



### HAMILTONIANO DE HUBBARD

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} a_{j\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

Ele descreve a transição metal-isolante de Mott, ver Ref. [1]  
 $t$  = termo de "hopping" a primeiros vizinhos (tunelamento)  
 $U$  = interação Coulombiana (repulsão entre os elétrons)

$a_{i\sigma}^\dagger$  operador que cria um elétron no sítio  $i$  com spin  $\sigma$

$a_{i\sigma}$  operador que destrói um elétron no sítio  $i$  com spin  $\sigma$

$n_{i\uparrow(\downarrow)} = a_{i\uparrow(\downarrow)}^\dagger a_{i\uparrow(\downarrow)}$  operador que conta o número de elétrons com spin up (spin down) no sítio  $i$

$$[H, \sum_i n_{i\uparrow}] = [H, \sum_i n_{i\downarrow}] = [H, S_z] = [H, S^2] = 0$$

A dimensão do espaço de estados ilustra a dificuldade do tratamento numérico do problema. Para o modelo de Hubbard com  $N$  sítios, fixado o número de elétrons com spins up e down, ela é dada por:

$$\mathcal{N}_H = \binom{n_\uparrow + n_\downarrow}{n_\uparrow}^2$$

Como lidamos com férmions, precisamos convencionar a aplicação dos operadores de criação e destruição ao definir os estados da base de número, pois eles anticomutam. Temos os seguintes estados por sítio:

Vácuo	$ 0\rangle_i$
1 up elétron	$ \uparrow\rangle_i = a_{i\uparrow}^\dagger  0\rangle_i$
1 down elétron	$ \downarrow\rangle_i = a_{i\downarrow}^\dagger  0\rangle_i$
2 elétrons	$ \uparrow\downarrow\rangle_i \equiv  d\rangle_i = a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\downarrow}^\dagger  0\rangle_i$

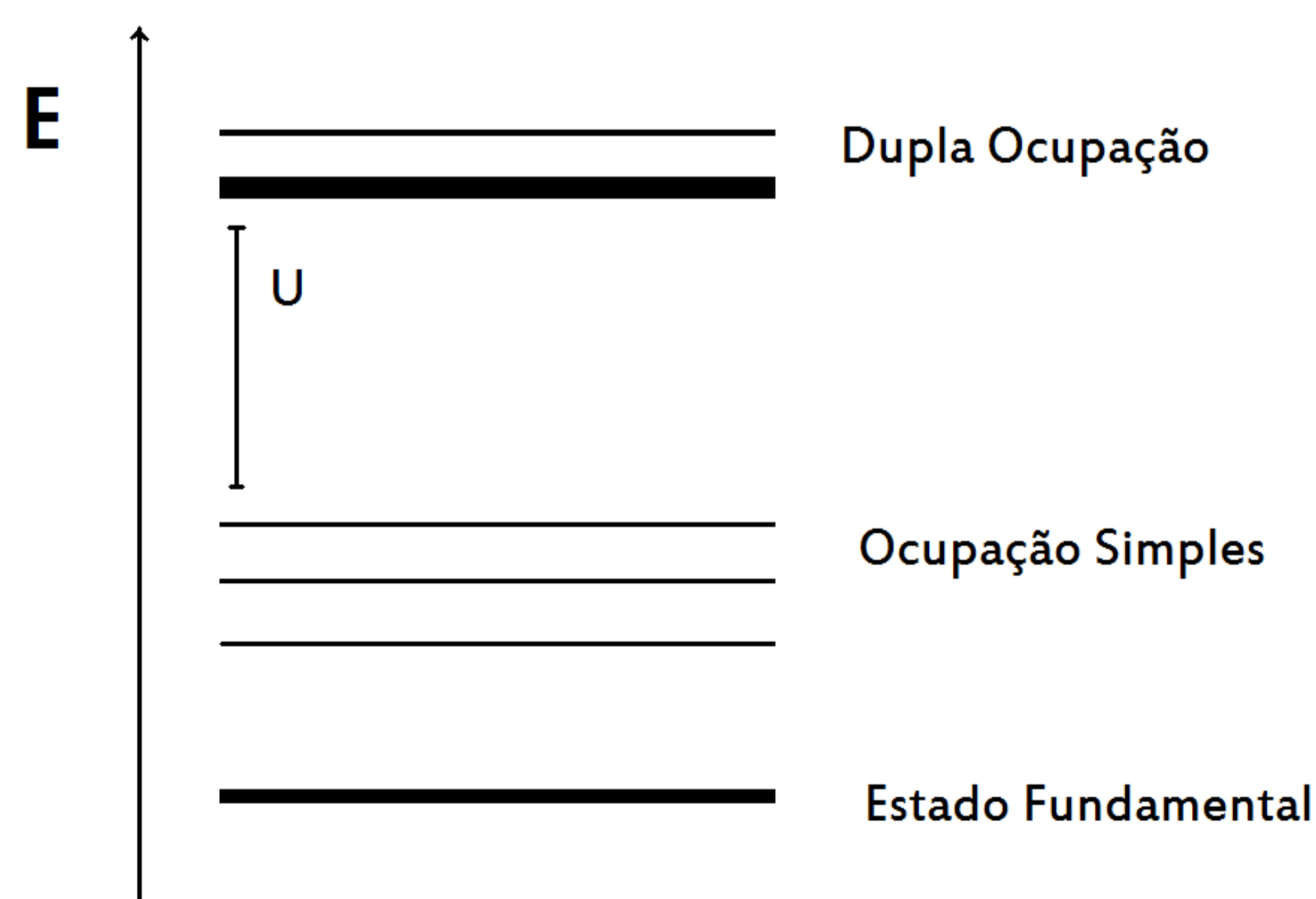
Devido ao grande número de simetrias do modelo, o seu estudo analítico para alguns casos particulares é muito simples. Estudamos aqui a banda semi-preenchida para o caso de dois sítios (e dois elétrons), no setor de spin  $S_z=0$ .

Diagonalizando o Hamiltoniano obtivemos um estado fundamental (EF) não-degenerado, dado por:

$$|\Psi_-\rangle = \sqrt{\left(1 + \frac{U}{\sqrt{U^2 + 16t^2}}\right)} \frac{|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle}{2} + \sqrt{\left(1 - \frac{U}{\sqrt{U^2 + 16t^2}}\right)} \frac{|d0\rangle + |0d\rangle}{2}$$

Numa notação onde os estados descrevem a ocupação dos dois sítios. Os prefatores definem os coeficientes  $a$ - e  $b$ -, que dependem de  $U$  e  $t$ . Para qualquer valor de  $U$ , existe uma diferença (ou gap) de energia entre os estados de ocupação simples e os de dupla ocupação (como ilustrado na figura abaixo). No modelo de Hubbard de dois sítios obtivemos a seguinte energia para o estado fundamental:

$$E_- = \frac{1}{2} \left( U - \sqrt{U^2 + 16t^2} \right)$$



**Esquema** dos autoestados do modelo de Hubbard de dois sítios e dois elétrons, e sua distribuição na energia: O estado fundamental de mais baixa energia, seguido em ordem ascendente pelo tripleto com  $E=0$ . Acima do gap de energia  $E_g=U$  estão os estados de dupla ocupação. Há, no total, 6 estados.

### CARACTERIZAÇÃO DO EMARANHAMENTO QUÂNTICO

Para investigar o emaranhamento quântico neste sistema, definimos o operador ou matriz densidade. Num estado puro, ele é dado por [2]:

$$\rho_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$$

O operador ou matriz densidade reduzido a um dos sítios, para o modelo de Hubbard com dois elétrons no Estado Fundamental (EF), se escreve, na base de número de ocupação, como:

$$\rho_{1,EF} = \frac{a_-^2}{2} (|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|) - \frac{b_-^2}{2} (|0\rangle\langle 0| + |d\rangle\langle d|)$$

A partir desse operador densidade, calculamos a entropia de von Neumann a ele associada, e verificamos que ela apresenta um máximo em  $U=0$ . A nossa interpretação disto é que a entropia de von Neumann sinaliza onde o sistema apresenta uma transição de fase quântica de tipo condutor-isolante. A expressão da entropia de von Neumann é dada por [3]:

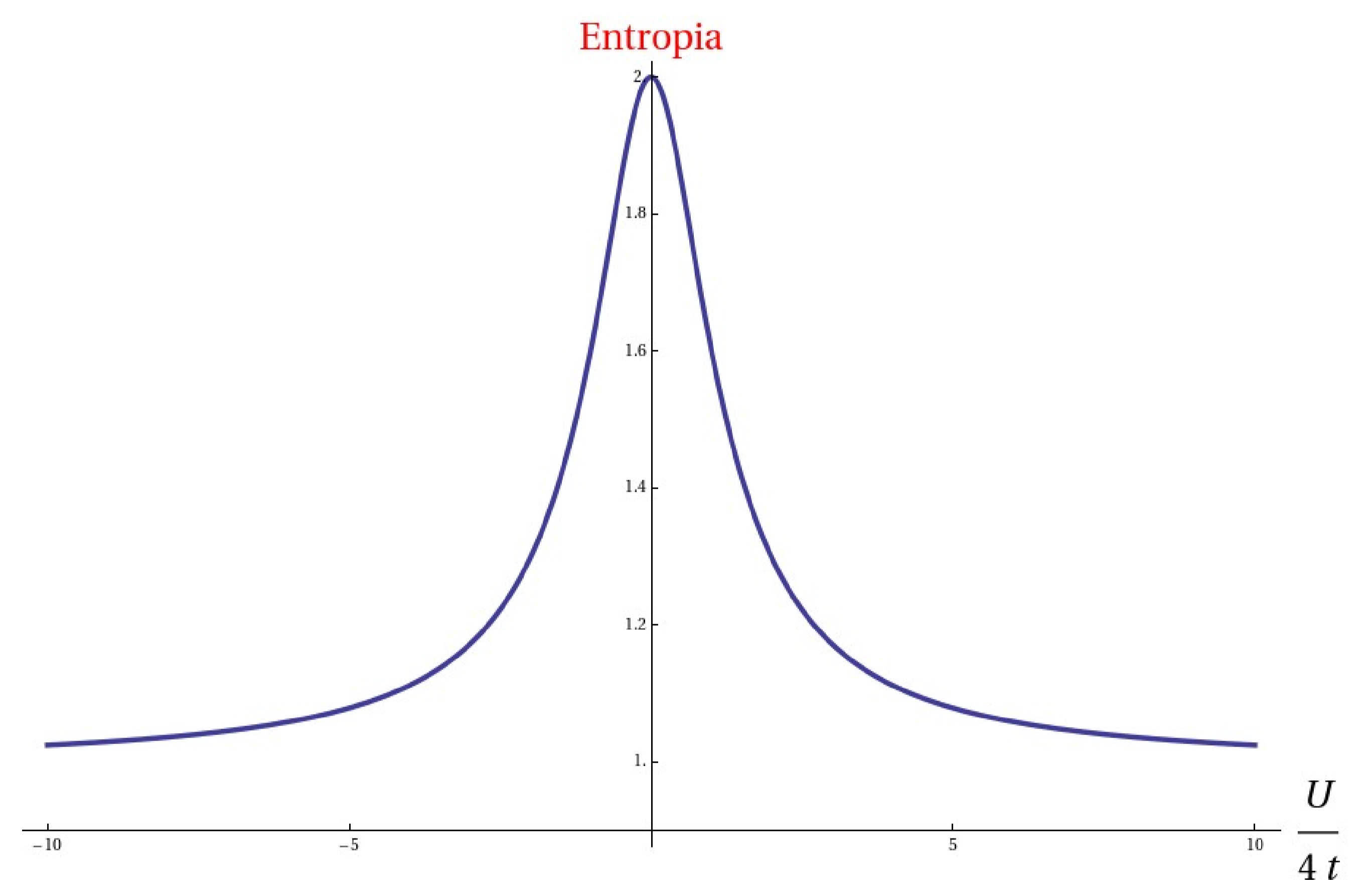
$$S(\rho) = -Tr(\rho \log_2(\rho))$$

Seu uso na descrição do emaranhamento quântico é interessante devido às seguintes propriedades [3]:

$$\begin{aligned} S(\rho) = 0 &\Leftrightarrow \rho = |\psi\rangle\langle\psi| \\ S(\rho_a \otimes \rho_b) &= S(\rho_a) + S(\rho_b) \\ |S(\rho_a) - S(\rho_b)| &\leq S(\rho_{ab}) \leq S(\rho_a) + S(\rho_b) \end{aligned}$$

Essa última propriedade valendo quando temos um sistema descrito por uma matriz densidade conjunta  $\rho_{ab}$ , sendo  $\rho_a$  e  $\rho_b$  as matrizes densidades reduzidas aos subsistemas  $a$  e  $b$ .

Para o operador densidade reduzido a um sítio apresentado acima, obtivemos o seguinte comportamento para  $S$ , como função de parâmetro  $U/4t$ :



**Conclusões e Comentários:** neste trabalho encontramos que

1. A entropia  $S$  tem um máximo em  $U=0$ , decaindo para  $|U| \rightarrow \infty$
2. Esse resultado sinaliza uma transição de fase quântica (a  $T=0$ ).
3. Para  $U$  negativo sobrevive o estado "supercondutor"  $|d0\rangle + |0d\rangle$ .
4. Para  $U$  positivo sobrevive o estado "singleto"  $|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle$ .
5. Como o modelo é invariante translacional isto é válido para  $N$  sítios.
6. Neste trabalho: Emaranhamento = Entropia de von Neumann.
7. Próximos passos: separar um sistema de 4 sítios em dois de 2 sítios.
8. Calcular outras quantidades associadas ao emaranhamento, como "fidelidade quântica", "número de Wegner" e "concorrência", ver [3].

#### REFERÊNCIAS:

- [1] GEBHARD, F. - *The Mott Metal-Insulator Transition* - Springer Verlag
- [2] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, F. - *Quantum Mechanics* - Wiley VCH
- [3] NIELSEN, M.; CHUANG, I. - *Quantum Computation and Quantum Information* - Cambridge University Press.

\* bolsista BIC – UFRGS / PROPESQ