . . . 63
- Figura 13 - Emaranhamento do sistema homogêneo, equação Eq.(4.2), em função da interação  $U$ . As curvas cheias representam  $S^{hom}(n, U)$  calculada com a derivada  $\partial e_0/\partial U$  a partir da energia numérica de Bethe- Ansatz, enquanto os símbolos são  $S^{hom}(n, U)$  calculada com  $\partial e_0/\partial U$  a partir da parametrização BA-LSOC Eq.(4.4) para cada densidade. 69

*Lista de Figuras*

- Figura 14 - Distribuição de emaranhamento nos sítios de uma cadeia de 12 sítios, com 6 partículas ( $N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 3$ ) e interação  $U = 4$ . Comparação entre o emaranhamento calculado com a equação Eq.(4.2), substituindo a densidade homogênea  $n$  pela densidade do sítio  $n_i$  exata (entropia LDA) e aproximada via LDA (*nested* LDA), e o emaranhamento exato. . . . . 70
- Figura 15 - Ilustração de uma superrede na direção  $x$  formada por dois diferentes materiais, titanato de estrôncio ( $SrTiO_3$ ) e titanato de lantânio ( $LaTiO_3$ ). A modulação nas superredes pode ser devida a uma diferença no potencial externo ( $\Delta V$ ) ou a uma diferença de interação eletrônica ( $\Delta U$ ) entre os materiais. À direita uma imagem desta superrede, extraída de *Nature* **419**, 378 (2002). . . . . 72
- Figura 16 - Esquema de uma superrede de tamanho  $L$ , período  $\Delta L$ , formada por materiais de mesma largura  $d$  com a) modulação  $\Delta V = V_1 - V_0$  e  $U$  constante e b) modulação  $\Delta U = U_1 - U_0$  e  $V$  fixo. Adotamos  $L = 200$ ,  $d = 10$  e  $U_0 = V_0 = 0$ . . . . . 73
- Figura 17 - Emaranhamento médio de um único sítio,  $\bar{S}^{LDA}[n_i, m = 0, U]$ , em função da modulação  $\Delta$  da superrede em  $V$ , com  $U = 3$ , e da superrede em  $U$ , com  $V = 3$ . Consideramos uma cadeia aberta (OBC) com 200 sítios e 100 partículas com magnetização total nula ( $m = 0$ ). 74
- Figura 18 - Razão entre as derivadas do emaranhamento com relação à modulação  $\Delta$  da superrede em  $U$  e  $V$ ,  $R = (\partial S / \partial U) / (\partial S / \partial V)$ . A reta representa a razão entre as derivadas de energia, equações Eq.(4.9) e Eq.(4.10),  $(\partial E_0 / \partial U) / (\partial E_0 / \partial V) = n/4$ , com  $n = 0.5$ . . . . . 75
- Figura 19 - Ilustração de como surgiria uma descontinuidade no emaranhamento à medida que  $L \rightarrow \infty$  se houvesse uma transição de fase na superrede com modulação  $\Delta V$ . Os pontos são os resultados reais apresentados na Figura 17. . . . . 76

## Lista de Figuras

- Figura 20 - Emaranhamento em função da modulação  $\Delta V$  da superrede para vários tamanhos de cadeia  $L$ , com  $U = 3$  e  $n = 0.5$ . . . . . 77
- Figura 21 - Emaranhamento em função das modulações  $\Delta V$  e  $\Delta U$  em uma superrede com  $L = 200$  e  $N = 100$ . O emaranhamento diminui bruscamente com  $\Delta V$  quase que independente do valor de  $\Delta U$ . . . . . 78
- Figura 22 - Ilustração de uma cadeia aberta de  $L$  sítios na presença de uma impureza local de intensidade  $V_j$ . O potencial  $V_j$  no sítio  $j$  pode ser atrativo ou repulsivo. . . . . 78
- Figura 23 - Distribuição de densidades ao longo de uma cadeia na presença de uma impureza a) com intensidade nula,  $V_j = 0$ ; b) repulsiva, com intensidade  $V_j = 10$ ; c) atrativa, com intensidade  $V_j = -10$ . A reta em vermelho representa a densidade média  $n = N/L = 0.8$ , da cadeia aberta com  $L = 100$ ,  $N = 80$ ,  $U = 2$  e impureza no sítio  $j = 51$ . Para  $V_j \neq 0$  há uma ligeira assimetria entre os dois lados da impureza, porque a impureza não está exatamente no centro da cadeia. . . . . 79
- Figura 24 - Emaranhamento médio por sítio na presença de uma impureza de intensidade  $V_j$ . A impureza é local (no sítio 51) em uma cadeia aberta (OBC) de 100 sítios, 80 partículas e interação intra-sítio  $U = 2$ . O quadro destaca o pequeno platô de emaranhamento, para  $-2 \leq V_j \leq -1.5$ . . . . . 80
- Figura 25 - Emaranhamento na presença de uma impureza de intensidade  $V_j$ , para uma cadeia com interação  $U = 4$  (esquerda) e  $U = 6$  (direita). A impureza está localizada na posição 51 de uma cadeia aberta (OBC) com  $L = 100$  e  $n = 0.8$ . Os quadros internos destacam os platôs de emaranhamento. . . . . 81

*Lista de Figuras*

Figura 26 - Densidade no sítio da impureza ( $n_j$ ) em função do potencial da impureza ( $V_j$ ). Quanto maior o valor de $U$ , maior deve ser o módulo de $V_j$ para que a resistência em $n_j = 1$ seja vencida e a densidade se torne $n_j > 1$ . . . . .	82
Figura 27 - Ilustração do potencial harmônico, $V_i = k(i - i_0)^2$ , para diferentes curvaturas $k > k' > k''$ . Adotamos $i_0 = L/2 + 1$ para $L$ par e $i_0 = (L + 1)/2$ para $L$ ímpar. . . . .	83
Figura 28 - Emaranhamento $\bar{S}^{LDA}$ de uma cadeia aberta com $L = 100$ , $n = 0.7$ e $U = 8$ , em função da curvatura $k$ do potencial harmônico $V_i = k(i - i_0)^2$ . . . . .	84
Figura 29 - Derivada numérica do emaranhamento (Figura 28) com relação à curvatura $k$ do potencial, $\partial\bar{S}^{LDA}/\partial k$ . Em destaque alguns picos na derivada. . . . .	84
Figura 30 - Perfil de densidade na cadeia para cada curvatura $k$ do confinamento harmônico associada a um pico na derivada de emaranhamento. . . . .	85
Figura 31 - Energia do estado fundamental por sítio, $e_0$ , em função da curvatura $k$ do confinamento harmônico, em uma cadeia aberta com $L = 100$ , $N = 70$ e $U = 8$ . . . . .	86
Figura 32 - Ilustração de uma cadeia de tamanho $L$ cujo emaranhamento de blocos é definido entre o bloco $x$ e o restante da cadeia $L - x$ . . . . .	89
Figura 33 - Termo universal do emaranhamento entre blocos, Eq.(5.3), em função do tamanho $x$ do bloco, para um sistema finito qualquer de tamanho $L = 12$ . . . . .	92
Figura 34 - Entropia de emaranhamento de um bloco de tamanho $x$ em um sistema finito de tamanho $L = 10$ , com $n = 1$ e $U = 0$ . Comparação entre o resultado exato e o calculado através da Eq.(5.8). . . . .	95
Figura 35 - Emaranhamento e razão de energias $ E_{XC}/E $ em função da frequência de oscilação $\omega$ do átomo de Hooke. . . . .	102

## Lista de Figuras

- Figura 36 - Emaranhamento e razão de energias  $|E_{XC}/E|$  em função da curvatura  $k$  do modelo de Hubbard sob confinamento harmônico,  $V = kx^2$ . A divergência de  $|E_{XC}/E|$  em torno de  $k = 0.0015$  deve-se ao fato de que  $E$  passa por zero, como mostramos na Figura 31. . . . . 103
- Figura 37 - Emaranhamento e energia de troca e correlação por sítio  $e_{XC}$  em função da curvatura  $k$  do modelo de Hubbard sob confinamento harmônico,  $V = kx^2$ . . . . . 104
- Figura 38 - Comportamento da energia de troca e correlação por sítio em função da densidade para o modelo de Hubbard homogêneo ( $L = \infty$  e  $V = 0$ ), com  $U_i = U = 8t$  e  $t_{ij} = t = 1$ . . . . . 104
- Figura 39 - Análise de  $e_{XC} - e_H$  em função da curvatura  $k$ , comparado com o emaranhamento em função de  $k$ , para o modelo de Hubbard sob potencial harmônico. . . . . 105
- Figura 40 - Derivadas  $\partial S/\partial k$  e  $\partial(e_{XC} - e_H)/\partial k$  em função de  $k$ , para o modelo de Hubbard sob potencial harmônico. . . . . 105
- Figura 41 - Análise do indicador  $e_{XC} - e_H$  para uma cadeia aberta com  $L = 100$ ,  $N = 80$ ,  $U = 2$  e com uma impureza no sítio 51. Em (a) apresentamos o emaranhamento em função do potencial da impureza, (b) o indicador em função de  $V_{imp}$  e (c) as derivadas do emaranhamento e do indicador com relação a  $V_{imp}$ . . . . . 107
- Figura 42 - Análise do indicador  $e_{XC} - e_H$  para uma superrede com modulação  $\Delta V$ , com  $L = 200$ ,  $N = 100$  e  $U = 3$ . Em (a) apresentamos o emaranhamento em função da modulação, (b) o indicador em função de  $\Delta V$  e (c) as derivadas do emaranhamento e do indicador com relação a  $\Delta V$ . . . . . 108

## Lista de Figuras

- Figura 43 - Análise do indicador  $e_{XC} - e_H$  para o confinamento harmônico com  $U = 2$  e para o sistema com uma impureza e a superrede, ambos com  $U = 8$ . A quantidade  $e_{XC} - e_H$  é um bom indicador para qualquer inomogeneidade com interação forte. . . . . 109
- Figura 44 - Na primeira coluna: derivadas do indicador de emaranhamento  $I = e_{XC} - e_H - t^{TF}$  e do emaranhamento em função da inomogeneidade:  $k$  para o confinamento harmônico,  $V_{imp}$  para impureza e  $\Delta V$  para a superrede. Na segunda coluna: emaranhamento e o indicador deslocado de uma constante  $d$ ,  $I' = I + d$ , para cada inomogeneidade. 110
- Figura 45 - Energia do modelo de Hubbard homogêneo, calculada numericamente através das equações de Lieb-Wu,  $e^{exato}(n, m, U)$  e calculada através da nossa parametrização Eq.(B.3),  $e^{BA-spin}(n, m, U)$ , em função da densidade, para  $U = 4$  e  $m \approx n/2$ . . . . . 128
- Figura 46 - Energia do modelo de Hubbard homogêneo em função da magnetização  $m$ . Comparação entre a nossa parametrização  $e^{BA-spin}(n, m, U)$ , dada pela Eq.(B.3), e o resultado numérico exato,  $e^{exato}(n, m, U)$ , para  $n \approx 0.5$  e  $U = 2$ . . . . . 129
- Figura 47 - Energia do modelo de Hubbard homogêneo em função da interação  $U$ , calculada com nossa parametrização  $e^{BA-spin}(n, m, U)$ , Eq.(B.3), e numericamente,  $e^{exato}(n, m, U)$ , para  $n \approx 0.5$  e  $U = 0.25$ . . . . . 130

# *Lista de Tabelas*

Tabela 1 - Entropia de emaranhamento para os limites de interação nula ( $U = 0$ ) e de interação atrativa tendendo ao infinito ( $U = -40$ ). A razão $S(n, U = 0)/S(n, U = -40) \approx 2$ representa o fator de redução do emaranhamento devida à formação de dímeros fortemente acoplados em $U \rightarrow -\infty$ . . . . .	55
Tabela 2 - Desvios locais da entropia LDA e da <i>nested</i> LDA para a cadeia de 12 sítios (Figura 14). Os desvios são apresentados apenas até o sítio $L/2 = 6$ , já que o sistema é simétrico com relação ao centro da cadeia.	71
Tabela 3 - Contribuição universal, $S^{univ}(x = 1, L)$ , e resultado exato para a entropia de emaranhamento de um único bloco, $x = 1$ , para cadeias com condição periódica de contorno, interação $U = 4$ e diferentes densidades $n$ e tamanhos $L$ . . . . .	91
Tabela 4 - Contribuição universal e resultado exato para a entropia de emaranhamento entre o bloco $x$ e o restante da cadeia no modelo de Hubbard homogêneo, com $U = 0$ , $L = 10$ e $n = 1$ . . . . .	92
Tabela 5 - Desvio do emaranhamento entre blocos ( Eq.(5.8)) com relação aos resultados exatos para $U = 0$ , $n = 1$ e $L = 10$ . . . . .	96
Tabela 6 - Desvio das contribuições universal ( $S^{univ}$ ) e não-universal ( $s_1$ ) com relação ao emaranhamento total exato, para $U = 0$ , $n = 1$ e $L = 10$ , com $s_1 = S^{hom}(n = 1, U = 0) = 2$ . . . . .	96

*Lista de Tabelas*

Tabela 7 - Média em  $m$  do desvio percentual  $\bar{D}$  entre a energia exata e nossa parametrização  $e^{BA-spin}(n, m, U)$ , Eq.(B.3), para alguns valores de  $n$  e  $U$ . . . . . 131

# *Sumário*

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>21</b>
<b>2</b>	<b>Fundamentos Teóricos</b>	<b>25</b>
2.1	Emaranhamento . . . . .	25
2.2	Entropia como Medida de Emaranhamento . . . . .	28
2.3	Modelo de Hubbard . . . . .	32
2.4	Teoria do Funcional da Densidade . . . . .	35
2.4.1	LDA e Aproximação de Thomas-Fermi . . . . .	37
2.4.2	Energia de troca e correlação . . . . .	39
2.4.3	Esquema Kohn-Sham . . . . .	40
2.4.4	DFT para o modelo de Hubbard . . . . .	41
<b>3</b>	<b>Emaranhamento no Modelo de Hubbard Homogêneo</b>	<b>45</b>
3.1	Emaranhamento Local . . . . .	46
3.2	Emaranhamento nas Fases Isolante, Metálica e Supercondutora . . . . .	51
3.3	Emaranhamento na Presença de Campos Magnéticos Externos . . . . .	60
3.4	Sumário dos Resultados . . . . .	63
<b>4</b>	<b>Emaranhamento no Modelo de Hubbard Espacialmente Inomogêneo</b>	<b>65</b>
4.1	LDA para a Entropia de Emaranhamento . . . . .	66

## Sumário

4.2	Emaranhamento em Superredes . . . . .	72
4.3	Emaranhamento na Presença de Impurezas . . . . .	77
4.4	Emaranhamento sob Confinamento Harmônico . . . . .	83
4.5	Sumário dos Resultados . . . . .	86
<b>5</b>	<b>Emaranhamento entre Blocos</b>	<b>89</b>
5.1	Contribuições Universal e Não-Universal do Emaranhamento . . . . .	90
5.2	Entropia de Emaranhamento entre Blocos para o Modelo de Hubbard . . .	94
5.3	LDA para a Entropia de Emaranhamento entre Blocos . . . . .	96
5.4	Sumário dos Resultados . . . . .	98
<b>6</b>	<b>Energia como indicador de emaranhamento</b>	<b>101</b>
<b>7</b>	<b>Conclusões</b>	<b>113</b>
	<b>Referências</b>	<b>117</b>
	<b>Apêndice A – Matriz Densidade Reduzida</b>	<b>123</b>
	<b>Apêndice B – Parametrização para a energia do modelo de Hubbard com spin</b>	<b>127</b>

# 1 *Introdução*

O *emaranhamento* é uma das propriedades mais fascinantes da Mecânica Quântica e também uma de suas características menos intuitivas. Dois graus de liberdade de um sistema quântico são emaranhados quando não podemos atribuir valores a um independentemente do outro. Assim, ao medirmos o estado de um dos subsistemas de um sistema composto emaranhado, interferimos instantaneamente no estado dos demais subsistemas, independentemente da distância entre eles. Sob uma visão clássica, o emaranhamento é interpretado como uma interação instantânea entre subsistemas, o que levou Albert Einstein a chamá-lo de *ação fantasmagórica à distância* (1).

A Física Quântica, porém, revela que não se trata de uma interação à distância entre sistemas distintos, mas de uma consequência da *não-localidade* na descrição quântica de um único sistema composto. A diferença entre a visão clássica e a quântica foi ilustrada por A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen, no famoso paradoxo EPR, que descreve o estado de duas partículas emaranhadas a distâncias macroscópicas (1), no qual a interpretação em termos de uma interação entre partículas independentes, com propriedades locais, levaria a contradições com a relatividade restrita.

Embora esse emaranhamento a grandes distâncias tenha chamado muita atenção por seus aspectos não intuitivos e surpreendentes que desafiam a mente clássica, trata-se de uma propriedade intrínseca da Mecânica Quântica, presente em praticamente todos os sistemas, inclusive em sistemas que não estão separados por grandes distâncias, e até mesmo entre graus de liberdade de uma única partícula.

Emaranhamento entre sistemas com distância não macroscópica tem sido intensa-

mente investigado nos últimos anos no contexto da Informação Quântica, porque pode ser usado na transmissão, no armazenamento e no processamento de informação.

Os primeiros trabalhos em que verificou-se a existência de emaranhamento (2, 3) surgiram no início da década de 80, através de testes das desigualdades de Bell (4). Mas a quantificação de emaranhamento só foi explorada mais tarde, em sistemas de fótons (5, 6, 7, 8), incluindo o bem sucedido e famoso teletransporte de estado entre dois fótons em margens opostas do rio Danúbio (9).

Já para a Criptografia Quântica, o emaranhamento foi explorado em chaves criptográficas (10, 11, 12), para envio seguro de informação. A grande vantagem em usar estados emaranhados na Criptografia está no fato de que se houver algum interceptador na mensagem, sua presença será imediatamente notificada pela alteração no estado do sistema emaranhado.

O emaranhamento também desempenha um importante papel para o desenvolvimento da Computação Quântica (13), em que, além de transmitir, é necessário armazenar e processar informação. Existem alguns sistemas muito visados para o futuro computador quântico, como elétrons em nanoestruturas, spins em experiências de ressonância nuclear magnética (RNM) e redes quânticas de íons, nos quais alguns processos simples de transmissão de informação já foram produzidos (14, 15, 16).

No entanto, comparada com a Informação e a Criptografia Quântica, a Computação Quântica está em um estágio ainda mais inicial, especialmente com relação a realizações experimentais. Do ponto de vista teórico, embora constituam uma linha de pesquisa bem recente, os estudos de emaranhamento em nanoestruturas têm evoluído rapidamente (17), principalmente com o auxílio de modelos como os de Heisenberg e de Hubbard (18, 19).

Embora o estudo de emaranhamento tenha recebido muita atenção nos últimos anos, podemos considerar que estamos na fase inicial da montagem de um intrigante quebra-cabeça. Suas peças contêm informações sobre a natureza do emaranhamento, sobre como identificar sistemas emaranhados, quantificar o grau de emaranhamento, entender suas propriedades e controlar essa característica tão promissora da Mecânica Quântica.

Nosso objetivo nesta tese foi o estudo do emaranhamento em sistemas de muitos férmions. Para isso investigamos o comportamento do emaranhamento nas fases metálica, isolante e supercondutora de um sólido. Procuramos entender como o emaranhamento é influenciado pela variação dos parâmetros internos do sistema, como densidade, magnetização e interação eletrônica. Propusemos uma maneira de obter o emaranhamento de sistemas inomogêneos e buscamos a compreensão dos efeitos que bordas, impurezas, potenciais elétricos e campos magnéticos externos, produzem no emaranhamento. Estudamos ainda as contribuições universal e não-universal do emaranhamento e procuramos por uma relação entre emaranhamento e energia. Todas essas pesquisas foram efetuadas sob uma visão que mescla ciência fundamental com possíveis aplicações, uma alimentando a outra, para que pudéssemos contribuir com algumas peças para o quebra-cabeça.

Os conceitos teóricos necessários para estes estudos são apresentados no Capítulo 2. Iniciamos apresentando a definição de emaranhamento e a entropia como forma de quantificar o emaranhamento. Em seguida descrevemos o modelo de Hubbard. Por fim apresentamos alguns conceitos básicos da teoria do funcional da densidade (DFT), incluindo a aproximação de densidade local (LDA) e o sistema Kohn-Sham, e então apresentamos como a DFT é aplicada ao modelo de Hubbard.

No Capítulo 3 tratamos do emaranhamento no modelo de Hubbard homogêneo, explorando as fases isolante, metálica e superfluida. Analisamos o emaranhamento nessas fases em função dos parâmetros do sistema: densidade, interação e magnetização. Além disso estudamos os efeitos de campos magnéticos no emaranhamento e exploramos seu relacionamento com a susceptibilidade magnética.

Apresentamos, no Capítulo 4, a proposta de uma LDA para a entropia de emaranhamento de sistemas inomogêneos. Testamos a qualidade de nossa proposta comparando com resultados exatos para cadeias pequenas. Aplicamos a LDA para a entropia de emaranhamento do modelo de Hubbard inomogêneo e exploramos o efeito de diversas inomogeneidades: superredes, impurezas e confinamento harmônico.

Estendemos a análise para o emaranhamento entre blocos, no Capítulo 5, analisando

as contribuições universal e não-universal do emaranhamento, e propomos uma LDA para a entropia de emaranhamento entre blocos de sistemas inomogêneos.

No Capítulo 6 apresentamos resultados preliminares de um indicador de emaranhamento formado por uma combinação de componentes da energia total: energia de troca e correlação, energia de Hartree e energia cinética. E, finalmente, no Capítulo 7 apresentamos as conclusões finais.

## 2 *Fundamentos Teóricos*

Dedicamos este capítulo à descrição dos conceitos teóricos que serão fundamentais para a compreensão dos resultados da tese. Iniciamos definindo emaranhamento, conceitual e matematicamente, apresentamos a entropia como medida de emaranhamento, descrevemos o modelo de Hubbard, conceitos básicos de DFT e por fim apresentamos a DFT aplicada ao modelo de Hubbard.

### 2.1 Emaranhamento

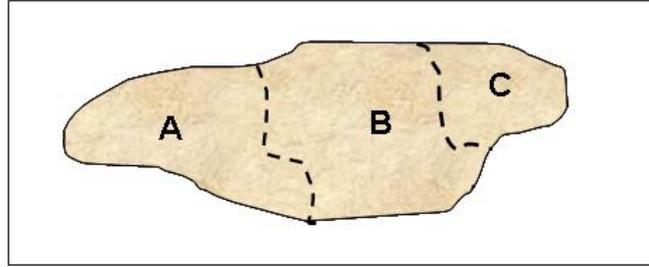
O *emaranhamento* é uma das propriedades mais intrigantes da Mecânica Quântica. A compreensão de sua natureza tem sido um dos grandes desafios da ciência fundamental, principalmente porque se trata de um observável de mensurabilidade não-trivial. Além dessa questão básica, identificar, quantificar e controlar o emaranhamento em um dado sistema são essenciais para o desenvolvimento das áreas de Informação e Computação Quântica.

Matematicamente o emaranhamento é definido através da impossibilidade de fatorização dos estados dos subsistemas emaranhados. Assim, se três subsistemas  $A, B$  e  $C$ , como ilustra a Figura 1, estão *emaranhados* entre si, então o estado total  $|\Psi_{ABC}\rangle$  não é fatorizado no produto dos estados individuais,

$$|\Psi_{ABC}\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \otimes |\psi_C\rangle, \quad (2.1)$$

em que  $|\psi_i\rangle$  é o estado do subsistema  $i$ . Assim, qualquer medida em um dos subsistemas  $A, B$  ou  $C$  afeta instantaneamente os demais subsistemas. Por isso, a partir da medida do

estado de um subsistema, podemos extrair alguma informação sobre o estado dos demais. Essa definição de emaranhamento não está restrita a apenas 3 subsistemas: desde que tenhamos mais de um sistema envolvido, não há um limite máximo para o número de componentes.



**Figura 1** – Ilustração de um sistema subdividido em três subsistemas. As partes *A*, *B* e *C* estarão emaranhadas se o estado total não for o produto dos estados dos subsistemas.

Quando o estado total obedece a Eq.(2.1), então existem correlações quânticas entre os subsistemas. É importante não confundir esse conceito de correlação, com o de correlação da teoria de muitos corpos. Na física de muitos corpos, quando as  $N$  partículas de um sistema são interagentes entre si, a função de onda total,  $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ , não pode ser decomposta em um produto das funções de onda de cada partícula,

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \neq \phi(r_1)\phi(r_2)\dots\phi(r_N), \quad (2.2)$$

onde  $\phi(r_i)$  é a função de onda da partícula  $i$ . Isso significa que o comportamento das partículas está correlacionado.

Embora haja uma semelhança formal entre as desigualdades Eq.(2.1) e Eq.(2.2), as duas definições de correlação são muito distintas. Para entender a diferença entre uma definição e outra é preciso considerar o conceito de subsistema em cada caso. Para a definição de correlação de muitos corpos, o importante é a existência ou não de interação Coulombiana entre as partículas. Neste caso temos  $N$  subsistemas, cada qual composto por uma única partícula, de forma que o estado de cada subsistema nada mais é do que a função de onda de cada partícula individual.

Já para sistemas emaranhados, dizemos que o emaranhamento existe entre pelo menos

dois subsistemas,  $A$  e  $B$ , que não representam necessariamente duas partículas,  $A$  e  $B$  poderiam representar diferentes graus de liberdade de uma mesma partícula. Ou poderiam ser formados por um conjunto de partículas, por exemplo,  $A$  contendo  $x$  partículas e  $B$  contendo  $y$  partículas. Neste caso o estado de cada subsistema não será apenas a função de onda de uma única partícula, mas será a função de onda das  $x$  partículas,  $\phi(r_x)$ , para o subsistema  $A$  e de  $y$ ,  $\phi(r_y)$ , para  $B$ . Assim, neste exemplo, o sistema estaria emaranhado se obedecesse a desigualdade

$$\langle r_1, r_2, \dots, r_N | \Psi_{AB} \rangle = \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) \neq \phi(r_x) \otimes \phi(r_y), \quad (2.3)$$

que absolutamente não traz nenhuma informação sobre correlação do ponto de vista de teoria de muitos corpos.

Assim, as correlações quânticas relacionadas com emaranhamento não devem ser confundidas com as correlações devido às interações entre as partículas. O único caso em que ambas as definições se confundem é aquele em que os  $N$  subsistemas  $A_1, A_2, \dots, A_N$  representam cada qual uma única partícula de um sistema com  $N$  partículas. Então, o estado de cada subsistema é a função de onda de uma única partícula,

$$\begin{aligned} \langle r_1 | \psi_{A_1} \rangle &= \phi(r_1), \\ \langle r_2 | \psi_{A_2} \rangle &= \phi(r_2), \\ &\vdots \\ \langle r_N | \psi_{A_N} \rangle &= \phi(r_N), \end{aligned} \quad (2.4)$$

e dessa forma as duas definições de correlação, Eq.(2.1) e Eq.(2.2), tornam-se idênticas. Neste caso o emaranhamento entre as partículas, devido apenas à interação entre elas, é a própria correlação no sentido de muitos corpos. Portanto, podemos considerar que a correlação de muitos corpos é na verdade um caso especial de emaranhamento.

Embora tenhamos definido sistemas emaranhados através da obediência à desigualdade Eq.(2.1), o emaranhamento não é apenas um fator qualitativo presente ou ausente em um sistema. É possível definir também um grau de emaranhamento. Diferentes sis-

temas emaranhados podem ter graus de emaranhamento diferentes. Um mesmo sistema, sob certas condições e variações de parâmetros, pode tornar-se mais ou menos emaranhado. Isso significa que ao medirmos o estado de um subsistema  $B$ , podemos obter mais ou menos informação sobre o estado do subsistema  $A$ , dependendo de quão emaranhado estiverem. Encontrar meios para quantificar essa intensidade de emaranhamento é um dos ingredientes essenciais para o desenvolvimento do processamento quântico de informação.

Para o caso mais complexo, de sistemas *multipartites* e com estado total misto, ou seja, formados por mais de 2 subsistemas com estado total em uma mistura estatística de estados, ainda há pouco consenso sobre a melhor forma de obter o grau de emaranhamento, embora existam algumas propostas (20, 21, 22). Já para o caso de sistemas *multipartites*, mas com estado total puro, existem algumas grandezas relativamente bem estabelecidas como eficientes medidores do grau de emaranhamento, como por exemplo concorrência e negatividade (23).

Especificamente para o caso que trataremos aqui, de sistemas *bipartites* — formados por dois subsistemas — e estado total puro, há um consenso de que a quantidade apropriada para a medida do grau de emaranhamento é a *entropia de von Neumann* ou *entropia de emaranhamento* (13), que discutiremos detalhadamente na próxima seção.

## 2.2 Entropia como Medida de Emaranhamento

Considere um sistema de duas componentes,  $A$  e  $B$ , em um estado total puro  $|\Psi_{AB}\rangle$ , tal que a matriz densidade do sistema seja

$$\rho_{AB} = |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}|. \quad (2.5)$$

O emaranhamento deste sistema pode ser calculado através da entropia de emaranhamento, definida como (13)

$$S_A = -Tr[\rho_A \log_2 \rho_A], \quad (2.6)$$

onde  $\rho_A$  é a matriz densidade reduzida do subsistema  $A$ , que é obtida através do traço da matriz densidade total nos graus de liberdade do subsistema  $B$ ,

$$\rho_A = Tr_B[\rho_{AB}]. \quad (2.7)$$

A equação Eq.(2.6) quantifica o emaranhamento entre os subsistemas  $A$  e  $B$ . Evidentemente o grau de emaranhamento de  $A$  com relação a  $B$  deve ser o mesmo de  $B$  com relação a  $A$ , o que implica na igualdade

$$S_A = S_B = -Tr[\rho_B \log_2 \rho_B], \quad (2.8)$$

onde  $\rho_B$  é a matriz densidade reduzida do sistema  $B$ ,

$$\rho_B = Tr_A[\rho_{AB}], \quad (2.9)$$

obtida através da matriz densidade total sob o traço nos graus de liberdade de  $A$ .

Embora a forma da entropia de emaranhamento, Eq.(2.6), seja muito parecida com a da entropia estatística da termodinâmica (24),

$$S^T = -k_B \sum_j P_j \ln P_j, \quad (2.10)$$

e com sua expressão quântica, obtida por von Neumann (25),

$$S^T(\rho) = -k_B Tr[\rho \ln \rho], \quad (2.11)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $P_j$  são as probabilidades de cada estado  $j$ , dependentes da temperatura  $T$  e  $\rho$  é a matriz densidade do sistema, a similaridade se restringe apenas à forma matemática e à idéia de que quanto maior o número de estados possíveis, maior a entropia.

Conceitualmente, no entanto, há uma grande diferença entre as entropias da Eq.(2.6) e da Eq.(2.11). A entropia termodinâmica  $S^T$  e sua versão quântica  $S^T(\rho)$  somam sobre todos os possíveis estados  $P_j$  (clássicos) e  $\rho$  (quânticos), respectivamente. Isso significa que ambas carregam informação sobre o número de estados possíveis e sobre a probabilidade

de cada estado no sistema todo, o que corresponde à informação sobre a desordem do sistema. Já a entropia de emaranhamento,  $S_A$ , soma sobre todos os possíveis estados do subsistema  $A$ . Isso significa que a informação está relacionada com o número de possíveis estados e sobre a probabilidade de cada estado no subsistema  $A$ , e que, de alguma forma carrega informação sobre o sistema  $B$ .

Para ilustrar como é possível obter informação sobre  $B$  a partir de uma medida no sistema  $A$ , considere o sistema formado por duas partículas, cada qual em uma superposição de estados de spin,  $|\uparrow\rangle$  e  $|\downarrow\rangle$ . O estado total dessas partículas deve ser puro para que o emaranhamento possa ser quantificado pela entropia de emaranhamento. Suponha então que o estado total seja o de uma partícula com spin para cima e outra com spin para baixo,  $|\Psi_{AB}\rangle = |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$ . Assim, ao efetuarmos uma medida sobre um dos subsistemas, digamos sobre a partícula  $A$ , o resultado da medida irá nos informar o estado da partícula  $B$ . Se a medida resultar no estado  $|\uparrow\rangle$ , saberemos que a partícula  $B$  estará no estado  $|\downarrow\rangle$ .

Embora possuam conceitos distintos, é comum que se tente fazer analogias entre a entropia de emaranhamento e a entropia termodinâmica, em busca de significados mais intuitivos para a entropia de emaranhamento. Existe no entanto uma outra forma de compreender a entropia de emaranhamento, vinculando-a a uma medida de pureza, como mostramos a seguir.

Considere um sistema *bipartite*,  $A$  e  $B$ , no estado total puro  $|\Psi_{AB}\rangle$ . Uma vez que se trata de um sistema puro, sua matriz densidade total será dada pela equação Eq.(2.5). Assim, se não houver emaranhamento entre  $A$  e  $B$ , ou seja, se o estado total fatorizar,

$$|\Psi_{AB}\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle, \quad (2.12)$$

então a matriz densidade total será

$$\begin{aligned} \rho_{AB} &= |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}| \\ &= |\psi_A\rangle\langle\psi_A| \otimes |\psi_B\rangle\langle\psi_B| \\ &= |\psi_A\rangle\langle\psi_A| \otimes |\psi_B\rangle\langle\psi_B| \\ &= \rho_A \otimes \rho_B. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Portanto, partindo de um sistema puro *não emaranhado* encontramos que cada subsistema está em um estado puro, com matriz densidade reduzida  $\rho_A = |\psi_A\rangle\langle\psi_A|$  e  $\rho_B = |\psi_B\rangle\langle\psi_B|$ .

De fato a relação Eq.(2.12), que define a inexistência de emaranhamento, é obedecida apenas quando os subsistemas também são puros. Se, ao contrário, os subsistemas fossem mistos, por exemplo, em uma mistura estatística de dois estados  $|\alpha\rangle$  e  $|\beta\rangle$ ,

$$\rho_A = \alpha_A|\alpha\rangle\langle\alpha| + \beta_A|\beta\rangle\langle\beta|, \quad (2.14)$$

$$\rho_B = \alpha_B|\alpha\rangle\langle\alpha| + \beta_B|\beta\rangle\langle\beta|, \quad (2.15)$$

cada qual com probabilidade  $\alpha_{A(B)}$  e  $\beta_{A(B)}$ , então  $|\Psi_{AB}\rangle \neq |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle$ . Portanto a medida da **pureza** do subsistema  $A$ , ou equivalentemente do subsistema  $B$ , é uma medida de emaranhamento. Para medir a pureza de um sistema basta calcular o traço do quadrado da matriz densidade deste sistema,  $Tr[\rho^2]$ . Devido à propriedade de idempotência da matriz densidade pura, se o subsistema estiver em um estado puro teremos  $Tr[\rho^2] = Tr[\rho] = 1$ . Já se estiver em um estado misto, o traço resultará em valor intermediário  $1/d \leq Tr[\rho^2] < 1$ , cujo mínimo dependerá da dimensão  $d$  da base de estados.

Assim, a entropia de emaranhamento,

$$S_{A(B)} = -Tr[\rho_{A(B)} \log_2 \rho_{A(B)}], \quad (2.16)$$

é basicamente uma medida da pureza dos subsistemas, onde incluiu-se uma função logarítmica<sup>1</sup>, tal que a extensividade da entropia fosse mantida<sup>2</sup>.

Apesar de termos escolhido a base 2 para o logaritmo da Eq.(2.16)<sup>3</sup>, o uso de outras bases, como  $\ln$  ou  $\log$ , não acarretaria nenhuma alteração conceitual para a definição da

<sup>1</sup> Como o logaritmo atua em probabilidades, que são menores ou iguais a 1, o resultado de  $\log_2 \rho$  será sempre nulo ou negativo. Assim ao introduzir o logaritmo na definição de emaranhamento, é preciso acrescentar também um sinal negativo, para que a entropia seja sempre positiva.

<sup>2</sup> Neste caso a extensividade existe apenas para entropias de emaranhamento de diferentes sistemas, mas não para as entropias das partes emaranhadas. Assim, por exemplo, um sistema  $A, B$  emaranhado terá ainda  $S_{AB} \neq S_A + S_B$ . Entretanto, se tivermos um sistema cujo emaranhamento depende da escolha de  $A$ , por exemplo em sistemas espacialmente inhomogêneos, o logaritmo garantirá a extensividade para as entropias dos diversos subsistemas  $A_1, A_2, A_3, \dots$  escolhidos:  $S_{total} = S_{A_1} + S_{A_2} + S_{A_3} + \dots$ . Isso permite, por exemplo, o cálculo do emaranhamento médio de  $A$  com relação a  $B$ .

<sup>3</sup> Essa escolha é conveniente para o modelo de Hubbard porque a base de ocupação neste modelo tem dimensão  $d = 4$ , de forma que a entropia estará limitada entre dois números inteiros,  $0 \leq S \leq 2$ .

Eq.(2.16). Diferentes bases apenas definem diferentes escalas para a entropia. A escala da entropia irá depender da dimensão  $d$  da base de estados, ou seja, dependerá do número de estados possíveis do subsistema.

Como vimos o emaranhamento será mínimo,

$$S_A^{min} = S_B^{min} = 0, \quad (2.17)$$

quando o subsistema for puro, isto é, estiver em um estado bem definido, com probabilidade unitária, enquanto os demais estados têm probabilidade nula.

Analogamente, o emaranhamento máximo,

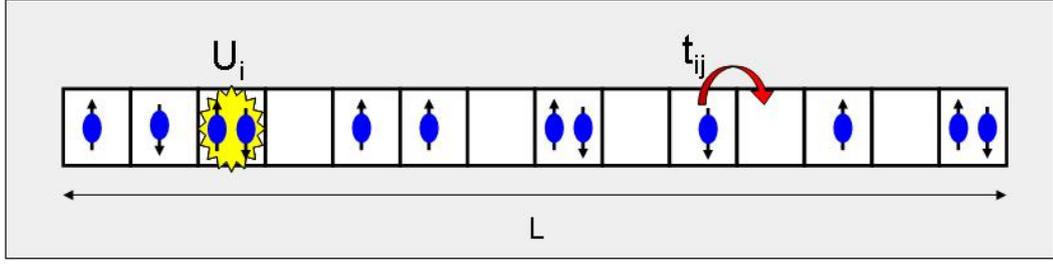
$$S_A^{max} = S_B^{max} = -\log_2\left(\frac{1}{d}\right), \quad (2.18)$$

ocorrerá quando o subsistema for maximamente misto, ou seja, quando todos os  $d$  possíveis estados da matriz  $\rho_{A(B)}$  tiverem igual probabilidade  $1/d$ , de forma que a equação Eq.(2.16) recaia na Eq.(2.18).

## 2.3 Modelo de Hubbard

O estudo de emaranhamento em sólidos, como discutido no Capítulo 1, tem sido investigado em cadeias de spin há algum tempo (26, 27, 28, 29, 30). Esses modelos descrevem cadeias com sítios ocupados por um único elétron ou íon, cujo único grau de liberdade é a orientação de spin. Mais recentemente, porém, sistemas de elétrons itinerantes, tal como descrito pelo modelo de Hubbard, têm se tornado alvo de estudos de emaranhamento (31, 32). O modelo de Hubbard, muito explorado na área de sistemas fortemente correlacionados, é uma simplificação para a descrição de elétrons em sólidos.

Em um sistema unidimensional, formado por uma cadeia de  $L$  sítios, o modelo de Hubbard descreve o movimento dos elétrons nos sítios, como ilustra a Figura 2. Cada sítio representa um orbital eletrônico, não-degenerado, de forma que só pode ser ocupado por no máximo dois elétrons com spins opostos, devido ao Princípio de Exclusão de Pauli. Duas partículas em um mesmo sítio  $i$  experimentam uma interação Coulombiana  $U_i$ . As



**Figura 2** – Ilustração de uma cadeia de tamanho  $L$  do modelo de Hubbard. Cada sítio pode ser ocupado por até duas partículas, com interação intra-sítio  $U_i$ . A itinerância das partículas entre sítios vizinhos é representada pelo termo  $t_{ij}$ , com  $j = i \pm 1$ .

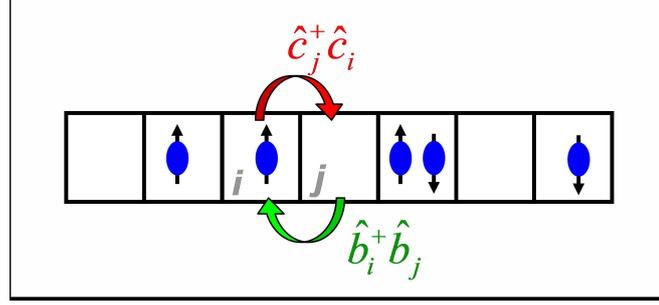
partículas possuem também uma certa probabilidade  $t_{ij}$  de se deslocar de um sítio  $i$  para um sítio vizinho  $j$ , esse é o termo de energia cinética ou *hopping*. Além disso cada sítio pode estar sob ação de algum potencial externo  $v_{i\sigma}$ , elétrico ou magnético, onde  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  é a orientação de spin. Assim o Hamiltoniano do modelo de Hubbard unidimensional é dado por

$$\hat{H} = - \sum_{ij\sigma} t_{ij} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} v_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (2.19)$$

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

A itinerância das partículas ao longo da cadeia depende das probabilidades de *hopping* entre os sítios  $t_{ij}$  e da interação  $U_i$ . Por exemplo, se no sítio  $i$  há uma partícula com spin  $\sigma$ , 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  $\sigma$ , e baixa, se ela estiver sozinha no sítio  $j$ , pois o custo energético será maior para manter 2 partículas no sítio  $i$ , devido à interação  $U_i$ . Se por outro lado o sítio  $i$  estiver vazio e o sítio  $j$  duplamente ocupado, a probabilidade de uma das partículas do sítio  $j$  migrar para o sítio  $i$  será alta, tendendo à configuração de mais baixa energia.

Para o caso em que  $U_i = U$  é o mesmo para todos os sítios, essa itinerância de partículas do sítio  $j$  para o sítio  $i$  pode ser analisada de forma simétrica através do movimento de *buracos* ou de *ausência de partículas*, do sítio  $i$  para o sítio  $j$ , como ilustrado na Figura 3.



**Figura 3** – O hopping de uma partícula do sítio  $i$  para o sítio  $j$ , através da operação  $\hat{c}_j^+ \hat{c}_i$ , é ilustrado juntamente com o movimento simétrico de um buraco, do sítio  $j$  para o sítio  $i$ , através da operação  $\hat{b}_i^+ \hat{b}_j$  onde  $\hat{b}_i^+ = (-1)^i \hat{c}_i$  e  $\hat{b}_i = (-1)^i \hat{c}_i^\dagger$  são operadores de criação e aniquilação de buracos.

As interações  $U_i$  e as energias cinéticas  $t_{ij}$ , dependem da distribuição de densidades das partículas na cadeia. A distribuição de partículas, por sua vez, depende das condições de contorno e do potencial externo  $v_{i\sigma}$ . Por exemplo, para um sistema sem campos externos ( $v_{i\sigma} = 0$ ) e tamanho infinito, o sistema será homogêneo — a distribuição de densidades  $n_i$  será uniforme,  $n_i = n = N/L$  — e então todos os sítios serão equivalentes, com  $U_i = U$  e  $t_{ij} = t$ . Da mesma forma, se o sistema for finito, mas com condição de contorno periódica (PBC – do inglês *periodic boundary conditions*), a distribuição será igualmente homogênea,  $n_i = n = N/L$ . Se por outro lado, o sistema tiver condição aberta de contorno (OBC – do inglês *open boundary conditions*), a distribuição de densidades será afetada pela presença das bordas, apresentando oscilações de Friedel (33). Na presença de potenciais externos,  $v_{i\sigma} \neq 0$ , a distribuição será inhomogênea e dependente da forma de  $v_{i\sigma}$ .

Em alguns casos o Hamiltoniano Eq.(2.19) do modelo de Hubbard é exatamente solúvel. Para sistemas pequenos, com  $L \leq 20$  sítios, o Hamiltoniano pode ser diagonalizado numericamente. No limite termodinâmico,  $L \rightarrow \infty$ , em que a cadeia é homogênea, a energia por sítio do estado fundamental é obtida através da solução exata Bethe-Ansatz (34, 35),

$$e_0(n, m, U) = -2t \int_{-Q}^Q \alpha(k) \cos k dk, \quad (2.20)$$

dependente da densidade, da magnetização  $m = (n_\uparrow - n_\downarrow)/2$ , onde  $n_\sigma$  é a densidade de partículas com spin  $\sigma$ . A função  $\alpha(k)$  vem das equações de Lieb-Wu, que são um conjunto

de equações integrais acopladas,

$$\begin{aligned}\alpha(k) &= \frac{1}{2\pi} + \frac{\cos k}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{U/4}{(U/4)^2 + (l - \text{sen}k)^2} \sigma(l) dl, \\ \sigma(l) &= \frac{1}{\pi} \int_{-Q}^Q \frac{U/4}{(U/4)^2 + (l - \text{sen}k)^2} \alpha(k) dk - \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{U/2}{(U/2)^2 + (l - l')^2} \sigma(l') dl',\end{aligned}\quad (2.21)$$

em que  $Q$  é determinado pela condição de normalização  $\int_{-Q}^Q \alpha(k) dk = n$  e  $\sigma(l)$  é normalizado por  $\int_{-\infty}^{\infty} \sigma(l) dl = n_{\downarrow}/2$ . A solução numérica das equações de Lieb-Wu, Eq.(2.21), assim como a subrotina de diagonalização exata do Hamiltoniano Eq.(2.19), foram implementadas em nosso grupo de pesquisa pelo colaborador Dr. Vivaldo L. Campo.

Para o caso em que o tamanho da cadeia é intermediário,  $20 \ll L \ll \infty$ , embora não tenhamos soluções exatas, é possível obter várias propriedades do Hamiltoniano Eq.(2.19) através da Teoria do Funcional da Densidade (DFT – do inglês *Density Functional Theory*) (36, 37, 38). Usando DFT e a aproximação de densidade local (LDA – do inglês *Local-Density Approximation*) para o modelo de Hubbard (39), pode-se obter a energia e a distribuição de densidades de cadeias com tamanhos intermediários. Na próxima seção, apresentamos os principais conceitos de DFT e LDA e mostramos como são aplicadas ao modelo de Hubbard.

## 2.4 Teoria do Funcional da Densidade

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) (36, 37, 38) tem sido uma ferramenta fundamental para a solução de problemas de muitos corpos. Através de DFT é possível descrever um sistema de  $N$  partículas interagentes, descritas por uma equação de Schrödinger  $3N$ -dimensional para a função de onda de muitos corpos  $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ , a partir de um sistema equivalente de uma única partícula com um potencial efetivo  $v_{KS}(r)$ , através das equações de Kohn-Sham (KS) (40).

A DFT fundamenta-se no *teorema de Hohenberg-Kohn* (HK) (36), que estabelece que a densidade  $n_0(r)$ , de um sistema de  $N$  partículas interagentes no estado fundamental sob ação de um potencial externo  $v(r)$ , determina univocamente a função de onda

$\Psi_0(r_1, r_2, \dots, r_N)$  do sistema. Portanto a função de onda é um *funcional da densidade*,

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

onde  $n(r)$  é dada por

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

A energia do estado fundamental  $E_0$  pode ser obtida minimizando  $E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$ , com relação a todos os possíveis estados anti-simétricos  $|\Psi\rangle$ ,

$$\begin{aligned} E_0 &= \min_{\Psi} \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle \\ &= \langle \Psi[n_0] | \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} | \Psi[n_0] \rangle \\ &= E[n_0(r)], \end{aligned} \quad (2.24)$$

onde os operadores de energia cinética  $\hat{T}$  e de interação  $\hat{U}$  são universais<sup>4</sup>, enquanto o operador  $\hat{V}$  do potencial externo é dependente do sistema. Uma vez que  $\Psi[n_0]$  é um funcional da densidade, então a energia, assim como qualquer observável, é um funcional da densidade  $E_0 = E[n_0(r)]$  (Eq.(2.24)).

Assim a energia do estado fundamental também pode ser obtida minimizando o funcional da densidade  $E[n]$

$$E[n] = T[n] + U[n] + V[n], \quad (2.25)$$

com relação à densidade,

$$\begin{aligned} E_0 &= \min_n E[n] \\ &= \min_n [T[n] + U[n] + V[n]]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

A minimização da energia resulta em

$$\begin{aligned} \frac{\delta E[n]}{\delta n(r)} &= \frac{\delta F[n]}{\delta n(r)} + \frac{\delta V[n]}{\delta n(r)} \\ 0 &= \frac{\delta F[n]}{\delta n(r)} + v(r), \end{aligned} \quad (2.27)$$

<sup>4</sup> Isso significa que a forma dos operadores  $\hat{T}$  e  $\hat{U}$  é a mesma para qualquer sistema Coulombiano e não-relativístico, enquanto o operador  $\hat{V}$  varia de acordo com o sistema considerado.

onde  $v(r) = \delta V[n]/\delta n(r)$  é o potencial externo e  $F[n]$  é o funcional universal,

$$F[n] = T[n] + U[n]. \quad (2.28)$$

Embora todo este formalismo seja exato, não conseguimos resolver o problema diretamente porque o funcional universal  $F[n]$  não é conhecido explicitamente. Assim, na prática é preciso fazer aproximações para a energia cinética e a interação eletrônica do sistema interagente.

### 2.4.1 LDA e Aproximação de Thomas-Fermi

A aproximação de densidade local (LDA),

$$O[n(r)] \approx O^{LDA}[n] = \int d^3r o^{hom}(n)|_{n \rightarrow n(r)}, \quad (2.29)$$

consiste em aproximar o funcional da densidade  $O[n(r)]$ , de um observável extensivo  $\langle \hat{O} \rangle$  de um sistema com distribuição de densidade inhomogênea, pela integração no volume de  $o^{hom}(n) = \lim_{V \rightarrow \infty} O^{hom}(n)/V$ , substituindo localmente  $n$  por  $n(r)$ , como ilustra a Figura 4. A função da densidade  $O^{hom}(n)$  é o observável para o sistema com distribuição de densidade homogênea. A seguir mostraremos o uso da LDA para o cálculo da energia cinética na aproximação de Thomas-Fermi.

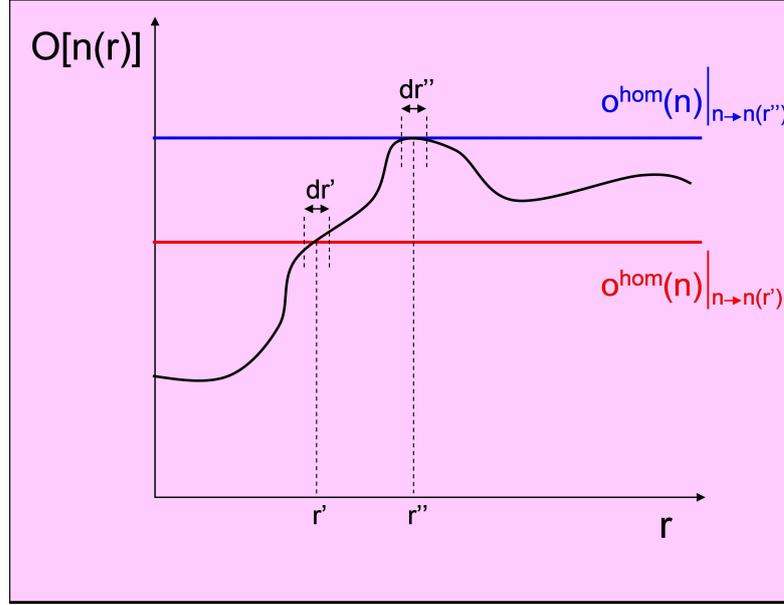
A mais simples aproximação para o funcional universal  $F[n]$  é obtida pela aproximação de *Thomas-Fermi* (TF), em que a energia de interação é aproximada pela *energia de Hartree*,

$$U[n] \approx E_H[n] = \frac{e^2}{2} \int d^3r \int d^3r' \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|}, \quad (2.30)$$

que é a energia eletrostática clássica, e a energia cinética do sistema interagente  $T[n]$  é aproximada<sup>5</sup> por

$$T[n(r)] \approx T_s^{LDA}[n] = \int d^3r t_s^{hom}(n)|_{n \rightarrow n(r)}, \quad (2.31)$$

<sup>5</sup> A energia cinética na aproximação de TF é calculada através de duas aproximações independentes. Uma delas é a aproximação LDA, tal como na Eq.(2.29), que aproxima a energia cinética do sistema inhomogêneo,  $T[n(r)]$ , a partir da densidade de energia  $t^{hom}(n)$  do sistema homogêneo. A outra aproximação consiste em adotar a energia cinética do sistema homogêneo *não-interagente*,  $t_s^{hom}(n)$ , no lugar da densidade de energia do sistema homogêneo interagente,  $t^{hom}(n) \approx t_s^{hom}(n)$ .



**Figura 4** – Ilustração da aproximação LDA para um sistema unidimensional. Para cada intervalo  $dr'$  calcula-se a função homogênea  $o^{hom}(n)$ , substituindo  $n$  por  $n(r')$ .

onde  $t_s^{hom}(n)$  é a densidade de energia cinética de um sistema não-interagente com densidade constante,

$$t_s^{hom}(n) = \frac{3}{10}(3\pi^2 n)^{2/3} = \frac{3}{5} \frac{k_F^2}{2}, \quad (2.32)$$

em que  $k_F^2/2$  é a energia de Fermi, usando para a massa  $m = 1$  e  $\hbar = 1$ , e se relaciona com a densidade por  $k_F^2 = (3\pi^2 n)^{2/3}$ . Assim, na aproximação TF a equação Eq.(2.28) é aproximada por

$$F[n] \approx F^{TF}[n] = T_s^{LDA}[n] + E_H[n]. \quad (2.33)$$

Portanto a energia total, Eq.(2.25), na aproximação de Thomas-Fermi é dada por

$$E[n] \approx E^{TF}[n] = T_s^{LDA}[n] + E_H[n] + V[n]. \quad (2.34)$$

A simplicidade da aproximação de Thomas-Fermi facilita sua implementação, mas em contrapartida seus resultados são limitados.

### 2.4.2 Energia de troca e correlação

Na tentativa de melhorar a aproximação de TF acrescenta-se a *energia de troca e correlação*,

$$E_{XC}[n] = T[n] - T_s[n] + U[n] - E_H[n], \quad (2.35)$$

que contém toda informação perdida nas aproximações  $T[n] \approx T_s[n]$  e  $U[n] \approx E_H[n]$ . A energia de troca e correlação pode ser decomposta em  $E_X + E_C$ , em que

$$E_X = \frac{-q^2}{2} \sum_{jk} \int d^3r \int d^3r' \frac{\phi_j^*(r)\phi_k^*(r')\phi_j(r')\phi_k(r)}{|r-r'|}, \quad (2.36)$$

é a energia de troca, devido ao princípio de exclusão de Pauli, e  $E_C$  é a energia devido às correlações, cujo funcional não é conhecido.

Assim o funcional energia de sistemas interagentes é dado por

$$E[n] = T_s[n] + E_H[n] + E_{XC}[n] + V[n], \quad (2.37)$$

e sua minimização, semelhante à Eq.(2.27), leva à relação

$$\frac{\delta E[n]}{\delta n(r)} = \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} + v_H(r) + v_{XC}(r) + v(r) = 0, \quad (2.38)$$

onde  $v_H(r) = \delta E_H[n]/\delta n(r)$  é o potencial de Hartree e  $v_{XC}(r) = \delta E_{XC}[n]/\delta n(r)$  é o potencial de troca e correlação.

Embora as equações Eq.(2.37) e Eq.(2.38) sejam formalmente exatas, novamente temos que recorrer a aproximações para que sejam resolvidas, uma vez que não conhecemos explicitamente<sup>6</sup> a forma dos funcionais  $T_s[n]$  e  $E_{XC}[n]$ . Esse problema foi simplificado com o esquema proposto por Kohn e Sham (40), que permite que a minimização Eq.(2.38) seja feita indiretamente.

<sup>6</sup> Note que mesmo a componente  $E_X$  não é conhecida explicitamente em termos da densidade, mas apenas em função dos orbitais  $\phi(r)$ , Eq.(2.36).

### 2.4.3 Esquema Kohn-Sham

O esquema Kohn-Sham (KS) consiste em mapear um sistema interagente, com densidade  $n$  e energia  $E[n]$  dada pela equação Eq.(2.37), em um sistema auxiliar não-interagente, com mesma densidade  $n$  e energia  $E_s[n]$

$$E_s[n] = T_s[n] + V_s[n], \quad (2.39)$$

já que  $E_H = 0$  e  $E_{XC} = 0$  para o sistema não-interagente. A minimização da energia  $E_s[n]$  será

$$\frac{\delta E_s[n]}{\delta n(r)} = \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} + v_s(r) = 0, \quad (2.40)$$

onde  $v_s(r) = \delta V_s[n]/\delta n(r) = v_{KS}(r)$  é o potencial externo do sistema não-interagente ou potencial de Kohn-Sham.

Igualando as equações Eq.(2.38) e Eq.(2.40), encontramos o potencial de Kohn-Sham que mapeia um sistema interagente no sistema KS,

$$v_{KS}(r) = v(r) + v_H(r) + v_{XC}(r). \quad (2.41)$$

Assim, podemos calcular a densidade do sistema de muitos corpos,  $n(r)$ , resolvendo o problema de um sistema não-interagente, ou seja, o problema de partícula única. A equação de Schrödinger para o sistema KS será

$$\left[ \frac{-\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v_{KS}(r) \right] \phi_i(r) = \epsilon_i \phi_i(r), \quad (2.42)$$

onde  $n(r) = n_{KS}(r)$  é dada por

$$n(r) = \sum_i^N |\phi_i(r)|^2, \quad (2.43)$$

e  $\phi_i(r)$  são os orbitais de KS.

Esse conjunto de equações, Eq.(2.41) – Eq.(2.43), constitui as *equações de Kohn-Sham*. Perceba entretanto que para obter a densidade  $n(r)$ , é preciso saber  $\phi_i(r)$ , Eq.(2.43). Por outro lado, para obter  $\phi_i(r)$  é preciso conhecer o potencial  $v_{KS}(r)$ , Eq.(2.42). Mas para obter  $v_{KS}(r)$  é preciso obter  $v_H(r)$  e  $v_{XC}(r)$ , Eq.(2.41). Mas estes, por sua vez, são obtidos a partir da densidade  $n(r)$ . Ou seja, o problema *não é linear*.

Para resolver o sistema KS é preciso adotar uma técnica *auto-consistente*, em que inicia-se com um chute para a densidade  $n(r)$ , calcula-se o correspondente  $v_{KS}(r)$  e obtém-se  $\phi_i(r)$ . Este  $\phi_i(r)$  irá gerar uma nova densidade  $n(r)$ , que usaremos como chute para o próximo ciclo. E assim seguimos repetidamente até que haja convergência entre as sucessivas densidades. Esse processo geralmente exige algumas iterações, mas ainda assim é mais vantajoso resolver a equação de Schrödinger para uma única partícula algumas poucas dezenas de vezes do que resolver uma única vez a equação de Schrödinger de muitos corpos. Uma vez que a solução tenha convergido,  $n(r) = n_0(r)$ , então podemos obter a energia  $E_0[n_0(r)]$  do sistema.

Apesar do esquema KS ser formalmente exato, os cálculos de DFT na prática exigem ainda algumas aproximações. A escolha do método numérico para resolver o ciclo auto-consistente de KS e a escolha das funções de base para a resolução, são aproximações técnicas. Por outro lado, adotar os orbitais  $\phi_i(r)$  e os auto-valores  $\epsilon_i$  como funções de onda e energia do sistema interagente, é uma aproximação conceitual. Por fim, não conhecemos uma expressão exata para o funcional  $E_{XC}[n]$ , de forma que precisamos recorrer a uma de suas aproximações (41).

#### 2.4.4 DFT para o modelo de Hubbard

Até aqui descrevemos a formulação *ab initio* da DFT. Para aplicar a DFT em modelos, é preciso reformulá-la para cada modelo. Especificamente para o modelo de Hubbard, descrito pelo Hamiltoniano Eq.(2.19), existe uma formulação da teoria do funcional da densidade (39). O Hamiltoniano de KS neste caso é

$$H_{KS} = -t \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i v_i^{eff} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}, \quad (2.44)$$

onde  $v_i^{eff}$  é o potencial efetivo do sistema KS, Eq.(2.41),

$$v_i^{eff} = v^{eff}[n_i] = v[n_i] + v_H[n_i] + v_{XC}[n_i], \quad (2.45)$$

$v[n_i]$  é o potencial externo,  $v_H[n_i] = Un_i/2$  é o potencial de Hartree e  $v_{XC}[n_i] = \delta E_{XC}[n_i]/\delta n_i$  é o potencial de troca e correlação<sup>7</sup>.

Embora essa formulação da DFT para o modelo de Hubbard, assim como para o caso *ab initio*, seja formalmente exata, não conhecemos a forma de  $E_{XC}[n_i]$  e portanto, precisamos usar aproximações. Neste trabalho adotaremos a aproximação BA-LDA para a energia de troca e correlação (39), que usa uma aproximação local baseada na solução de Lieb-Wu (34) para o ansatz de Bethe (veja Seção 2.3).

A aproximação BA-LDA (39) consiste em fazer uma aproximação LDA para a energia de troca e correlação, partindo de uma proposta parametrizada para a energia total por sítio do sistema *homogêneo*,

$$e^{BA}(n, U) = \frac{-2t\beta(U)}{\pi} \text{sen}\left(\frac{\pi n}{\beta(U)}\right) \quad \text{para } 0 \leq n \leq 1, \quad (2.46)$$

em que  $\beta(U)$  é um parâmetro determinado pela imposição de que a parametrização Eq.(2.46) seja exata em  $n = 1$ , onde a solução das equações de Lieb-Wu é conhecida analiticamente,

$$\beta(U) \text{sen}\left(\frac{\pi}{\beta(U)}\right) = 2\pi \int_0^\infty \frac{J_0(x)J_1(x)}{x(1 + e^{Ux/2})} dx, \quad (2.47)$$

onde  $J_i(x)$  é a função de Bessel de ordem  $i$  e  $\beta(U)$  tem valores exatos nos limites de  $U = 0$  e  $U = \infty$ ,  $\beta(U = 0) = 2$  e  $\beta(U = \infty) = 1$ .

Assim, uma vez que existe uma expressão analítica, embora aproximada, para a energia total por sítio  $e = E/L \approx e^{BA}(n, U)$ , inserindo a Eq.(2.46) na relação Eq.(2.37), podemos obter uma aproximação BA para a energia de troca e correlação por sítio do sistema homogêneo:

$$\begin{aligned} e_{XC}(n, U) \approx e_{XC}^{BA}(n, U) &= e^{BA}(n, U) - t_s - e_H \\ &= \frac{-2t\beta(U)}{\pi} \text{sen}\left(\frac{\pi n}{\beta(U)}\right) + \frac{4t}{\pi} \text{sen}\left(\frac{\pi n}{2}\right) - \frac{Un^2}{4}, \end{aligned} \quad (2.48)$$

onde usamos as relações  $t_s = -4t/\pi \text{sen}(\pi n/2)$  e  $e_H = Un^2/4$ .

<sup>7</sup> Para o modelo de Hubbard, em que cada sítio está restrito a apenas um nível de energia  $e$ , portanto, restrito à dupla ocupação de partículas com spins opostos, a energia de troca é nula, existe apenas energia de correlação. Mesmo assim, mantemos a denominação mais geral de energia de troca e correlação.

Finalmente, de posse de uma expressão analítica para a densidade de energia de troca e correlação, Eq.(2.48), podemos construir uma LDA para  $E_{XC}$  do sistema *inomogêneo*,

$$E_{XC}[n] \approx E_{XC}^{BA-LDA}[n, U] = \sum_i^N e_{XC}^{BA}(n, U)|_{n \rightarrow n_i} \quad \text{para } 0 \leq n \leq 1. \quad (2.49)$$

A extensão para  $1 < n \leq 2$  pode ser obtida através da transformação partícula-buraco — descrita na Seção 2.3 — substituindo-se  $n_i$  por  $2 - n_i$  (34), de forma que a energia total do estado fundamental será

$$e^{BA}(n, U) = U(n - 1) - \frac{2t\beta(U)}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi(2 - n)}{\beta(U)} \right) \quad \text{para } 1 < n \leq 2. \quad (2.50)$$

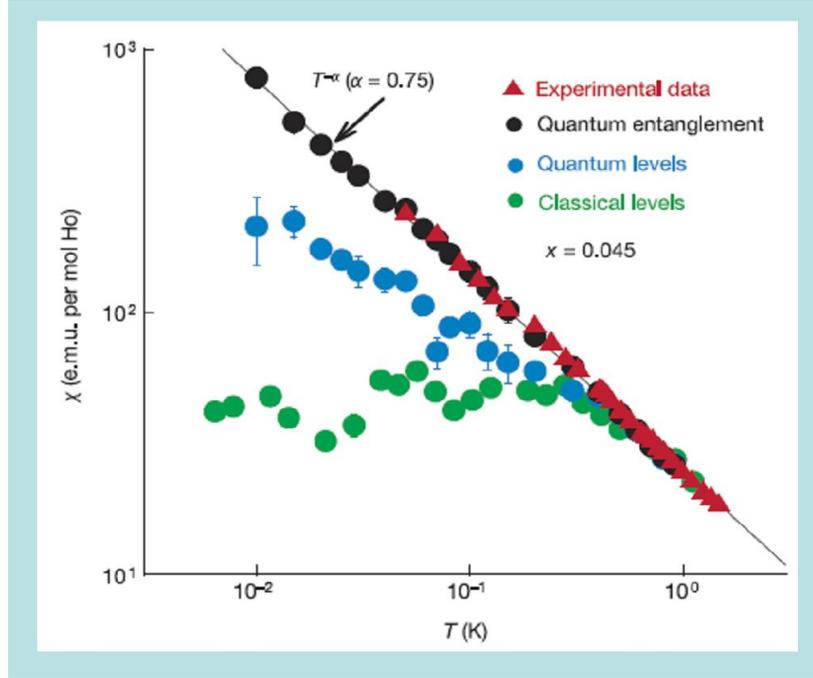


### 3 *Emaranhamento no Modelo de Hubbard Homogêneo*

Os primeiros estudos de emaranhamento, tanto teóricos quanto experimentais, foram realizados em sistemas de fótons (5, 7, 6, 8). Do ponto de vista experimental isso provavelmente se deve ao fato de que possuímos grande controle sobre sistemas ópticos, em comparação com sistemas sólidos. Do ponto de vista teórico, considerava-se que o emaranhamento fosse dissipado através das interações entre as partículas do sistema e o ambiente, ou reservatório, pelo processo denominado decoerência (42), que é cada vez mais intenso à medida que o sistema torna-se macroscópico. Por isso, por muito tempo a investigação de emaranhamento em sólidos não foi alvo de interesse: supunha-se que nas dimensões reais e a temperaturas finitas o emaranhamento já não existisse mais.

Recentemente porém, através da medida da susceptibilidade magnética de um material ferromagnético em função da temperatura, mostrou-se (43) que os resultados experimentais são reproduzidos pela teoria somente quando considera-se a presença de emaranhamento no sistema, como mostra a Figura 5. Concluiu-se então que o emaranhamento desempenha papel fundamental em sistemas macroscópicos mesmo para temperaturas relativamente altas (44).

Desde este surpreendente resultado, o estudo de emaranhamento em cadeias de spin e em cadeias de partículas itinerantes se intensificou, não apenas recebendo o *status* de realista, mas também tornando-se necessário para a completa descrição de sólidos. Assim, dedicamos este capítulo ao estudo do emaranhamento no modelo de Hubbard unidimensional e homogêneo.



**Figura 5** – Susceptibilidade magnética em função da temperatura de um material ferromagnético ( $\text{LiHo}_{0.045}\text{Y}_{0.955}\text{F}_4$ ). Dados experimentais e ajustes com três diferentes tratamentos: clássico, semi-clássico e totalmente quântico. Figura extraída do artigo *Nature* **425**, 48 (2003).

Na Seção 3.1 apresentamos a definição de emaranhamento local, resultados anteriores de emaranhamento como testemunha de transições de fase quânticas no modelo de Hubbard homogêneo e as limitações das técnicas anteriores a esta tese. Na Seção 3.2 apresentamos nossa proposta para o uso da solução numérica Bethe-Ansatz no cálculo do emaranhamento e os resultados nas fases isolante, metálica e superfluida do modelo de Hubbard homogêneo. Na Seção 3.3 descrevemos o emaranhamento na presença de um campo magnético externo e analisamos sua relação com a susceptibilidade magnética.

### 3.1 Emaranhamento Local

A entropia de emaranhamento foi definida no Capítulo 2, Eq.(2.6), como uma excelente ferramenta para quantificar o emaranhamento entre dois subsistemas  $A$  e  $B$  com estado total puro. Não discutimos porém quais seriam os subsistemas nem tão pouco a natureza deste emaranhamento. Assim, por exemplo, se definimos  $A$  e  $B$  como sendo duas partículas, o emaranhamento será entre partículas, que pode ser devido à polarização de

spins e também devido à posição espacial das partículas. Se no entanto fixamos essas duas partículas no espaço, fazendo com que seus graus de liberdade sejam restritos à orientação de spin, teremos emaranhamento apenas entre spins.

Quando, porém, definimos  $A$  como uma região localizada do espaço e  $B$  o restante do espaço, que pode ser limitado ou não, temos *emaranhamento local*. Assim, por exemplo, ao definirmos  $A$  como um único sítio de uma cadeia e  $B$  o restante da cadeia, a entropia de emaranhamento fornecerá o emaranhamento local entre o sítio  $A$  e os demais sítios. Neste caso, o emaranhamento local é uma medida de quanta informação pode ser extraída sobre o estado quântico do sistema  $B$ , a partir do estado quântico do sítio  $A$ .

Para o modelo de Hubbard homogêneo,

$$\hat{H} = -t \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + v \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (3.1)$$

descrito pela Eq.(2.19) com  $t_{ij} = t$ ,  $U_i = U$  e  $v_{i\sigma} = v$ , os possíveis estados de um determinado sítio  $A$ , na base de ocupação, são

$$|n\rangle_A = |0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle \text{ ou } |\uparrow\downarrow\rangle, \quad (3.2)$$

representando respectivamente, o estado em que o sítio está vazio, o estado com uma única partícula com spin para cima, o de uma partícula com spin para baixo e o de duas partículas, uma com cada orientação de spin devido ao Princípio de Exclusão de Pauli.

Nesta base, a matriz densidade reduzida do sítio  $A$  é diagonal (veja demonstração no Apêndice A),

$$\rho_A = w_\uparrow |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + w_\downarrow |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + w_2 |\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow| + w_0 |0\rangle\langle 0|, \quad (3.3)$$

onde  $w_2$  é o valor esperado de dupla ocupação,

$$w_2 = \langle\psi| \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow |\psi\rangle, \quad (3.4)$$

$w_\sigma$  é o valor esperado da ocupação de uma única partícula com spin  $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ,

$$w_\sigma = \langle\psi| \hat{n}_\sigma |\psi\rangle - w_2, \quad (3.5)$$

e  $w_0$  o de ocupação nula,

$$w_0 = 1 - w_\uparrow - w_\downarrow - w_2, \quad (3.6)$$

para o qual usamos a identidade  $\sum_n w_n = 1$ , como mostramos detalhadamente no Apêndice A. O estado fundamental é representado por  $|\psi\rangle$ ,  $\hat{n}_\sigma = \hat{c}_\sigma^\dagger \hat{c}_\sigma$  é o operador densidade e  $\hat{c}_\sigma^\dagger$  e  $\hat{c}_\sigma$  são respectivamente os operadores de criação e aniquilação de uma partícula com spin  $\sigma$ .

Assim a entropia de emaranhamento do sítio  $A$ ,

$$S_A = -Tr[\rho_A \log_2 \rho_A], \quad (3.7)$$

torna-se,

$$S_A = -w_\uparrow \log_2 w_\uparrow - w_\downarrow \log_2 w_\downarrow - w_2 \log_2 w_2 - w_0 \log_2 w_0. \quad (3.8)$$

Note que quando a indeterminação do estado do sítio é máxima, ou seja, quando todos os possíveis estados têm igual probabilidade ( $w_\uparrow = w_\downarrow = w_2 = w_0 = 1/4$ ), o emaranhamento é máximo,  $S_A^{max} = 2$ . Quando o estado do sítio é completamente definido, isto é, um dos  $w_n = 1$  e portanto os demais são nulos, então não há emaranhamento,  $S_A^{min} = 0$ . Assim o emaranhamento local de um único sítio do modelo de Hubbard na base de ocupação varia sempre entre 0 e 2.

Podemos agora usar o teorema de Hellman-Feynman (45) para a energia  $E_0$  do estado fundamental,

$$\langle \psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial U} | \psi \rangle = \frac{\partial E_0}{\partial U}, \quad (3.9)$$

e as definições de densidade de carga,

$$n = \langle \psi | \hat{n}_\uparrow | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{n}_\downarrow | \psi \rangle, \quad (3.10)$$

e de densidade de spin (ou magnetização),

$$m = \frac{\langle \psi | \hat{n}_\uparrow | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{n}_\downarrow | \psi \rangle}{2}, \quad (3.11)$$

para substituir todas as probabilidades  $w_n$  da entropia por grandezas físicas: energia,

densidade e magnetização.

Portanto, derivando o Hamiltoniano Eq.(3.1) com relação a  $U$ , tomando a média no estado fundamental e usando a definição Eq.(3.4), temos

$$\begin{aligned}\langle \psi | \frac{\partial \hat{H}}{\partial U} | \psi \rangle &= \langle \psi | \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} | \psi \rangle \\ &= L \langle \psi | \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} | \psi \rangle \\ &= L w_2.\end{aligned}\tag{3.12}$$

Note que a somatória pôde ser substituída por  $L \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow}$  porque no sistema homogêneo todos os sítios são equivalentes. Igualando as equações Eq.(3.9) e Eq.(3.12), obtemos a probabilidade de ocupação dupla em função da energia,

$$w_2 = \frac{\partial e_0}{\partial U},\tag{3.13}$$

onde  $e_0 = E_0/L$  é a energia do estado fundamental por sítio.

Somando e subtraindo as relações Eq.(3.10) e Eq.(3.11), obtemos

$$\langle \psi | n_{\uparrow} | \psi \rangle = \frac{n}{2} + m,\tag{3.14}$$

$$\langle \psi | n_{\downarrow} | \psi \rangle = \frac{n}{2} - m,\tag{3.15}$$

e então, substituindo nas definições Eq.(3.5) e Eq.(3.6), obtemos  $w_{\uparrow}$ ,  $w_{\downarrow}$  e  $w_0$  em função de  $e_0$ ,  $n$  e  $m$ ,

$$w_{\uparrow} = \frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} + m,\tag{3.16}$$

$$w_{\downarrow} = \frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} - m,\tag{3.17}$$

$$w_0 = 1 - n + \frac{\partial e_0}{\partial U}.\tag{3.18}$$

Dessa forma a **entropia de emaranhamento de um único sítio no modelo de Hubbard homogêneo**, Eq.(3.8), torna-se uma função da densidade, da magnetização e

da interação,

$$S^{hom}(n, m, U) = -\left(\frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} + m\right) \log_2 \left[\frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} + m\right] - \left(\frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} - m\right) \log_2 \left[\frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} - m\right] - \left(1 - n + \frac{\partial e_0}{\partial U}\right) \log_2 \left[1 - n + \frac{\partial e_0}{\partial U}\right] - \frac{\partial e_0}{\partial U} \log_2 \frac{\partial e_0}{\partial U}, \quad (3.19)$$

uma vez que a energia é uma função destas quantidades,  $e_0 = e_0(n, m, U)$ .

O estudo de emaranhamento em modelos de sólidos é mais comum no modelo de Heisenberg, cujo emaranhamento é devido apenas à orientação de spin das partículas. Existem poucos trabalhos que estudam o emaranhamento em sistemas de partículas itinerantes, descritos pelo modelo de Hubbard (31, 32, 46, 47). Especificamente analisando o emaranhamento local, dado pela Eq.(3.19), um grupo (31) usa diagonalização exata para obter a entropia  $S(n, m, U)$ , enquanto um outro grupo (32, 46) usa explicitamente a Eq.(3.19). Mas a energia  $e_0(n, m, U)$  não é conhecida analiticamente para todos os valores de  $n, m$  e  $U$ , portanto os trabalhos (32, 46) apenas exploram os limites  $S^{hom}(n = 1, m, U = 0)$  e  $S^{hom}(n = 1, m, U \rightarrow -\infty)$ , onde a energia é conhecida analiticamente, e para o caso sem campo magnético ( $m = 0$ ), usam uma expansão da energia em termos de  $1/U$  (48),

$$e_0 = -\frac{2}{\pi} \operatorname{sen}(\pi n) - \sum_{l=1}^{\infty} \kappa_l(n) \left(\frac{1}{U}\right)^l, \quad (3.20)$$

válida para  $U \rightarrow \infty$ , com  $\kappa_l(n)$  tabelados até a quinta ordem em  $l$  na Ref.(48).

Ambos os grupos, porém, concentram-se no estudo do emaranhamento como uma testemunha de transições de fase quânticas (QPT – do inglês *Quantum Phase Transitions*). As propriedades específicas do emaranhamento e sua relação com as grandezas  $n, m$  e  $U$  não são exploradas. Além disso, ambos apresentam sérias limitações: via diagonalização exata o trabalho da Ref.(31) está restrito a cadeias de tamanho máximo  $L = 70$  para sistemas semi-preenchidos ( $n = 1$ ) e  $L = 10$  para  $n \neq 1$ . Embora seja suficiente para os propósitos relacionados com QPT, adotar um sistema de 10 ou mesmo 70 sítios como se fosse um sistema infinito certamente transferiria grande imprecisão para  $S^{hom}(n, m, U)$ , comprometendo uma análise mais detalhada do emaranhamento. Já os métodos adotados em (32, 46) são limitados com relação à escolha de  $n, m$  e  $U$ , apenas algumas combinações

específicas desses valores são possíveis, conforme já relacionadas acima.

Na seção a seguir propomos o uso da solução numérica Bethe-Ansatz para a energia, que fornece o valor exato<sup>1</sup> de  $e_0(n, m, U)$  e apresentamos os resultados para a entropia de emaranhamento nas fases isolante, metálica e supercondutora do modelo de Hubbard homogêneo.

## 3.2 Emaranhamento nas Fases Isolante, Metálica e Supercondutora

Vimos que podemos estudar o emaranhamento exato do modelo de Hubbard homogêneo através de uma expressão analítica que é função da densidade, da magnetização e da interação, dada pela Eq.(3.19). Note porém que a dependência não é direta, devido à presença da energia  $e_0(n, m, U)$ . Portanto, embora no sistema homogêneo  $n, m$  e  $U$  possam ser considerados parâmetros arbitrariamente escolhidos, a energia  $e_0(n, m, U)$  irá depender da combinação escolhida e deverá ser obtida de alguma forma para que o emaranhamento seja obtido.

Propomos então usar a solução numérica Bethe-Ansatz para a energia do modelo de Hubbard homogêneo (34), já apresentada na Seção 2.3 e implementada em nosso grupo de pesquisa pelo colaborador Dr. Vivaldo L. Campo. Assim, uma vez estabelecidos os valores de  $n, m$  e  $U$ , podemos obter numericamente o valor da energia  $e_0(n, m, U)$ , calcular sua derivada  $\partial e_0/\partial U$  também numericamente e, através da Eq.(3.19), obter a entropia de emaranhamento  $S^{hom}(n, m, U)$ .

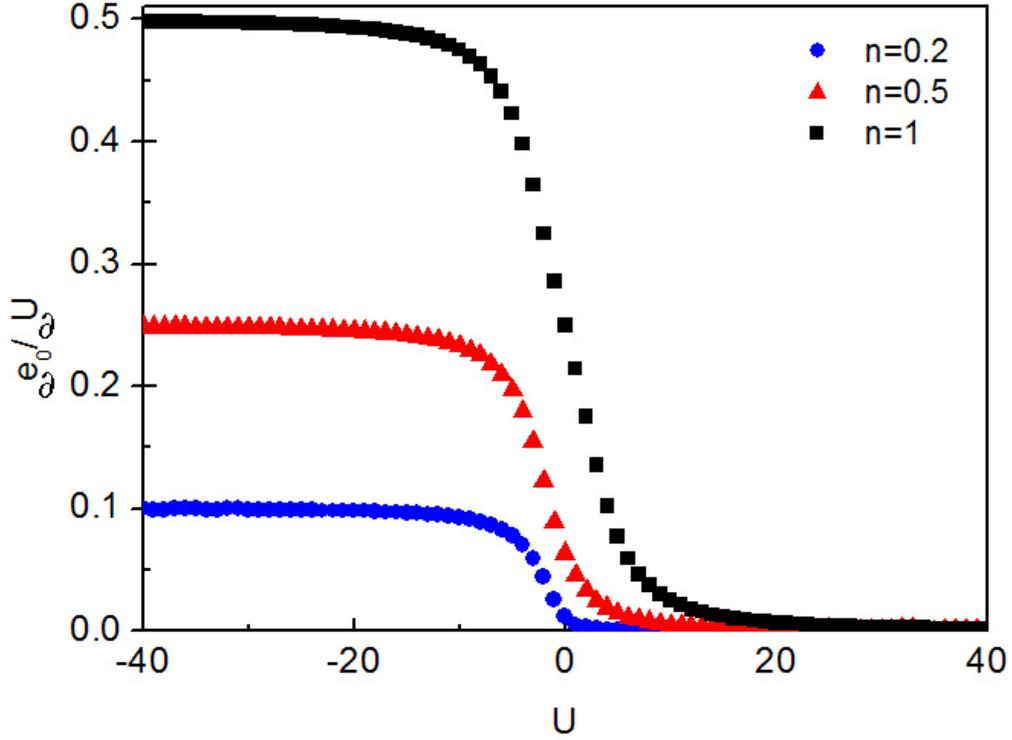
Façamos, inicialmente, uma análise da quantidade  $\partial e_0/\partial U$ . Na Figura 6 apresentamos a derivada da energia em função da interação para alguns valores de densidade e  $m = 0$ . Observamos que a maior variação ocorre em torno de  $U = 0$  e que para o limite  $U \rightarrow \infty$  a derivada vai a zero para qualquer densidade. Esse comportamento é extraído diretamente da energia, que no limite de  $U \rightarrow \infty$ , como mostra a Eq.(3.20), possui uma expressão

<sup>1</sup> O cálculo é exato, mas resolvido numericamente, de forma que há ainda uma fonte de erro devido aos arredondamentos feitos internamente pelo computador. Mas esse tipo de erro é inferior a  $10^{-13}$ , o que é praticamente exato para nossos propósitos.

exata:

$$e_0(n, U = \infty) = -\frac{2}{\pi} \text{sen}(\pi n), \quad (3.21)$$

que independe de  $U$  e, portanto,  $\partial e_0 / \partial U = 0$  para qualquer  $n$ .



**Figura 6** – Derivada da energia com relação a  $U$ ,  $\partial e_0(n, m = 0, U) / \partial U$ , em função da interação em  $n = 0.2$ ,  $n = 0.5$  e  $n = 1$ .

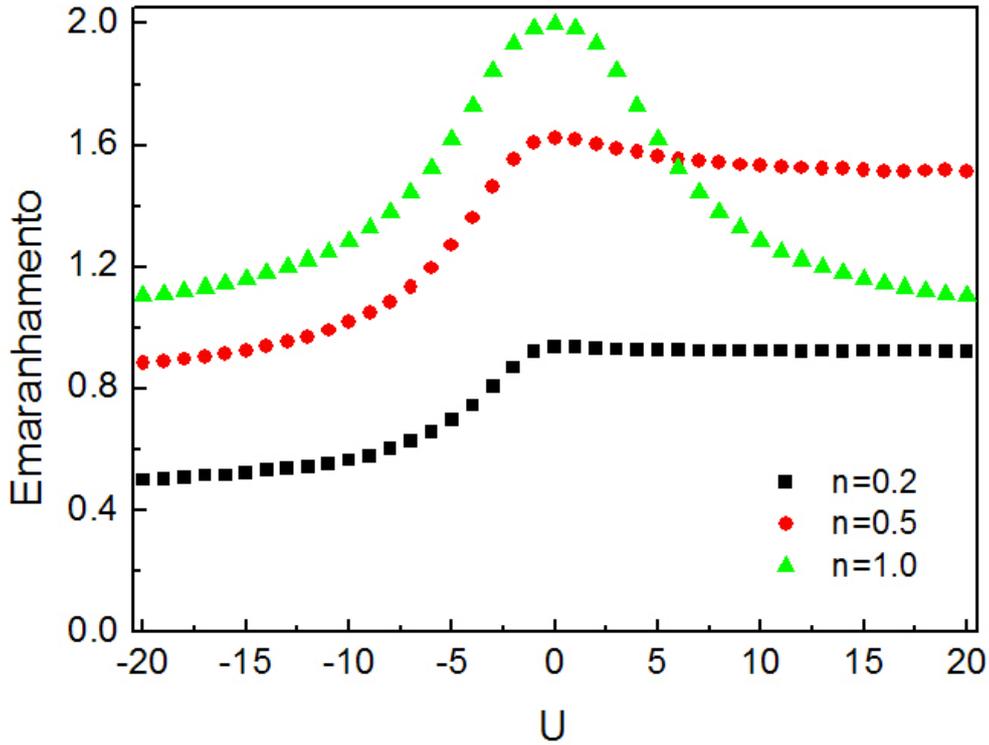
Já para o caso em que  $U \rightarrow -\infty$ , a saturação ocorre em  $\partial e_0 / \partial U = n/2$ . Para compreender esse limite, é fundamental lembrar que através da transformação partícula-buraco é possível escrever a energia de um sistema atrativo em termos da energia do sistema repulsivo (34),  $e_0(n, |U|)$ ,

$$e_0(n, U) = \frac{Un}{2} - e_0(n, |U|) \quad \text{para } U < 0. \quad (3.22)$$

Assim, para  $U \rightarrow -\infty$ , a energia  $e_0(n, |U|)$  torna-se constante em  $U$ , Eq.(3.21), de forma que a derivada  $\partial e_0 / \partial U$  para  $U < 0$  é simplesmente

$$\frac{\partial e_0(n, U)}{\partial U} = \frac{n}{2}. \quad (3.23)$$

Vimos que o máximo absoluto do emaranhamento de um único sítio no modelo de Hubbard é  $S^{max} = 2$ , que ocorre quando  $w_{\uparrow} = w_{\downarrow} = w_2 = w_0 = 1/4$ . Porém, as definições Eq.(3.13) e Eq.(3.16) – Eq.(3.18) mostram que, em  $m = 0$ , essa condição só é obtida em  $n = 1$  e  $U = 0$ . Para qualquer combinação de  $n$  e  $U$ , o emaranhamento máximo do sistema é sempre menor que o emaranhamento absoluto, e ocorre quando as probabilidades são razoavelmente equilibradas. Portanto, o emaranhamento diminui quando uma das probabilidades é nula ou extremamente alta. Baseando-se nessas considerações, a derivada da energia com relação à interação pode indicar para quais valores de  $U$  teremos mais ou menos emaranhamento.



**Figura 7** – Entropia de emaranhamento  $S^{hom}(n, m = 0, U)$  de um único sítio do modelo de Hubbard homogêneo com densidade:  $n = 0.2$ ,  $n = 0.5$  e  $n = 1.0$ , em função da interação intra-sítio  $U$ .

Quando  $\partial e_0/\partial U$  é nula ( $U \rightarrow \infty$ ), Figura 6, a probabilidade de dupla ocupação também é nula (Eq.(3.13)) e, portanto, teremos pouco emaranhamento. Da mesma forma, quando  $\partial e_0/\partial U$  é máxima ( $U \rightarrow -\infty$ ), a dupla ocupação é fortemente favorecida, então o emaranhamento será pequeno. Assim, o emaranhamento será máximo na região

onde a derivada  $\partial e_0/\partial U$  possui valor intermediário, ou seja, em torno de  $U = 0$ . E o emaranhamento diminuirá à medida que  $|U|$  aumentar.

Através da análise de  $\partial e_0/\partial U$  foi possível extrair informações qualitativas do emaranhamento em função da interação. Porém, para uma análise mais detalhada, fizemos uma varredura em  $U$  e calculamos  $S^{hom}(n, m = 0, U) \equiv S^{hom}(n, U)$  para três sistemas com densidades diferentes, como mostra a Figura 7. Observamos que de fato o emaranhamento é máximo em  $U = 0$  para qualquer valor da densidade  $n$  e decresce com  $|U|$ . A presença de uma interação intra-sítio  $U$  restringe os graus de liberdade das partículas, privilegiando determinadas probabilidades de ocupação e diminuindo o emaranhamento, como já discutido anteriormente.

Para a região repulsiva,  $U > 0$ , observamos que o emaranhamento diminui muito lentamente para  $n \neq 1$  e cai bruscamente em  $n = 1$ , Figura 7. Esse comportamento reflete a transição metal-isolante. Para  $n < 1$  o sistema comporta-se como um metal, com intensa itinerância das partículas, mesmo para fortes interações, e portanto, elevado emaranhamento. Para  $n = 1$  o sistema torna-se isolante, congelando os graus de liberdade das partículas e diminuindo drasticamente o emaranhamento. O cruzamento entre as curvas de  $n = 0.5$  e  $n = 1$  mostra que, para  $U > 0$ , o emaranhamento não é monotônico com a densidade. Além disso, revela que a entropia de emaranhamento não é uma função de estado, no sentido de que dois estados diferentes do sistema podem apresentar o mesmo valor de emaranhamento.

Quando a interação intra-sítio é atrativa,  $U < 0$ , as partículas tendem a formar pares nos sítios, favorecendo  $w_2$  e diminuindo muito o emaranhamento, como mostra a Figura 7. Para  $|U|$  não muito grande, os pares são fracamente acoplados, formando pares de Cooper (49) que são descritos pela teoria BCS (BCS - das iniciais dos autores: Bardeen, Cooper e Schrieffer) da supercondutividade. À medida que  $|U|$  aumenta muito, no limite da condensação de Bose-Einstein (BEC – do inglês *Bose-Einstein Condensation*) (50), as partículas formam dímeros fortemente acoplados. Essa transição dos pares de Cooper para dímeros representa a transição BCS-BEC. Nesta fase superfluida, a restrição dos

graus de liberdade das partículas é reduzida por um fator 2, porque cada par comporta-se como uma única partícula. Observamos que o emaranhamento também é reduzido pelo mesmo fator,  $S(n, U = 0)/S(n, U \rightarrow -\infty) \approx 2$ , como mostra a Tabela 1 para  $U = -40$ .

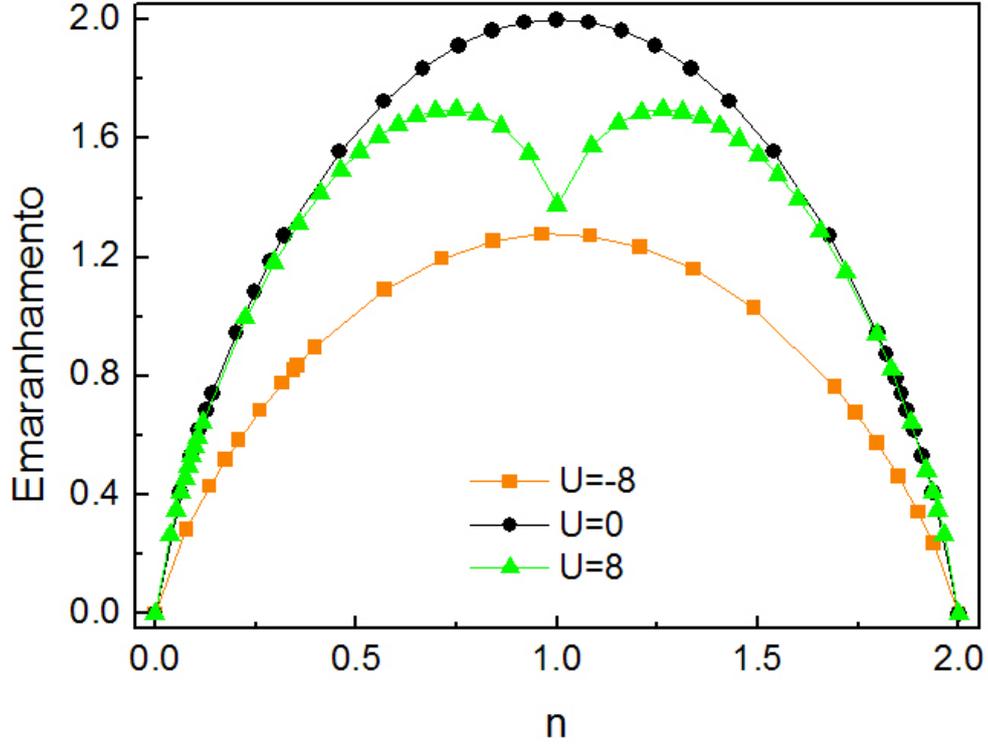
Além disso, ainda na região atrativa da Figura 7, verificamos que o emaranhamento é maior quanto maior a densidade e, como não observamos nenhum ponto de cruzamento entre as três curvas, supomos então que o emaranhamento cresce monotonicamente com  $n$  para qualquer valor fixo de  $U < 0$ .

**Tabela 1** – Entropia de emaranhamento para os limites de interação nula ( $U = 0$ ) e de interação atrativa tendendo ao infinito ( $U = -40$ ). A razão  $S(n, U = 0)/S(n, U = -40) \approx 2$  representa o fator de redução do emaranhamento devida à formação de dímeros fortemente acoplados em  $U \rightarrow -\infty$ .

$n$	$S(n, U = 0)$	$S(n, U = -40)$	$S(n, U = 0)/S(n, U = -40)$
0.2	0.94	0.47	2.00
0.5	1.62	0.83	1.95
1.0	2.00	1.03	1.94

Para melhor visualizar o comportamento do emaranhamento com a densidade, calculamos  $S(n, U)$  em função de  $n$ , agora fixando  $U$ , como mostra a Figura 8. Observamos que o emaranhamento é simétrico em  $n = 1$  para qualquer  $U$ , refletindo a simetria partícula-buraco discutida no Capítulo 2. As curvas de  $U = 0$  e  $U = -8$  são semelhantes, o emaranhamento aumenta monotonicamente com a densidade entre  $0 \leq n \leq 1$ , mas o sistema com interação atrativa tem seus graus de liberdade reduzidos e portanto tem menor emaranhamento para qualquer valor de  $n$ . Já o efeito da interação repulsiva só surge para valores mais altos de densidade, para  $n \leq 0.5$  o emaranhamento em  $U = 8$  é praticamente o mesmo que em  $U = 0$ . Isso porque mesmo com grande interação repulsiva, um sistema de baixa densidade ainda assim comporta-se como um metal, com elevada itinerância. À medida que  $n$  aumenta, o sistema se aproxima da transição metal-isolante em  $U > 0$  e  $n = 1$ , ficando com seus graus de liberdade mais restritos, e então o emaranhamento decresce.

Do ponto de vista teórico não há problema em definir a densidade do sistema homo-



**Figura 8** – Entropia de emaranhamento  $S^{hom}(n, m = 0, U)$  de um único sítio do modelo de Hubbard homogêneo em função da densidade  $n$  para os casos: não interagente ( $U = 0$ ), atrativo ( $U = -8$ ) e repulsivo ( $U = 8$ ).

gêneo como um parâmetro, ao contrário, é uma prática extremamente comum em DFT. Experimentalmente, porém, a densidade nem sempre é facilmente mensurável. A quantidade associada à  $n$  e mais comumente medida é o potencial químico  $\mu$ ,

$$\mu = \frac{\partial E_0(n, m, U)}{\partial n}, \quad (3.24)$$

onde  $E_0(n, m, U)$  é a energia total do estado fundamental. O potencial químico carrega informação sobre a quantidade de energia necessária para acrescentar ou retirar uma partícula do sistema, e entra no Hamiltoniano Eq.(3.1) como um potencial externo  $v = -\mu$ ,

$$\hat{H} = -t \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}. \quad (3.25)$$

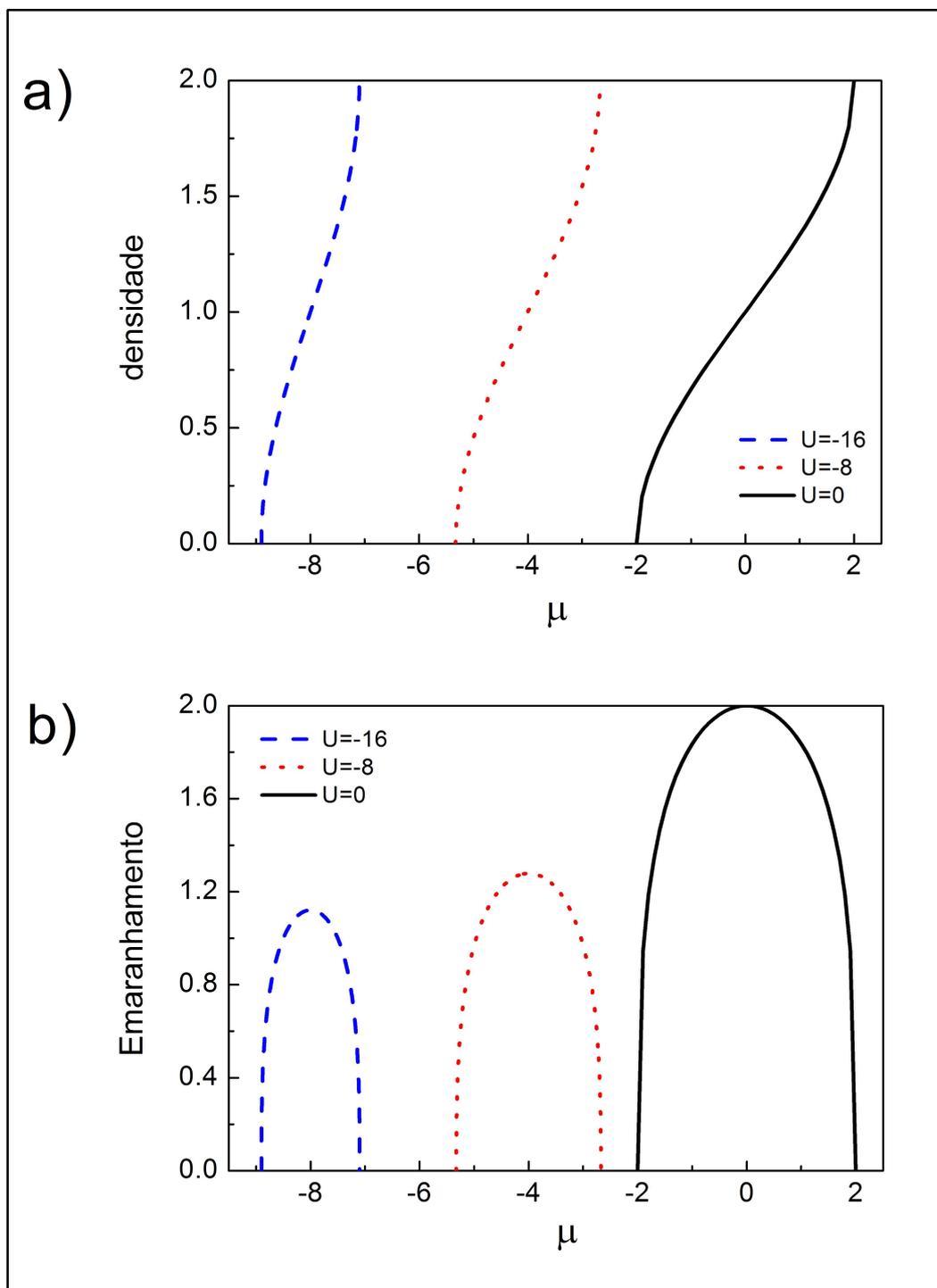
Assim, para cada densidade  $n$  das curvas de  $S^{hom}(U) \times n$  (Figura 8), podemos calcular o potencial químico associado  $\mu(n)$  através da Eq.(3.24), como mostra a Figura 9a,

comparando o sistema não interagente com o sistema atrativo. Observamos novamente a simetria partícula-buraco em  $n = 1$  para qualquer valor de  $U \leq 0$ . Considerando então que cada densidade corresponde a um potencial químico, podemos mapear o emaranhamento no potencial químico (Figura 9b).

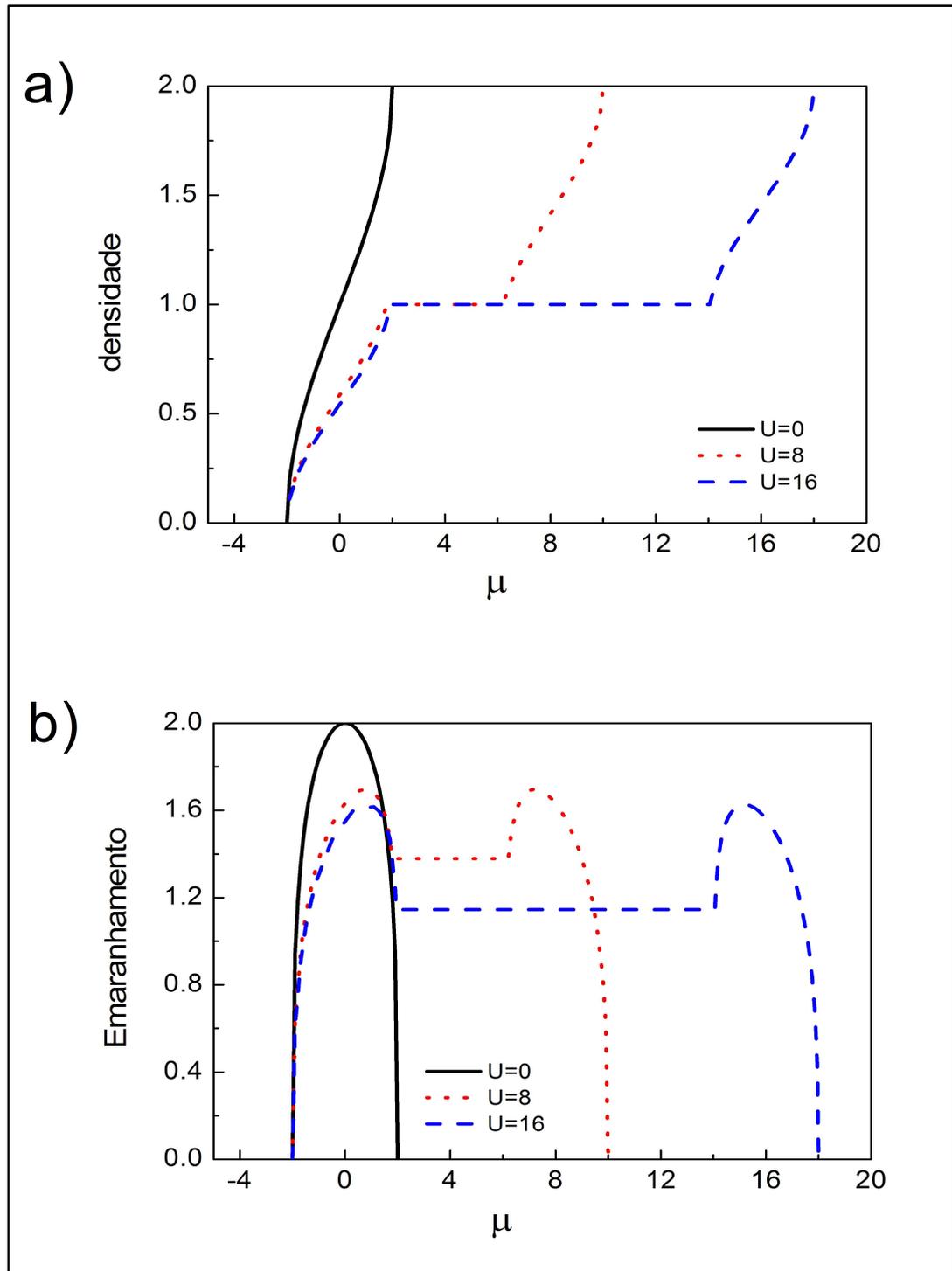
Observamos que o emaranhamento para interações atrativas comporta-se de forma semelhante ao emaranhamento no caso de interação nula. Assim como na Figura 7, o emaranhamento diminui à medida que  $|U|$  aumenta e seu máximo ocorre para  $\mu = U/2$ . Esse é exatamente o valor para o qual  $n = 1$ , em concordância com a Figura 8 para  $U \leq 0$ .

Analogamente analisamos o emaranhamento em função do potencial químico para o sistema com interação repulsiva. Na Figura 10a observamos que a densidade para  $U \neq 0$  fica congelada em  $n = 1$ , formando um platô no potencial químico. Esse efeito é reflexo da transição metal-isolante, em  $n = 1$  e  $U > 0$ . Existe uma resistência para aumentar a densidade para  $n > 1$ , portanto há uma faixa de valores de  $\mu$ , ou equivalentemente de energia, para o qual nenhuma variação em  $n$  ocorre, mantendo o sistema congelado em  $n = 1$ . O platô só desaparece quando o potencial químico é suficientemente grande para fazer  $n > 1$ . O comprimento do platô é proporcional à interação repulsiva  $U$ .

Os efeitos da transição metal-isolante também são refletidos no emaranhamento, como podemos ver na Figura 10b. O emaranhamento é nulo em  $n = 0$  e cresce à medida que  $n$  aumenta. Entretanto o máximo de  $S^{hom}$  não ocorre, como no caso atrativo, em  $n = 1$ . Agora o emaranhamento máximo ocorre em algum valor de  $n < 1$  (assim como na Figura 8) e à medida que  $n$  se aproxima de um isolante ( $n = 1$ ), com pouca itinerância,  $S^{hom}$  diminui. Em  $n = 1$  o emaranhamento apresenta um platô no potencial químico. É preciso aumentar consideravelmente o potencial químico para fazer  $n > 1$  e então variar  $S^{hom}$ . Neste ponto o emaranhamento sofre um brusco aumento, mas depois volta a cair, formando um ombro. Esse efeito é o mesmo observado na Figura 8, para  $U = 8$ , e deve-se ao fato de que o sistema passa de um estágio congelado, em  $n = 1$ , com pouca itinerância, para um estágio quase-metálico em  $n > 1$ , com maior itinerância e, portanto, maior emaranhamento. Mas à medida que a densidade se aproxima de  $n = 2$ ,  $S^{hom}$  tende a zero novamente.



**Figura 9** – (a) Densidade em função do potencial químico  $\mu$ ; (b) entropia de emaranhamento  $S^{hom}(n, U)$  em função do potencial químico para os casos: não interagente ( $U = 0$ ) e atrativo com  $U = -16$  e  $U = -8$ .



**Figura 10** – (a) Densidade em função do potencial químico  $\mu$ ; (b) entropia de emaranhamento  $S^{hom}(n, U)$  em função do potencial químico para os casos: não interagente ( $U = 0$ ) e repulsivo com  $U = 8$  e  $U = 16$ .

Para  $U > 0$  esse mapeamento do emaranhamento com o potencial químico já havia sido feito em (32), através da expansão em  $1/U$  da energia, válida para  $U \gg 1$ . Entretanto, usando nosso método, identificamos erros na Figura 2 do artigo (32), os platôs ocorriam para valores incorretos do potencial químico. Entramos em contato com os autores, que então publicaram uma errata (51), reconhecendo o problema e corrigindo os resultados.

### 3.3 Emaranhamento na Presença de Campos Magnéticos Externos

Sob a presença de um campo magnético externo o Hamiltoniano do modelo de Hubbard, Eq.(3.1), torna-se

$$\hat{H} = -t \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} - \frac{h}{2} \sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} - \hat{n}_{i\downarrow}) \quad (3.26)$$

onde  $h$  é a intensidade do campo magnético e relaciona-se com a magnetização  $m$  por

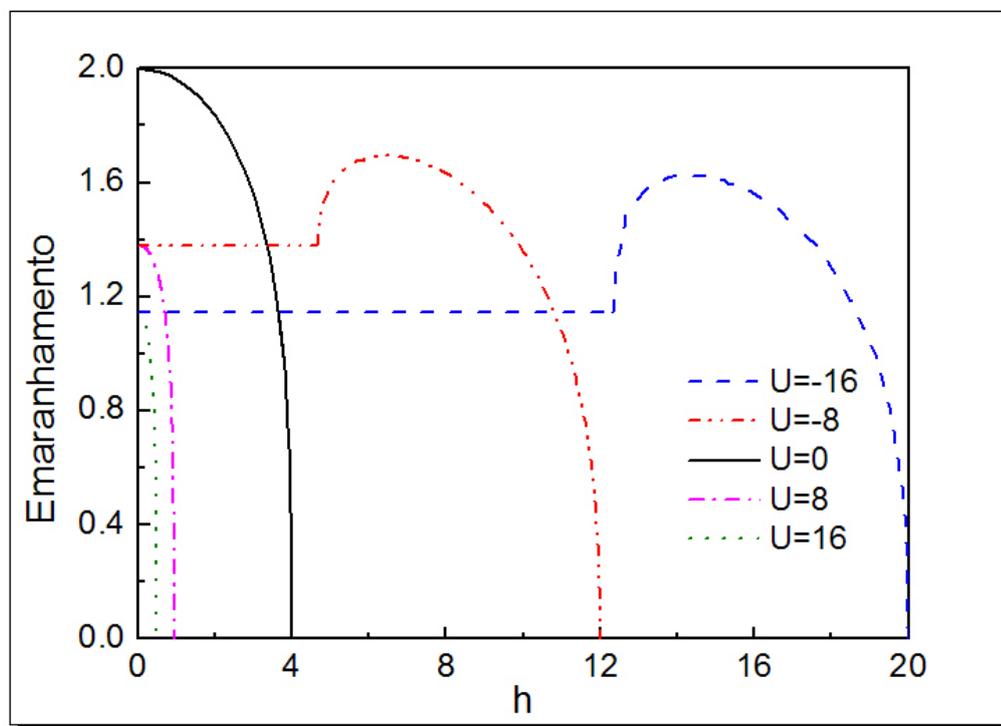
$$h = \frac{\partial E_0(n, m, U)}{\partial m}. \quad (3.27)$$

Por simplicidade consideramos que o número de partículas no sistema é conservado, ou seja,  $\mu = 0$ . Assim, analogamente ao mapeamento que fizemos do emaranhamento com o potencial químico usando para isso a relação Eq.(3.24), entre  $n$  e  $\mu$ , agora faremos o mapeamento do emaranhamento com o campo magnético usando a relação Eq.(3.27), entre  $m$  e  $h$ . Na Figura 11 apresentamos o emaranhamento em função do campo magnético  $h$  para alguns valores de  $U$  e densidade fixa  $n = 1$ .

Observamos que para interações repulsivas o emaranhamento comporta-se com o campo magnético de forma similar ao caso não interagente, diminuindo monotonicamente com  $h$ . Entretanto quanto maior o valor de  $U$ , mais facilmente o emaranhamento é destruído pelo campo magnético. Isso ocorre porque campo magnético alinha os spins na direção do campo, limitando portanto os graus de liberdade de spin das partículas. Quando  $U$  é muito grande, os graus de liberdade espaciais também são congelados. Assim, quando temos a combinação de fortes interações repulsivas e campo magnético externo, o emara-

nhamento é totalmente destruído mesmo para  $h$  pequeno (para  $U = 16$ , campos  $h \geq 0.5$  são suficientes para anular o emaranhamento).

Para sistemas com interação  $U < 0$ , observamos que campos magnéticos abaixo de um certo valor crítico  $h_c$  não geram qualquer efeito no emaranhamento (Figura 11), caracterizando um *gap* de spin (52). O *gap* existe devido à competição entre a interação atrativa, que tende a formar pares (discutido na seção anterior), e o campo magnético, que tenta alinhar os spins na direção do campo. Como os pares devem ter spins opostos, devido ao Princípio de Exclusão de Pauli, o campo magnético precisa ser forte o suficiente para vencer a interação atrativa e então separar os pares e só então alinhá-los ao campo. Por isso quanto maior  $|U|$ , maior o *gap*. Quando o campo magnético é  $h = h_c$ , os pares são desfeitos, o sistema torna-se momentaneamente mais livre e então o emaranhamento aumenta. Mas à medida que o campo aumenta e realmente começa a alinhar os spins, o emaranhamento volta a diminuir, até o ponto de saturação, em que o alinhamento é máximo e o emaranhamento é nulo.



**Figura 11** – Emaranhamento em função do campo magnético externo  $h$  em  $n = 1$  e interações  $U$ : nula, atrativa e repulsiva.

Assim como os dois mapeamentos anteriores, do emaranhamento no potencial químico, através da relação entre  $n$  e  $\mu$ , e do emaranhamento no campo magnético, a partir da relação entre  $m$  e  $h$ , podemos agora mapear o emaranhamento na susceptibilidade magnética  $\chi$ , cuja inversa é

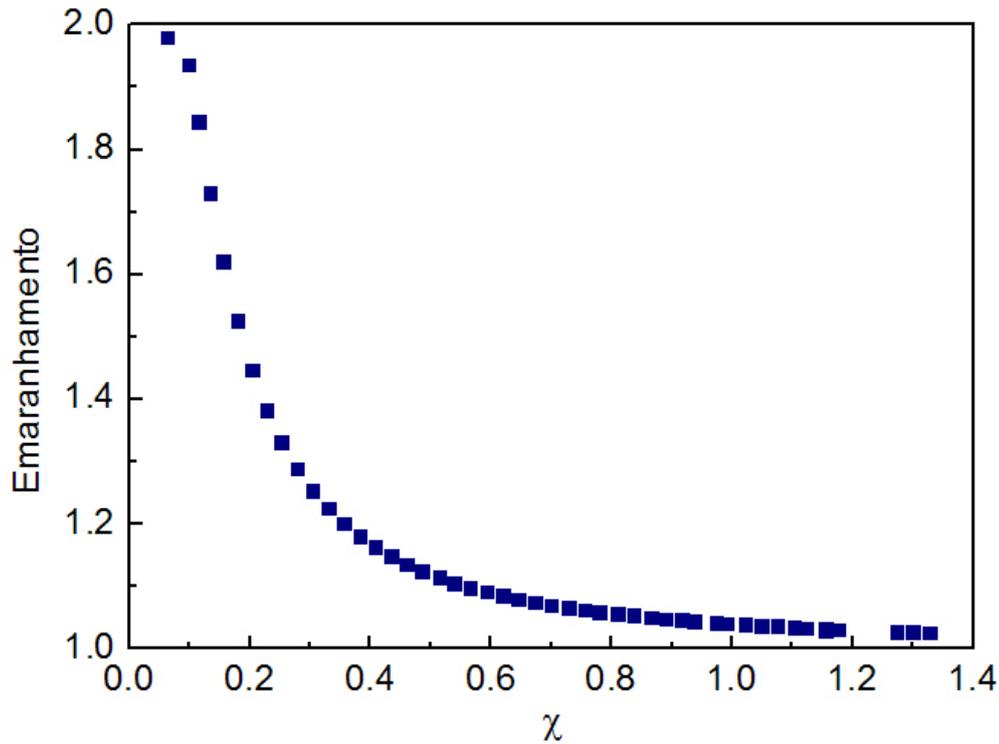
$$\chi^{-1} = \frac{\partial^2 E_0(n, m, U)}{\partial m^2} \Big|_{m=0}, \quad (3.28)$$

através da relação entre a interação e a susceptibilidade. Para isso fixamos  $n$  e calculamos a susceptibilidade através da Eq.(3.28) em função de  $U$ . Como em  $m = 0$  e  $n$  fixo, cada  $U$  corresponde a um valor de emaranhamento (Figura 7), podemos mapear o emaranhamento em  $\chi$ .

Recentemente, devido a uma série de considerações físicas e evidências experimentais, a susceptibilidade magnética tem sido associada qualitativamente ao emaranhamento. Embora nenhuma relação direta, tal como um mapeamento de  $S$  em  $\chi$ , tenha sido obtido até então, os experimentos (43, 53) sugerem que existe uma relação entre as grandezas. Entretanto a relação entre emaranhamento e susceptibilidade apresentada por cada experimento são contraditórias entre si. Os resultados do experimento da Ref.(43), indicam que o emaranhamento deve aumentar à medida que a susceptibilidade aumenta (ver Figura 5). Já no experimento da Ref.(53) e em sua reanálise (54), concluiu-se que o emaranhamento diminui com a susceptibilidade.

Notamos que o material analisado em cada experimento possui natureza magnética distinta. Na Ref.(43) o material é ferromagnético (FM), enquanto que em (54, 53) o material é anti-ferromagnético (AFM). Talvez a contradição entre os experimentos possa ser explicada pela distinta natureza (FM e AFM) dos materiais. Através do modelo de Hubbard é possível simular um material AFM, fixando  $n = 1$  e considerando  $U \gg 1$ . Assim, na tentativa de elucidar esse problema, usamos a expressão Eq.(3.28) e o mapeamento descrito acima para obter o emaranhamento em função da susceptibilidade, como apresentado na Figura 12.

Verificamos que o emaranhamento diminui com  $\chi$ , como sugerido em (54, 53) para materiais AFM. Embora uma conclusão final sobre a diferença entre os casos FM e AFM



**Figura 12** – Emaranhamento em função da susceptibilidade magnética para o modelo de Hubbard em  $n = 1$ .

só seja possível através de uma análise semelhante para o caso FM, nossos resultados mostram claramente que de fato existe uma relação intrínseca entre emaranhamento e susceptibilidade, descartando a possibilidade de coincidência ou artefato.

### 3.4 Sumário dos Resultados

Neste capítulo definimos o emaranhamento local, obtivemos a entropia de emaranhamento de um único sítio para o modelo de Hubbard homogêneo em função dos parâmetros  $n, m$  e  $U$  e analisamos seu comportamento nas fases isolante, metálica e superfluida, em função dos três parâmetros, bem como investigamos a relação entre a susceptibilidade magnética e o emaranhamento.

Verificamos que o emaranhamento, conhecido como testemunha de transições de fase quânticas, também é um indicador das transições metal-isolante e BCS-BEC, apresen-

tando comportamento completamente distinto para cada uma das fases do sistema: isolante, metálica e superfluida. Além disso observamos que a entropia de emaranhamento não é uma função de estado no sentido termodinâmico, pois conjuntos de parâmetros diferentes podem levar ao mesmo valor de emaranhamento. Observamos ainda que nos *gaps* de spin, que ocorrem em sistemas repulsivos e semi-preenchidos sob campos magnéticos externos, o emaranhamento permanece constante até que o campo magnético atinja seu valor crítico. Por fim, verificamos que o emaranhamento está de fato intrinsecamente relacionado com a susceptibilidade magnética de sistemas a baixas temperaturas, embora a forma de sua dependência e os efeitos da natureza ferromagnética e antiferromagnética do sistema ainda não sejam claros. Estes resultados foram publicados em 2006 na revista *Physical Review A* (55).

Todos os resultados apresentados até aqui são fundamentais para a compreensão de emaranhamento em sistemas fortemente correlacionados e em sistemas magnéticos. Porém a restrição a sistemas homogêneos prejudica a descrição de sistemas mais realistas: finitos, com bordas, sob um potencial confinante, com impurezas, interfaces, modulação no potencial ou mesmo na interação, enfim, sistemas com inhomogeneidade espacial. Assim, visando futuras aplicações tecnológicas, apresentamos no capítulo seguinte uma proposta para o cálculo do emaranhamento em sistemas inhomogêneos.

## 4 *Emaranhamento no Modelo de Hubbard Espacialmente Inomogêneo*

O estudo do emaranhamento em sistemas inomogêneos é fundamental porque os futuros dispositivos para processamento e envio de informação através de sistemas emaranhados, como em computadores quânticos, serão sistemas finitos e, portanto, sob efeito de bordas. Outra inomogeneidade tão natural e inevitável quanto a presença de bordas é a presença de impurezas. Mas há ainda inomogeneidades provocadas pela junção de diferentes materiais, como em superredes, ou pela presença de um potencial externo inomogêneo, como o potencial harmônico de uma rede óptica ou de um ponto quântico. Assim, ferramentas que permitam o estudo do emaranhamento em sistemas mais realistas com inomogeneidades tornam-se fundamentais para o desenvolvimento das áreas de Informação Quântica e Computação Quântica.

No Capítulo 2 apresentamos a aproximação de densidade local e apresentamos sua aplicação no cálculo da energia cinética de Thomas-Fermi e no cálculo da energia de troca e correlação em DFT. Neste capítulo, analogamente à LDA para a energia, apresentamos nossa proposta de uma LDA para a entropia de emaranhamento de sistemas inomogêneos. Aplicamos então a proposta para o modelo de Hubbard finito, testamos sua confiabilidade e precisão, comparando com resultados exatos, e então passamos para a análise mais detalhada de inomogeneidades mais complexas no modelo de Hubbard: superredes, impurezas e confinamento harmônico.

## 4.1 LDA para a Entropia de Emaranhamento

Devido ao teorema de Hohenberg-Kohn (HK), apresentado no Capítulo 2, a entropia  $S$ , assim como qualquer outro observável, é um funcional da densidade,  $S = S[n(r)]$ . Isso significa que se conhecêssemos a forma exata do funcional  $S[n(r)]$  para um determinado sistema inomogêneo, a entropia de emaranhamento seria determinada exclusivamente através da distribuição de densidades  $n(r)$  deste sistema. Mas assim como no caso da energia de troca e correlação, este funcional não é conhecido, por isso é necessário tratá-lo com alguma aproximação.

Considerando que a entropia é uma grandeza extensiva, assim como a energia, e que a aproximação LDA é uma das mais simples existentes para o tratamento da energia, propomos a aproximação de densidade local para a entropia de sistemas inomogêneos,

$$S[n(r)] \approx S^{LDA}[n(r)] = \int d^3r S^{hom}(n)|_{n \rightarrow n(r)}, \quad (4.1)$$

reduzindo o problema de conhecer o funcional  $S[n(r)]$  a obter a função entropia do sistema homogêneo  $S^{hom}(n)$ . Portanto, desde que conheçamos a distribuição de densidades  $n(r)$  de um sistema inomogêneo e sua entropia no limite homogêneo, podemos usar a equação Eq.(4.1) para calcular aproximadamente a entropia de emaranhamento deste sistema na presença de inomogeneidades.

Especificamente para o modelo de Hubbard, conhecemos e entendemos muitas das propriedades de  $S^{hom}(n)$ , em função não apenas da densidade  $n$ , mas também da magnetização  $m$  e da interação  $U$ ,

$$\begin{aligned} S^{hom}(n, m, U) = & -\left(\frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} + m\right) \log_2 \left[ \frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} + m \right] - \left(\frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} - m\right) \log_2 \left[ \frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} - m \right] \\ & - \left(1 - n + \frac{\partial e_0}{\partial U}\right) \log_2 \left[ 1 - n + \frac{\partial e_0}{\partial U} \right] - \frac{\partial e_0}{\partial U} \log_2 \frac{\partial e_0}{\partial U}, \end{aligned} \quad (4.2)$$

cujas propriedades foram discutidas no Capítulo 3.

Portanto, podemos obter explicitamente a entropia do modelo de Hubbard inomogêneo

usando a expressão Eq.(4.2) na LDA para a entropia Eq.(4.1),

$$S[n_i, m, U] \approx S^{LDA}[n_i, m, U] = \sum_i^L S^{hom}(n, m, U)|_{n \rightarrow n_i}, \quad (4.3)$$

onde  $L$  é o número total de sítios  $i$  e a integral da Eq.(4.1) foi substituída por uma soma, já que os sítios definem uma distribuição discreta de densidades  $n_i$ . Note que na Eq.(4.3) mantivemos a magnetização fixa em  $m$  e neste capítulo adotaremos  $m = 0$ , de forma que possamos usar a aproximação BA-LSOC para a energia, como explicamos a seguir. Entretanto, a rigor poderíamos ter também uma distribuição  $m_i$  de densidade de spin. Neste caso deveríamos fazer não só a LDA mas também uma aproximação local de densidade de spin (LSDA – do inglês *Local Spin Density Approximation*) para a entropia de emaranhamento. Visando essa futura extensão, trabalhamos paralelamente a este trabalho na construção de uma parametrização para a energia do modelo de Hubbard homogêneo na presença de magnetização. Mais detalhes e resultados preliminares são apresentados no Apêndice B.

No Capítulo 3 a derivada  $\partial e_0/\partial U$  era obtida numericamente a partir de um conjunto de valores de energia, obtida via Bethe-Ansatz, em função de  $U$  para cada sistema com densidade  $n$ . No caso inhomogêneo porém, esse processo é inviável, pois agora não temos uma densidade homogênea, mas um conjunto de densidades  $n_i$  para cada sistema de densidade média  $n$ . Seria preciso gerar um conjunto de valores de energia em função de  $U$  para cada  $n_i$  fixo. No entanto, na integração das equações de Lieb-Wu, Eq.(2.21), não temos controle direto sobre a densidade a ponto de escolher precisamente qualquer valor  $n_i$ . Portanto faremos aqui uma aproximação adicional, calculando a derivada através da expressão parametrizada BA-LSOC (39),

$$e_0(n, U) = \frac{-4\beta(U)}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{\beta(U)} \right), \quad (4.4)$$

válida para sistemas não magnetizados ( $m = 0$ ), com  $\beta(U)$  determinado através da condição de que a energia é exata em  $n = 1$  (34, 35),

$$\frac{-4\beta(U)}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi}{\beta(U)} \right) = -4 \int_0^\infty \frac{J_0(x)J_1(x)}{x[1 + \exp(xU/2)]} dx, \quad (4.5)$$

onde  $J_i(x)$  são as funções de Bessel de ordem  $i$ . Note que para uma LSDA para a entropia precisaríamos de uma expressão semelhante à Eq.(4.4), mas válida para sistemas magnetizados. Com este intuito trabalhamos paralelamente a este trabalho na obtenção de uma parametrização para a energia do modelo de Hubbard homogêneo magnetizado, cujos resultados, ainda preliminares, apresentamos no Apêndice B.

Essa aproximação na energia porém, Eq.(4.4), não influencia significativamente na qualidade da medida de emaranhamento, como mostra a Figura 13, onde apresentamos a entropia  $S^{hom}$  em função de  $U$  positivo<sup>1</sup>, calculada com  $\partial e_0/\partial U$  via BA-LSOC, Eq.(4.4), e via Bethe-Ansatz, Eq.(2.20). O maior desvio percentual<sup>2</sup>, em  $U = 0$  e  $n = 1$ , é de apenas 1.39%, para todos os demais valores de  $n, U$  os desvios são inferiores a 0.7%.

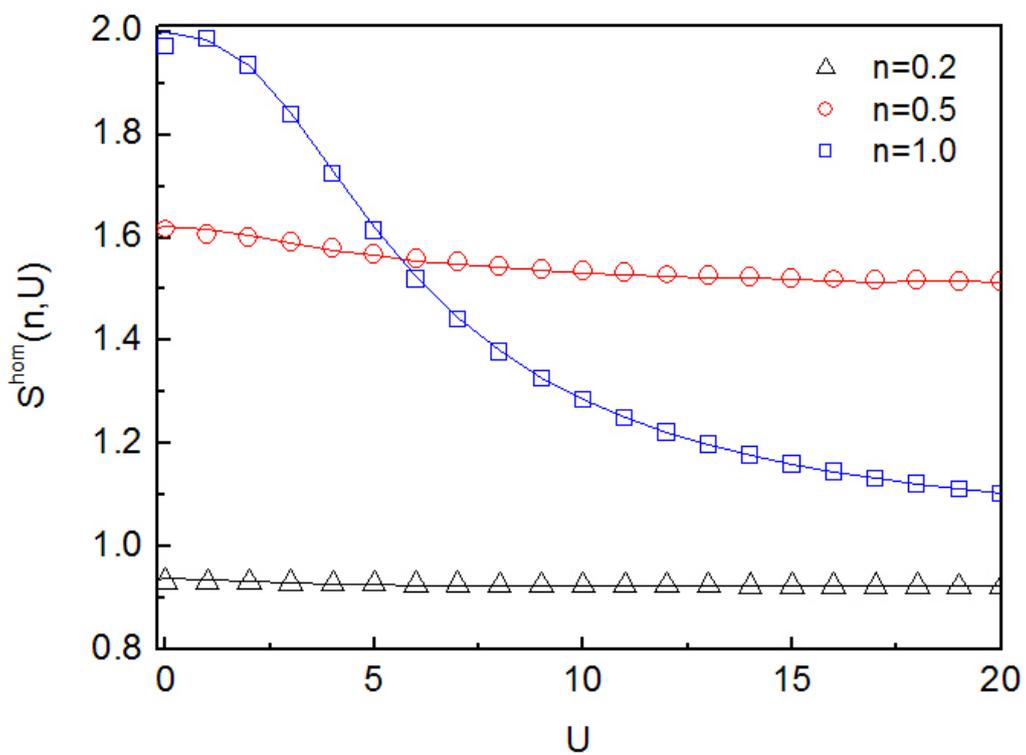
Entretanto, se tratando de um sistema inomogêneo, a distribuição de densidades  $n_i$  também tem que ser obtida através de alguma aproximação, uma vez que não temos acesso à solução exata do modelo de Hubbard inomogêneo para  $L \geq 15$ . Usamos então a aproximação LDA para a energia de troca e correlação e resolvemos auto-consistentemente o ciclo KS, como discutido no Capítulo 2, para obter as densidades na aproximação LDA,  $n_i^{LDA}$ . Dessa forma a distribuição  $n_i$  é obtida via LDA para a energia de troca e correlação e depois ainda aplicamos a LDA para a entropia. Portanto denominamos essa entropia como *nested* LDA, pois há uma LDA dentro da outra.

Para sistemas pequenos (até 15 sítios), podemos testar a confiabilidade e a precisão da *nested* LDA, comparando com os resultados obtidos via diagonalização exata. Além disso, a diagonalização também fornece a distribuição exata de densidades  $n_i$ , de forma que também podemos calcular a entropia LDA, Eq.(4.3), através das densidades exatas, suprimindo uma das aproximações feitas na *nested* LDA.

Nossa comparação será então entre a entropia de emaranhamento exata (obtida via diagonalização), a entropia LDA (usando entropia LDA e  $n_i$  exata) e a *nested* LDA (usando

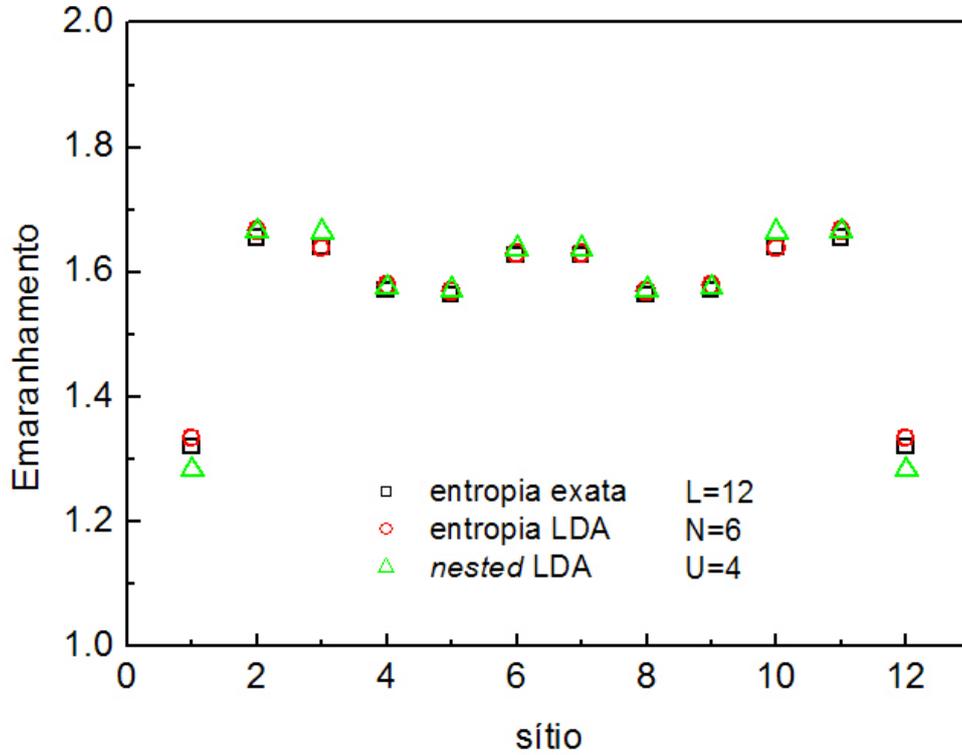
<sup>1</sup> Embora seja possível obter uma aproximação para a energia de sistemas atrativos, através da transformação partícula-buraco Eq.(3.22) e da parametrização Eq.(4.4), em sistemas inomogêneos limitamos nossa análise a interações repulsivas, uma vez que as diferenças físicas entre sistemas repulsivos e atrativos já foram analisados no Capítulo 3.

<sup>2</sup> Durante o texto qualquer referência ao desvio percentual ( $D$ ) de uma medida  $x$  com relação a outra medida  $y$  está associada ao cálculo através da fórmula  $D = 100|x - y|/y$ .



**Figura 13** – Emaranhamento do sistema homogêneo, equação Eq.(4.2), em função da interação  $U$ . As curvas cheias representam  $S^{hom}(n, U)$  calculada com a derivada  $\partial e_0/\partial U$  a partir da energia numérica de Bethe-Ansatz, enquanto os símbolos são  $S^{hom}(n, U)$  calculada com  $\partial e_0/\partial U$  a partir da parametrização BA-LSOC Eq.(4.4) para cada densidade.

entropia LDA e  $n_i^{LDA}$ ). Consideramos uma cadeia aberta de 12 sítios ( $L = 12$ ) e 6 partículas ( $N = 6$ ), com magnetização nula ( $m = 0$ ), ou seja, mesmo número de partículas com spin para cima e com spin para baixo,  $N_\uparrow = N_\downarrow = N/2$ , e interação  $U = 4$ , cuja inomogeneidade é provocada exclusivamente pelas bordas. Calculamos então a entropia  $S^{hom}(n)|_{n \rightarrow n_i}$ , que fornece o emaranhamento do sítio  $i$  com relação aos demais sítios, usando densidades exatas (entropia LDA) e densidades LDA (*nested* LDA) e comparamos com a entropia exata  $S^{exata}$ , como mostra a Figura 14.



**Figura 14** – Distribuição de emaranhamento nos sítios de uma cadeia de 12 sítios, com 6 partículas ( $N_\uparrow = N_\downarrow = 3$ ) e interação  $U = 4$ . Comparação entre o emaranhamento calculado com a equação Eq.(4.2), substituindo a densidade homogênea  $n$  pela densidade do sítio  $n_i$  exata (entropia LDA) e aproximada via LDA (*nested* LDA), e o emaranhamento exato.

A oscilação observada no emaranhamento reflete a oscilação na distribuição de densidades, devido às bordas. No primeiro e no último sítio, como resultado da conectividade a apenas um sítio vizinho, encontramos o mínimo do emaranhamento, cerca de 20% menor que o máximo neste sistema. É nas bordas também que observamos o maior desvio das

duas aproximações com relação ao resultado exato, de 1.08% para a entropia LDA e de 2.78% para a *nested* LDA, como mostra a Tabela 2. Ambos os resultados são excelentes, considerando que um sistema tão pequeno, com  $L = 12$ , representa um teste extremamente difícil para a LDA<sup>3</sup>. Embora os desvios sejam menores para a entropia LDA, os sistemas maiores terão que ser tratados com *nested* LDA, pois não teremos acesso às densidades  $n_i$  via diagonalização exata.

**Tabela 2** – Desvios locais da entropia LDA e da *nested* LDA para a cadeia de 12 sítios (Figura 14). Os desvios são apresentados apenas até o sítio  $L/2 = 6$ , já que o sistema é simétrico com relação ao centro da cadeia.

sítio	1	2	3	4	5	6
Desvio LDA (%)	1.08	0.76	0.03	0.54	0.39	0.21
Desvio <i>nested</i> LDA (%)	2.78	0.68	1.50	0.26	0.51	0.67

Muito embora seja interessante observar que a concordância entre os métodos é muito boa em todos os sítios, a informação de emaranhamento em cada sítio específico da cadeia não é muito útil, uma vez que em um sistema real muitas vezes não conseguimos medir as propriedades de um sítio específico. Assim, a medida mais relevante é o emaranhamento médio,

$$\bar{S}^{LDA}[n_i, m, U] = \frac{1}{L} S^{LDA}[n_i, m, U] = \frac{1}{L} \sum_i^L S^{hom}(n, m, U)|_{n \rightarrow n_i}, \quad (4.6)$$

onde  $S^{LDA}$  é a entropia de emaranhamento do sistema total, Eq.(4.1). Portanto o emaranhamento em sistemas com inomogeneidades mais complexas será analisado através do emaranhamento médio de um único sítio, Eq.(4.6).

Calculando a entropia média para o sistema aberto apresentado na Figura 14, observamos que usando a *nested* LDA,  $\bar{S}_{nested}^{LDA}$ , o desvio com relação à média exata ( $\approx 0.2\%$ ) é menor que o desvio ( $\approx 0.5\%$ ) de  $\bar{S}^{LDA}$ , usando densidades exatas. Esse excelente desempenho da *nested* LDA é resultado de um cancelamento de erros, uma vez que o emaranhamento é superestimado em alguns sítios e subestimado em outros<sup>4</sup>. Para sistemas

<sup>3</sup> Como discutido no Capítulo 2, a LDA fornece resultados exatos para sistemas homogêneos, isto é, com densidade constante, e uma boa aproximação para sistemas com baixa oscilação na densidade. Em cadeias pequenas o efeito das bordas é muito maior que em cadeias grandes, produzindo maiores oscilações na distribuição de densidades e, portanto, tornando-se um teste difícil para a LDA.

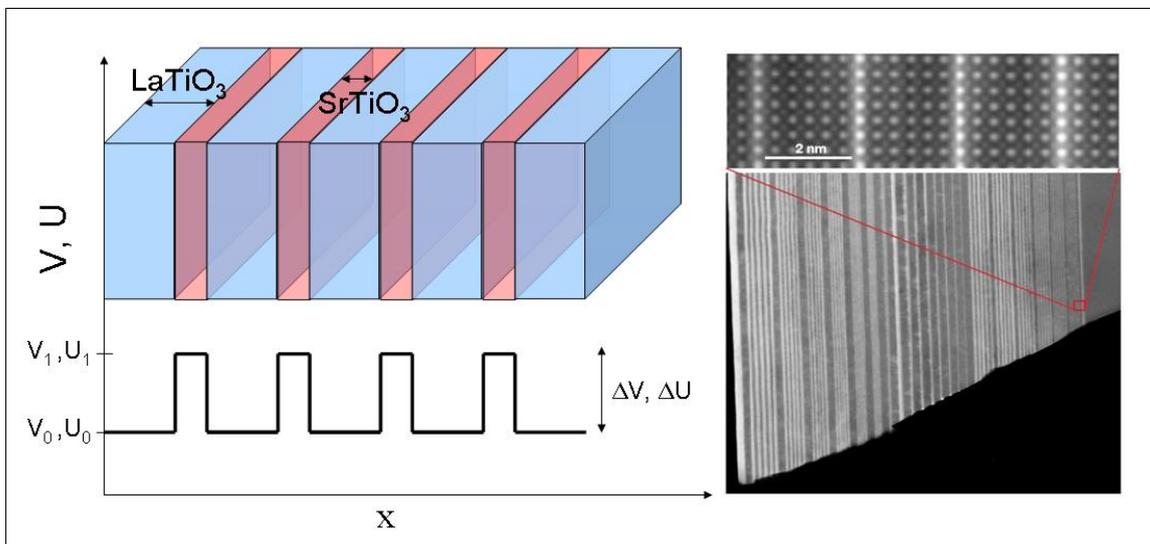
<sup>4</sup> Consequência direta das oscilações na distribuição de densidades serem superestimadas via LDA.

maiores contudo, tanto os desvios locais, da Tabela 2, quanto o desvio do emaranhamento médio, Eq.(4.6), serão ainda menores.

Concluimos, portanto, que nossa aproximação LDA para a entropia de emaranhamento apresenta excelente performance, inclusive usando LDA também para gerar as densidades (*nested* LDA). Nas próximas seções trataremos sistemas maiores e inhomogeneidades mais complexas: superredes, impurezas e confinamento harmônico, de difícil acesso por métodos exatos, constituindo portanto, aplicações promissoras da *nested* LDA.

## 4.2 Emaranhamento em Superredes

Uma superrede é um sistema que possui uma modulação periódica no potencial externo  $V$  ou na interação eletrônica  $U$ , como por exemplo um sistema formado por materiais diferentes intercalados, como ilustrado na Figura 15. Entender como o emaranhamento é afetado por essas modulações pode ser crucial para o desempenho de dispositivos de processamento de informação em sistemas nanoestruturados.



**Figura 15** – Ilustração de uma superrede na direção  $x$  formada por dois diferentes materiais, titanato de estrôncio ( $\text{SrTiO}_3$ ) e titanato de lantânio ( $\text{LaTiO}_3$ ). A modulação nas superredes pode ser devida a uma diferença no potencial externo ( $\Delta V$ ) ou a uma diferença de interação eletrônica ( $\Delta U$ ) entre os materiais. À direita uma imagem desta superrede, extraída de *Nature* **419**, 378 (2002).

No modelo de Hubbard uma superrede em  $V$  pode ser implementada acrescentando-se

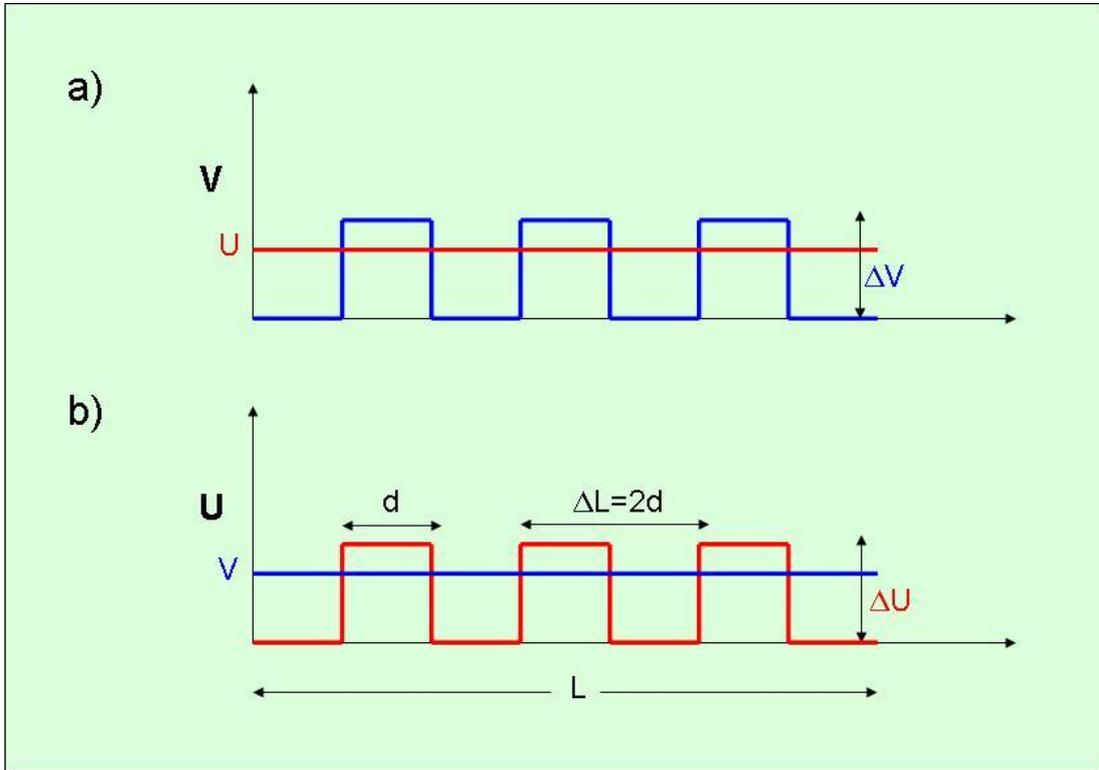
ao Hamiltoniano Eq.(3.1) um potencial externo  $V_i$ ,

$$\hat{H} = -t \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} V_i \hat{n}_{i\sigma}, \quad (4.7)$$

que varia periodicamente entre  $V_0$  e  $V_1$ , com modulação  $\Delta V = V_1 - V_0$ , enquanto a interação  $U$  entre as partículas é mantida constante. Da mesma maneira uma superrede em  $U$  é descrita por

$$\hat{H} = -t \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + \sum_i U_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + V \sum_{i\sigma} \hat{n}_{i\sigma}, \quad (4.8)$$

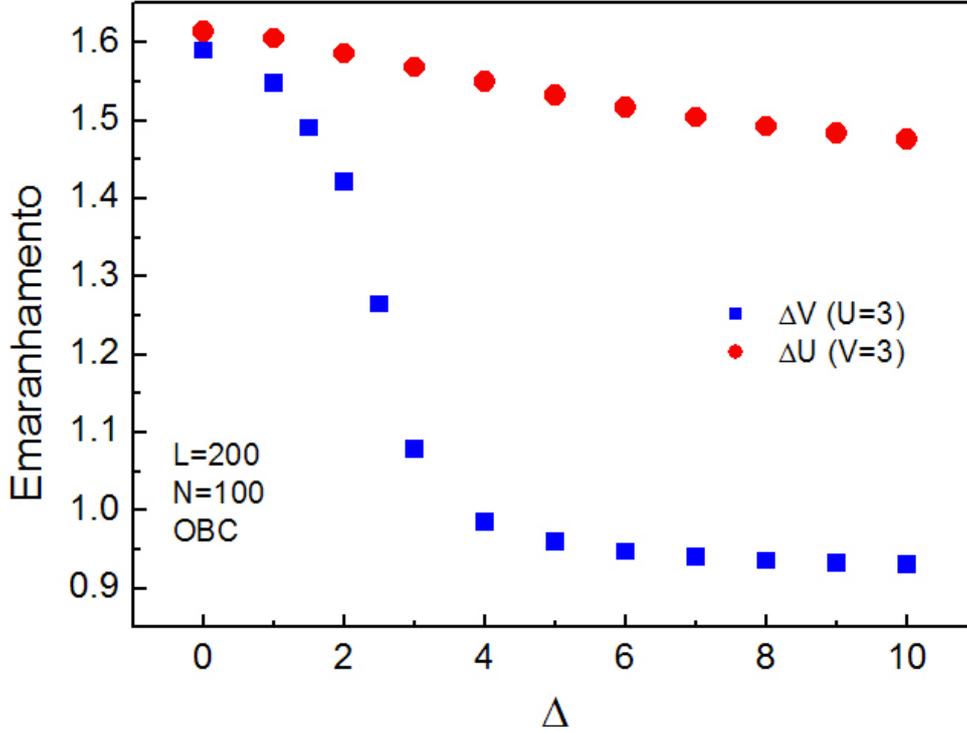
onde  $U_i$  varia periodicamente entre  $U_0$  e  $U_1$ , com  $\Delta U = U_1 - U_0$  e  $V$  constante.



**Figura 16** – Esquema de uma superrede de tamanho  $L$ , período  $\Delta L$ , formada por materiais de mesma largura  $d$  com a) modulação  $\Delta V = V_1 - V_0$  e  $U$  constante e b) modulação  $\Delta U = U_1 - U_0$  e  $V$  fixo. Adotamos  $L = 200$ ,  $d = 10$  e  $U_0 = V_0 = 0$ .

Para entender como o emaranhamento é afetado com as modulações de uma superrede, consideremos inicialmente uma superrede no potencial externo, com modulação  $\Delta V$  e  $U$  fixo, e uma superrede na interação, com modulação  $\Delta U$  e  $V$  constante, ambas em uma cadeia aberta com  $L = 200$ ,  $N = 100$  e período  $\Delta L = 20$ , como mostra a Figura 16. Por simplicidade adotamos  $V_0 = U_0 = 0$ . Calculamos então a entropia de emaranhamento

médio de um único sítio,  $\bar{S}^{LDA}[n_i, m = 0, U]$ , para cada superrede em função da modulação  $\Delta$ , como mostra a Figura 17.



**Figura 17** – Emaranhamento médio de um único sítio,  $\bar{S}^{LDA}[n_i, m = 0, U]$ , em função da modulação  $\Delta$  da superrede em  $V$ , com  $U = 3$ , e da superrede em  $U$ , com  $V = 3$ . Consideramos uma cadeia aberta (OBC) com 200 sítios e 100 partículas com magnetização total nula ( $m = 0$ ).

Observamos que o emaranhamento é máximo quando não há nenhuma modulação no sistema ( $\Delta = 0$ ), isto é, quando a cadeia é homogênea, com  $V$  e  $U$  constante. À medida que provocamos inomogeneidade espacial através de  $\Delta V$  ou  $\Delta U$ , o emaranhamento diminui, pois a modulação interrompe a comunicação entre os sítios. Mas este efeito é muito mais intenso para superredes em  $V$  que em superredes em  $U$ . Isso significa que variações locais no potencial externo destroem o emaranhamento mais efetivamente do que variações locais na interação.

Esse resultado é coerente com o encontrado em (56), onde a energia também é afetada mais intensamente com as modulações em  $V$  do que com  $\Delta U$ . Usando o teorema de Hellman-Feynman, Eq.(3.9), no Hamiltoniano Eq.(4.7), encontramos que a energia varia

com o potencial externo por

$$\frac{\partial E_0}{\partial V_i} = \sum_{i,\sigma} \langle \hat{n}_{i\sigma} \rangle = n, \quad (4.9)$$

enquanto a variação com a interação é

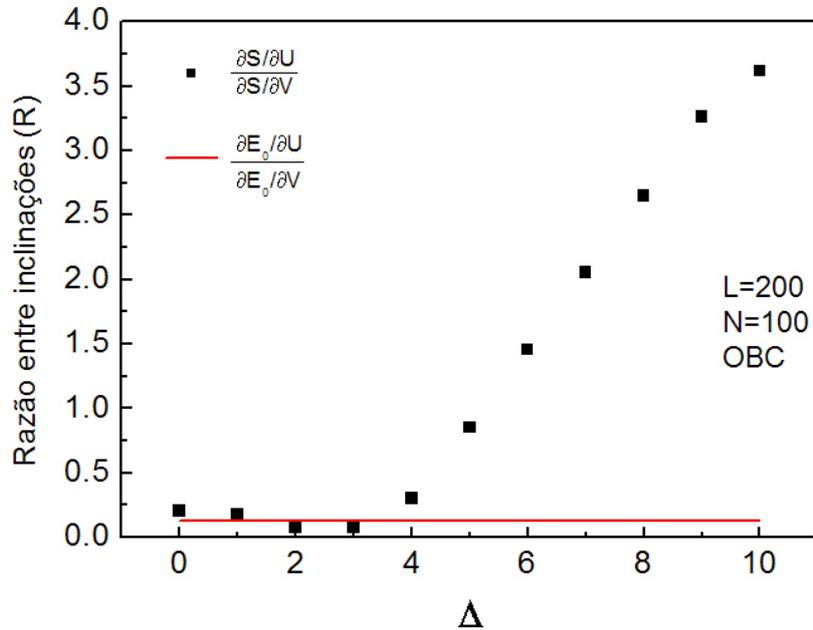
$$\frac{\partial E_0}{\partial U_i} = \sum_i \langle \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} \rangle = \frac{n^2}{4}, \quad (4.10)$$

obtida através do Hamiltoniano Eq.(4.8), onde usamos a relação  $n_\uparrow = n_\downarrow = n/2$ . Assim, para qualquer valor de  $0 \leq n \leq 2$ ,  $\Delta V$  produz mais variações na energia e, conseqüentemente, no emaranhamento, do que  $\Delta U$ .

De fato, se consideramos a razão  $R$  entre as inclinações das curvas apresentadas na Figura 17, no regime de decaimento  $0 \leq \Delta < 4$ , encontramos

$$R = \frac{\partial S / \partial U}{\partial S / \partial V} \approx \frac{\partial E_0 / \partial U}{\partial E_0 / \partial V} = \frac{n}{4}, \quad (4.11)$$

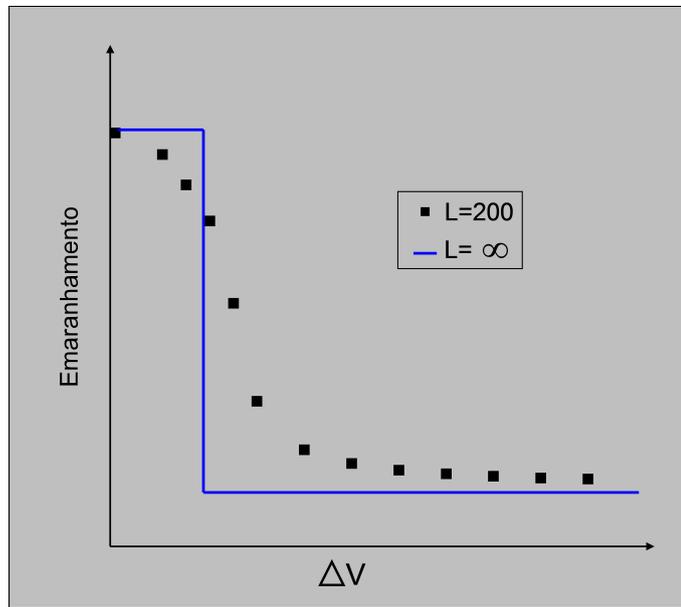
como mostra a Figura 18.



**Figura 18** – Razão entre as derivadas do emaranhamento com relação à modulação  $\Delta$  da superrede em  $U$  e  $V$ ,  $R = (\partial S / \partial U) / (\partial S / \partial V)$ . A reta representa a razão entre as derivadas de energia, equações Eq.(4.9) e Eq.(4.10),  $(\partial E_0 / \partial U) / (\partial E_0 / \partial V) = n/4$ , com  $n = 0.5$ .

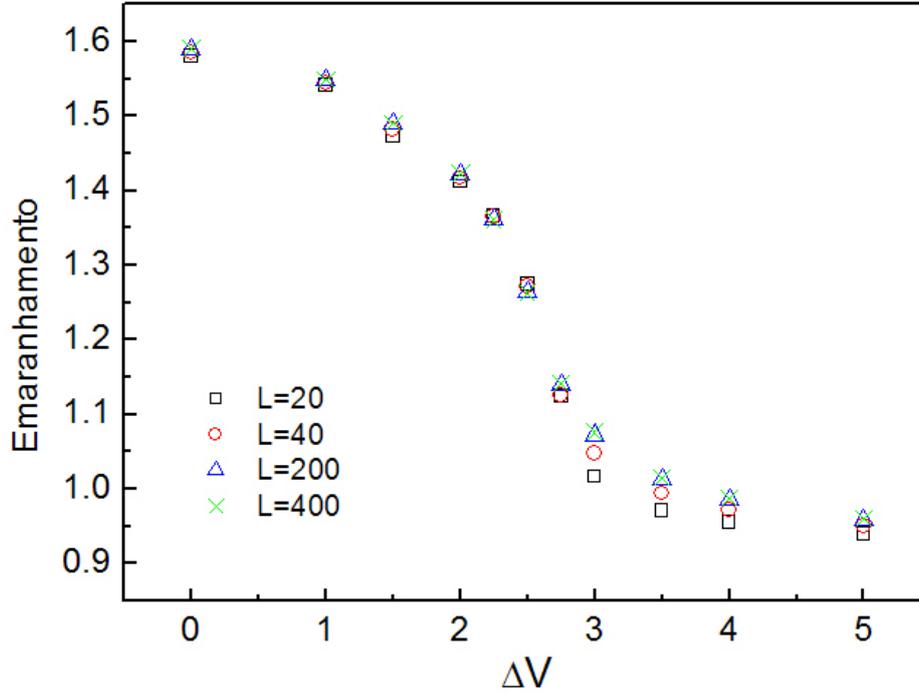
O comportamento do emaranhamento com relação à modulação da superrede em  $V$ ,

apresentado na Figura 17, é semelhante ao comportamento de uma transição de fase (57), em que há uma variação brusca para um determinado parâmetro. Para checar a existência ou não de uma transição de fase na superrede em  $V$ , fixamos a densidade e calculamos  $\bar{S}^{LDA}$  em função de  $\Delta V$  para diferentes valores de  $L$ . À medida que  $L \rightarrow \infty$ , a existência de uma transição de fase será testemunhada pelo surgimento de uma descontinuidade no emaranhamento, tal como ilustra a Figura 19. Entretanto o que observamos é que o comportamento do emaranhamento na superrede praticamente independe de  $L$ , como mostra a Figura 20. Assim, a superrede em  $V$  não apresenta transição de fase, embora o comportamento de  $S$  com  $\Delta V$  lembre o comportamento de uma transição.



**Figura 19** – Ilustração de como surgiria uma descontinuidade no emaranhamento à medida que  $L \rightarrow \infty$  se houvesse uma transição de fase na superrede com modulação  $\Delta V$ . Os pontos são os resultados reais apresentados na Figura 17.

Até aqui analisamos superredes em apenas uma das grandezas,  $V$  ou  $U$ . Em sistemas reais, porém, é mais natural que as modulações sejam em  $U$  e  $V$  simultaneamente. Assim, na Figura 21 apresentamos o emaranhamento médio por sítio de uma cadeia com modulações  $\Delta V$  e  $\Delta U$ . Mais uma vez observamos que a modulação no potencial externo  $V$  é a principal responsável pelo decréscimo do emaranhamento: para qualquer  $\Delta V$  fixo, o emaranhamento decai muito lentamente com a modulação  $\Delta U$  e, ao contrário, para qualquer  $\Delta U$  constante, o emaranhamento diminui bruscamente com  $\Delta V$ .



**Figura 20** – Emaranhamento em função da modulação  $\Delta V$  da superrede para vários tamanhos de cadeia  $L$ , com  $U = 3$  e  $n = 0.5$ .

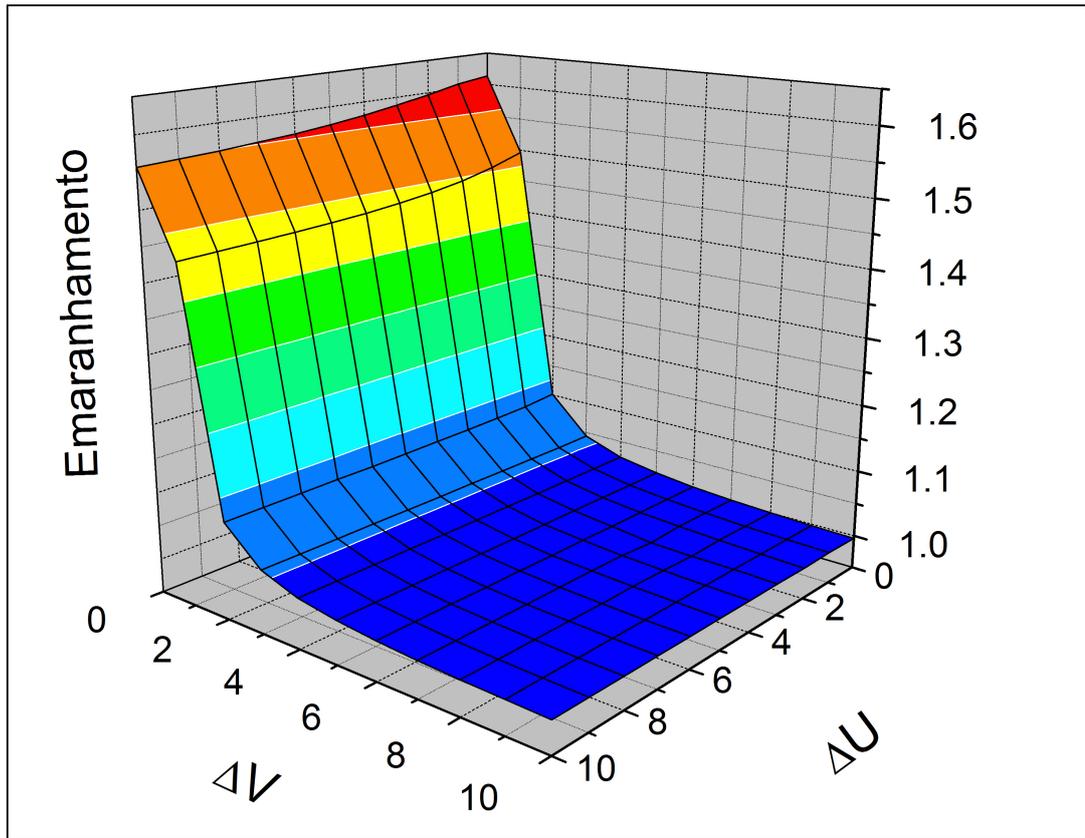
### 4.3 Emaranhamento na Presença de Impurezas

Nesta seção trataremos do emaranhamento de sistemas na presença de uma impureza. Consideramos o caso em que a impureza, de intensidade  $V_j$ , está localizada em um único sítio  $j$ , como mostra a Figura 22. O Hamiltoniano deste sistema é o mesmo que descreve a superrede em  $V$ , equação Eq.(4.7), mas o potencial externo agora é

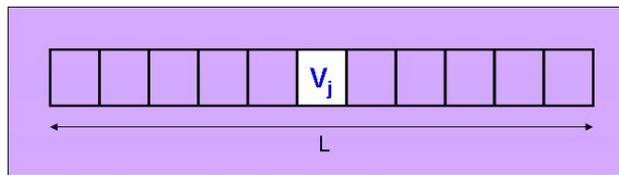
$$V_i = V_j \delta_{i,j}, \quad (4.12)$$

onde  $\delta_{i,j}$  é a delta de Kronecker.

O potencial da impureza pode ser atrativo ou repulsivo, provocando diferentes distribuições de densidade, como podemos ver na Figura 23, para uma cadeia de  $L = 100$  na presença de uma impureza de intensidade  $V_j$ . As densidades foram obtidas através da aproximação LDA para a energia de troca e correlação, descrita no Capítulo 2. Verificamos que na ausência de impurezas a distribuição de densidades oscila apenas devido às



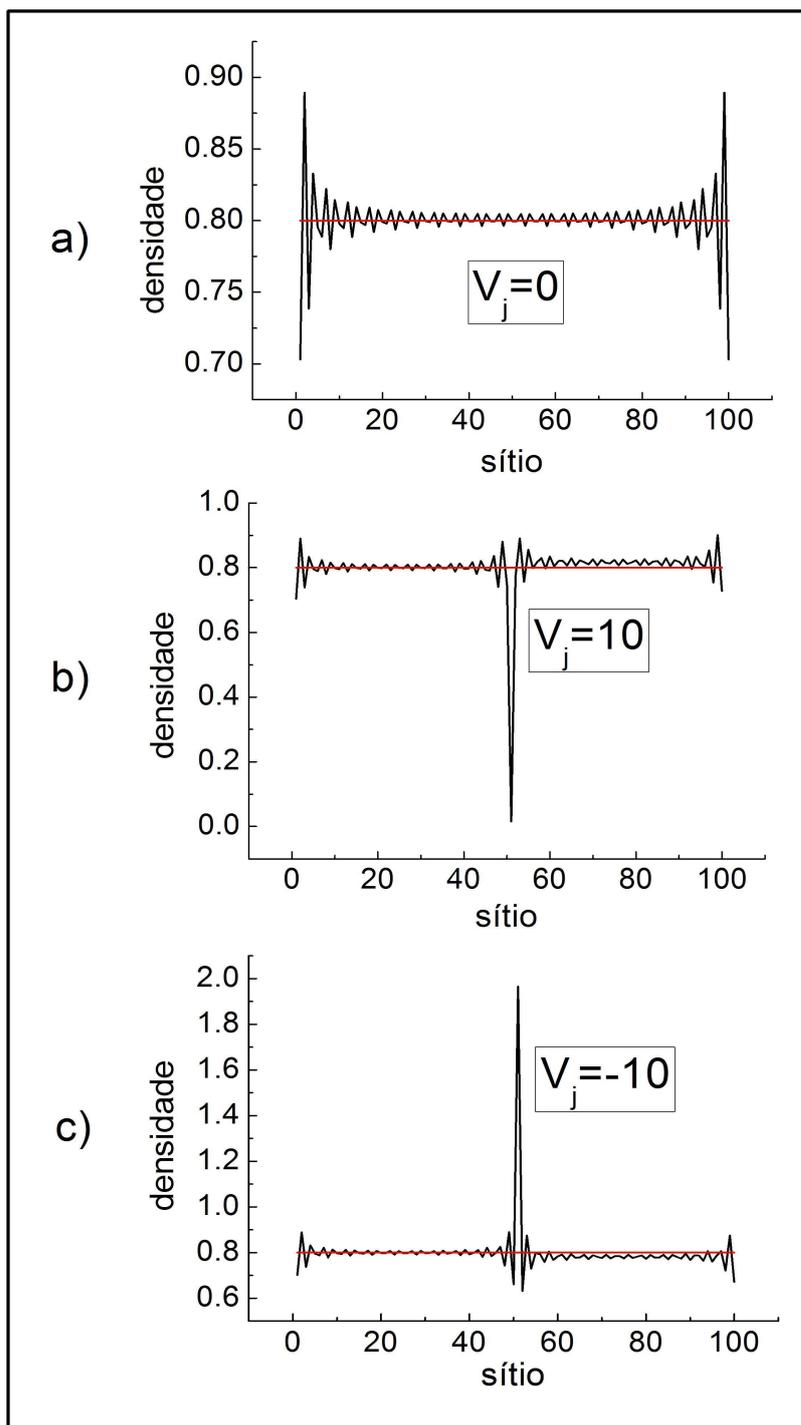
**Figura 21** – Emaranhamento em função das modulações  $\Delta V$  e  $\Delta U$  em uma superrede com  $L = 200$  e  $N = 100$ . O emaranhamento diminui bruscamente com  $\Delta V$  quase que independente do valor de  $\Delta U$ .



**Figura 22** – Ilustração de uma cadeia aberta de  $L$  sítios na presença de uma impureza local de intensidade  $V_j$ . O potencial  $V_j$  no sítio  $j$  pode ser atrativo ou repulsivo.

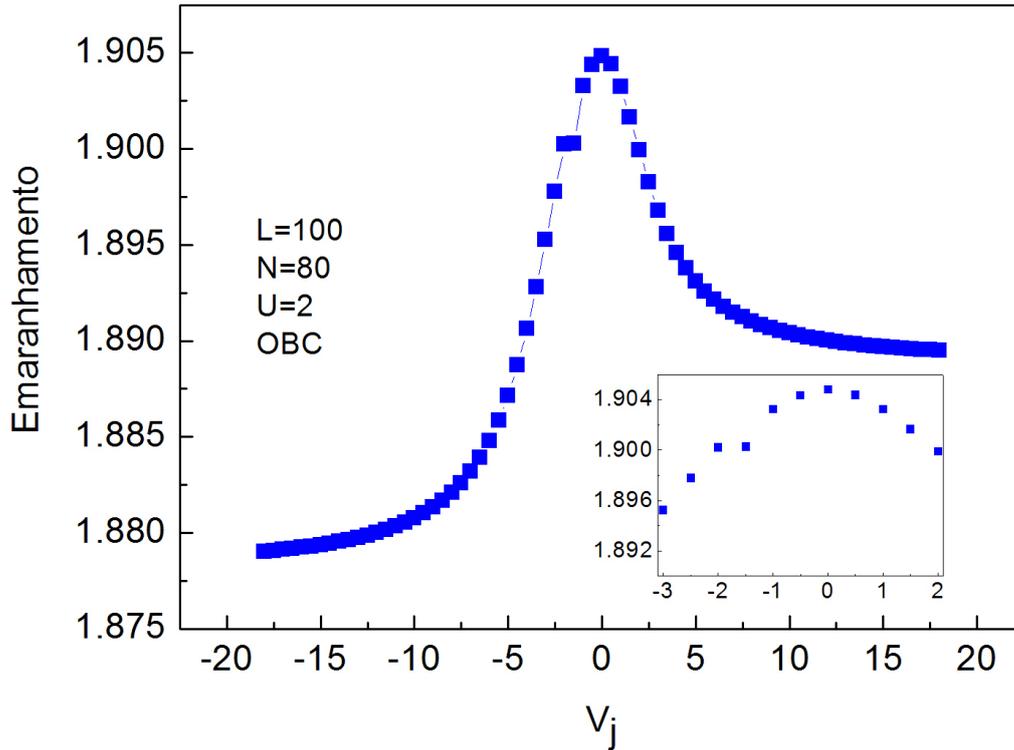
bordas, Figura 23a. Na presença de uma impureza, além das oscilações devido às bordas, surgem também oscilações de Friedel (33) nas vizinhanças da impureza. No caso de impureza repulsiva, a densidade é praticamente nula no sítio da impureza e as oscilações nos sítios vizinhos produzem densidades  $n_i$  predominantemente maiores que a densidade média  $n$ , Figura 23b. Já na presença de uma impureza atrativa, a densidade é máxima no sítio da impureza e as densidades nos sítios vizinhos são menores que  $n$ , Figura 23c.

Para compreender como o emaranhamento é afetado pela impureza, calculamos a



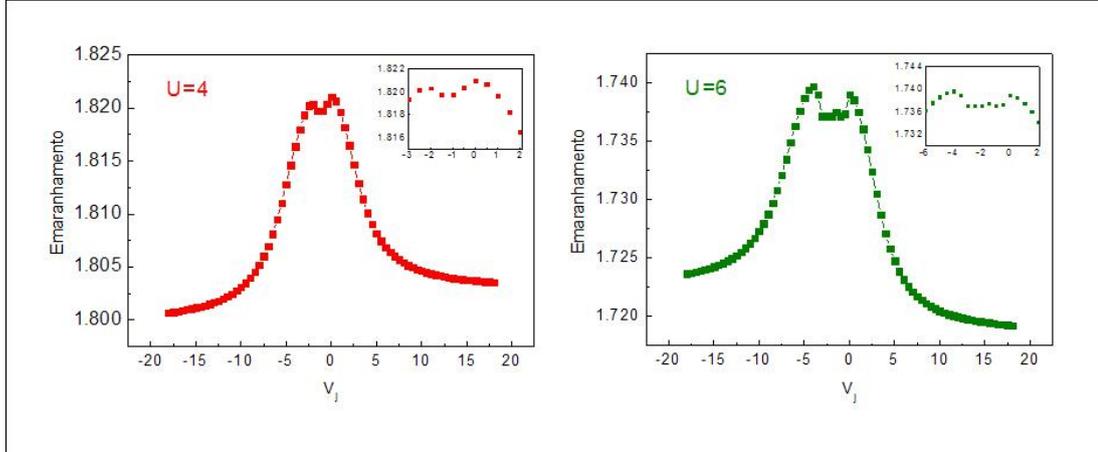
**Figura 23** – Distribuição de densidades ao longo de uma cadeia na presença de uma impureza a) com intensidade nula,  $V_j = 0$  ; b) repulsiva, com intensidade  $V_j = 10$ ; c) atrativa, com intensidade  $V_j = -10$ . A reta em vermelho representa a densidade média  $n = N/L = 0.8$ , da cadeia aberta com  $L = 100$ ,  $N = 80$ ,  $U = 2$  e impureza no sítio  $j = 51$ . Para  $V_j \neq 0$  há uma ligeira assimetria entre os dois lados da impureza, porque a impureza não está exatamente no centro da cadeia.

entropia de emaranhamento médio de um único sítio,  $\bar{S}^{LDA}$ , para sistemas de mesmo tamanho ( $L = 100$ ), mesma densidade média ( $n = N/L = 0.8$ ), mesma interação ( $U = 2$ ), mas com diferentes intensidades de impureza ( $-18 \leq V_j \leq 18$ ) em função da intensidade  $V_j$ , Figura 24. Verificamos que o emaranhamento é máximo quando o sistema é mais homogêneo, isto é, para  $V_j = 0$ . Apesar da escala de decaimento do emaranhamento ser bem menor<sup>5</sup>, este resultado é semelhante ao que encontramos nas superredes: a impureza interrompe a comunicação entre os dois lados da cadeia, diminuindo o emaranhamento. De fato qualquer inomogeneidade sempre diminui o emaranhamento, pois sua presença restringe a itinerância das partículas, limitando os graus de liberdade de ocupação nos sítios.



**Figura 24** – Emaranhamento médio por sítio na presença de uma impureza de intensidade  $V_j$ . A impureza é local (no sítio 51) em uma cadeia aberta (OBC) de 100 sítios, 80 partículas e interação intra-sítio  $U = 2$ . O quadro destaca o pequeno platô de emaranhamento, para  $-2 \leq V_j \leq -1.5$ .

<sup>5</sup> O emaranhamento decresce com a impureza em uma escala menor que com a modulação da superrede porque neste caso o potencial que provoca a inomogeneidade é diferente de zero em apenas um sítio, enquanto no caso das superredes o potencial era modulado em conjuntos de 10 sítios.

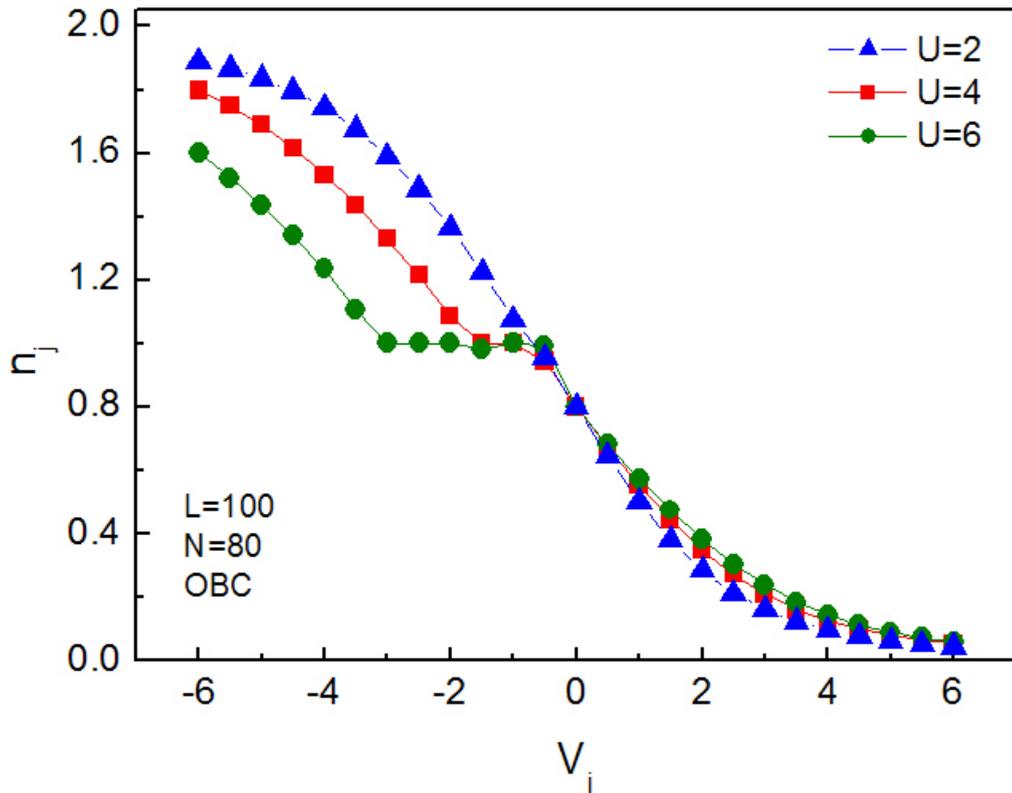


**Figura 25** – Emaranhamento na presença de uma impureza de intensidade  $V_j$ , para uma cadeia com interação  $U = 4$  (esquerda) e  $U = 6$  (direita). A impureza está localizada na posição 51 de uma cadeia aberta (OBC) com  $L = 100$  e  $n = 0.8$ . Os quadros internos destacam os platôs de emaranhamento.

Já a saturação do emaranhamento ocorre quando o efeito da impureza é neutralizado, isto é, a densidade no sítio da impureza atinge um dos limites  $n_j = 2$  (para  $V_j < 0$ ) ou  $n_j = 0$  (para  $V_j > 0$ ) e então, mesmo que  $|V_j|$  aumente, a distribuição de densidades permanece a mesma, produzindo o mesmo valor de emaranhamento (Figura 24, aproximadamente em  $|V_j| > 15$ ). Note entretanto que a saturação neste caso de  $U = 2$  não é simétrica: o emaranhamento no ponto de saturação é maior quando a impureza é repulsiva. Para compreender esse efeito, voltemos à Figura 23. Vimos que a impureza produz oscilações na densidade em sua vizinhança, qualquer que seja sua natureza, repulsiva ou atrativa. Entretanto as impurezas repulsivas levam os sítios vizinhos a densidades preferencialmente maiores que a densidade média, garantindo emaranhamento médio maior do que no caso de impurezas atrativas, onde as densidades ao redor da impureza são menores que a densidade média.

Por fim ainda observamos na região atrativa da Figura 24 dois pontos,  $V_j = -2$  e  $V_j = -1.5$ , com o mesmo emaranhamento  $\bar{S}^{LDA} = 1.90$ , formando uma espécie de pequeno platô (quadro interno da Figura 24). Esse platô indica uma competição entre a interação intra-sítio  $U$  e o potencial  $V_j$  da impureza, que nesta região têm sinais opostos. Para confirmar essa competição fizemos gráficos semelhantes para sistemas com interações  $U$  ainda mais fortes, apresentados na Figura 25.

Verificamos que de fato existe um platô no emaranhamento e que seu comprimento é maior quanto maior a interação  $U$  (Figuras 24 e 25). Isso comprova a existência de uma competição entre a interação repulsiva  $U$  e o potencial atrativo  $V_j$  da impureza. O potencial  $V_j$  atrai partículas para o sítio da impureza, mas quando a densidade atinge  $n_j = 1$ , há uma resistência para aumentar a densidade, devido à interação repulsiva  $U$  no sítio, precursor da transição metal-isolante. Então a densidade permanece constante até que  $V_j$  seja suficientemente forte para vencer a interação  $U$  e então produzir  $n_j > 1$ , como mostra a Figura 26. Nesta faixa em que  $n_j$  está congelada, a distribuição de densidades como um todo também permanece inalterada, produzindo o mesmo emaranhamento médio, ou seja, formando um platô de emaranhamento.



**Figura 26** – Densidade no sítio da impureza ( $n_j$ ) em função do potencial da impureza ( $V_j$ ). Quanto maior o valor de  $U$ , maior deve ser o módulo de  $V_j$  para que a resistência em  $n_j = 1$  seja vencida e a densidade se torne  $n_j > 1$ .

Além disso observamos que, quando finalmente o potencial da impureza consegue vencer a interação e fazer  $n_j > 1$ , o emaranhamento sofre um abrupto aumento, devido

ao súbito descongelamento da distribuição de densidades, formando um “ombro”, antes de finalmente diminuir à medida que  $n_j$  se aproxima de  $n_j = 2$  (Figura 25). Mas observe que à medida que  $U$  aumenta, a densidade  $n_j$  tende à ocupação máxima  $n_j = 2$  mais lentamente, portanto o decaimento do emaranhamento é mais lento para  $U$  maior.

## 4.4 Emaranhamento sob Confinamento Harmônico

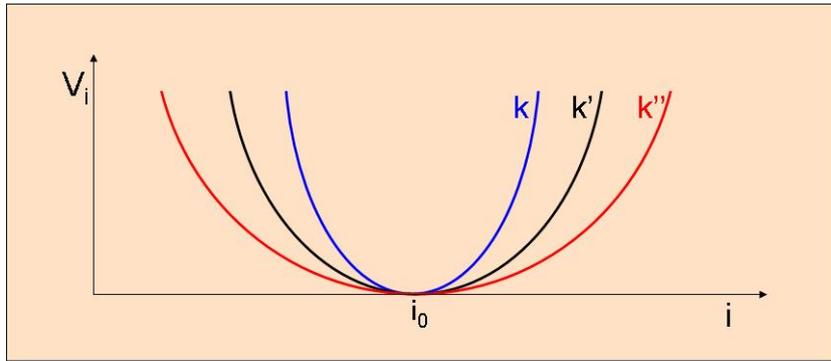
Nesta seção estudamos o emaranhamento em uma cadeia harmonicamente confinada, que simula por exemplo, elétrons em pontos quânticos ou átomos em uma armadilha óptica (58, 59). Esse sistema é modelado substituindo o potencial externo  $V_i$  do Hamiltoniano do modelo de Hubbard,

$$\hat{H} = -t \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow} + \sum_{i\sigma} V_i \hat{n}_{i\sigma}, \quad (4.13)$$

por um potencial harmônico,

$$V_i = k(i - i_0)^2, \quad (4.14)$$

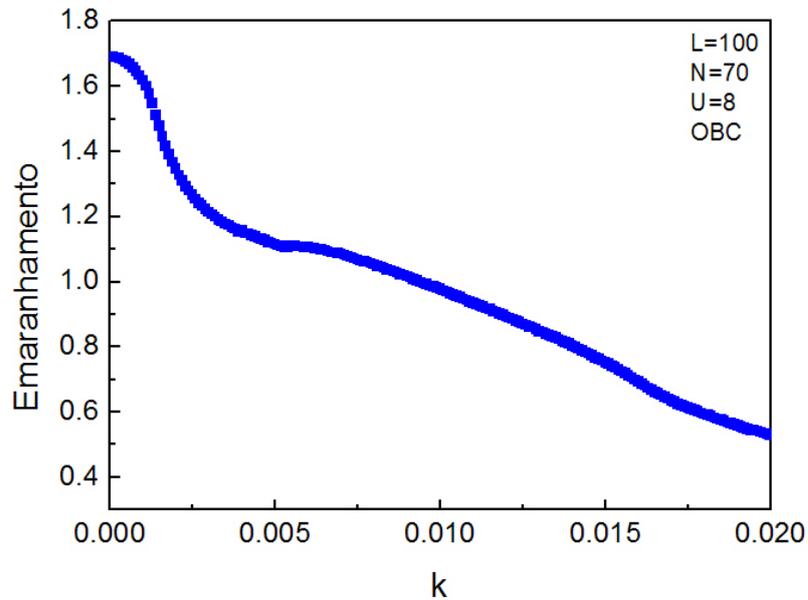
com curvatura  $k$  centrada em  $i_0$ , como ilustra a Figura 27.



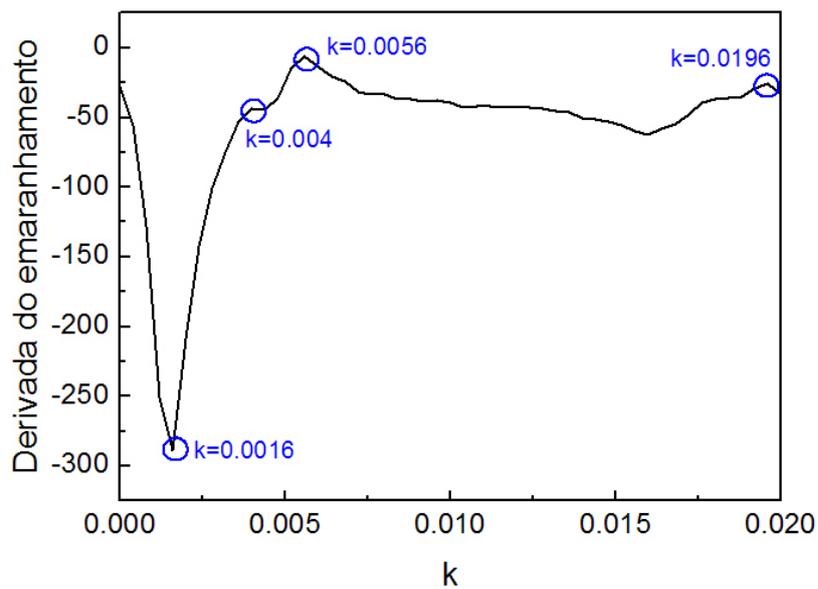
**Figura 27** – Ilustração do potencial harmônico,  $V_i = k(i - i_0)^2$ , para diferentes curvaturas  $k > k' > k''$ . Adotamos  $i_0 = L/2 + 1$  para  $L$  par e  $i_0 = (L + 1)/2$  para  $L$  ímpar.

Na Figura 28 analisamos o emaranhamento de uma cadeia aberta de 100 sítios em função da curvatura  $k$  do potencial, para densidade média  $n = 0.7$  e interação  $U = 8$ . Novamente, tal como para superredes e impurezas, encontramos que o emaranhamento é máximo quando não há nenhuma inhomogeneidade, ou seja, quando não há confinamento ( $k = 0$ ). À medida que confinamos o sistema, restringimos os graus de liberdade das

partículas e então o emaranhamento decresce. Entretanto observamos que este decaimento não é uniforme, como pode ser visto mais explicitamente na derivada do emaranhamento com relação à curvatura, Figura 29.

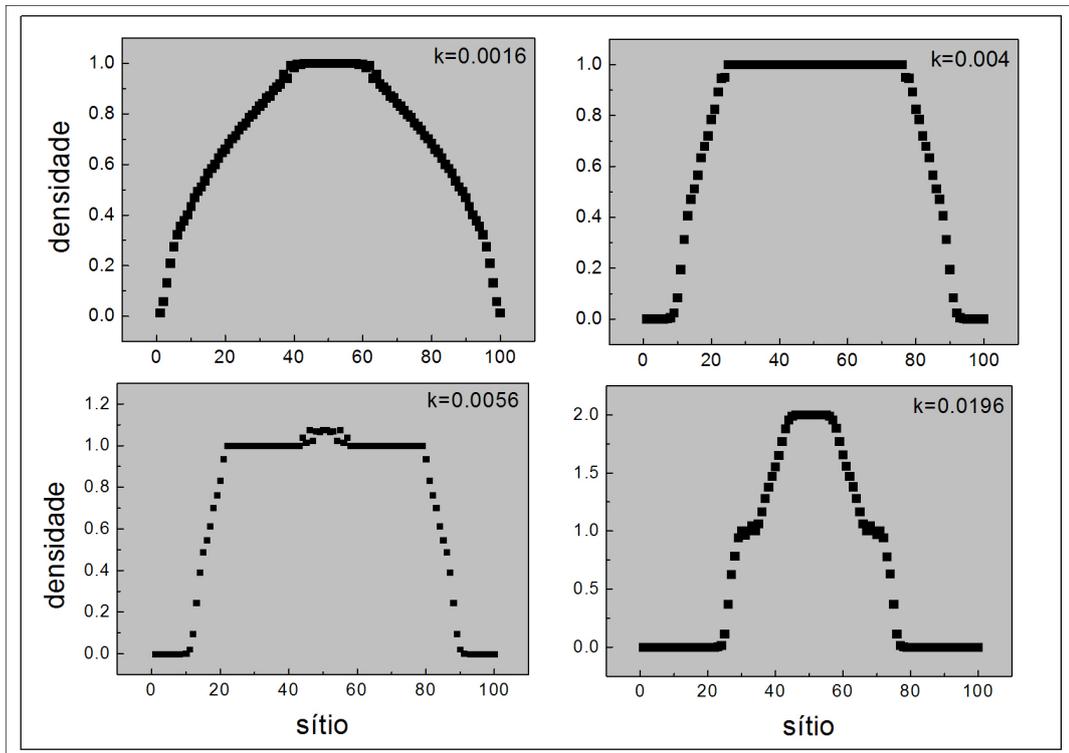


**Figura 28** – Emaranhamento  $\bar{S}^{LDA}$  de uma cadeia aberta com  $L = 100$ ,  $n = 0.7$  e  $U = 8$ , em função da curvatura  $k$  do potencial harmônico  $V_i = k(i - i_0)^2$ .



**Figura 29** – Derivada numérica do emaranhamento (Figura 28) com relação à curvatura  $k$  do potencial,  $\partial\bar{S}^{LDA}/\partial k$ . Em destaque alguns picos na derivada.

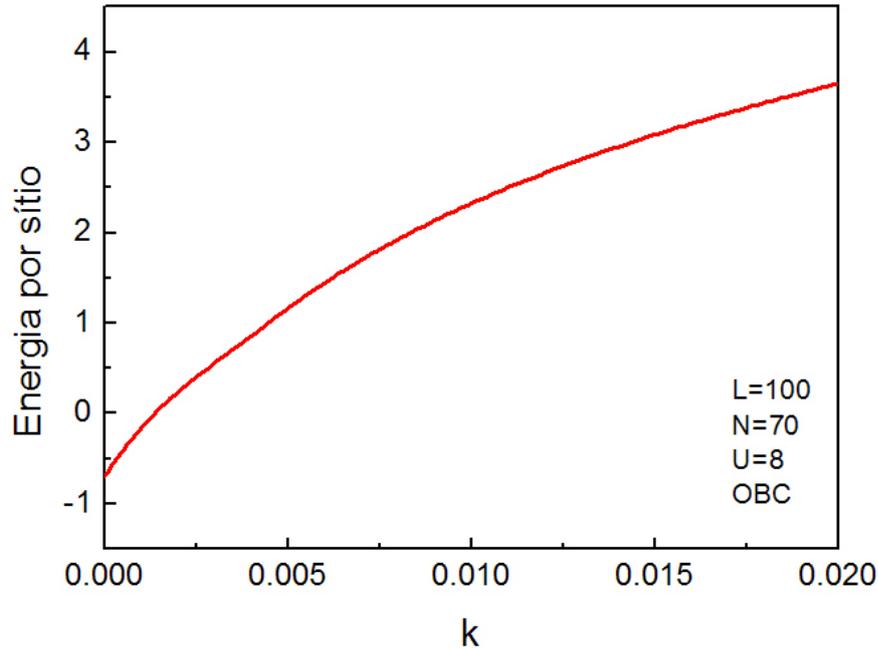
Para compreender os picos que surgem na derivada de emaranhamento, destacados na Figura 29, analisamos o perfil de densidades ao longo da cadeia para cada valor de  $k$  correspondente. Observamos que cada pico na derivada do emaranhamento está relacionado com uma estrutura de densidades diferente, como mostra a Figura 30. O primeiro pico, em  $k = 0.0016$ , corresponde a um regime de transição metal-isolante, em que o sistema começa a ter alguns sítios com densidade congelada em  $n_i = 1$ . O segundo pico na derivada,  $k = 0.004$ , representando um platô no emaranhamento, ocorre quando muitos sítios estão congelados na densidade  $n_i = 1$ . À medida que aumentamos ainda mais o confinamento,  $k = 0.0056$ , conseguimos finalmente forçar sítios com  $n_i > 1$ , as partículas tornam-se novamente mais itinerantes, numa fase quase-metálica, aumentando o emaranhamento. O último pico representa uma diminuição do emaranhamento quando alguns sítios possuem ocupação  $n_i = 2$ , caracterizando uma fase isolante por ocupação máxima (isolante de banda), em  $k = 0.0196$ .



**Figura 30** – Perfil de densidade na cadeia para cada curvatura  $k$  do confinamento harmônico associada a um pico na derivada de emaranhamento.

Esses diferentes perfis da densidade foram observados e analisados anteriormente (60). A novidade consiste em poder identificá-las a partir do emaranhamento. A energia, por

exemplo, não faz qualquer distinção entre as fases, como podemos ver na Figura 31. Concluimos portanto, que o emaranhamento além de ser uma testemunha de transições de fase quânticas (26, 61, 62), como mencionado anteriormente, é também um indicador de fases mais sutis, como estas da distribuição de densidades.



**Figura 31** – Energia do estado fundamental por sítio,  $e_0$ , em função da curvatura  $k$  do confinamento harmônico, em uma cadeia aberta com  $L = 100$ ,  $N = 70$  e  $U = 8$ .

## 4.5 Sumário dos Resultados

Neste capítulo, visando o estudo do emaranhamento em sistemas inomogêneos, apresentamos a proposta de uma LDA para a entropia de emaranhamento e, aplicando ao modelo de Hubbard finito e comparando com resultados exatos, mostramos que é uma excelente aproximação e uma ferramenta poderosa para o estudo de inomogeneidades mais complexas. Aplicamos então a LDA para a entropia do modelo de Hubbard não-uniforme e exploramos superredes, impurezas e confinamento harmônico.

Em superredes encontramos que o emaranhamento é mais sensível às variações locais no potencial externo que às variações locais na interação entre as partículas. Obser-

---

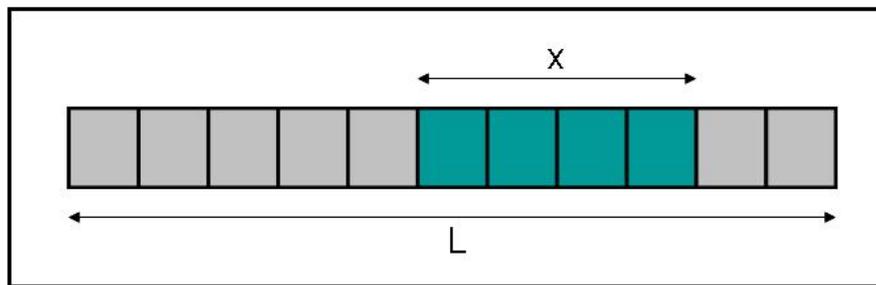
vamos que impurezas, assim como superredes, prejudicam a itinerância das partículas, diminuindo o emaranhamento. Por fim, estudando o emaranhamento no sistema harmonicamente confinado, encontramos que o emaranhamento não é apenas uma testemunha de QPT, mas também é capaz de apontar para transições suaves, como as diferentes fases observadas na distribuição de densidades. Estes resultados foram publicados em 2008 na revista *Physical Review Letters* (63).

No próximo capítulo estendemos nossa análise para o emaranhamento entre blocos de sítios, começando com a definição deste tipo de emaranhamento. Em seguida analisamos suas contribuições universal e não-universal, vinculando o emaranhamento entre blocos e o emaranhamento de um único sítio. Por fim, propomos uma LDA para o emaranhamento entre blocos de sistemas inomogêneos.



## 5 *Emaranhamento entre Blocos*

Nos dois capítulos anteriores estudamos o emaranhamento de um único sítio com relação ao restante da cadeia. Agora consideraremos o caso em que o sistema  $A$  é definido por um bloco de  $x$  sítios e o sistema  $B$  é formado pelo restante da cadeia, com  $L - x$  sítios, como ilustra a Figura 32. Assim, o *emaranhamento entre blocos* é definido como o emaranhamento entre o bloco  $x$  e o restante do sistema  $L - x$ .



**Figura 32** – Ilustração de uma cadeia de tamanho  $L$  cujo emaranhamento de blocos é definido entre o bloco  $x$  e o restante da cadeia  $L - x$ .

O estudo de emaranhamento entre blocos tem sido feito numericamente (47, 64, 65, 66). Através da teoria de campo conforme (67) porém, Calabrese e Cardy (CC) (68) obtiveram uma expressão analítica e exata para a entropia de emaranhamento de blocos em uma cadeia finita,

$$S(x, L) = \frac{c}{3} \log_2 \left[ \frac{L}{\pi} \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) \right] + s_1, \quad (5.1)$$

válida para qualquer sistema de tamanho finito  $L$ , com  $L \gg x$  e condições periódicas de contorno, onde  $c$  é a carga central (67) e  $s_1$  é uma constante em  $x$  e  $L$ , dependente exclusivamente das características específicas do sistema, e que até então permanecia totalmente indeterminada. Já o primeiro termo do lado direito da Eq.(5.1) é universal, ou seja, independe do sistema físico.

No contexto da Física Estatística, a fórmula de CC, Eq.(5.1), foi amplamente estudada (69, 65, 66), mas na maioria dos casos apenas o termo universal era explorado, já que o termo não-universal  $s_1$  é constante nas dimensões  $x$  e  $L$ . Além disso, embora seja uma expressão para sistemas finitos, ainda não é possível usá-la para a análise de sistemas inhomogêneos, tais quais estudados no capítulo anterior.

Nas próximas seções comparamos as contribuições universal e não-universal do emaranhamento, mostramos como é possível relacionar  $s_1$  à entropia de emaranhamento de um único sítio do sistema homogêneo e apresentamos os resultados do emaranhamento de blocos no caso particular do modelo de Hubbard homogêneo. Por fim, apresentamos uma proposta LDA para o cálculo do emaranhamento entre blocos de sistemas inhomogêneos.

## 5.1 Contribuições Universal e Não-Universal do Emaranhamento

A fórmula de CC para a entropia de emaranhamento entre blocos, Eq.(5.1), fornece o emaranhamento em função do tamanho total do sistema  $L$  e do tamanho do bloco  $x$ , mas qualquer dependência com o número de partículas no sistema, com a interação entre as partículas ou com campos externos, permanece desconhecida e contida no termo  $s_1$ . Além disso, a princípio nada podemos afirmar sobre a contribuição relativa de  $s_1$  e do termo universal, qual deles desempenha papel mais importante e para quais parâmetros isso acontece.

Para entender a relevância de cada contribuição, universal e não-universal, para a entropia de emaranhamento, consideramos o emaranhamento de um único sítio ( $x = 1$ ) do modelo de Hubbard homogêneo,

$$\hat{H} = -t \sum_{ij\sigma} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (5.2)$$

explorado no Capítulo 3. Para uma cadeia pequena, de até 15 sítios, podemos calcular exatamente o emaranhamento de um único sítio,  $S^{exato}(x = 1, L; n, U)$ , através da diagonalização exata do Hamiltoniano Eq.(5.2), para uma dada densidade  $n$  e interação  $U$ . Por

outro lado, especificando apenas  $x$  e  $L$ , podemos calcular o termo universal para o modelo de Hubbard,

$$S^{univ}(x, L) = \frac{c}{3} \log_2 \left[ \frac{L}{\pi} \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) \right], \quad (5.3)$$

diretamente da fórmula de CC. A carga central para o modelo de Hubbard (70) é  $c = 2$  para  $n \neq 1$  e  $c = 1$  para  $n = 1$ , para qualquer interação  $U \neq 0$ . Em  $U = 0$ , a carga central é  $c = 2$  para qualquer  $n$ . Então, comparando o resultado exato com o termo universal, podemos inferir sobre a relevância do termo não-universal  $s_1$ .

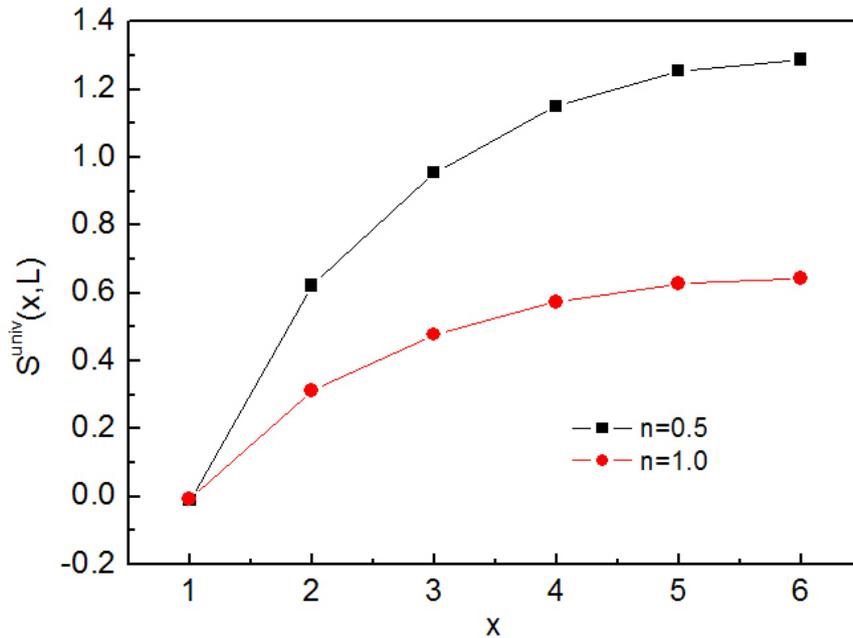
Assim, apresentamos na Tabela 3 o termo universal, a entropia de emaranhamento exata e o desvio entre elas, para  $x = 1$ ,  $U = 4$  e alguns valores de  $L$  e  $n$ . Observamos que o termo universal tem uma contribuição muito pequena para o emaranhamento total. Concluimos então que o termo não-universal  $s_1$  é o principal responsável pela entropia de emaranhamento de um único sítio ( $x = 1$ ), enquanto o termo universal é quase irrelevante.

**Tabela 3** – Contribuição universal,  $S^{univ}(x = 1, L)$ , e resultado exato para a entropia de emaranhamento de um único bloco,  $x = 1$ , para cadeias com condição periódica de contorno, interação  $U = 4$  e diferentes densidades  $n$  e tamanhos  $L$ .

$n$	$L$	$S^{univ}$	$S^{exato}$	Desvio (%)
0.5	4	-0.101	1.541	106.5
	8	-0.025	1.564	101.6
	12	-0.011	1.576	100.7
1.0	4	-0.050	1.594	103.1
	8	-0.012	1.701	100.7
	12	-0.005	1.718	100.3

Note, entretanto, que para valores de  $x > 1$  e um tamanho  $L$  fixo, o termo universal cresce, como mostra a Figura 33, para duas densidades diferentes. Assim, é fundamental analisar as contribuições universal e não-universal em sistemas com  $x \neq 1$ . Para isso usamos os resultados exatos da Ref.(47) para a entropia de emaranhamento entre blocos do modelo de Hubbard homogêneo, calculada numericamente via diagonalização exata. De forma semelhante ao que fizemos para o caso de  $x = 1$ , comparamos na Tabela 4 o resultado exato com o termo universal, mas agora em função de  $x$ , para  $L = 10$ ,  $n = 1$  e  $U = 0$ .

Observamos que o termo universal é cada vez mais relevante para o emaranhamento total à medida que o tamanho do bloco aumenta. Mas ainda assim, sua maior contribuição em  $x = 5$ ,  $S^{univ}(x = 5) = 1.114$ , corresponde a menos de 40% do emaranhamento total,  $S^{exato}(x = 5) = 3.22$ . Esse resultado ressalta a importância da determinação da constante  $s_1$ .



**Figura 33** – Termo universal do emaranhamento entre blocos, Eq.(5.3), em função do tamanho  $x$  do bloco, para um sistema finito qualquer de tamanho  $L = 12$ .

**Tabela 4** – Contribuição universal e resultado exato para a entropia de emaranhamento entre o bloco  $x$  e o restante da cadeia no modelo de Hubbard homogêneo, com  $U = 0$ ,  $L = 10$  e  $n = 1$ .

$x$	$S^{univ}$	$S^{exato}$	Desvio (%)
1	-0.016	2.00	100.8
2	0.602	2.69	77.6
3	0.910	3.02	69.9
4	1.065	3.17	66.4
5	1.114	3.22	65.4

Usamos considerações muito simples para obter o termo não-universal  $s_1$ . Primeiro,

observamos que a fórmula de CC para  $L \rightarrow \infty$  torna-se

$$S(x, L \rightarrow \infty) = \frac{c}{3} \log_2(x) + s_1, \quad (5.4)$$

onde usamos  $\text{sen}(y) \approx y$  para  $y \rightarrow 0$ . Então o termo não-universal  $s_1$  é dado por

$$s_1 = S(x, L \rightarrow \infty) - \frac{c}{3} \log_2(x). \quad (5.5)$$

Outro aspecto importante é que, no limite  $L \gg x$ , a expressão de CC Eq.(5.1) é exata e  $s_1$  independe das dimensões  $x$  e  $L$ . Portanto, embora ainda exista  $x$  no lado direito da Eq.(5.5),  $s_1$  é constante em  $x$ . Isso significa que a Eq.(5.5) fornecerá o mesmo resultado para  $s_1$ , qualquer que seja nossa escolha de  $x$ . Escolhamos portanto o caso mais conveniente,  $x = 1$ , para o qual o termo  $c/3 \log_2(1) = 0$ . Assim, no limite de  $L \gg x$ , a constante  $s_1$  pode ser escrita em termos do emaranhamento de um único sítio do sistema homogêneo,  $S^{\text{hom}}(x = 1)$ ,

$$s_1 = S(x = 1, L = \infty) \equiv S^{\text{hom}}(x = 1), \quad (5.6)$$

que é constante em  $x$  e  $L$ , mas depende dos parâmetros específicos do sistema.

A dedução apresentada acima para  $s_1$  é totalmente geral, válida para qualquer sistema. Assim, introduzindo a Eq.(5.6) na fórmula de CC, obtemos uma expressão para a entropia de emaranhamento entre blocos de um sistema finito,

$$S(x, L) = \frac{c}{3} \log_2 \left[ \frac{L}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) \right] + S^{\text{hom}}(x = 1), \quad (5.7)$$

cuja dependência com os parâmetros específicos do sistema agora não está em um termo indeterminado, mas em uma função com significado muito bem definido: a entropia de emaranhamento de um único sítio no limite homogêneo ( $L \rightarrow \infty$ ).

Considerando que conhecemos explicitamente a expressão da entropia de emaranhamento de um único sítio para o modelo de Hubbard homogêneo, Eq.(3.19), na próxima seção analisamos o emaranhamento entre blocos no modelo de Hubbard, a partir da expressão Eq.(5.7).

## 5.2 Entropia de Emaranhamento entre Blocos para o Modelo de Hubbard

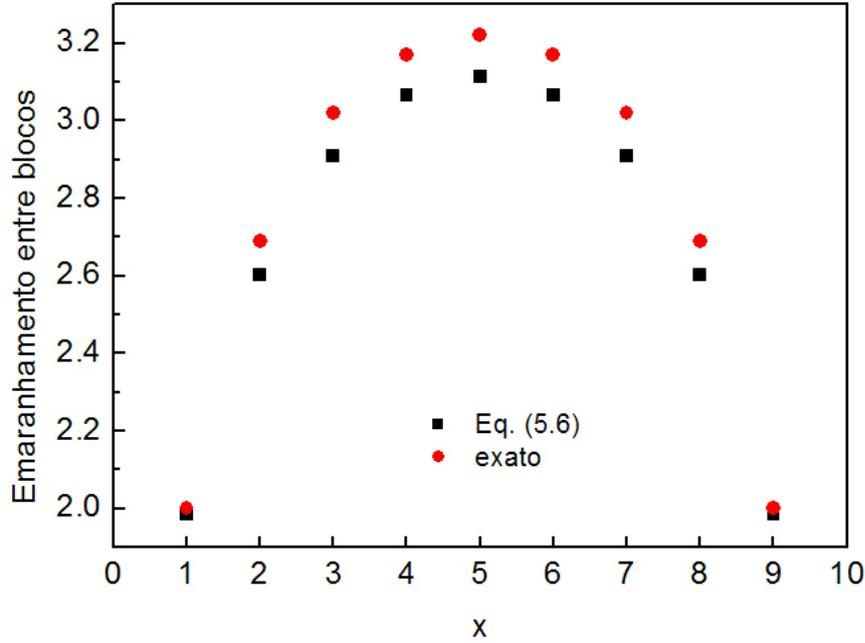
No Capítulo 3 vimos que a entropia de emaranhamento do modelo de Hubbard homogêneo, Eq.(3.19), é uma função da densidade, da magnetização e da interação do sistema,  $S^{hom}(n, m, U)$ . Dessa forma, a entropia de emaranhamento entre blocos do modelo de Hubbard finito é dada por

$$S(x, L; n, U) = \frac{c}{3} \log_2 \left[ \frac{L}{\pi} \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) \right] - 2 \left( \frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} \right) \log_2 \left[ \frac{n}{2} - \frac{\partial e_0}{\partial U} \right] - \left( 1 - n + \frac{\partial e_0}{\partial U} \right) \log_2 \left[ 1 - n + \frac{\partial e_0}{\partial U} \right] - \frac{\partial e_0}{\partial U} \log_2 \frac{\partial e_0}{\partial U} \quad (5.8)$$

onde substituímos a Eq.(3.19) na Eq.(5.7), considerando apenas o caso sem campo magnético externo,  $m = 0$ . O primeiro termo do lado direito da Eq.(5.8) vem da teoria conforme e carrega informação sobre a geometria do sistema, através de  $x$  e  $L$ . Os demais termos vem da solução Bethe-Ansatz e contêm informação sobre as interações entre as partículas, através de  $U$  e  $n$ . Para a completa descrição do sistema, a Eq.(5.8) deveria conter também um termo de correção de tamanho finito, que não pode ser obtido nem da teoria conforme, nem da solução Bethe-Ansatz, mas pode ser estimado através da diagonalização exata de sistemas pequenos, como mostraremos a seguir.

Assim, usando a Eq.(5.8), podemos calcular o emaranhamento entre blocos do modelo de Hubbard finito, para qualquer conjunto de parâmetros  $n, U$ . Apresentamos na Figura 34 a comparação entre o emaranhamento calculado através da Eq.(5.8) e o resultado exato (47) em função do tamanho do bloco, para o modelo de Hubbard finito em  $n = 1$  e  $L = 10$ . Observamos que o emaranhamento aumenta à medida que o tamanho do bloco aumenta e que é máximo em  $x = L/2$ . Isso ocorre porque, quanto maior o número  $x$  de sítios do bloco, maior o número de possíveis estados (cuja base é  $4^x$ ) e, portanto, maior o emaranhamento. A partir de  $x > L/2$  observamos a simetria  $S(x) = S(L - x)$ , condição fundamental para garantir a reciprocidade do emaranhamento,  $S_A = S_B$ , como postulado no Capítulo 2.

Além disso, verificamos que nossa Eq.(5.8) reproduz muito bem os resultados exatos para  $x < L/2$ , mas à medida que  $x \rightarrow L/2$  a reprodução torna-se menos fiel. Isso se



**Figura 34** – Entropia de emaranhamento de um bloco de tamanho  $x$  em um sistema finito de tamanho  $L = 10$ , com  $n = 1$  e  $U = 0$ . Comparação entre o resultado exato e o calculado através da Eq.(5.8).

deve ao fato de que as equações Eq.(5.1) e Eq.(5.8) são exatas apenas no limite em que  $L \gg x$ , o que definitivamente não é o caso em  $x = L/2$ . Seria preciso adicionar um termo de correção de tamanho finito às expressões Eq.(5.1) e Eq.(5.8) para que tivesse melhor desempenho em regiões em que a condição  $L \gg x$  não é satisfeita. Ainda assim, o desvio máximo é inferior a 4%, como mostra a Tabela 5. Portanto podemos considerar que, no limite em que  $x$  e  $L$  não satisfazem a relação  $L \gg x$  e, conseqüentemente, a dedução Eq.(5.6) e a Eq.(5.8) deixam de ser exatas, ainda assim a Eq.(5.8) pode ser considerada como uma boa aproximação para a entropia de emaranhamento de sistemas finitos.

Finalmente, agora que conhecemos o termo não-universal  $s_1$ , podemos comparar explicitamente os desvios das duas contribuições. Na Tabela 4 apresentamos anteriormente o desvio do termo universal para o modelo de Hubbard em  $L = 10$ ,  $n = 1$  e  $U = 0$ . Para os mesmos parâmetros, o termo não-universal é dado por  $s_1 = S^{hom}(n = 1, U = 0) = 2$ . Juntando os resultados, apresentamos na Tabela 6 os desvios para as duas contribuições. Claramente, apesar do termo universal tornar-se mais relevante à medida que  $x$  aumenta,

**Tabela 5** – Desvio do emaranhamento entre blocos ( Eq.(5.8)) com relação aos resultados exatos para  $U = 0$ ,  $n = 1$  e  $L = 10$ .

$x$	$S(x, L; n, U)$	Exata	Desvio (%)
1	1.984	2.00	0.8
2	2.602	2.69	3.3
3	2.910	3.02	3.6
4	3.065	3.17	3.3
5	3.114	3.22	3.3

a contribuição não-universal continua sendo o termo mais importante para o emaranhamento total.

**Tabela 6** – Desvio das contribuições universal ( $S^{univ}$ ) e não-universal ( $s_1$ ) com relação ao emaranhamento total exato, para  $U = 0$ ,  $n = 1$  e  $L = 10$ , com  $s_1 = S^{hom}(n = 1, U = 0) = 2$ .

$x$	Exata	$S^{univ}$	Desvio $S^{univ}$ (%)	Desvio $s_1$ (%)
1	2.00	-0.016	100.8	0.0
2	2.69	0.602	77.6	25.6
3	3.02	0.910	69.9	33.8
4	3.17	1.065	66.4	36.9
5	3.22	1.114	65.4	37.9

### 5.3 LDA para a Entropia de Emaranhamento entre Blocos

No Capítulo 4 apresentamos a proposta de uma LDA para a entropia de emaranhamento de um único sítio ( $x = 1$ ) e exploramos diversas inomogeneidades no modelo de Hubbard. Mesmo para cadeias pequenas,  $L = 12$ , o desvio do emaranhamento médio de um único sítio foi de apenas  $\approx 0.2\%$ . Note contudo que a LDA, Eq.(4.1), foi formulada em termos da função homogênea<sup>1</sup>  $S^{hom}(n, m, U)$ , que agora sabemos tratar-se da constante  $s_1$  da expressão de CC Eq.(5.1). Assim, para a descrição completa dos sistemas inomogêneos, deveríamos ter considerado também, de alguma forma, o termo universal. Porém,

<sup>1</sup> É importante ressaltar que a LDA não consiste em aproximar o sistema inomogêneo pelo sistema homogêneo. Para aproximar um funcional  $F[n]$  usando LDA, usa-se  $f^{hom}(n) = \lim_{V \rightarrow \infty} F^{hom}(n)/V$ , onde  $V$  é o volume, mas substituindo a densidade  $n$  do sistema homogêneo pela densidade  $n_i$  do sistema inomogêneo.

na seção anterior vimos que o termo universal tem pouca contribuição ao emaranhamento em  $x = 1$ . Isso explica porque a aplicação da LDA para o emaranhamento de um único sítio apenas sobre o termo *não-universal*,  $s_1 = S^{hom}$ , funcionou tão bem para a análise de sistemas inhomogêneos.

Não podemos esperar, entretanto, que a LDA na forma definida para o emaranhamento de um único sítio seja válida para blocos, pois à medida que  $x$  aumenta, a contribuição do termo universal torna-se relevante para o emaranhamento total (Tabela 6). Existem ao menos duas possíveis maneiras de incluir o termo universal à LDA para o emaranhamento entre blocos. A mais simples é apenas acrescentando à LDA anterior,

$$S^{LDA}(x = 1; n, m, U) = \sum_i^L S^{hom}(n, m, U)|_{n \rightarrow n_i}, \quad (5.9)$$

o termo universal:

$$S_1^{LDA}[x, L; n, m, U] = MS^{univ}(x, L) + \sum_i^L S^{hom}(n, m, U)|_{n \rightarrow n_i}, \quad (5.10)$$

onde  $M = L/x$  é o número total de blocos.

Uma forma mais geral de incluir o termo universal, consiste em generalizar a formulação antiga, formulando uma LDA para o emaranhamento entre blocos de sistemas inhomogêneos,

$$S_2^{LDA}(x, L; n, m, U) = \sum_x^M \left[ S^{univ}(x, L) + S^{hom}(n, m, U) \right] |_{n \rightarrow n_x}, \quad (5.11)$$

construída sobre a expressão completa Eq.(5.7), onde  $n_x = N_x/x$  é a densidade do bloco  $x$  no sistema inhomogêneo e  $N_x$  é o número total de partículas no bloco  $x$ .

O termo universal independe da densidade, de forma que podemos tirá-lo da somatória. Podemos também decompor a soma feita nos blocos pela soma nos sítios:

$$\sum_x^M \rightarrow \frac{1}{x} \sum_i^L, \quad (5.12)$$

de forma que o segundo termo do lado direito da Eq.(5.11) torna-se

$$\frac{1}{x} \sum_i^L S^{hom}(n, m, U)|_{n \rightarrow n_i} = \frac{1}{x} S^{LDA}(x = 1; n, m, U). \quad (5.13)$$

Portanto, a LDA para a entropia de emaranhamento entre blocos de sistemas inhomogêneos torna-se

$$S_2^{LDA}(x, L; n, m, U) = MS^{univ}(x, L) + \frac{1}{x} S^{LDA}(x = 1; n, m, U), \quad (5.14)$$

onde o termo universal é dado por

$$S^{univ}(x, L) = \frac{c}{3} \log_2 \left[ \frac{L}{\pi} \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) \right]. \quad (5.15)$$

As equações Eq.(5.10) e Eq.(5.14) podem ser usadas para o cálculo do emaranhamento entre blocos de qualquer sistema inhomogêneo, desde que saibamos a expressão do emaranhamento de um único sítio no limite homogêneo. Não sabemos qual das aproximações,  $S_1^{LDA}$  ou  $S_2^{LDA}$ , é a melhor forma de tratar o emaranhamento entre blocos em sistemas não-uniformes. Mas, para o modelo de Hubbard, para o qual conhecemos  $S^{hom}(x = 1; n, m, U)$ , poderemos, em trabalhos futuros, testar as duas abordagens e ainda explorar a entropia de emaranhamento entre blocos na presença de inhomogeneidades.

## 5.4 Sumário dos Resultados

Neste capítulo definimos a entropia de emaranhamento entre blocos, apresentamos a expressão analítica de Calabrese-Cardy para sistemas finitos e comparamos as contribuições universal e não-universal do emaranhamento. Determinamos explicitamente o termo não-universal em função da entropia de emaranhamento de um único sítio no limite infinito, calculamos o emaranhamento de blocos para o modelo de Hubbard homogêneo e propusemos uma generalização da LDA para o emaranhamento entre blocos de sistemas inhomogêneos.

As comparações dos termos universal e não-universal mostraram que a contribuição universal é praticamente irrelevante para o emaranhamento de um único sítio, mas torna-se cada vez mais importante à medida que consideramos blocos de sítios maiores. Especifica-

mente para o modelo de Hubbard, verificamos que mesmo para  $x = L/2$  a contribuição do termo não-universal, que contém informações específicas do sistema, ainda corresponde a mais de 60% do emaranhamento total. Com isso concluímos que a determinação do termo não-universal é fundamental para a completa descrição do emaranhamento, e, com considerações muito simples, encontramos que este termo representa o emaranhamento de um único sítio no limite homogêneo. Obtivemos então a expressão Eq.(5.8) para o modelo de Hubbard, que apresentou excelente concordância com resultados exatos, no regime de validade  $x \ll L$ . Finalmente propusemos uma LDA para a entropia de emaranhamento entre blocos, válida para qualquer sistema inhomogêneo, que pode ser a base para futuros estudos de emaranhamento em sistemas não-uniformes. Estes resultados foram publicados em 2008 na revista *Physical Review A* (71).

Todos os resultados apresentados até aqui representam o estudo do emaranhamento a partir da entropia de emaranhamento  $S$ . No próximo capítulo apresentamos resultados preliminares do estudo do emaranhamento através de um *indicador de emaranhamento*, formado pela combinação de componentes de energia: energia de troca e correlação, energia de Hartree e energia cinética.



## 6 *Energia como indicador de emaranhamento*

O estudo do emaranhamento é fundamental para o desenvolvimento da Informação e Computação Quântica, entretanto, como discutimos nas primeiras seções do Capítulo 2, apenas em alguns casos específicos existe consenso sobre a melhor grandeza para quantificar emaranhamento. Até no caso de um sistema *bipartite* e com estado total puro, em que a entropia de emaranhamento é considerada a melhor maneira de calcular o emaranhamento, ainda existem dificuldades técnicas, como por exemplo obter a matriz densidade reduzida do subsistema. Portanto, é comum a busca por quantidades alternativas, que dêem uma indicação sobre o emaranhamento. Esses *indicadores ou testemunhas de emaranhamento* em geral não fornecem exatamente o emaranhamento, mas indicam qualitativamente as regiões de emaranhamento máximo, mínimo e intermediário.

Recentemente nossa colaboradora Dra. Irene D’Amico, da Universidade de York, Inglaterra, e seu estudante de doutorado Jeremy Coe, estudando o emaranhamento espacial entre os elétrons do átomo de Hooke (72), encontraram que a razão entre a energia de troca e correlação e a energia total,  $|E_{XC}/E|$ , funciona como um indicador de emaranhamento.

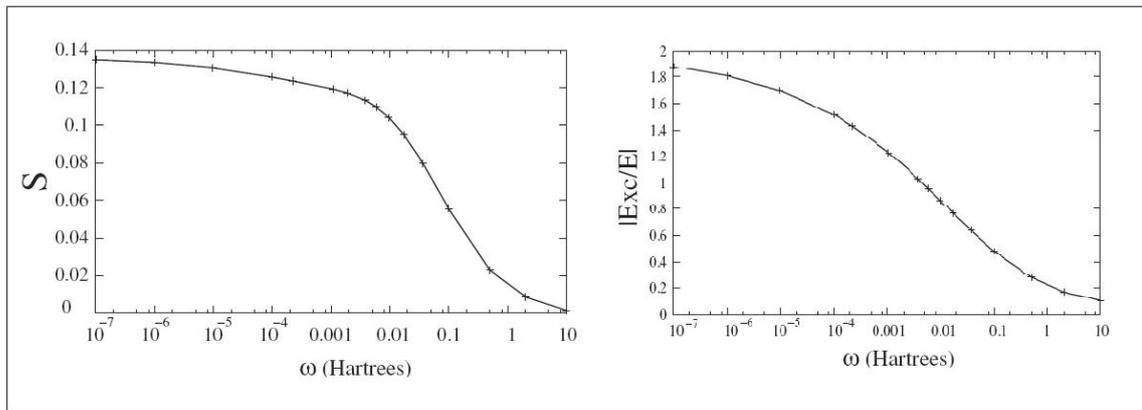
O átomo de Hooke, descrito pelo Hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 + \frac{1}{2}\omega^2 r_1^2 + \frac{1}{2}\omega^2 r_2^2 + \frac{1}{|r_1 - r_2|}, \quad (6.1)$$

descreve dois elétrons confinados por um potencial harmônico, com frequência  $\omega$ . Os dois primeiros termos representam as energias cinéticas das partículas 1 e 2, os dois próximos termos são as energias devido ao potencial harmônico e o último termo é a energia de interação entre os dois elétrons.

Considerando cada elétron como um subsistema, J. P. Coe, A. Sudbery, e I. D' Amico (72) calcularam a entropia de emaranhamento  $S$ , Eq.(2.6), e observaram que o emaranhamento diminui com  $\omega$  de forma semelhante à quantidade  $|E_{XC}/E|$ , como mostra a Figura 35. O comportamento não é idêntico, mas  $|E_{XC}/E|$  é capaz de indicar ao menos as regiões onde o emaranhamento é máximo, mínimo e intermediário.

Durante um estágio de doutorado em York<sup>1</sup>, investigamos a quantidade  $|E_{XC}/E|$  no modelo de Hubbard e observamos que neste caso a razão de energias *não* é um indicador de emaranhamento. Buscando entender as diferenças entre os modelos e a relação entre emaranhamento e energias, encontramos uma combinação ( $I$ ) entre as energias de troca e correlação, de Hartree e cinética de Thomas-Fermi, por sítio,  $I = e_{XC} - 1/2e_H - t^{TF}$ , que tem o mesmo comportamento do emaranhamento em função da inomogeneidade. Ao contrário do indicador  $|E_{XC}/E|$  para o átomo de Hooke, observamos que  $I$  não é apenas um indicador qualitativo de emaranhamento, mas fornece praticamente o comportamento quantitativo do emaranhamento, a menos de uma constante, para o modelo de Hubbard inomogêneo, qualquer que seja a inomogeneidade.

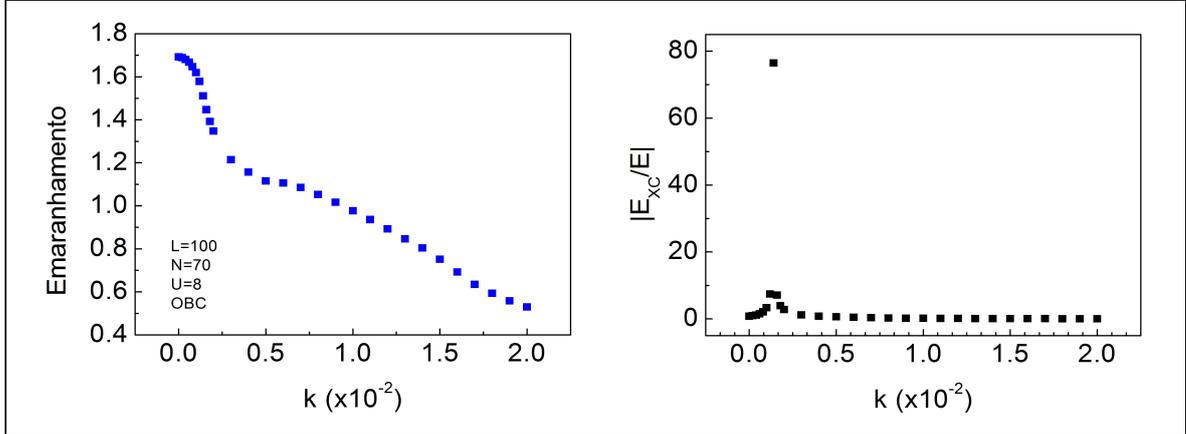


**Figura 35** – Emaranhamento e razão de energias  $|E_{XC}/E|$  em função da frequência de oscilação  $\omega$  do átomo de Hooke.

Na tentativa de encontrar, para o modelo de Hubbard, um resultado semelhante ao da Figura 35, consideramos inicialmente a inomogeneidade que torna o Hubbard mais próximo possível do átomo de Hooke, ou seja, confinamento harmônico  $V = kx^2$ , onde  $k$  e  $\omega$  se relacionam por  $\omega^2 = k/m$ . Calculamos então o emaranhamento médio de um

<sup>1</sup> O estágio foi realizado no período de abril a julho/2008 e suportado pela agência CAPES.

único sítio com relação ao restante da cadeia, com  $L = 100$ ,  $N = 70$ ,  $U = 8$  e OBC, como apresentado na Seção 4.4. No entanto, observamos que  $|E_{XC}/E|$  comporta-se de maneira muito diferente do emaranhamento com relação a  $k$ , Figura 36.

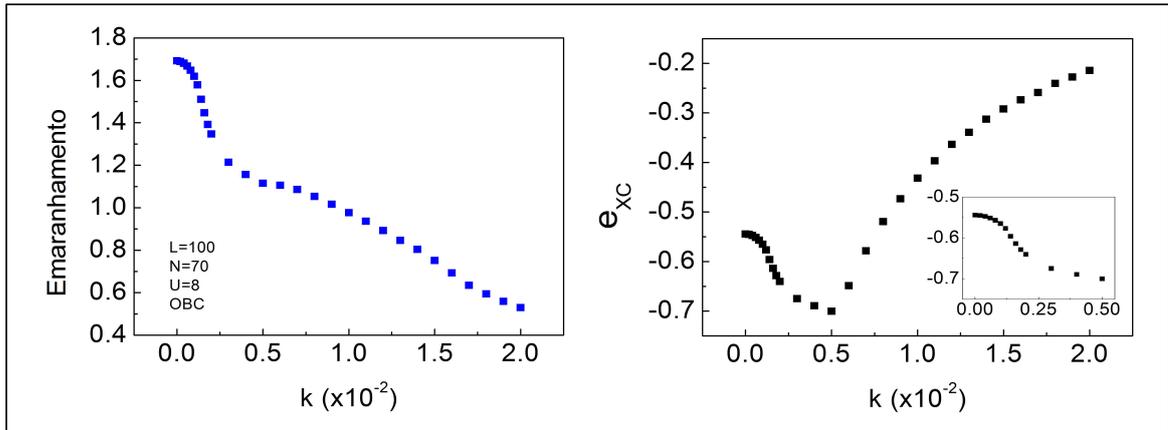


**Figura 36** – Emaranhamento e razão de energias  $|E_{XC}/E|$  em função da curvatura  $k$  do modelo de Hubbard sob confinamento harmônico,  $V = kx^2$ . A divergência de  $|E_{XC}/E|$  em torno de  $k = 0.0015$  deve-se ao fato de que  $E$  passa por zero, como mostramos na Figura 31.

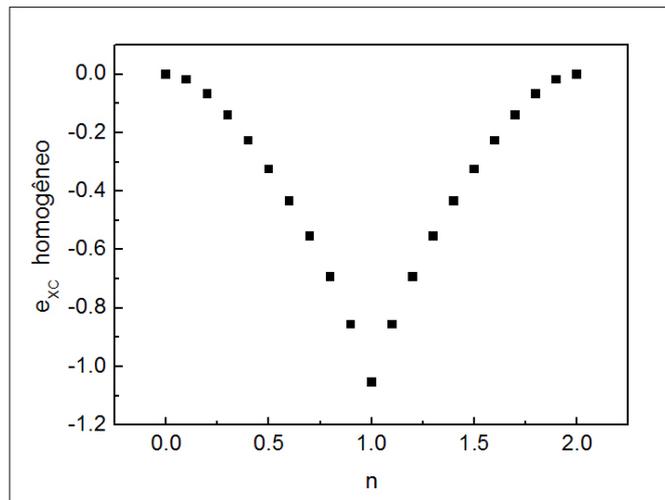
Porém, mapeando apenas a energia de troca e correlação<sup>2</sup> por sítio  $e_{XC}$ , Figura 37, observamos que para baixos valores de  $k$  o comportamento é parecido com o do emaranhamento, mas a partir de um certo valor crítico  $k_c \approx 0.005$  o comportamento de  $e_{XC}$  inverte e as duas grandezas perdem sua similaridade. Voltando à análise das densidades, Figura 30, verificamos que  $k_c$  corresponde ao regime da transição metal-isolante de Mott, em que alguns sítios passam a ter densidade  $n_i > 1$ .

A energia de troca e correlação, para um sistema uniforme,  $U_i = U$  e  $t_{ij} = t$ , é simétrica com relação à densidade em  $n = 1$ , como podemos ver na Figura 38. Esse comportamento de  $E_{XC}$  é particular do modelo de Hubbard, devido à restrição de que um sítio pode ser ocupado por no máximo duas partículas. Portanto, a inversão observada na Figura 37, para valores de  $k$  em que existem sítios com densidades  $n_i > 1$ , é um reflexo da simetria partícula-buraco em  $n_i = 1$ .

<sup>2</sup> Relembramos que a energia de troca no modelo de Hubbard é nula, conforme nota de rodapé da Seção 2.4.4, existe apenas energia de correlação. Mas mantivemos a denominação mais geral de energia de troca e correlação.



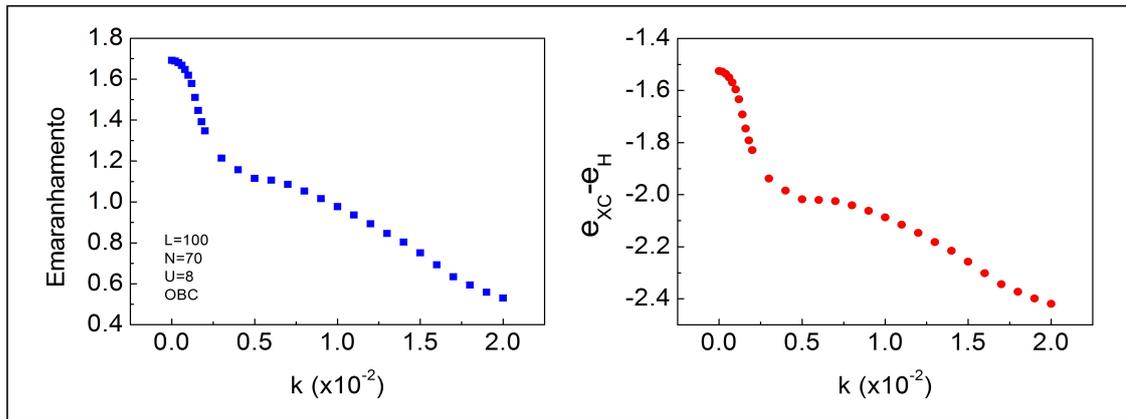
**Figura 37** – Emaranhamento e energia de troca e correlação por sítio  $e_{XC}$  em função da curvatura  $k$  do modelo de Hubbard sob confinamento harmônico,  $V = kx^2$ .



**Figura 38** – Comportamento da energia de troca e correlação por sítio em função da densidade para o modelo de Hubbard homogêneo ( $L = \infty$  e  $V = 0$ ), com  $U_i = U = 8t$  e  $t_{ij} = t = 1$ .

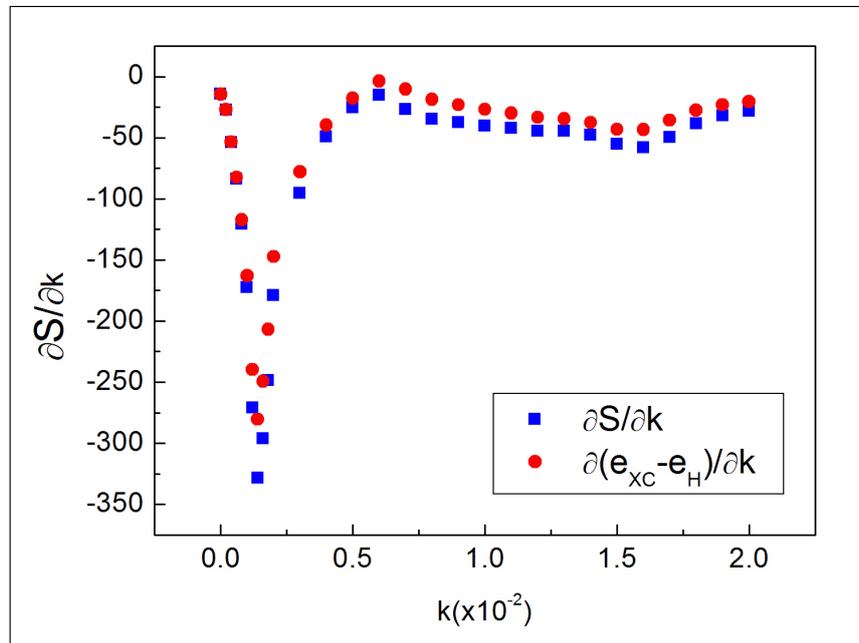
Considerando que a estrutura observada no emaranhamento em função de  $k$  (Figuras 28, 36 e 37) deve-se à restrição de máxima ocupação e à transição metal-isolante em  $n = 1$ , supusemos então que para recuperar a informação completa do emaranhamento, precisaríamos considerar não só  $e_{XC}$ , mas também a energia de Hartree  $e_H$ , uma vez que juntas correspondem à energia de interação do sistema.

Encontramos o surpreendente resultado de que a *diferença*  $e_{XC} - e_H$  tem praticamente o mesmo comportamento que o emaranhamento, como pode-se observar na Figura 39. De



**Figura 39** – Análise de  $e_{XC} - e_H$  em função da curvatura  $k$ , comparado com o emaranhamento em função de  $k$ , para o modelo de Hubbard sob potencial harmônico.

fato se calculamos as derivadas  $\partial S/\partial k$  e  $\partial(e_{XC} - e_H)/\partial k$ , verificamos que inclusive a taxa do decaimento do emaranhamento é bem reproduzido por  $e_{XC} - e_H$ , como mostra a Figura 40.



**Figura 40** – Derivadas  $\partial S/\partial k$  e  $\partial(e_{XC} - e_H)/\partial k$  em função de  $k$ , para o modelo de Hubbard sob potencial harmônico.

A Figura 40 mostra que a quantidade  $e_{XC} - e_H$  contém ainda mais informação sobre o emaranhamento do que esperávamos. Procurávamos apenas por algo que indicasse as regiões de máximo e mínimo de emaranhamento, tal como obtido anteriormente para o

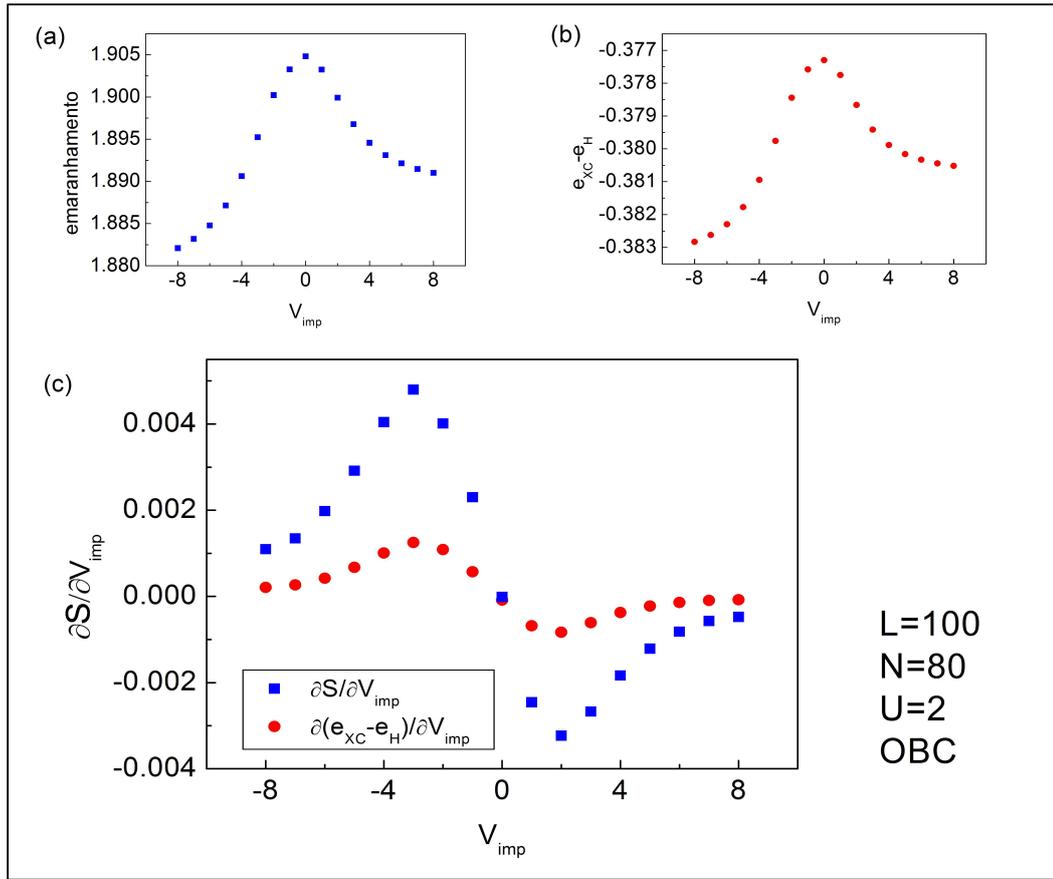
átomo de Hooke (72). No entanto, a grandeza  $e_{XC} - e_H$  é praticamente equivalente ao emaranhamento médio de um único sítio com relação ao restante da cadeia, a menos de uma constante em  $k$ . Mas, será que este resultado ocorre apenas para o caso sob confinamento harmônico? Ou é válido para qualquer inomogeneidade?

Para responder a essas questões fizemos a mesma análise para um caso de impureza e um caso de superrede, como mostram as Figuras 41 e 42. Embora o comportamento da quantidade  $e_{XC} - e_H$  em função da inomogeneidade,  $V_{imp}$  no caso da impureza e  $\Delta V$  no caso da superrede, seja similar ao comportamento do emaranhamento, apresentando as mesmas regiões de máximo e mínimo, verificamos que nestes casos a taxa do decaimento é bem diferente. Através das derivadas, Figura 41c e 42c, podemos ver que  $e_{XC} - e_H$  possui o mesmo comportamento qualitativo do emaranhamento. Quantitativamente, porém,  $e_{XC} - e_H$  não é tão bom indicador como para o caso de confinamento harmônico, Figura 40.

À procura de uma explicação para que  $e_{XC} - e_H$  fosse bom indicador de emaranhamento quando a inomogeneidade é um potencial harmônico, mas não tão bom quando a inomogeneidade é uma impureza ou a modulação de uma superrede, notamos que os sistemas escolhidos<sup>3</sup> tinham interação  $U$  muito diferentes entre si. Para o caso harmônico, o sistema tinha interação  $U = 8$ , enquanto para impureza  $U = 2$  e para superrede  $U = 3$ . Será que essa diferença nas interações poderia explicar a diferença no desempenho de  $e_{XC} - e_H$  na reprodução de  $S$ ? Como poderíamos corrigir a quantidade  $e_{XC} - e_H$  de forma que seja capaz de reproduzir o emaranhamento mesmo para  $U$  pequeno?

A primeira pergunta é respondida, invertendo as interações de  $U$  de cada sistema. Calculamos o sistema harmônico com  $U = 2$  e adotamos  $U = 8$  para a impureza e a superrede. Verificamos que agora a diferença  $e_{XC} - e_H$  reproduzia muito bem a taxa de emaranhamento para impureza e superrede, cuja interação era alta, enquanto que para o sistema harmônico, com  $U = 2$ , havia apenas reprodução qualitativa, como mostra a Figura 43. Concluímos então que de fato a diferença na interação  $U$  adotada em cada

<sup>3</sup> Por simplicidade, escolhemos os parâmetros que já haviam sido analisados anteriormente, apresentados no Capítulo 4.



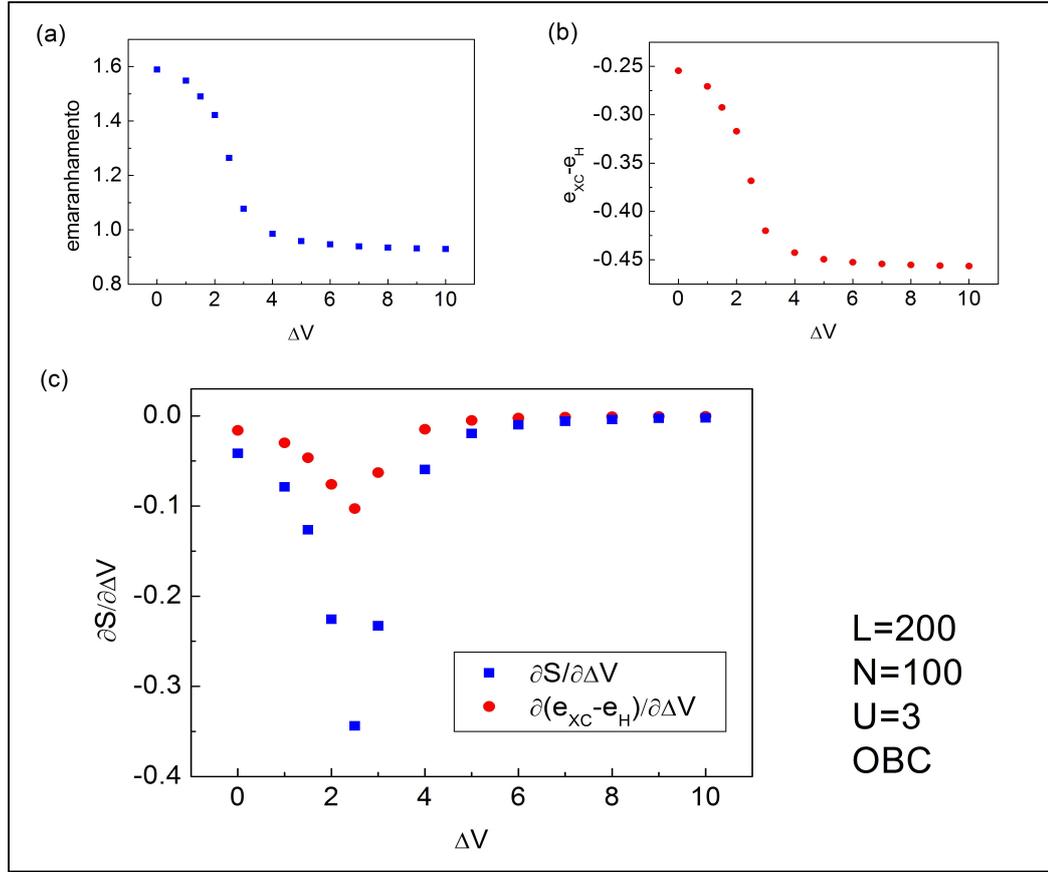
**Figura 41** – Análise do indicador  $e_{XC} - e_H$  para uma cadeia aberta com  $L = 100$ ,  $N = 80$ ,  $U = 2$  e com uma impureza no sítio 51. Em (a) apresentamos o emaranhamento em função do potencial da impureza, (b) o indicador em função de  $V_{imp}$  e (c) as derivadas do emaranhamento e do indicador com relação a  $V_{imp}$ .

caso é responsável pela diferença no desempenho de  $e_{XC} - e_H$  em reproduzir  $S$ .

Para responder à segunda pergunta, e corrigir o indicador  $e_{XC} - e_H$ , notamos que a principal diferença entre sistemas fortemente interagentes e sistemas com fraca interação está na energia cinética, que perde sua relevância à medida que  $U$  aumenta. Assim, para os casos com  $U$  pequeno, talvez exista uma contribuição da energia cinética que não foi considerada em  $e_{XC} - e_H$  e que não faz falta quando adotamos  $U$  muito grande. Buscando então maneiras de incluir a energia cinética, encontramos um novo indicador,

$$\mathbf{I} = \mathbf{e}_{XC} - \frac{1}{2}\mathbf{e}_H - \mathbf{t}^{TF}, \quad (6.2)$$

que mostrou-se excelente para todas as inhomogeneidades do modelo de Hubbard, como podemos ver na Figura 44.

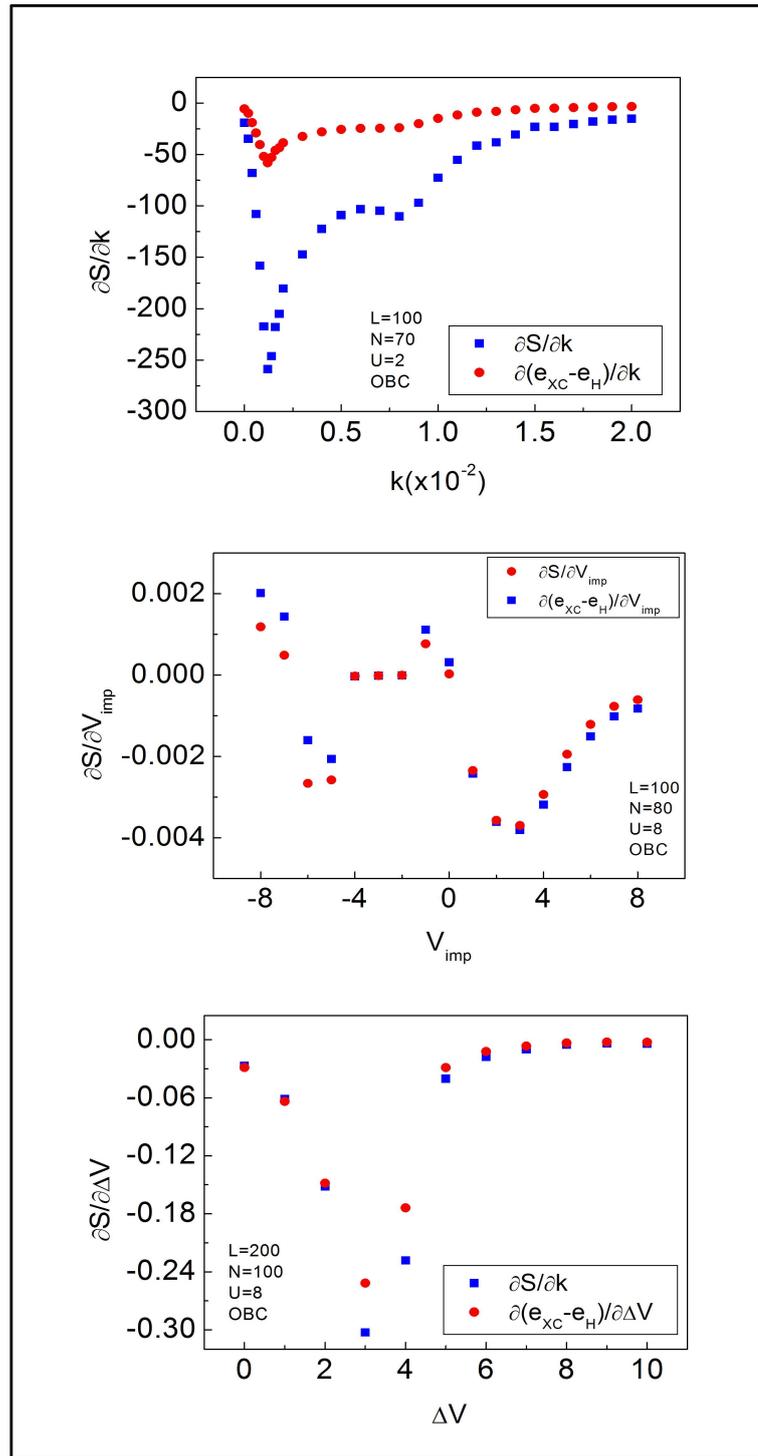


**Figura 42** – Análise do indicador  $e_{XC} - e_H$  para uma superrede com modulação  $\Delta V$ , com  $L = 200$ ,  $N = 100$  e  $U = 3$ . Em (a) apresentamos o emaranhamento em função da modulação, (b) o indicador em função de  $\Delta V$  e (c) as derivadas do emaranhamento e do indicador com relação a  $\Delta V$ .

Em todos os casos usamos LDA para a energia de troca e correlação e resolvemos o sistema KS para obter as densidades  $n_i$ . Com as densidades obtivemos então  $e_H(n_i) = Un_i^2/4$  e a energia cinética,  $t \approx t^{TF}(n_i) = 3n_i(3\pi^2n_i)^{2/3}/10$ , na aproximação de Thomas-Fermi. Para obter o emaranhamento em cada caso usamos nossa proposta de LDA para a entropia, Eq.(4.3).

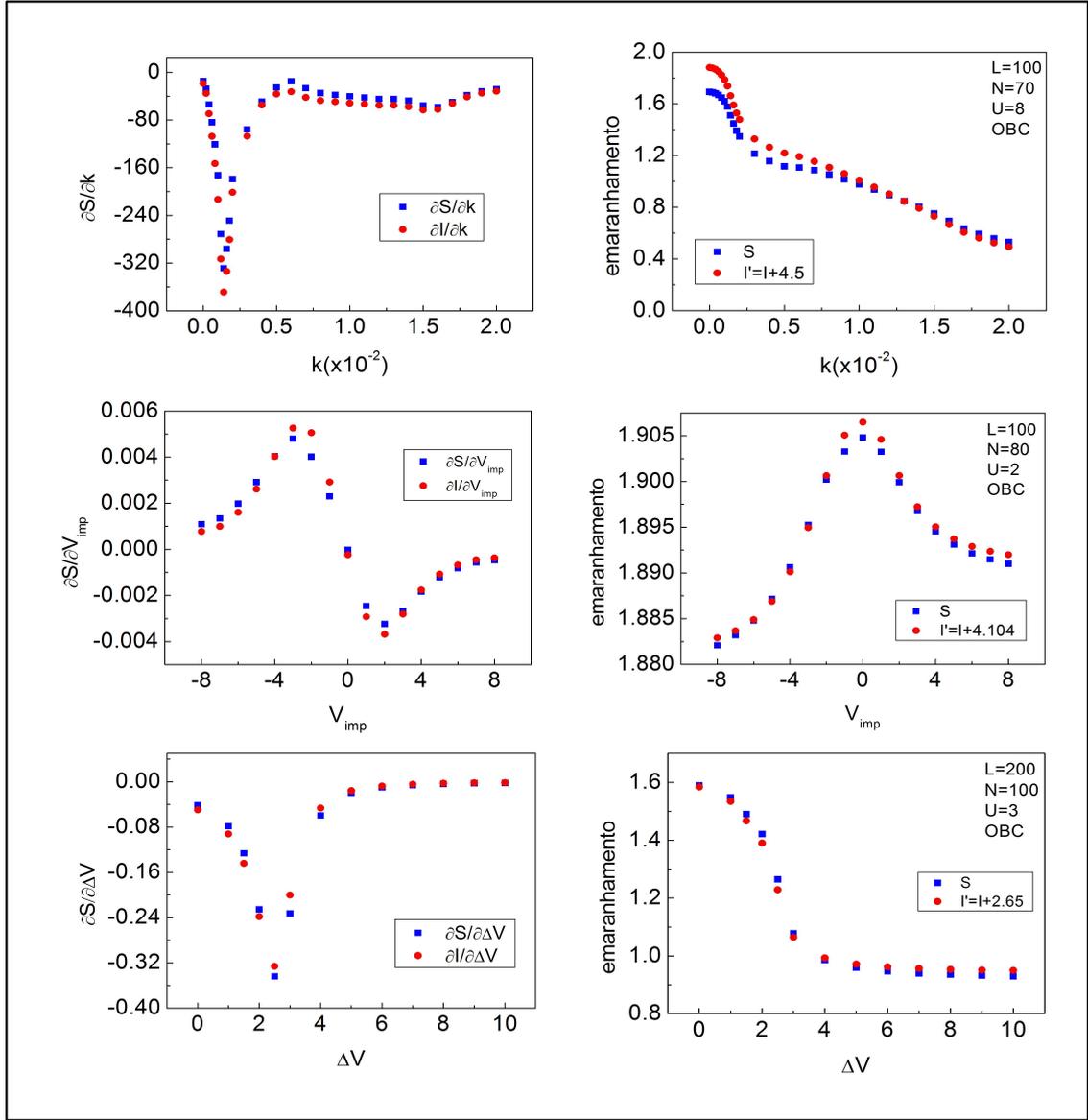
Os próximos passos deste trabalho consistem em testar o indicador de emaranhamento  $I$  usando todas as componentes  $e_{XC}$ ,  $e_H$  e  $t$  exatas, obtidas através da diagonalização numérica para sistemas pequenos. Além disso, não entendemos ainda por que este indicador funciona, portanto pretendemos investigar sua natureza e também verificar se é uma particularidade do modelo de Hubbard ou se pode ser estendido para outros modelos.

O estudo de emaranhamento e, principalmente, as técnicas usadas para o cálculo de



**Figura 43** – Análise do indicador  $e_{XC} - e_H$  para o confinamento harmônico com  $U = 2$  e para o sistema com uma impureza e a superrede, ambos com  $U = 8$ . A quantidade  $e_{XC} - e_H$  é um bom indicador para qualquer inomogeneidade com interação forte.

emaranhamento, encontram-se num estágio de desenvolvimento ainda bem primário, em comparação com o longo caminho já percorrido pela Física da Matéria Condensada no



**Figura 44** – Na primeira coluna: derivadas do indicador de emaranhamento  $I = e_{XC} - e_H - t^{TF}$  e do emaranhamento em função da inomogeneidade:  $k$  para o confinamento harmônico,  $V_{imp}$  para impureza e  $\Delta V$  para a superrede. Na segunda coluna: emaranhamento e o indicador deslocado de uma constante  $d$ ,  $I' = I + d$ , para cada inomogeneidade.

estudo e no desenvolvimento de técnicas para o cálculo de energia. Dessa forma, obter uma quantidade como  $I$ , formada apenas por componentes da energia, capaz de revelar o emaranhamento de um dado sistema, pode ser uma ferramenta muito útil para o estudo de emaranhamento.

Ressaltamos por fim, que todos os resultados apresentados até aqui para sistemas inomogêneos, foram obtidos em cadeias com magnetização nula, através da LDA para a

---

entropia de emaranhamento. Para estender a LDA para um sistema magnetizado, construindo uma LSDA (LSDA – do inglês *Local Spin Density Approximation*), precisaríamos de uma parametrização para a energia, semelhante à apresentada no Capítulo 2, mas agora para sistemas magnetizados. Com esse objetivo iniciamos uma busca por tal parametrização, como mencionado anteriormente, cujos resultados ainda não publicados são apresentados no Apêndice B.



## 7 *Conclusões*

Neste trabalho propusemos o estudo do emaranhamento em sistemas de muitos férmions. Visando inicialmente explorar o emaranhamento nas fases isolante, metálica e supercondutora de um sólido, analisamos o emaranhamento no modelo de Hubbard unidimensional e homogêneo, descrevendo elétrons em uma cadeia infinita. Definimos então o emaranhamento local de um único sítio com relação ao restante da cadeia, e calculamos a entropia de emaranhamento de um único sítio.

Esta entropia de emaranhamento mostrou-se sensível às fases isolante, metálica e supercondutora do sistema, revelando-se portanto uma testemunha das transições metal-isolante e BCS-BEC. Observamos que a entropia de emaranhamento não corresponde a uma função de estado no sentido termodinâmico, pois diferentes estados do sistema podem levar ao mesmo valor de emaranhamento. Sob ação de campos magnéticos externos, encontramos que o emaranhamento permanece constante nos *gaps* de spin, até que o campo magnético atinja seu valor crítico. Por fim, verificamos que a susceptibilidade magnética e o emaranhamento são intrinsecamente relacionados, e há indícios de que a forma dessa relação depende da natureza ferromagnética ou antiferromagnética do sistema. Essa análise do emaranhamento no modelo de Hubbard homogêneo foi publicada no *Physical Review A*, Ref.(55).

Com o objetivo de compreender as mudanças no emaranhamento devidas à presença de inhomogeneidades, propusemos então uma aproximação de densidade local (LDA) para a entropia de emaranhamento. Para cadeias pequenas, foi possível comparar nossa aproximação com resultados exatos e os testes mostraram que a LDA para a entropia é uma excelente aproximação para o emaranhamento de sistemas inhomogêneos, além de ser fa-

cilmente aplicável a sistemas com inomogeneidades mais complexas. Assim, empregamos a entropia LDA no modelo de Hubbard inomogêneo para três diferentes tipos de inomogeneidade: superredes, impurezas e confinamento harmônico.

Verificamos que todas as inomogeneidades diminuem o emaranhamento. Em superredes observamos que o emaranhamento diminui mais bruscamente com variações periódicas no potencial externo, do que com variações periódicas na interação, efeito semelhante ao que havia sido observado anteriormente para a energia. Para impurezas verificamos que existem combinações de parâmetros que produzem um platô no emaranhamento, onde podemos variar o potencial da impureza e ainda assim manter o emaranhamento constante. Por fim, verificamos que o emaranhamento no sistema harmonicamente confinado decai de forma não-uniforme, e que cada variação em sua curvatura representa uma transição no perfil de densidade. Concluimos então que o emaranhamento, além de ser testemunha de transições metal-isolante e BCS-BEC, também é capaz de apontar para diferentes regimes no perfil de densidades do sistema. Este trabalho foi publicado no *Physical Review Letters*, Ref.(63).

Exploramos ainda o emaranhamento entre blocos, definindo o emaranhamento de um bloco de sítios com relação ao restante da cadeia e, com o auxílio da expressão de Calabrese-Cardy (CC) para a entropia de sistemas finitos, analisamos as contribuições universal e não-universal do emaranhamento.

Encontramos que no limite em que o emaranhamento entre blocos é igual ao emaranhamento de um único sítio com relação ao restante da cadeia, a contribuição universal, dependente apenas da geometria, é praticamente irrelevante comparada com a contribuição não-universal, dependente das características intrínsecas do sistema. À medida que consideramos o emaranhamento de um bloco com mais de um sítio, com relação ao restante da cadeia, o papel do termo universal torna-se cada vez mais relevante, mas ainda assim o termo não-universal é indispensável. Concluimos então que para a completa descrição do emaranhamento entre blocos o termo não-universal deve ser obtido e, com considerações bem simples, mostramos que o termo não-universal corresponde na verdade à entropia de

emaranhamento de um único sítio no limite homogêneo. Estendemos então a fórmula de CC, incluindo agora nossa expressão para o termo não-universal, e então propomos duas diferentes formas de construir uma LDA para a entropia de emaranhamento entre blocos. Este trabalho foi publicado no *Physical Review A*, Ref.(71). Futuros trabalhos incluem testes dessas duas propostas, de forma que possamos escolher a melhor entre elas, bem como a exploração do emaranhamento entre blocos de sistemas inomogêneos.

Em outro trabalho procuramos por um indicador de emaranhamento tal qual encontrado anteriormente, por colaboradores nossos, para o átomo de Hooke. Obtivemos uma relação entre as energias de troca e correlação, de Hartree e cinética, capaz não só de indicar qualitativamente as regiões de maior ou menor emaranhamento, mas de praticamente reproduzir quantitativamente o emaranhamento. Verificamos que este indicador reproduz o emaranhamento em função de qualquer inomogeneidade a menos de uma constante. Cada termo de energia foi calculado através das densidades obtidas via LDA. Assim, para a conclusão deste trabalho, ainda pretendemos calcular o indicador através das energias exatas, compreender sua natureza e investigar sua validade para outros sistemas.

O desenvolvimento de técnicas teóricas para identificar, quantificar e controlar o emaranhamento em sólidos é fundamental para o desenvolvimento das áreas de Informação e Computação Quântica. Estamos em uma fase inicial na montagem do quebra-cabeça dessa característica tão intrigante e promissora da Mecânica Quântica. Com os resultados desta tese foi possível contribuir com algumas poucas peças. Existem ainda muitas questões fundamentais a serem investigadas, muitas propriedades e sistemas que devem ser explorados, e esperamos futuramente poder contribuir na solução de outros problemas dessa área.



## *Referências*

- 1 EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Physical Review*, v. 47, n. 10, p. 777, 1935.
- 2 ASPECT, A.; GRANGIER, P.; ROGER, G. Experimental tests of realistic local theories via bell's theorem. *Phys. Rev. Lett.*, v. 47, n. 7, p. 460, 1981.
- 3 ASPECT, A.; GRANGIER, P.; ROGER, G. Experimental realization of einstein-podolsky-rosen-bohm gedankenexperiment: A new violation of bell's inequalities. *Phys. Rev. Lett.*, v. 49, n. 2, p. 91, 1982.
- 4 BELL, J. S. On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox. *Physics*, v. 1, p. 195, 1964.
- 5 PAN, J.-W. et al. Experimental entanglement swapping: Entangling photons that never interacted. *Physical Review Letters*, v. 80, n. 18, p. 3891, 1998.
- 6 LUKIN, M. D.; IMAMOGLU, A. Nonlinear optics and quantum entanglement of ultraslow single photons. *Physical Review Letters*, v. 84, n. 7, p. 1419, 2000.
- 7 ZUKOWSKI, M. et al. Independent photons and entanglement. a short overview. *International Journal of Theoretical Physics*, v. 38, n. 1, p. 501, 1999.
- 8 MAIR, A. et al. Entanglement of the orbital angular momentum states of photons. *Nature*, v. 412, p. 313, 2001.
- 9 URSIN, R. et al. Communications: Quantum teleportation across the danube. *Nature*, v. 430, p. 849, 2004.
- 10 EKERT, A. K.; PALMA, G. M. Quantum cryptography with interferometric quantum entanglement. *Journal of Modern Optics*, v. 41, p. 2413, 1994.
- 11 LEE, J.-W. et al. Quantum cryptography using single-particle entanglement. *Physical Review A*, v. 68, n. 1, p. 012324, 2003.
- 12 KEMPE, J. Multiparticle entanglement and its applications to cryptography. *Physical Review A*, v. 60, n. 2, p. 910, 1999.

- 
- 13 NIELSEN, M. A.; CHIANG, I. L. *Quantum Computation and Quantum Information*. [S.l.]: Cambridge University Press, Cambridge, England, 2000.
- 14 ZHANG, W.-M. et al. Charge-to-spin conversion of electron entanglement states and spin-interaction-free solid-state quantum computation. *Physical Review B*, APS, v. 76, n. 16, p. 165311, 2007.
- 15 VANDERSYPEN, L. M. K.; CHUANG, I. L. Nmr techniques for quantum control and computation. *Reviews of Modern Physics*, v. 76, n. 4, p. 1037, 2005.
- 16 BOOZER, A. D. et al. Reversible state transfer between light and a single trapped atom. *Physical Review Letters*, v. 98, n. 19, p. 193601, 2007.
- 17 AMICO, L. et al. Entanglement in many-body systems. *Reviews of Modern Physics*, v. 80, n. 2, p. 517, 2008.
- 18 BAXTER, R. *Exactly solved models in statistical mechanics*. [S.l.]: London, Academic Press, 1982.
- 19 LIEB, E. H.; WU, F. Y. The one-dimensional hubbard model: a reminiscence. *Physica A*, v. 321, p. 1, 2003.
- 20 WEI, T.-C. Relative entropy of entanglement for multipartite mixed states: Permutation-invariant states and d[u-umlaut]r states. *Physical Review A*, v. 78, n. 1, p. 012327, 2008.
- 21 OBADA, A.-S.; HESSIAN, H.; MOHAMED, A.-B. Entropy and entanglement in the mixed state for a dispersive jc model in a phase-damped cavity. *Optics Communications*, v. 280, p. 230, 2007.
- 22 GOUR, G. Mixed-state entanglement of assistance and the generalized concurrence. *Physical Review A*, v. 72, n. 4, p. 042318, 2005.
- 23 VERSTRAETE, F. et al. A comparison of the entanglement measures negativity and concurrence. *Journal of Physics A*, v. 34, n. 47, p. 10327, 2001.
- 24 BENT, H. A. *The second law: an introduction to classical and statistical thermodynamics*. [S.l.]: New York, Oxford University Press, 1965.
- 25 NEUMANN, J. V. *Mathematical foundations of quantum mechanics*. [S.l.]: Princeton, Princeton University Press, 1955.
- 26 OSTERLOH, A. et al. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition.

*Nature*, v. 416, p. 608, 2002.

27 LATORRE, J.; RICO, E.; VIDAL, G. Ground state entanglement in quantum spin chains. *Quantum Information and Computation*, v. 4, n. 1, p. 48, 2004.

28 WANG, X.; ZANARDI, P. Quantum entanglement and bell inequalities in heisenberg spin chains. *Physics Letters A*, v. 301, n. 1-2, p. 1, 2002.

29 SUBRAHMANYAM, V. Entanglement dynamics and quantum-state transport in spin chains. *Physical Review A*, v. 69, n. 3, 2004.

30 KEATING, J. P.; MEZZADRI, F. Entanglement in quantum spin chains, symmetry classes of random matrices, and conformal field theory. *Physical Review Letters*, v. 94, n. 5, p. 050501, 2005.

31 GU, S.-J. et al. Entanglement and quantum phase transition in the extended hubbard model. *Physical Review Letters*, v. 93, n. 8, p. 086402, 2004.

32 LARSSON, D.; JOHANNESSON, H. Entanglement scaling in the one-dimensional hubbard model at criticality. *Physical Review Letters*, v. 95, n. 19, p. 196406, 2005.

33 BEDÜRFTIG, G. et al. Friedel oscillations in the open hubbard chain. *Physical Review B*, v. 58, n. 16, p. 10225, 1998.

34 LIEB, E. H.; WU, F. Y. Absence of mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Physical Review Letters*, v. 20, n. 25, p. 1445, 1968.

35 OGATA, M.; SHIBA, H. Bethe-ansatz wave function, momentum distribution, and spin correlation in the one-dimensional strongly correlated hubbard model. *Physical Review B*, v. 41, n. 4, p. 2326, 1990.

36 HOHENBERG, P.; KOHN, W. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, v. 136, n. 3B, p. B864, 1964.

37 KOHN, W. Nobel lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*, v. 71, n. 5, p. 1253, 1999.

38 DREIZLER, R. M.; GROSS, E. K. U. *Density Functional Theory*. [S.l.]: Springer-Verlag, Berlin, 1990.

39 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.

40 KOHN, W.; SHAM, L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, v. 140, n. 4A, p. A1133, 1965.

41 PERDEW, J.; KURTH, S. Density functionals for non-relativistic coulomb systems in the new century. v. 620, p. 1, 2003.

42 SCHLOSSHAUER, M. Decoherence, the measurement problem, and interpretations of quantum mechanics. *Reviews of Modern Physics*, v. 76, n. 4, p. 1267, 2005.

43 GHOSH, S. et al. Entangled quantum state of magnetic dipoles. *Nature*, v. 425, p. 48, 2003.

44 VEDRAL, V. Quantum physics: Entanglement hits the big time. *Nature*, v. 425, p. 28, 2003.

45 FEYNMAN, R. P. Forces in molecules. *Physical Review*, v. 56, n. 4, p. 340, 1939.

46 LARSSON, D.; JOHANNESSON, H. Single-site entanglement of fermions at a quantum phase transition. *Physical Review A*, v. 73, n. 4, p. 042320, 2006.

47 DENG, S.-S.; GU, S.-J.; LIN, H.-Q. Block-block entanglement and quantum phase transitions in the one-dimensional extended hubbard model. *Physical Review B*, v. 74, n. 4, p. 045103, 2006.

48 CARMELO, J.; BAERISWYL, D. Solution of the one-dimensional hubbard model for arbitrary electron density and large  $u$ . *Physical Review B*, v. 37, n. 13, p. 7541, 1988.

49 COOPER, L. N. Bound electron pairs in a degenerate fermi gas. *Physical Review*, v. 104, n. 4, p. 1189, 1956.

50 KETTERLE, W. Nobel lecture: When atoms behave as waves: Bose-einstein condensation and the atom laser. *Reviews of Modern Physics*, v. 74, n. 4, p. 1131, 2002.

51 LARSSON, D.; JOHANNESSON, H. Erratum: Entanglement scaling in the one-dimensional hubbard model at criticality. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 16, p. 169906, 2006.

52 BAHDER, T. B.; WOYNAROVICH, F. Gap in the spin excitations and magnetization curve of the one-dimensional attractive hubbard model. *Physical Review B*, v. 33, n. 4, p. 2114, 1986.

- 
- 53 BERGER, L.; FRIEDBERG, S. A.; SCHRIEMPF, J. T. Magnetic susceptibility of  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2.5\text{H}_2\text{O}$  at low temperature. *Physical Review*, v. 132, n. 3, p. 1057, 1963.
- 54 BRUKNER Časlav; VEDRAL, V.; ZEILINGER, A. Crucial role of quantum entanglement in bulk properties of solids. *Physical Review A*, v. 73, n. 1, p. 012110, 2006.
- 55 FRANCA, V. V.; CAPELLE, K. Entanglement of strongly interacting low-dimensional fermions in metallic, superfluid, and antiferromagnetic insulating systems. *Physical Review A*, v. 74, n. 4, p. 042325, 2006.
- 56 LIMA, N.; MALVEZZI, A.; CAPELLE, K. Competition between local potentials and attractive particle-particle interactions in superlattices. *Solid State Communications*, v. 144, p. 557, 2007.
- 57 SACHDEV, S. *Quantum Phase Transitions*. [S.l.]: Cambridge University Press, Cambridge, England, 1999.
- 58 LEDENTSOV, N. et al. Quantum dot heterostructures: Fabrication, properties, lasers (review). *Semiconductors*, v. 32, p. 343, 1998.
- 59 PRITCHARD, D. E. et al. Light traps using spontaneous forces. *Physica Review Letters*, v. 57, n. 3, p. 310, 1986.
- 60 CAMPO, J. V. L.; CAPELLE, K. Phase diagram of harmonically confined one-dimensional fermions with attractive and repulsive interactions. *Physical Review A*, v. 72, n. 6, p. 061602, 2005.
- 61 OSBORNE, T. J.; NIELSEN, M. A. Entanglement in a simple quantum phase transition. *Physica Review A*, v. 66, n. 3, p. 032110, 2002.
- 62 WU, L.-A. et al. Linking entanglement and quantum phase transitions via density-functional theory. *Physical Review A*, v. 74, n. 5, p. 052335, 2006.
- 63 FRANCA, V. V.; CAPELLE, K. Entanglement in spatially inhomogeneous many-fermion systems. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 7, p. 070403, 2008.
- 64 LOU, P.; LEE, J. Y. Block-block entanglement and quantum phase transition in the spin-(1/2) xx chain. *Physical Review B*, v. 74, n. 13, p. 134402, 2006.
- 65 LAFLORENCIE, N. et al. Boundary effects in the critical scaling of entanglement entropy in 1d systems. *Physical Review Letters*, v. 96, n. 10, p. 100603, 2006.
- 66 LAFLORENCIE, N. Scaling of entanglement entropy in the random singlet phase.

*Physical Review B*, v. 72, n. 14, p. 140408, 2005.

67 FRANCESCO, P. D.; MATHIEU, P.; SÉNÉCHAL, D. *Conformal Field Theory*. [S.l.]: Springer-Verlag, New York, 1997.

68 CALABRESE, P.; CARDY, J. Entanglement entropy and quantum field theory. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, v. 2004, n. 06, p. P06002, 2004.

69 KOREPIN, V. E. Universality of entropy scaling in one dimensional gapless models. *Physical Review Letters*, v. 92, n. 9, p. 096402, 2004.

70 KHOLODENKO, A. L. Central charge for the half-filled hubbard chain. *Journal of Physics A*, v. 20, p. 6133, 1987.

71 FRANCA, V. V.; CAPELLE, K. Universal and nonuniversal contributions to block-block entanglement in many-fermion systems. *Physical Review A*, v. 77, n. 6, p. 062324, 2008.

72 COE, J. P.; SUDBERY, A.; D'AMICO, I. Entanglement and density-functional theory: Testing approximations on hooke's atom. *Physical Review B*, v. 77, n. 20, p. 205122, 2008.

## *APÊNDICE A – Matriz Densidade Reduzida*

No Capítulo 3 descrevemos o emaranhamento de um único sítio  $A$  no modelo de Hubbard, através de sua matriz densidade reduzida,

$$\rho_A = w_0 |0\rangle\langle 0| + w_\uparrow |\uparrow\rangle\langle \uparrow| + w_\downarrow |\downarrow\rangle\langle \downarrow| + w_2 |\uparrow\downarrow\rangle\langle \uparrow\downarrow|, \quad (\text{A.1})$$

na base de ocupação  $|n\rangle = |0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$ , com probabilidades  $w_n$ , tais que  $\sum_n w_n = 1$ .

Para obter a Eq.(A.1), decompos o estado total puro  $|\Psi_{AB}\rangle$  nas bases de ocupação  $|n\rangle$  e  $|\alpha\rangle$ ,

$$|\Psi_{AB}\rangle = \sum_n \sum_\alpha c_{n\alpha} |n\rangle \otimes |\alpha\rangle \quad (\text{A.2})$$

onde  $\{|\alpha\rangle\}$  é a base de ocupação no espaço de Hilbert de  $(L - 1)$  sítios e  $\{|n\rangle\}$  é a base de ocupação no espaço de Hilbert de um único sítio.

Assim, a matriz densidade total será

$$\begin{aligned} \rho_{AB} &= |\Psi_{AB}\rangle\langle \Psi_{AB}| \\ &= \sum_{n,\alpha} \sum_{n',\alpha'} c_{n\alpha} c_{n'\alpha'}^* |n\alpha\rangle\langle n'\alpha'|, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

e então a matriz densidade reduzida é dada por

$$\begin{aligned} \rho_A &= \text{Tr}_B[\rho_{AB}] \\ &= \sum_{\alpha''} \langle \alpha'' | \sum_{n\alpha} \sum_{n'\alpha'} [c_{n\alpha} c_{n'\alpha'}^* |n\alpha\rangle\langle n'\alpha'|] | \alpha'' \rangle \\ &= \sum_{nn'} d_{nn'} |n\rangle\langle n'|, \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

com  $d_{nn'} = \sum_\alpha c_{n\alpha} c_{n'\alpha}^*$ .

Agora considerando as simetrias do modelo de Hubbard: conservação do número de partículas e conservação da componente  $z$  do spin, devemos impôr que

$$[\rho_A, n_A] = 0 \quad (\text{A.5})$$

$$[\rho_A, S_A^z] = 0 \quad (\text{A.6})$$

onde

$$n_A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

representa a densidade total no sítio  $A$  e

$$S_A^z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

a componente  $z$  do spin no sítio  $A$ , na representação matricial  $\sum_{nn'} |n\rangle\langle n'|$ .

Mas as relações (A.5) e (A.6) apenas são satisfeitas se  $\rho_A$  contiver apenas termos diagonais. Portanto:

$$\rho_A = \begin{pmatrix} w_0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_\uparrow & 0 & 0 \\ 0 & 0 & w_\downarrow & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w_2 \end{pmatrix}$$

Para obter as probabilidades  $w_n$  em termos do valor esperado dos operadores de densidade  $\hat{n}_\uparrow$  e  $\hat{n}_\downarrow$ , tal como mostram as equações Eq.(3.4) – Eq.(3.6) do Capítulo 3, usamos

as definições

$$\begin{aligned}
 \hat{n}_\uparrow &= \hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\uparrow = |10\rangle\langle 10| + |11\rangle\langle 11|, \\
 \hat{n}_\downarrow &= \hat{c}_\downarrow^\dagger \hat{c}_\downarrow = |01\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 11|, \\
 \hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow &= \hat{c}_\uparrow^\dagger \hat{c}_\uparrow \hat{c}_\downarrow^\dagger \hat{c}_\downarrow = |11\rangle\langle 11|,
 \end{aligned} \tag{A.7}$$

em que a notação  $|kl\rangle$  representa o número  $k = 0, 1$  de partículas no sítio  $A$  com estado de spin para cima,  $|\uparrow\rangle$ , e o número  $l = 0, 1$  de partículas no estado  $|\downarrow\rangle$ . Nesta notação, temos  $|\uparrow\rangle = |10\rangle$ ,  $|\downarrow\rangle = |01\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow\rangle = |11\rangle$  e  $|0\rangle = |00\rangle$ , de forma que a matriz densidade, Eq.(A.1), total pode ser escrita como

Calculando então, o valor esperado de cada operador,

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \hat{n}_\uparrow | \psi \rangle &= Tr[\hat{n}_\uparrow \rho_{AB}] \\
 &= \sum_{k,l=0}^1 \langle kl | [ |10\rangle\langle 10| + |11\rangle\langle 11| ] [ w_2 |11\rangle\langle 11| + w_\uparrow |10\rangle\langle 10| + w_\downarrow |01\rangle\langle 01| + w_0 |00\rangle\langle 00| ] |kl\rangle \\
 &= \sum_{k,l=0}^1 \langle kl | [ w_\uparrow |10\rangle\langle 10| + w_2 |11\rangle\langle 11| ] |kl\rangle \\
 &= w_\uparrow + w_2,
 \end{aligned} \tag{A.8}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \hat{n}_\downarrow | \psi \rangle &= Tr[\hat{n}_\downarrow \rho_{AB}] \\
 &= \sum_{k,l=0}^1 \langle kl | [ |01\rangle\langle 01| + |11\rangle\langle 11| ] [ w_2 |11\rangle\langle 11| + w_\uparrow |10\rangle\langle 10| + w_\downarrow |01\rangle\langle 01| + w_0 |00\rangle\langle 00| ] |kl\rangle \\
 &= \sum_{k,l=0}^1 \langle kl | [ w_\downarrow |01\rangle\langle 01| + w_2 |11\rangle\langle 11| ] |kl\rangle \\
 &= w_\downarrow + w_2,
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

$$\begin{aligned}
 Tr[\hat{n}_\uparrow \hat{n}_\downarrow \rho_{AB}] &= \sum_{k,l=0}^1 \langle kl | [ |11\rangle\langle 11| ] [ w_2 |11\rangle\langle 11| + w_\uparrow |10\rangle\langle 10| + w_\downarrow |01\rangle\langle 01| + w_0 |00\rangle\langle 00| ] |kl\rangle \\
 &= \sum_{k,l=0}^1 \langle kl | [ w_2 |11\rangle\langle 11| ] |kl\rangle \\
 &= w_2.
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

$$= w_2. \tag{A.12}$$

Assim, recombinação dos termos das equações Eq.(A.9) – Eq.(A.12) e usando a nor-

malização  $\sum_n w_n = 1$ , recuperamos as equações Eq.(3.4) – Eq.(3.6) do Capítulo 3,

$$w_2 = n_{\uparrow\downarrow},$$

$$w_{\uparrow\downarrow} = n_{\uparrow\downarrow} - w_2,$$

$$w_0 = 1 - w_{\uparrow} - w_{\downarrow} - w_2.$$

## *APÊNDICE B – Parametrização para a energia do modelo de Hubbard com spin*

Como apresentamos no Capítulo 2, a energia por sítio do modelo de Hubbard no limite homogêneo foi parametrizada a partir do Bethe-Ansatz (34, 35), por

$$e^{BA}(n, m = 0, U) = \frac{-2t\beta(U)}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{\beta(U)} \right) \quad \text{para } 0 \leq n \leq 1, \quad (\text{B.1})$$

onde  $\beta(U)$  é obtido pela relação

$$\beta(U) \text{sen} \left( \frac{\pi}{\beta(U)} \right) = 2\pi \int_0^\infty \frac{J_0(x)J_1(x)}{x(1 + e^{ux/2})} dx. \quad (\text{B.2})$$

Embora a Eq.(B.1) seja uma excelente ferramenta para o estudo do modelo de Hubbard, é válida apenas para sistemas com magnetização nula,  $m = 0$ . Assim, para o estudo de propriedades de sistemas magnetizados, é muito desejável possuir também uma expressão analítica parametrizada para a energia do modelo de Hubbard homogêneo com  $m \neq 0$ .

Com este objetivo, tentamos uma série de parametrizações, até que obtivemos a seguinte expressão,

$$e^{BA-spin}(n, m, U) = -\frac{2\beta(n, m, U)}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{\beta(n, m, U)} \right) \cos \left( \frac{\pi m}{\gamma(n, m, U)} \right), \quad (\text{B.3})$$

onde  $\beta(n, m, U)$  é obtido pela expressão

$$-\frac{2\beta(n, m, U)}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi}{\beta(n, m, U)} \right) = -4 \int_0^\infty dx \frac{J_0(x)J_1(x)}{x \left( 1 + \exp \left[ \frac{Ux}{2} \left( \frac{(n^4 - m^4)(1 - m^4)}{n^4} \right)^{1 - n^2} \right] \right)}, \quad (\text{B.4})$$

$J_i(x)$  são funções de Bessel de ordem  $i$  e  $\gamma(n, m, U)$  é um parâmetro definido como

$$\gamma(n, m, U) = 2 \exp \left[ \frac{U(1 - n^{1/4})(n^4 - m^4)}{\sqrt{n}} \right]. \quad (\text{B.5})$$

A equação Eq.(B.3) e os parâmetros  $\beta(n, m, U)$  e  $\gamma(n, m, U)$  foram construídos de maneira a satisfazer os três limites exatos (34, 35, 39),

$$e(n, m, U = 0) = -\frac{4}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{2} \right) \cos \left( \frac{\pi m}{2} \right), \quad (\text{B.6})$$

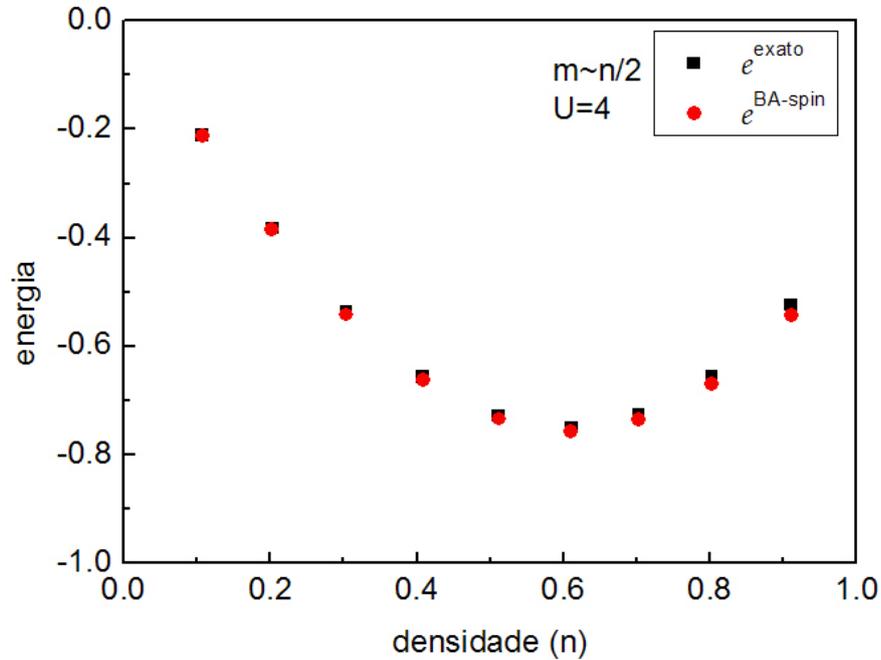
$$e(n, m, U \rightarrow \infty) = -\frac{2}{\pi} \text{sen}(\pi n), \quad (\text{B.7})$$

$$e(n, m = n, U) = -\frac{4}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{2} \right) \cos \left( \frac{\pi m}{2} \right) = -\frac{2}{\pi} \text{sen}(\pi n), \quad (\text{B.8})$$

e os dois limites aproximados (39),

$$e(n = 1, m, U) = -\frac{2\beta(U)}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi}{\beta(U)} \right) \cos \left( \frac{\pi m}{2} \right), \quad (\text{B.9})$$

$$e(n, m = 0, U) = -\frac{2\beta(U)}{\pi} \text{sen} \left( \frac{\pi n}{\beta(U)} \right). \quad (\text{B.10})$$

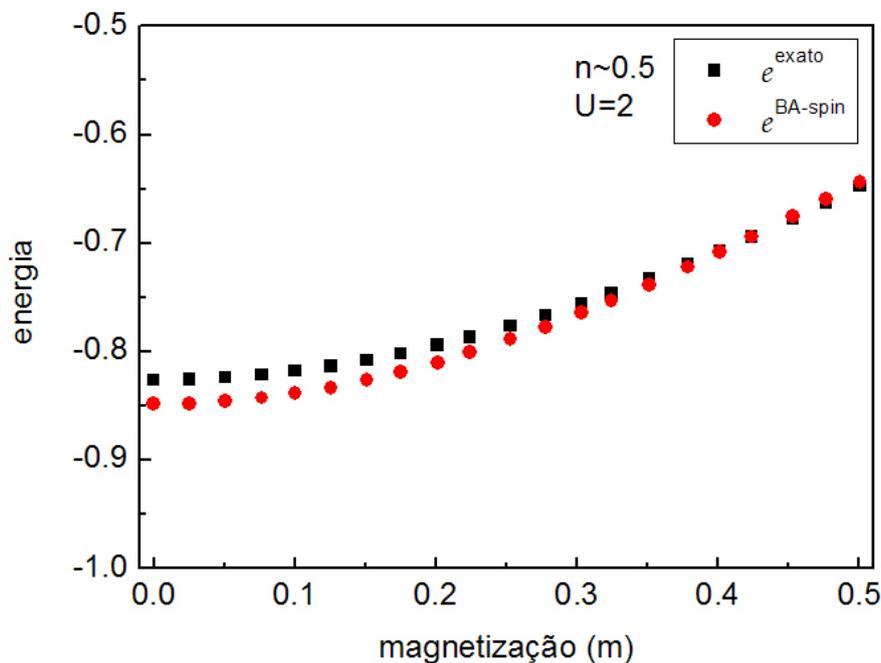


**Figura 45** – Energia do modelo de Hubbard homogêneo, calculada numericamente através das equações de Lieb-Wu,  $e^{\text{exato}}(n, m, U)$  e calculada através da nossa parametrização Eq.(B.3),  $e^{\text{BA-spin}}(n, m, U)$ , em função da densidade, para  $U = 4$  e  $m \approx n/2$ .

Além disso ajustamos os parâmetros de forma que a Eq.(B.3) apresentasse desvios relativamente baixos quando comparada com a energia obtida numericamente,  $e^{exato}(n, m, U)$ . Na Figura 45 comparamos a energia numérica com a energia aproximada pela Eq.(B.3) em função da densidade para  $U = 4$  e  $m \approx n/2$ . Observamos que há uma boa concordância especialmente para  $n \leq 0.8$ . Com desvio médio de apenas  $\bar{D} = 1.31\%$ , onde

$$\bar{D} = \sum_i D(g_i) = \sum_i \left| \frac{e^{BA-spin}(n, m, U) - e^{exato}(n, m, U)}{e^{exato}(n, m, U)} \times 100 \right|, \quad (B.11)$$

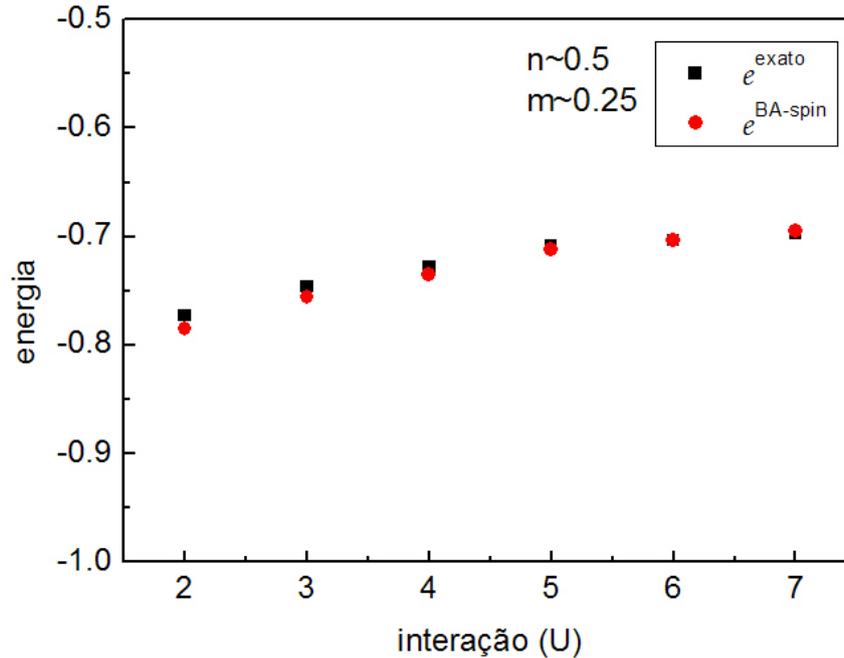
e  $D(g_i)$  é o desvio percentual para cada valor  $i$  de uma das grandezas  $g = n, m$  ou  $U$  mantendo as demais fixas. Os valores de  $n$  e  $m$  são aproximados porque não conseguimos controlá-los diretamente na solução numérica das equações de Lieb-Wu, controlamos apenas os limites das integrais, que por sua vez se relacionam com  $n$  e  $m$ . Essa é outra motivação para a construção de uma expressão analítica em que  $n, m, U$  podem ser arbitrariamente escolhidos.



**Figura 46** – Energia do modelo de Hubbard homogêneo em função da magnetização  $m$ . Comparação entre a nossa parametrização  $e^{BA-spin}(n, m, U)$ , dada pela Eq.(B.3), e o resultado numérico exato,  $e^{exato}(n, m, U)$ , para  $n \approx 0.5$  e  $U = 2$ .

Na Figura 46 fixamos  $U = 2$  e  $n \approx 0.5$  e calculamos a energia em função de  $m$ . Há

uma boa concordância, com desvio médio  $\bar{D} = 1.56\%$ , especialmente para  $m \geq 0.3$ . Mas ainda assim o maior desvio, em  $m = 0$ , é  $D(m = 0) = 2.71\%$ . Por fim fixamos  $n \approx 0.5$  e  $m \approx 0.25$  e calculamos a energia em função da interação  $U$ . A Figura 47 mostra que há uma excelente concordância, com desvio médio  $\bar{D} = 0.74\%$ .



**Figura 47** – Energia do modelo de Hubbard homogêneo em função da interação  $U$ , calculada com nossa parametrização  $e^{BA-spin}(n, m, U)$ , Eq.(B.3), e numericamente,  $e^{exato}(n, m, U)$ , para  $n \approx 0.5$  e  $U = 0.25$ .

Na Tabela 7 apresentamos os desvios médios  $\bar{D}$  com relação à magnetização  $m$ , para alguns valores de  $n$  e  $U$ . Verificamos que nossa parametrização Eq.(B.3) apresenta boa concordância de uma forma geral com o resultado exato, mas os desvios para  $n \geq 0.5$  são maiores quanto maior a interação  $U$ .

Para a conclusão deste trabalho pretendemos aperfeiçoar nossa atual parametrização, Eq.(B.3), diminuindo as potências em  $n$  e  $m$ , a fim de evitar oscilações numéricas. Para isso talvez teremos que sacrificar a obediência aos limites aproximados, Eq.(B.9) e Eq.(B.10), mas isso não constitui um grande problema se os desvios com relação aos resultados exatos em função de  $n, m$  e  $U$  permanecerem baixos. Trabalhos futuros envolvem aplicações da parametrização para o cálculo de outras grandezas, como por exemplo, a susceptibilidade

**Tabela 7** – Média em  $m$  do desvio percentual  $\bar{D}$  entre a energia exata e nossa parametrização  $e^{BA-spin}(n, m, U)$ , Eq.(B.3), para alguns valores de  $n$  e  $U$ .

$n/U$	Desvio (%)		
	2	4	6
<b>0.2</b>	0.84	0.74	0.58
<b>0.5</b>	1.56	1.61	1.93
<b>0.8</b>	1.89	1.98	2.42

magnética  $\chi = \partial^2 E / \partial m^2|_{m=0}$ .

Esse desenvolvimento, além de útil para a melhor compreensão de sistemas magnetizados descritos pelo modelo de Hubbard, apresenta uma importância técnica fundamental: permite o controle direto de todos os parâmetros  $n, m, U$ . Com este controle, podemos escolher arbitrariamente um conjunto de parâmetros  $n, m, U$  e então dessa forma calcular grandezas como a susceptibilidade, em que precisamos derivar com relação a  $m$ , mantendo fixos  $n$  e  $U$ . Da mesma forma, para uma futura descrição do emaranhamento em sistemas magnetizados e inomogêneos, precisaremos de controle sobre a distribuição de magnetização  $m_i$ , para a construção de uma aproximação de densidade de spin local (LSDA).