

SAULO LUIS LIMA DA SILVA

**SOBRE A MEDIDA DE EMARANHAMENTO, VIA DISTÂNCIA ENTRE
ESTADOS, EM CADEIAS DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICAS DE
SPIN-1/2**

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2015

**Ficha catalográfica preparada pela Biblioteca Central da
Universidade Federal de Viçosa - Câmpus Viçosa**

T

S586s
2015

Silva, Saulo Luis Lima da, 1986-
Sobre a medida de emaranhamento, via distância entre estados, em cadeias de Heisenberg antiferromagnéticas de spin-1/2 / Saulo Luis Lima da Silva. - Viçosa, MG, 2015.
vii, 63f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui apêndice.

Orientador : Daniel Heber Theodoro Franco.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 60-63.

1. Teoria quântica. 2. Matéria condensada.
3. Heisenberg, Princípio de incerteza de. 4. Materiais magnéticos. I. Universidade Federal de Viçosa.
Departamento de Física. Programa de Pós-graduação em Física Aplicada. II. Título.

CDD 22. ed. 530.12

SAULO LUIS LIMA DA SILVA

**SOBRE A MEDIDA DE EMARANHAMENTO, VIA DISTÂNCIA ENTRE ESTADOS,
EM CADEIAS DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICAS DE SPIN-1/2**

Tese apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Física, para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

APROVADA: 16 de dezembro de 2015.



Oswaldo Monteiro Del Cima
(Coorientador)



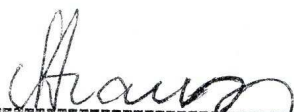
Jakson Miranda Fonseca



Fernando da Rocha V. B. de Melo



Roberto Silva Sarthour Júnior



Daniel Heber Theodoro Franco
(Orientador)

À minha mãe.

Agradecimentos

Ao fim de uma caminhada tão longa e na qual tivemos a companhia de tantas pessoas fundamentais para o avanço, agradecer nunca é tarefa fácil ou justa. Um provérbio africano diz: se você quer ir rápido, vá sozinho, mas se quer ir longe, vá acompanhado. Sendo assim, posso dizer que cheguei longe e rápido.

Agradeço a Deus, minha família e amigos. Especialmente, agradeço à minha mãe, ao Jorge e ao meu irmão. À minha avó Genasia e avô Tatão (*in memoriam*). Ao meus tios(as) Neuza, Nivaldo, Wilson e Cota e aos primos Vandão, Silvisney, Jânisson, Igor, Silviano, Wilton, Marcão, Marcelo e André.

Impossível deixar de agradecer à família que são os alunos da pós graduação. Especialmente agradeço àqueles que carregarei para o resto da vida sempre por perto, de alguma forma: Angélica, Fabio (Baiano), Priscila, Herman, Eduardo, Renan, Thiago, Jader, Renatinha e Paty. Aproveito para deixar o agradecimento ao meu grande amigo e melhor vizinho que eu poderia ter tido nesses mais de dez anos de Viçosa, Alysson.

Sou muito grato à mãe que é a UFV, por todo o suporte recebido. Ao departamento de física, que inclui os professores que me proporcionaram um grande aprendizado e, dessa forma, me fizeram um ser humano melhor e mais completo. Aos funcionários do departamento, especialmente à Elaine, Marcão e Lauriete.

Palavras são poucas para agradecer aos meus orientadores Daniel e Oswaldo. A paciência, disposição e boa vontade (no sentido Kantiano) que são intrínsecos a eles foram fundamentais para que o trabalho se concretizasse. Agradeço também ao meu coorientador Afrânio pela disposição e grandes contribuições ao longo de todo o trabalho.

Finalmente, agradeço à FAPEMIG e CAPES pelo apoio financeiro.

Sumário

RESUMO	vi
ABSTRACT	vii
1 Introdução	1
2 Emaranhamento	5
2.1 Correlações quânticas	5
2.2 Estados separáveis e emaranhados	8
2.3 Matriz densidade; estados puros e misturados	8
2.4 Critérios de separabilidade: sistemas abertos	12
2.5 Mapas positivos	14
2.6 Testemunha de emaranhamento	15
2.7 Quantificação de emaranhamento em sistemas bipartidos	16
2.7.1 Negatividade	17
2.7.2 Emaranhamento de formação e concorrência	17
2.8 Distância entre estados como medida de emaranhamento	18
2.8.1 Convexidade do conjunto das matrizes densidade	18
2.8.2 Distância entre estados e emaranhamento	19
2.8.3 Norma de Hilbert-Schmidt	20
3 Susceptibilidade magnética em cadeias de Heisenberg.	22
3.1 Modelo de Heisenberg	22
3.2 Susceptibilidade Magnética em Sistema Dímero	23

3.2.1	Equação de Van Vleck	24
3.2.2	Equação de Bleaney e Bowers	25
3.3	Susceptibilidade magnética em cadeia de spin infinita	27
4	Emaranhamento em cadeias de Heisenberg	29
4.1	Emaranhamento térmico e macroscópico	30
4.2	Emaranhamento em cadeias de Heisenberg	31
4.2.1	Testemunha de emaranhamento	34
4.3	Dímero: O composto Ferro Nitrosyl	35
4.4	Trímero: O composto $2b.3CuCl_2 \cdot 2H_2O$	37
4.4.1	Outros compostos	40
4.5	Dímero-trímero: O composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$	42
4.6	Cadeia com N spins	45
4.6.1	O composto $\beta - T_eVO_4$	47
5	Conclusões e Perspectivas	49
	Apêndice A	51
	Referências bibliográficas	63

Resumo

SILVA, Saulo Luis Lima da, D. Sc., Universidade Federal de Viçosa, Dezembro de 2015. **SOBRE A MEDIDA DE EMARANHAMENTO, VIA DISTÂNCIA ENTRE ESTADOS, EM CADEIAS DE HEISENBERG ANTIFERROMAGNÉTICAS DE SPIN-1/2.** Orientador: Daniel Heber Theodoro Franco. Coorientadores: Oswaldo Monteiro Del Cima e Afrânio Rodrigues Pereira.

Embora o estudo sobre emaranhamento quântico tenha sua origem na primeira metade do século passado, com os trabalhos de A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen, somente nos anos 80, após os experimentos de Aspect e colaboradores, é que esse assunto teve renovado o interesse pela comunidade científica. Tal fenômeno se mostrou de grande interesse tanto do ponto de vista teórico, filosófico e tecnológico. Apesar dos esforços, a detecção e medida de emaranhamento não é um assunto totalmente fechado. Falta-nos ainda uma forma geral de detecção e quantificação do emaranhamento. Nesse trabalho, temos por objetivo estudar o emaranhamento quântico. Particularmente, o emaranhamento térmico e macroscópico em sistemas de matéria condensada. Usaremos para isso, o método de distância entre estados como quantificador de emaranhamento. Tal método possui um forte apelo geométrico e possui a vantagem de não depender da dimensão nem do tamanho do sistema. A utilização de tal método não é recorrente na literatura pelo fato de que sua aplicação exige, em geral, métodos numéricos. Mostraremos uma forma analítica de aplicação para sistemas que satisfaçam o critério de Peres-Horodecki. Além disso, será apresentado o cálculo do emaranhamento para vários sistemas de *spin-1/2* que satisfaçam a hamiltoniana de Heisenberg $1D$, anisotrópica, sem campo magnético externo e com interação antiferromagnética. Além de sistemas dímeros, estudaremos o emaranhamento em sistemas trímeros, cadeias de Heisenberg infinitas e sistemas dímero-trímero. Mostraremos o comportamento do emaranhamento com a temperatura, bem como determinaremos a temperatura crítica de emaranhamento para vários compostos reais.

Abstract

SILVA, Saulo Luis Lima da, D. Sc., Universidade Federal de Viçosa, December, 2015.
ON THE ENTANGLEMENT MEASURED USING THE DISTANCE BETWEEN STATES IN SPIN-1/2 HEISENBERG CHAINS WITH ANTIFERROMAGNETIC COUPLING. Adviser: Daniel Heber Theodoro Franco. Co-advisers: Oswaldo Monteiro Del Cima and Afrânio Rodrigues Pereira.

Although the study of quantum entanglement has its origin in the first half of the last century, with the works of A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, only in the 80s that this issue received renewed interest due to the Aspect experiments and collaborators. This phenomenon has proved of great interest from a theoretical, philosophical and technological point of view. Despite efforts, detection and measurement of entanglement is not a fully enclosed subject. We have not found a general form of detection and quantification of entanglement. In this work, we aim to study quantum entanglement. In particular, thermal and macroscopic entanglement in condensed matter systems. We will use for this, the method of distance between states as quantifier of entanglement. This method has a strong geometrical appeal and has the advantage of not depending on the system dimension or size. Use this method is not very common in the literature because their implementation requires, in general, numerical methods. We show an analytical form of application for systems that meet the criteria of Peres-Horodecki. Moreover, the calculation of entanglement for various spin-1/2 systems which satisfy the $1D$ Heisenberg Hamiltonian with antiferromagnetic interaction and without external magnetic field will be displayed. We Will study the entanglement systems dimer, trimer and Heisenberg infinite chains, such as dimer-trimer systems. We show the entanglement behavior as well as the critical temperature of entanglement for various real compounds.

Capítulo 1

Introdução

Emaranhamento quântico é um dos aspectos mais intrigantes e peculiares da mecânica quântica. Nas palavras de Erwin Schrödinger, o emaranhamento não é *um*, mas *o* traço característico da mecânica quântica. Tal fenômeno tem a origem de seu estudo nas críticas feitas à mecânica quântica por Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen [1]. Os autores argumentaram que a mecânica quântica, tal como era entendida, não podia ser uma teoria completa da Natureza. Esse trabalho evidencia, na verdade, o caráter não local da mecânica quântica. Einstein utilizou o termo ação fantasmagórica à distância para descrever essas peculiaridades da teoria e Schrödinger cunhou o termo emaranhamento em 1936.

A questão sobre se o emaranhamento é algo real ou apenas uma consequência teórica abstrata do formalismo matemático da teoria ficou em aberto até quase três décadas após a morte de Einstein. Na década de 60, John Bell, deu uma importante contribuição para a elucidação experimental desse tema. Bell deduziu o que ficou conhecido como Desigualdades de Bell. Tais desigualdades nunca são violadas no contexto da física clássica, mas a física quântica pode não satisfazê-las em casos especiais, particularmente, casos em que haja emaranhamento [2]. Em 1982, Alain Aspect e colaboradores fizeram uma experiência onde mediram a polarização de dois fótons produzidos por uma mesma fonte, a saber, o decaimento radioativo de um átomo de cálcio [3]. Nesse experimento foi possível demonstrar que as desigualdades de Bell eram violadas em alguns casos especiais, como previa a mecânica quântica.

Atualmente, não existem mais dúvidas experimentais sobre a existência desse intrigante fenômeno. Suas consequências filosóficas e abstratas são, ainda, um ramo da física que gera muitas discussões e não parece estar perto de ser um problema fechado na ciência. Esse, no entanto, não é um assunto de interesse apenas acadêmico ou filosófico, o emaranhamento tem se mostrado fundamental para o entendimento e avanço de várias áreas da física e tecnologia atuais. Ele tem papel chave no entendimento das transições de fase quânticas [4, 5, 6], no processamento e transmissão de informação quântica [7, 8] e no ramo da ciência, ainda em crescimento conhecido como biologia quântica [9, 10, 11], entre outros.

Embora tenha se passado mais de três décadas desde a descoberta experimental de Aspect, o problema de saber quando um determinado estado está emaranhado e, uma vez detectado tal emaranhamento, saber o quão emaranhado ele está não é tarefa fácil e ainda é um problema aberto em física.

Um tema de grande interesse é estudar o emaranhamento em sistemas de matéria condensada. Tal interesse advém do fato de que alguns comportamentos de tais sistemas só podem ser entendidos à luz do emaranhamento. A susceptibilidade magnética a baixas temperaturas, transições de fases quânticas, reações químicas são alguns exemplos de onde o emaranhamento é ingrediente chave para um completo entendimento do sistema. Além disso, no intuito de se produzir um processador quântico, o estudo de emaranhamento em sistemas de matéria condensada se faz essencial. Em matéria condensada, os ditos materiais magnéticos são de particular interesse. Dentre esses, temos os ferromagnetos e antiferromagnetos que são descritos pelo modelo de Heisenberg. Estudaremos o emaranhamento em sistemas desse tipo.

Um dos nossos objetivos nesse trabalho é utilizar um método para quantificar o grau de emaranhamento de um sistema - a distância entre estados como medida de emaranhamento. Nossa motivação para tal escolha está no apelo geométrico do método, juntamente com o fato de ele ser independente da dimensão e do tamanho do sistema. Utilizaremos a norma de Hilbert-Schmidt para medir a distância entre estados quânticos. A escolha de tal norma se deveu, principalmente, à sua simplicidade de aplicação. A questão de se essa norma satisfaz as condições desejáveis a uma boa medida de emaranhamento foi discutida em 1999 por C. Witte e M. Trucks [12]. Nesse trabalho, para mostrar que a norma de Hilbert-Schmidt é não crescente sobre aplicação de mapas positivos preservando o traço, os autores lançaram mão do Teorema de Lindblad. Em 2000 M. Ozawa argumentou, valendo-se de um contra exemplo, que essa norma não satisfaz a condição de emaranhamento não crescente sob aplicação de mapa positivo preservando traço [13]. Trabalhos posteriores, no entanto, mostraram que, sob certas condições, essa norma fornece uma boa medida de emaranhamento [14, 15, 16]. Deixamos uma discussão mais detalhada sobre esse ponto para o Apêndice A.

A proposta de se medir o emaranhamento via distância entre estados remonta a 1997 com o trabalho de V. Vedral *et al.* [17]. Apesar de não ser nova, essa proposta não é, em geral, encontrada sendo utilizada na literatura devido ao fato da necessidade de se usar métodos numéricos para aplicá-la. Uma de nossas contribuições originais do trabalho é mostrar que para sistemas que satisfaçam o critério de Perez-Horodecki [18], podemos calcular o emaranhamento do sistema analiticamente de uma forma tão simples quanto a concorrência, por exemplo. Com a vantagem, em detrimento desta, de se aplicar, também, a sistemas de dimensão $2 \otimes 3$. Os resultados dessa parte do trabalho estão submetidos para a publicação [19, 20].

O estudo do emaranhamento em cadeias de Heisenberg é de grande interesse na física e

já vem sendo feito há vários anos. No início dos anos 2000, os trabalhos de K. M. O'Connor e W. K. Wootters [21] juntamente com os trabalhos de X. Wang e P. Zanardi [22] mostraram como obter a matriz densidade de uma cadeia de Heisenberg cuja hamiltoniana comuta com a componente z do *spin* total. M. Wieśniak, V. Vedral e C. Brukner mostraram, em 2005, como relacionar o emaranhamento com a susceptibilidade magnética [23]. Em 2008 S. M. Aldoshin *et al.* estudaram o emaranhamento em sistemas dímero [24]. Os autores valeram-se da equação de Bleaney e Bowers [25] para relacionar o emaranhamento com a susceptibilidade magnética do sistema. Nesse mesmo ano, M. Souza *et al.* obtiveram experimentalmente o emaranhamento de um composto dímero-trímero utilizando a susceptibilidade magnética. Uma discussão sobre o emaranhamento em cadeias infinitas de *spins* em temperatura zero pode ser encontrado em [21] e [23].

Neste ponto, a contribuição original do nosso trabalho é a obtenção do emaranhamento para sistemas trímero, relacionando-o com a susceptibilidade magnética do sistema. Juntamente com a obtenção do emaranhamento em função da temperatura e a temperatura crítica de emaranhamento para dois compostos que ainda não haviam sido estudados sob essa ótica. Os resultados desse trabalho foram publicados e podem ser encontrados em [26].

Obtivemos também, originalmente, o emaranhamento térmico (e não apenas em $T = 0$) de uma cadeia infinita de *spins*. Para tanto, nos valemos dos trabalhos de Bonner e Fisher [27], assim como os trabalhos de Eggert *et al.* [28], para relacionar o emaranhamento com a susceptibilidade magnética do sistema. Além de uma expressão geral para o emaranhamento em função da temperatura do sistema, estudamos, pela primeira vez, o emaranhamento no composto $\beta - \text{T}_e\text{VO}_4$. Onde apresentamos o emaranhamento desse composto em função da temperatura, bem como sua temperatura crítica de emaranhamento. Os resultados desse trabalho estão submetidos para a publicação [29].

A tese está estruturada da seguinte forma; no Capítulo 2, uma discussão sobre os aspectos teóricos em emaranhamento são apresentados. Apresentaremos a definição de estado emaranhado e, quando possível, critérios que nos permitam identificar emaranhamento e, uma vez identificado, como quantificá-lo. Apresentaremos o método de distância entre estados como medida de emaranhamento. Tal método possui, além do apelo geométrico, a vantagem de poder ser aplicado independentemente da dimensão do sistema e do grau de liberdade de seus constituintes. Apesar disso, não é um método muito comum na literatura e isso se deve ao fato de ser necessário, em geral, métodos numéricos para aplicá-lo. No entanto, apresentamos nesse trabalho, para sistemas que satisfaçam o critério de Peres-Horodecki [30], um cálculo analítico de emaranhamento utilizando a distância entre estados.

O Capítulo 3 se destina ao estudo da susceptibilidade magnética de sistemas dímero e de uma cadeia infinita de *spin-1/2* que satisfaçam a hamiltoniana de Heisenberg. O objetivo de

tal estudo encontra sua justificativa no relacionamento entre o cálculo de emaranhamento do sistema e sua medida experimental. A conexão com a experiência se faz por meio de grandezas termodinâmicas. Existem várias propostas na literatura de funções termodinâmicas que podem ser usadas, tais como a susceptibilidade magnética [23], energia interna [31, 22] e a magnetização [22]. Optamos por utilizar a susceptibilidade magnética e tal escolha se baseou no fato de que testemunhas de emaranhamento utilizando-a são independentes da hamiltoniana do sistema e podem ser aplicadas a sistemas genéricos de N spins de módulo S . A importância de tais expressões será vista no Capítulo 4, onde encontraremos expressões para o emaranhamento dos sistemas que estivermos estudando como função da susceptibilidade magnética do material. Existem vários trabalhos que obtiveram tal expressão, mas uma expressão analítica para a susceptibilidade só é utilizada no caso de um composto dímero, onde podemos fazer uso da equação de Bleaney-Bowers [25] ou uma expressão análoga para o caso $S > 1/2$. No Capítulo 3, será apresentado a equação de Bleaney-Bowers e sua generalização para spins maiores que $1/2$. Finalmente, apresentaremos algumas considerações sobre a susceptibilidade magnética em uma cadeia infinita de spin- $1/2$. Essa discussão será baseada nos trabalhos de Bonner e Fisher [27] e de Eggert *et al.* [28].

O estudo sobre emaranhamento em cadeias de Heisenberg será assunto do Capítulo 4. Nesse capítulo apresentaremos uma expressão geral para o cálculo do emaranhamento utilizando a distância entre estados e como relacioná-la com a susceptibilidade magnética. Calcularemos o emaranhamento e a temperatura crítica de emaranhamento para compostos dímero, trímero, dímero-trímero e para uma cadeia infinita de spins. No caso do composto dímero-trímero, faremos uma análise da influência do dímero, interagindo antiferromagneticamente com o trímero, para o emaranhamento e temperatura crítica de emaranhamento do sistema.

Capítulo 2

Emaranhamento

Nesse capítulo abordaremos o emaranhamento quântico. Essa abordagem será feita de duas formas: a primeira, visa dar um entendimento do fenômeno em si e como ele se diferencia tanto do senso comum e da física clássica. A segunda, pretende apresentar uma abordagem mais formal e matemática do fenômeno. Nesse ponto será discutido como podemos detectar emaranhamento em um sistema e, uma vez detectado, como quantificá-lo, caso seja possível. Apresentaremos algumas formas usuais de medir emaranhamento, uma das quais será a distância entre estados, que será utilizada neste trabalho.

2.1 Correlações quânticas

Como já mencionado na introdução, em 1935 o artigo EPR [1] lançou questionamentos sobre se a mecânica quântica seria ou não uma teoria completa da Natureza. Para os autores, uma teoria completa significa que todo *“elemento de realidade”* física deve ter uma contraparte na teoria física. Os autores definem elemento de realidade da seguinte forma: se, sem perturbarmos o sistema, pudermos prever com certeza (com probabilidade igual a um) o valor de uma quantidade física, então existe um elemento de realidade física correspondente a essa quantidade física¹. Cinco meses depois da publicação desse artigo, Bohr publica sua resposta [32], na qual refuta, em termos um tanto obscuros, as ideias dos autores. Esse assunto foi muito discutido entre Bohr e Einstein em várias conferências em que os dois participaram. No entanto, fora a resposta de Bohr, o artigo EPR foi largamente ignorado pelos físicos nas décadas subsequentes. Em 1964, o físico irlandês John Bell (1928-1990), trabalhando em Genebra, mostrou que um sistema físico satisfazendo as exigências do artigo EPR deveria satisfazer uma certa desigualdade deduzida por ele, desigualdade essa que sistemas quânticos

¹Tradução livre de [“If, without in any way disturbing a system, we can predict with certainty (i.e., with probability equal to unity) the value of a physical quantity, then there exists an element of physical reality corresponding to this physical quantity”] [1].

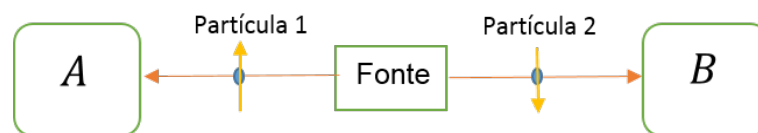


Figura 2.1: Ilustração esquemática de um experimento para medição da correlação de dois *spins*.

podem violar [2]. Esse trabalho renovou o interesse no artigo EPR, uma vez que agora havia a possibilidade de passá-lo pelo crivo da experiência. Esta, por sua vez, foi conclusivamente realizada em 1982 por Aspect e colaboradores [3].

Descreverei agora uma versão simplificada da proposta feita por Bell. Imaginemos um experimento consistindo de uma fonte que emite duas partículas de *spin*-1/2 (prótons ou elétrons, por exemplo) em sentidos opostos, uma em direção a um observador *A* e outra em direção a outro observador, que chamaremos de *B*. Imaginemos também, que essas duas partículas formem um estado singleto, ou seja, um estado com *spin* total nulo. O estado desse sistema pode ser escrito da seguinte forma

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (2.1)$$

Os observadores *A* e *B* podem escolher medir qualquer direção dos *spins* das partículas que chegam até eles. Essa situação está ilustrada na Figura 2.1.

Suponha que o observador *A* decida medir a componente *z* do *spin* da partícula 1. A probabilidade é de 50% de chance da medida ser $+z$ e 50% de chance de ser $-z$. Caso a medida dê $+z$, se o observador *B* também fizer uma medida da componente *z* do *spin* da partícula 2 irá obter, com certeza, o valor $-z$. Quando o observador *A* faz a medida, ele seleciona o primeiro estado dentro do parênteses no lado direito da Eq. (2.1). Se o observador *A* obtiver, como resultado, $-z$, o observador *B* obterá, obviamente o resultado $+z$ e o estado selecionado seria o segundo termo entre parênteses no lado direito da Eq. (2.1). Nesse caso, uma vez que *A* (ou *B*) realize uma medida, ele saberá com certeza qual valor dará a medida de *B* (*A*), não importando a que distâncias eles estejam. Existe uma perfeita correlação negativa entre os *spins*. Se *A* não realizar medida, *B* tem 50% de chance de obter $+z$ e 50% de chance de obter $-z$, mas depois que *A* realizar a medida, temos 100% de certeza sobre o resultado que será obtido por *B*. O mesmo seria válido para qualquer eixo comum que os dois observadores escolhessem para fazer as medidas. Podemos resumir esse resultado da seguinte forma: *Se A e B resolvem realizar medidas da mesma componente do spin, quando um deles obtiver o resultado de sua medida, saberá, instantaneamente, o resultado da medida do outro observador (existe uma correlação perfeita entre as duas medidas).*

Observe que não há nada de estranho nessa conclusão. Esse caso é análogo a pegarmos duas caixas opacas idênticas, colocarmos uma bola preta em uma delas e uma bola branca na outra, fecharmos as caixas e enviarmos, aleatoriamente, uma para qualquer lugar do universo e ficarmos com a outra. Antes de abrirmos as caixas não sabemos em qual está a bola branca e em qual está a preta, mas ao abrirmos uma delas (a que ficou, por exemplo) saberemos instantaneamente qual bola está na outra caixa.

Essa analogia, embora esclarecedora, é simples demais quando comparada com a mecânica quântica. A mecânica quântica é mais sofisticada, já que podemos medir, além da componente z , as componentes x e y do *spin*. É como se, na analogia do parágrafo anterior, pudéssemos escolher, ao fazermos a medida, que cores poderíamos observar ao abrir a caixa e olhar a bola que está dentro dela, azul-vermelho ou verde-amarelo, por exemplo.

Analisemos agora o que acontece se o observador A escolher medir a componente x (ou y) do *spin* da partícula 1 enquanto o observador B mede a componente z do *spin* da partícula 2. Se A medir $+x$ (ou $+y$), B tem 50% de obter $+z$ e 50% de chance de obter $-z$. Vemos, com isso, que uma medida do observador A não determina o valor que será obtido pelo observador B se eles escolherem medir componentes diferentes do *spin* das respectivas partículas. Podemos resumir esse resultado da seguinte forma: *se os observadores A e B resolvem medir componentes diferentes dos spins das respectivas partículas, não existirá correlação entre as duas medidas.*

Esta parte da experiência, por si só, também não causa nenhum “estranhamento”. É como se duas pessoas, cada uma munida de uma moeda, estivessem em duas cidades bem distantes. Elas decidem jogar as moedas várias vezes e anotam o valor obtido, depois elas se encontram e comparam os resultados. Elas concluirão, com certeza, que os eventos são independentes, ou seja, não existe correlação entre as medidas, analogamente à situação descrita no parágrafo anterior.

A peculiaridade da mecânica quântica e sua fuga do senso comum surge quando consideramos as duas conclusões em conjunto. Ora, na primeira parte vimos que existe uma correlação perfeita entre as medidas, nesse sentido é como se as partículas já soubessem como se comportar ao serem medidas, como se já tivessem decidido isso na fonte, mas isso é incompatível com a segunda conclusão que afirma que não há correlação entre as medidas. Isso mostra que os resultados que o observador B obtém dependem de que tipo de medida o observador A decide fazer, mesmo eles estando muito distantes um do outro e, portanto, não se comunicando. Não dá para propor um mecanismo que explique esses dois resultados em conjunto se excluirmos a ação à distância. Esse fato pode ser entendido matematicamente ao observarmos que embora possam estar muito distantes, o estado que descreve as duas partículas é um só, Eq. (2.1), e não temos informação, através dessa função de onda, de uma partícula individualmente, ape-

nas do sistema todo. Isso é o que chamamos de estado não-separável (emaranhado). Quando fazemos uma medida do sistema, a função de onda colapsa instantaneamente tornando-se, por exemplo, apenas o primeiro termo entre parênteses no lado direito da Eq. (2.1) ao medirmos a componente z do *spin* da partícula 1 e obtermos $+z$. Essa ação à distância, no entanto, é completamente inútil como mecanismo de transmissão de informação. Essa ação é revelada somente através da comparação entre os dois experimentos feitos independentemente, ou seja, a causalidade está preservada. Em mais uma analogia, imaginemos que as duas pessoas que foram com as respectivas moedas para cidades distantes, percebessem, atônitas, ao compararem seus resultados, que toda vez que uma media cara, a outra media coroa e vice-versa. Diríamos, nesse caso, que as moedas estão emaranhadas, mas só foi possível essa conclusão por meio da comparação das duas medidas feitas independentemente. O leitor mais interessado nessa visão mais descritiva do fenômeno poderá encontrar mais informações nas referências [33, 34, 35, 36], para citar apenas algumas.

2.2 Estados separáveis e emaranhados

Vamos discutir agora como podemos estudar matematicamente o emaranhamento quântico. Para tanto, vamos começar definindo quando um estado está emaranhado. Sejam A e B dois subsistemas com \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B sendo seus respectivos espaços de Hilbert associados. Dizemos que um estado puro $|\psi\rangle$ é separável se puder ser escrito na forma

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle, \quad (2.2)$$

com $|\psi_A\rangle \in \mathcal{H}_A$ e $|\psi_B\rangle \in \mathcal{H}_B$. Os estados que não admitem a forma (2.2) foram chamados por E. Schrödinger, em 1936, de estados emaranhados e tal denominação é utilizada até hoje.

Essa definição pode ser generalizada para o caso de, ao invés de dois, termos N subsistemas. No entanto, nesse caso, podemos ter diferentes graus de separabilidade. Se pudermos escrever a função de onda do sistema na forma

$$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \dots |\psi_K\rangle, \quad (2.3)$$

dizemos que o sistema é K -separável. Se $K = N$ dizemos que o sistema é completamente separável.

2.3 Matriz densidade; estados puros e misturados

Consideremos o cálculo do valor esperado de um dado operador A sobre o estado $|\psi\rangle$.

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle \\
 &= \frac{\sum_n \langle \psi | n \rangle \langle n | A | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \\
 &= \frac{\sum_n \langle n | A | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}.
 \end{aligned}$$

Vamos, agora, definir o que chamaremos de operador densidade (o termo matriz densidade é um termo mais comum para designar esse operador) como sendo

$$\rho \equiv \frac{|\psi\rangle\langle\psi|}{\langle\psi|\psi\rangle}. \quad (2.4)$$

O que nos permite escrever

$$\begin{aligned}
 \langle A \rangle &= \sum_n \langle n | A \rho | n \rangle \\
 &= \text{Tr}(A\rho).
 \end{aligned}$$

A matriz densidade contém toda informação física que podemos obter do estado $|\psi\rangle$. Ela é particularmente útil para descrever misturas estatísticas. Além disso, como o traço é independente da representação, $\text{Tr}(A\rho)$ pode ser calculado usando qualquer base conveniente. Vamos apresentar as propriedades desse operador que será tão importante para o estudo do emaranhamento.

- **Não negatividade:** os autovalores de ρ podem assumir valores nulos ou positivos, mas nunca negativos

$$\rho \geq 0.$$

- **Hermiticidade:**

$$\rho = \rho^\dagger.$$

- **Idempotência:**

$$\rho = \rho^2.$$

- **Traço unitário:**

$$\begin{aligned}
 \text{Tr}(\rho) &= \sum_n \langle n|\rho|n\rangle \\
 &= \frac{\sum_n \langle n|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \\
 &= \frac{\sum_n \langle\psi|n\rangle\langle n|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \\
 &= \frac{\langle\psi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \\
 &= 1.
 \end{aligned}$$

Essa descrição é válida para estados que chamamos de estados puros. Estados puros, são estados descritos pelo mesmo vetor de estado $|\psi\rangle$. Em contraste, temos os chamados estados mistos, que são caracterizados por uma coleção de vetores de estados, $|\psi^{(i)}\rangle$ que não são, necessariamente, ortogonais. Estados mistos são uma mistura de estados puros, como o próprio nome sugere.

A matriz densidade para um estado misto assumirá a forma

$$\rho_m = \sum_{i=1}^N p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (2.5)$$

com $0 < p_i < 1$, $\sum_{i=1}^N p_i = 1$ e $\text{Tr}(\rho_m) = 1$. De (2.5) é evidente que

$$\rho_m^2 = \sum_i p_i^2 |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (2.6)$$

e, portanto

$$\text{Tr}(\rho_m^2) = \sum_i p_i^2 < 1. \quad (2.7)$$

Isto nos mostra que a matriz densidade de um estado misto não é idempotente. A idempotência garante que os autovalores da matriz são apenas² 1 e 0, e como $\text{Tr}(\rho) = 1$, existe apenas um autovalor diferente de zero e vale 1. O autovetor correspondente a esse autovalor é, na verdade, o vetor de estado correspondente ao sistema em questão. Esse fato é interessante porque a partir de agora podemos utilizá-lo para definir estados puros e mistos. Estados puros serão aqueles cuja matriz densidade é idempotente e estados mistos, inversamente, serão aqueles cuja matriz densidade não é idempotente.

Consideremos um estado composto $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Podemos utilizar a matriz densidade para obter o valor médio de um observável qualquer, $P = P_A \otimes \mathbf{1}_B$ do subsistema A em termos da base produto $|m^{(A)}n^{(B)}\rangle = |mn\rangle$ da seguinte forma:

²Já que $\rho = \rho^2 \Rightarrow \rho(\rho - 1) = 0$, logo ρ pode assumir apenas os valores 1 ou 0.

$$\begin{aligned}
Tr(P\rho) &= \sum_{mn} \langle mn | P_A \otimes \mathbf{1}_B \rho | mn \rangle \\
&= \sum_{mn} \sum_{m'n'} \langle mn | P_A \otimes \mathbf{1}_B | m'n' \rangle \langle m'n' | \rho | mn \rangle \\
&= \sum_{mn} \sum_{m'n'} \langle m | P_A | m' \rangle \delta_{nn'} \langle m'n' | \rho | mn \rangle \\
&= \sum_{mm'} \langle m | P_A | m' \rangle \sum_n \langle m'n | \rho | mn \rangle \\
&= \sum_{mm'} \langle m | P_A | m' \rangle \langle m' | \rho^{(A)} | m \rangle \\
&= \sum_m \langle m | P_A \rho^{(A)} | m \rangle \\
&= Tr_B(P_A \rho^{(A)}).
\end{aligned}$$

Dessa forma, podemos obter o valor médio de um observável no primeiro subsistema através da matriz

$$\langle m' | \rho^{(A)} | m \rangle = \sum_n \langle m'n | \rho | mn \rangle, \quad (2.8)$$

que é obtida da matriz densidade do sistema total tomando-se o que chamaremos de *traço parcial* sobre os índices do subsistema B . Obviamente o mesmo tratamento pode ser feito para se calcular um observável no subespaço B . A essa matriz, obtida via traço parcial sobre o outro subsistema, damos o nome de *matriz densidade reduzida*.

A matriz densidade reduzida compartilha quase todas as propriedades listadas anteriormente para a matriz densidade total, mas, em geral, ela não é idempotente. Isso nos mostra que a matriz densidade reduzida de um estado puro corresponde, na verdade, a um estado misto. Vemos então, que ao tomarmos o traço parcial de um sistema e, por conta disso, tentarmos obter informação sobre apenas uma parte do sistema, perdemos informação no processo e a matriz densidade reduzida pode ser vista como uma medida de quanta informação perdemos nesse processo. Em outras palavras, o sistema total contém mais informação do que a soma de suas partes.

Embora a matriz densidade reduzida não seja, em geral, idempotente, ela preserva a propriedade de ser não-negativa. Podemos demonstrar isso da seguinte forma

$$\begin{aligned}
\langle m | \rho^{(A)} | m \rangle &= \sum_n \langle mn | \rho | mn \rangle \\
&= \sum_n |\langle \psi | mn \rangle|^2 \geq 0,
\end{aligned}$$

para qualquer vetor $m \in \mathcal{H}_A$ e $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ e por linearidade, para qualquer ρ .

Consideremos agora um estado separável constituído por dois subsistemas A e B , dado por

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle. \quad (2.9)$$

Tomando o traço parcial sobre o subsistema B teremos a matriz densidade reduzida do subsistema A

$$\rho^{(A)} = Tr_B(\rho) = |\psi_A\rangle\langle\psi_A|. \quad (2.10)$$

E, nesse caso, vemos que a matriz densidade reduzida é idempotente. Chegamos, com isso, à conclusão de que estados puros separáveis são idempotentes e estados emaranhados, por outro lado, são não-idempotentes. Sabemos agora como identificar emaranhamento em um dado estado puro. Seria interessante agora medir o quanto um determinado estado está emaranhado. Uma forma natural de fazermos isso seria medir o quanto um determinado estado emaranhado é “não-idempotente”. Uma forma de se fazer isso é via entropias quânticas. Existem várias propostas de entropias na literatura (ver, por exemplo [7]). A mais comum e utilizada é a Entropia de Von Neumann, definida por

$$S(\rho) = -Tr(\rho \log_2 \rho). \quad (2.11)$$

Note que se o estado for puro, $S(\rho) = 0$. Isso acontece quando a informação sobre o sistema é completa. Para sistemas mistos, $S(\rho) \neq 0$. É mais conveniente utilizarmos a entropia de Von Neumann na forma

$$S(\rho) = - \sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i, \quad (2.12)$$

onde λ_i são os autovalores de ρ . Observe que para estados emaranhados teremos $0 < S(\rho) \leq \log_2 D$, onde D é a dimensão do subsistema. Se $S(\rho) = \log_2 D$ dizemos que o sistema está maximamente emaranhado. Mais detalhes sobre o formalismo dos operadores densidade e estados emaranhados podem ser encontrados, entre outros, em [7, 36, 37].

2.4 Critérios de separabilidade: sistemas abertos

Vimos anteriormente que dado um estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, podemos obter informação sobre qualquer um dos subsistemas desse estado via traço parcial e da matriz densidade reduzida. É interessante ressaltar que, nesse caso, o sistema como um todo é puro e sua matriz densidade

é idempotente, perdemos, em geral, a propriedade de idempotência quando olhamos para uma parte do sistema. É como se ao olharmos para uma parte do sistema o “resto” dele interagisse com essa parte emaranhando-a.

Imaginemos agora uma situação mais complexa. Consideremos um sistema que não esteja isolado, mas interaja com o resto do universo, um banho térmico, por exemplo. Nesse caso não é mais possível descrever o sistema por um vetor de estado, mas uma formulação via matriz densidade ainda é possível. Essa situação representa um estado misto mais geral do que o discutido anteriormente. Em temperaturas finitas, descrevemos o estado de equilíbrio térmico do sistema pela matriz densidade

$$\rho(T) = \frac{e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}}}{Z}, \quad (2.13)$$

onde $Z = \text{Tr} \left(e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}} \right)$ é a *Função de Partição* do sistema. De posse de $\rho(T)$ é possível calcularmos quantidades termodinâmicas do sistema, como energia interna, magnetização e susceptibilidade magnética.

Em sistemas como esses, a entropia quântica (como a entropia de Von Neumann, por exemplo) não é uma boa forma de calcularmos emaranhamento. Vamos discutir agora uma forma de identificar emaranhamento em sistemas assim e na próxima seção mostraremos como podemos quantificá-los.

Considere um estado misto constituído por dois subsistemas e descrito pela matriz densidade $\rho \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Esses subsistemas podem estar relacionados das seguintes formas:

- **Fatorabilidade:** Nesse caso, os dois subsistemas são completamente independentes e podem ser estudados separadamente. Dizemos que um estado é fatorável quando sua matriz densidade pode ser escrita na forma

$$\rho = \rho^{(A)} \otimes \rho^{(B)}. \quad (2.14)$$

- **Separabilidade:** Dizemos que o sistema é separável quando a matriz densidade que descreve esse sistema pode ser escrita na forma

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^{(A)} \otimes \rho_i^{(B)}, \quad (2.15)$$

com $p_i \geq 0$ e $\sum_i p_i = 1$. Observe que os subsistemas, nesse caso, não são completamente independentes, existem correlações entre eles, mas essas correlações são do tipo clássicas e, portanto, o sistema não está emaranhado.

- **Não-separável:** Nesse caso a matriz densidade do sistema não pode ser escrita em nenhuma das formas anteriores. O sistema possui, além das correlações clássicas, correlações quânticas que o caracterizam como estando emaranhado.

Nesse ponto, podemos concluir que o problema de sabermos se um dado estado está ou não emaranhado se resume em saber se a matriz densidade que descreve o sistema pode ou não ser escrita na forma (2.15). Essa, no entanto, não é uma tarefa fácil e não existe um critério geral para a separabilidade. Apresentaremos agora alguns critérios úteis para determinar a separabilidade ou não de estados quânticos.

2.5 Mapas positivos

Um método muito útil e também um dos mais utilizados para detectar emaranhamento em sistemas bipartidos são os chamados *mapas positivos*. Um mapa positivo é uma operação feita sobre a matriz densidade do sistema que sempre retorna, como resultado, um operador nulo ou positivo, nunca um valor negativo, ou seja

$$\Lambda(\rho) \geq 0, \quad \forall \rho \geq 0. \quad (2.16)$$

A conveniência dos mapas positivos no estudo de estados emaranhados se dá devido ao fato de que sua extensão, $\mathbf{1}_A \otimes \Lambda_B$ não é, necessariamente, positivo definida. No entanto, se tomarmos um estado separável

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^{(A)} \otimes \rho_i^{(B)}, \quad (2.17)$$

e aplicarmos a extensão de um mapa positivo, teremos

$$(\mathbf{1}_A \otimes \Lambda_B)(\rho) = \sum_i p_i \rho_i^{(A)} \otimes \Lambda_B(\rho_i^{(B)}) \geq 0. \quad (2.18)$$

Ou seja, todo estado separável possui extensão de mapa positivo, positiva. Dessa forma, caso apliquemos a extensão de um mapa positivo a um dado estado e obtivermos um valor negativo, saberemos, com certeza, que este estado é não separável, em outras palavras, é emaranhado. Note que todo estado separável possui extensão do mapa positivo, positiva, mas nem todo estado emaranhado possuirá extensão do mapa positivo negativa e, portanto, esse método só é capaz de detectar alguns estados emaranhados, mas nem todos, uma vez que se a extensão de um mapa positivo aplicada a um estado for positiva, não podemos afirmar que o estado seja separável. Isso só seria verdade se demonstrássemos que todas as extensões, de todos os mapas positivos, são positivas.

Um mapa positivo muito utilizado e capaz de identificar uma grande quantidade de estados emaranhados é a transposição, Γ , sendo sua extensão $\mathbf{1}_A \otimes \Gamma_B$ a transposta parcial $P\Gamma$. A transposição usual troca os índices das linhas da matriz densidade pelos índices da coluna e a transposição parcial troca apenas um dos índices. A transposição usual atua da seguinte forma

$$\langle i, k | \rho | j, l \rangle \longmapsto \langle j, l | \rho | i, k \rangle, \quad (2.19)$$

enquanto a transposição parcial atua da seguinte maneira

$$\langle i, k | \rho | j, l \rangle \longmapsto \langle i, l | \rho | j, k \rangle. \quad (2.20)$$

Temos agora uma forma muito simples de analisar o emaranhamento em um dado sistema. É só calcularmos a transposta parcial da matriz densidade que descreve o sistema e se algum de seus autovalores forem negativos é porque o sistema está emaranhado. Infelizmente, em geral, se os autovalores da transposta parcial da matriz densidade forem todos positivos não podemos afirmar que o sistema seja separável. Em 1996 os irmãos Horodecki demonstraram um importante resultado mostrando que para sistemas com espaço de Hilbert com dimensões $2 \otimes 2$ e $2 \otimes 3$ a positividade da transposta parcial é condição necessária e suficiente para a separabilidade. Esse resultado é conhecido na literatura como critério de Peres-Horodecki [18].

2.6 Testemunha de emaranhamento

Uma outra forma muito útil de se detectar emaranhamento é a chamada *testemunha de emaranhamento*. Essa técnica se deve primeiramente aos irmãos Horodecki [18] e, posteriormente, obteve um estudo mais aprofundado por parte de Barbara M. Terhal [38]. Uma testemunha de emaranhamento³ (EW) consiste de um observável W que satisfaça a condição

$$Tr(W\rho) \geq 0, \quad (2.21)$$

para todos os estados separáveis. Esse observável (testemunha de emaranhamento) pode ser negativo, no entanto, para alguns estados emaranhados.

Esse método possui uma interpretação geométrica interessante e elucidativa. Seja Ω o conjunto de todas as matrizes densidade, \mathcal{S} o conjunto das matrizes densidade separáveis e $\Sigma = \Omega - \mathcal{S}$, o conjunto das matrizes densidades emaranhadas. \mathcal{S} é um conjunto convexo,⁴ portanto, dado qualquer ponto pertencente a Σ é possível traçar um plano que separa esse ponto do conjunto \mathcal{S} , essa situação está ilustrada na Figura 2.2. O que as testemunhas fazem é definir esse plano, quanto mais próximo do conjunto \mathcal{S} esse plano estiver, mais otimizada ela será e poderá detectar um maior número de estados emaranhados. Da figura fica claro que se quiséssemos obter todos os estados emaranhados e, conseqüentemente, separáveis, teríamos

³Do termo em inglês “*Entanglement Witness*”.

⁴Para vermos isso basta tomarmos ρ_1 e ρ_2 como sendo duas matrizes densidade. Qualquer combinação da forma $\rho = \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2$, com $\lambda \in [0, 1]$ satisfaz $\rho = \rho^\dagger$, $\rho \geq 0$ e $Tr(\rho) = 1$, mostrando que o conjunto das matrizes densidade formam um conjunto convexo.

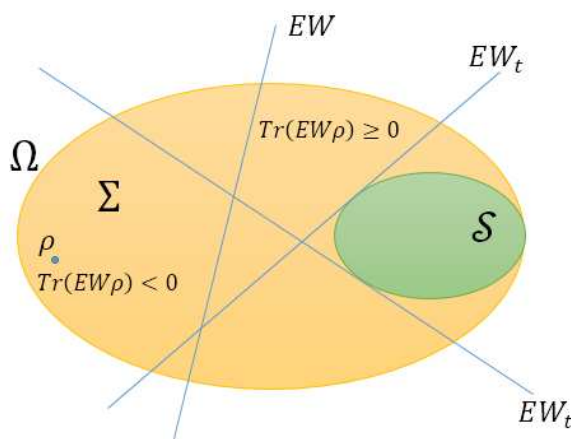


Figura 2.2: Ilustração esquemática das testemunhas de emaranhamento. EW_t são as testemunhas que tangenciam o conjunto das matrizes densidade separáveis.

que utilizar todas as testemunhas de emaranhamento que tangenciam \mathcal{S} , mas, em geral, o número de planos que tangenciam o conjunto \mathcal{S} é infinito.

2.7 Quantificação de emaranhamento em sistemas bipartidos

Vimos até agora que não existe um critério geral para detectar emaranhamento ou todos os estados separáveis de um certo sistema. Essa tarefa se torna mais fácil quando estivermos tratando sistemas com dimensão igual ou inferior a $2 \otimes 3$, quando podemos lançar mão do critério de Peres-Horodecki. A questão que vamos discutir agora é: uma vez detectado o emaranhamento, como podemos quantificá-lo? Mais uma vez, a resposta a esta pergunta não é tão simples. Não existe um critério geral para quantificar emaranhamento. Na literatura é possível encontrar várias propostas e candidatos a funções capazes de medir emaranhamento [7, 15, 23]. Existem alguns critérios que qualquer candidato deve seguir, mas até mesmo a lista desses critérios não é assunto fechado dentro da física. Listarei alguns dos critérios mais aceitos, embora existam na literatura propostas que não satisfazem alguns dos requisitos listados, o que não quer dizer que não possam ser usados.

Seguiremos a proposta apresentada por V. Vedral *et al.* [17]. Eles propõe que uma boa função utilizada como medida de emaranhamento $\mathcal{E}(\rho)$, deve satisfazer os seguintes critérios:

- Se ρ é separável, então

$$\mathcal{E}(\rho) = 0.$$

- Operações locais unitárias deixam \mathcal{E} invariante, isto é

$$\mathcal{E}(\rho) = \mathcal{E}(U_A \otimes U_B \rho U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger).$$

- O emaranhamento do sistema não pode aumentar devido a operações locais e comunicações clássicas, ou seja

$$\mathcal{E}(\Omega_{OLCC}(\rho)) \leq \mathcal{E}(\rho).$$

A importância do primeiro item é clara, já que estados separáveis não possuem emaranhamento. O segundo item deve ser imposto uma vez que transformações unitárias produzem apenas uma mudança nas bases do sistema de carácter local, o que não altera as correlações quânticas. O terceiro item é desejável uma vez que qualquer aumento nas correlações do sistema por meio de $OL + CC$ deve ser de natureza clássica e portanto não deve produzir um aumento no emaranhamento do sistema.

Agora vamos apresentar a *negatividade* e o *emaranhamento de formação* (que dá origem à fórmula de Wootters). Essas são duas formas largamente utilizadas na literatura para se quantificar emaranhamento. Por fim, apresentaremos a distância entre estados como medida de emaranhamento. Este último é o método que iremos utilizar em nossos trabalhos, por este motivo ele será apresentado com um detalhamento maior.

2.7.1 Negatividade

A negatividade é uma medida de fácil aplicação e que está diretamente relacionada ao critério de Peres-Horodecki. Por definição, a negatividade é dada por [39]

$$\mathcal{N}(\rho) = \sum_i |\lambda_i|, \quad (2.22)$$

onde λ_i são os autovalores negativos da trasposta parcial de ρ .

2.7.2 Emaranhamento de formação e concorrência

Considerando o fato de que o emaranhamento de estados mistos pode ser visto como uma mistura de estados puros, seremos levados ao conceito de emaranhamento de formação [40, 41]. O problema é que uma mistura estatística pode ter muitas decomposições diferentes e cada uma com uma média de entropia diferente. Para contornar esse problema, escolheremos, para definir a entropia de formação $EF(\rho)$, a que possuir a menor média de entropia, ou seja

$$EF(\rho) = \min \sum_i p_i S(\rho). \quad (2.23)$$

Em sistemas $2 \otimes 2$ é possível obter uma expressão analítica para o emaranhamento de formação

$$EF = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x), \quad (2.24)$$

com

$$x = \frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2},$$

sendo C o que chamamos de *concorrência*. A concorrência é definida por

$$C = \max(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}), \quad (2.25)$$

onde os λ 's são os autovalores, em ordem decrescente, do operador

$$R = \rho(\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho^*(\sigma^y \otimes \sigma^y), \quad (2.26)$$

com σ^y sendo a matriz de Pauli

$$\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.27)$$

Como a concorrência é uma função monótona do emaranhamento, ela pode ser tomada como medida do emaranhamento. A concorrência pode variar de 0, caso que não há emaranhamento no sistema, a 1, quando o sistema está maximamente emaranhado.

2.8 Distância entre estados como medida de emaranhamento

Mostramos na Seção 2.6 que a testemunha de emaranhamento é uma ferramenta útil, de fácil aplicação e com um forte apelo geométrico. Quando discutimos a interpretação geométrica das testemunhas de emaranhamento, utilizamos o fato do conjunto das matrizes densidade, assim como o conjunto das matrizes densidade separáveis, serem um conjunto convexo. Esse fato será utilizado em maior profundidade agora, pois ele nos permitirá utilizar a distância entre estados quânticos como uma medida do grau de emaranhamento do sistema. Para tanto, vamos apresentar algumas propriedades relevantes dos conjuntos convexos.

2.8.1 Convexidade do conjunto das matrizes densidade

Dizemos que um subconjunto X de um espaço vetorial⁵ E é convexo se, e somente se, o segmento de reta que liga dois pontos quaisquer a, b de X , também pertence a X , de forma

⁵Em nosso caso, esse espaço é o espaço de Hilbert.

equivalente,

$$\forall \lambda \in [0, 1] \Rightarrow \lambda a + (1 - \lambda)b \in X.$$

Definimos o conjunto das matrizes densidade como sendo constituído pelas matrizes hermitianas, $\rho = \rho^\dagger$, positivas definidas, $\rho \geq 0$, e de traço unitário, $Tr(\rho) = 1$. Sejam ρ_1 e ρ_2 duas matrizes densidade. Qualquer combinação da forma

$$\rho = \lambda \rho_1 + (1 - \lambda) \rho_2,$$

com $\lambda \in (0, 1)$ possui as três propriedades citadas anteriormente. Isso prova que o conjunto das matrizes densidade é um conjunto convexo.

Outra definição importante é a seguinte: se todo ponto de E contém uma única menor distância ao conjunto X , diremos que X é um conjunto de Chebyshev. Pode-se mostrar que todos os conjuntos convexos fechados não vazios, são conjuntos de Chebyshev [42].

Vamos usar a distância entre estados quânticos como uma medida do grau de emaranhamento do sistema e essas informações são muito importantes para esse fim, uma vez que ela nos diz que, sendo o conjunto das matrizes densidade um conjunto convexo, fechado e não vazio, ele é um conjunto de Chebyshev e, portanto, não só podemos falar em distância, como também existe uma única menor distância entre um ponto no conjunto que o contém e esse conjunto, propriamente dito.

Como motivação, Vedral *et al.* [17] tomaram a informação mútua de Von Neumann definida por

$$I_N(\rho_A : \rho_B; \rho_{AB}) \equiv S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}), \quad (2.28)$$

onde $S(\rho)$ é a entropia de von Neumann definida na Seção 2.3. I_N não pode aumentar sob operações locais, mas sob operações locais + comunicações clássicas, pode. Isso mostra que I_N não pode distinguir entre correlações clássicas e quânticas. Intuitivamente, a informação mútua de Von Neumann calcula a “distância” entre um dado estado ρ_{AB} e uma de suas partes não-emaranhadas $\rho_A \otimes \rho_B$. Essa ideia motiva a proposta de medida de emaranhamento via distância entre estados que será descrita na Seção seguinte.

2.8.2 Distância entre estados e emaranhamento

Consideremos o conjunto das matrizes densidade como sendo Ω . Ele é constituído pelo conjunto das matrizes densidades separáveis, \mathcal{S} e o conjunto das matrizes densidade emaranhadas, $\Sigma = \Omega - \mathcal{S}$. A proposta é que o grau de emaranhamento de um dado estado $\sigma \in \Sigma$ será definido como sendo a menor distância entre esse estado e o estado separável $\rho \in \mathcal{S}$ mais próximo. Ou seja,

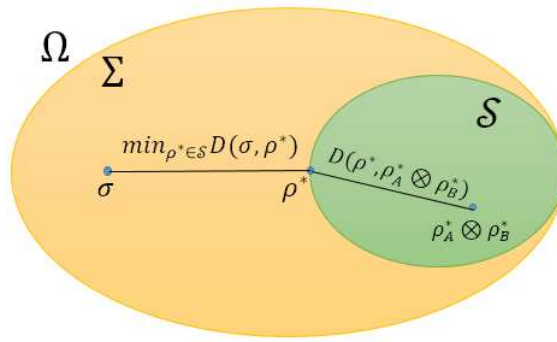


Figura 2.3: Ilustração esquemática da distância entre estados como medida de emaranhamento.

$$\mathcal{E}(\sigma) = \min_{\rho \in \mathcal{S}} D(\sigma, \rho), \quad (2.29)$$

onde D é uma medida de distância entre os dois estados que satisfaça as condições listadas na Seção 2.7. O estado σ possui também correlações clássicas, a Eq. (2.29) mede apenas as correlações quânticas. As correlações clássicas podem ser obtidas da seguinte forma [17]: seja $\rho^* \in \mathcal{S}$ o estado separável mais próximo de σ pela medida de D . As correlações clássicas podem ser obtidas por

$$\mathcal{E}_{cl} = D(\rho^*, \rho_A^* \otimes \rho_B^*), \quad (2.30)$$

sendo ρ_A^* e ρ_B^* as matrizes densidade reduzidas do estado ρ^* . Esses conceitos estão ilustrados na Figura 2.3.

2.8.3 Norma de Hilbert-Schmidt

Existem várias propostas na literatura para a escolha de D [17]. Uma delas é a norma de Hilbert-Schmidt que pode ser vista como a norma de Frobenius para matrizes complexas [12, 15]. Utilizaremos essa norma devido à sua simplicidade e facilidade de aplicação.

Definimos o produto interno de matrizes hermitianas da seguinte forma

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr}(AB). \quad (2.31)$$

Esse produto interno já nos leva, naturalmente, à escolha da norma

$$|A| = \sqrt{\langle A, A \rangle} = \sqrt{\text{Tr}(A^2)}, \quad (2.32)$$

que nos dá uma métrica Euclidiana no espaço vetorial real das matrizes hermitianas, chamada de métrica de Hilbert-Schmidt. O quadrado dessa métrica será

$$|A|^2 = \text{Tr}(A^2), \quad (2.33)$$

e a distância entre duas matrizes será

$$|A - B| = \sqrt{\text{Tr}(A - B)^2}. \quad (2.34)$$

Capítulo 3

Susceptibilidade magnética em cadeias de Heisenberg.

Nesse capítulo, estamos interessados em apresentar o modelo de Heisenberg para sistemas magnéticos. Particularmente, estudaremos o modelo de Heisenberg para sistemas que podem ser modelados como constituídos por dímeros e cadeias infinitas. Nosso foco principal nesse capítulo é apresentar uma expressão analítica para a susceptibilidade magnética de compostos dímero e cadeias infinitas com $\text{spin} = 1/2$ e J arbitrário. Tal expressão, para o caso do dímero, é a bem conhecida Equação de Bleaney e Bowers [25]. As considerações sobre cadeias de *spins* se baseará nos trabalhos de Bonner e Fisher [27] e de Eggert *et al* [28].

3.1 Modelo de Heisenberg

Podemos explicar o comportamento paramagnético de vários compostos considerando um modelo de *spins* localizados interagindo apenas com um campo magnético externo. Tal consideração, no entanto, não é capaz de explicar a magnetização residual existente em alguns materiais, como ferromagnetos, que permanecem magnetizados mesmo depois de removido o campo externo.

A fim de explicar o ordenamento magnético, mesmo a altas temperaturas e na ausência de campo magnético externo, Heisenberg e Dirac propuseram, na década de 30, um modelo que leva em conta argumentos quânticos. Tais argumentos não tem quaisquer análogos clássicos e são uma consequência geométrica advinda da necessidade de simetrização das funções de onda. Essa simetrização é necessária para que a função de onda satisfaça o princípio da exclusão de Pauli. A hamiltoniana proposta por Heisenberg é a seguinte

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - g\mu_B \sum_i \vec{B} \cdot \vec{S}_i, \quad (3.1)$$

com J sendo a constante de troca. O termo constante se deve ao fato de, nesse caso, ela ser constante para qualquer ponto da cadeia de Heisenberg. Embora, neste trabalho, trataremos apenas desse caso, existem modelos mais gerais onde são tratados sistemas com J variando com a posição do *spin* na cadeia. É interessante notar que, como explícito no somatório, a soma é feita apenas entre os primeiros vizinhos, já que a constante de troca envolve justaposição das funções de onda, que são apreciáveis apenas para sítios vizinhos. O segundo termo do lado direito da equação representa a interação dos *spins* com um campo magnético externo. Observe que se $J > 0$, a energia do sistema será minimizada caso os *spins* se alinhem paralelamente; materiais com essa característica são chamados de materiais ferromagnéticos. Por outro lado, caso $J < 0$, teremos uma minimização da energia do sistema quando os *spins* estiverem alinhados antiparalelamente; materiais que satisfazem essa condição são chamados de materiais antiferromagnéticos.

Uma característica interessante da hamiltoniana de Heisenberg é que, como na ausência de campo externo ela só possui produtos escalares entre os *spins*, ela será invariante sobre rotações comuns de todos os *spins*. Ou seja, nenhuma direção especial no espaço é privilegiada, sendo assim, os *spins* na fase ferromagnética podem se ordenar em qualquer direção arbitrária. A direção de magnetização será determinada por algum termo de anisotropia na cadeia ou por um campo magnético externo. Em alguns casos, a estrutura cristalina pode ser anisotrópica, de tal forma que, como consequência, permite apenas que os *spins* se orientem em duas direções, $+z$ e $-z$, por exemplo, e não em qualquer direção arbitrária. Essa situação pode ser descrita pelo modelo de Ising

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - B \sum_i \sigma_i^z, \quad (3.2)$$

que é consideravelmente mais simples que a Hamiltoniana de Heisenberg.

3.2 Susceptibilidade Magnética em Sistema Dímero

Existem compostos que podem ser modelados pela hamiltoniana de Heisenberg e, além disso, como sendo um composto dinuclear, também são chamados compostos dímero. Dímero, em física, é um termo aplicado à interação entre duas unidades similares, ou monômeros. O ácido acético é um exemplo onde as ligações de hidrogênio proporcionam tal interação.

Para obtermos a susceptibilidade magnética para sistemas desse tipo, faremos uso da equação de Van Vleck. Vamos apresentar, de forma resumida, os passos para se obter tal equação, mais detalhes podem ser visto em [43]. Sabemos que

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B}, \quad (3.3)$$

onde χ é a susceptibilidade magnética, M , a magnetização e B , o campo magnético externo. Consideremos, agora, uma molécula com espectro de energia E_n , ($n = 1, 2, 3, \dots$), na presença de um campo magnético B . Para cada nível de energia, definimos a magnetização microscópica como

$$\mu_n = \frac{\partial E_n}{\partial B}. \quad (3.4)$$

Podemos obter a magnetização molar macroscópica somando as magnetizações microscópicas, levando em conta o fator de Boltzmann, que nos fornece

$$M = \frac{N \sum_n \left(\frac{-\partial E_n}{\partial B} \right) e^{\frac{-E_n}{k_B T}}}{\sum_n e^{\frac{-E_n}{k_B T}}}. \quad (3.5)$$

Essa é uma expressão fundamental no magnetismo e não possui nenhuma aproximação. Dela podemos obter χ utilizando a Eq. (3.3).

3.2.1 Equação de Van Vleck

Embora geral, a Eq. (3.5) não é fácil de ser aplicada, uma vez que ela depende do conhecimento de

$$E_n = f(B),$$

para todos os estados térmicos ocupados. A fim de obter uma expressão mais simples para a magnetização, Van Vleck, em 1932, fez algumas aproximações e obteve uma equação que hoje leva seu nome. Para obtê-la, primeiro vamos expandir E_n em potências crescentes de B

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} B + E_n^{(2)} B^2 + \dots, \quad (3.6)$$

aqui, $E_n^{(0)}$ é o nível n de energia a campo zero, $E_n^{(1)}$ e $E_n^{(2)}$ são os chamados coeficientes de Zeemann de 1º e 2º ordem, respectivamente. Dessa forma, de (3.4)

$$\mu_n = -E_n^{(1)} - 2E_n^{(2)} B + \dots \quad (3.7)$$

Agora, consideremos

$$\frac{B}{k_B T} \ll 1,$$

o que nos possibilita escrever

$$e^{\frac{-E_n}{k_B T}} \cong e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}} e^{-\frac{E_n^{(1)} B + E_n^{(2)} B^2}{k_B T}} = e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}} \left(1 - \frac{E_n^{(1)} B}{k_B T} \right). \quad (3.8)$$

Isso nos leva a

$$M = \frac{N \sum_n \left(-E_n^{(1)} - 2E_n^{(2)} B \right) \left(1 - \frac{E_n^{(1)} B}{k_B T} e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}} \right)}{\sum_n \left(1 - \frac{E_n^{(1)} B}{k_B T} \right) e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}}}. \quad (3.9)$$

Em campo externo nulo, a magnetização será nula, logo

$$\sum_n E_n^{(1)} e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}} = 0,$$

o que reduz a Eq. (3.9) a

$$M \cong \frac{NB \sum_n \left(\frac{E_n^{(1)2}}{k_B T} - 2E_n^{(2)} \right) e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}}}{\sum_n e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}}}. \quad (3.10)$$

Sendo assim,

$$\chi = \frac{N \sum_n \left(\frac{E_n^{(1)2}}{k_B T} - 2E_n^{(2)} \right) e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}}}{\sum_n e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}}}, \quad (3.11)$$

que é a conhecida Equação de Van Vleck.

Quando todas as energias são lineares em H, os coeficientes Zeeman de 2^o ordem são nulos, logo

$$\chi = \frac{N \sum_n E_n^{(1)2} e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}}}{K_B T \sum_n e^{\frac{-E_n^{(0)}}{k_B T}}}. \quad (3.12)$$

3.2.2 Equação de Bleaney e Bowers

Consideremos agora um composto dímero descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J \vec{S}_A \cdot \vec{S}_B, \quad (3.13)$$

com \vec{S}_A e \vec{S}_B sendo os *spins* de cada unidade dimérica, J é a constante de troca e $S_A = S_B = 1/2$. A combinação de dois *spins*-1/2 pode carregar um *spin* total de 1 ou 0 dependendo se

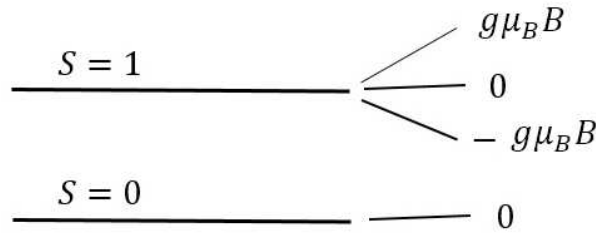


Figura 3.1: Níveis de energia do estado tripleto e singleto, respectivamente.

n	$E_n^{(0)}$	$E_n^{(1)}$
1	0	$-g\mu_B$
2	0	0
3	0	$g\mu_B$
4	J	0

Figura 3.2: Tabela com os valores de energia para o estado tripleto e singleto, tomando o estado tripleto como origem.

ocupam a configuração singleto ou tripleto. Caso o estado fundamental seja $S = 0$ e $J < 0$, teremos uma interação antiferromagnética, se o estado fundamental for $S = 1$ e $J > 0$, teremos uma interação ferromagnética.

Na ausência de qualquer outro fenômeno, a perturbação Zeeman não afeta o estado singleto e divide o estado tripleto da maneira mostrada na Figura 3.1, onde g é o fator de Landé e μ_B é o magneto de Bohr. Se tomarmos a energia do estado tripleto como origem, teremos os valores apresentados na Tabela 3.2, uma vez que $J = E(S = 0) - E(S = 1)$.

Substituindo esses valores na Eq. (3.12) teremos

$$\chi = \frac{2N_A(g\mu_B)^2}{k_B T \left(3 + e^{\frac{-J}{k_B T}} \right)}, \quad (3.14)$$

onde N_A é o número de Avogadro. Essa equação foi obtida pela primeira vez em 1952 por Bleaney e Bowers [25].

A Eq. (3.14) é válida para o caso em que $S_A = S_B = 1/2$, para o caso mais geral, em que $1/2 < S_A = S_B \leq 5/2$ temos a seguinte expressão:

$$\chi = \frac{2N(g\mu_B)^2}{k_B T} \frac{e^x + 5e^{3x} + 14e^{6x} + 30e^{10x} + 55e^{15x}}{1 + 3e^x + 5e^{3x} + 7e^{6x} + 9e^{10x} + 11e^{15x}}, \quad (3.15)$$

com $x = J/k_B T$. A expressão (3.15) se aplica ao caso $S_A = S_B = 5/2$. Para o caso $S_A = S_B = 2$, devemos eliminar o último termo do numerador e do denominador da equação e para $S_A = S_B = 3/2$, devemos, novamente, eliminar o último termo do numerador e do denominador da equação e assim por diante. Mais detalhes sobre a dedução dessa equação

pode ser encontrado na Referência [43].

3.3 Susceptibilidade magnética em cadeia de spin infinita

Esta seção se destina a apresentar a susceptibilidade magnética de uma cadeia infinita de *spins* com interação antiferromagnética entre os primeiros vizinhos. Consideraremos os casos em que os *spins* estejam igualmente espaçados. O caso mais simples desse sistema é o arranjo de íons de cobre(II) com $S = 1/2$.

A hamiltoniana do sistema, na ausência de campo magnético externo e considerando um sistema isotrópico, será dada por

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}. \quad (3.16)$$

Quando $N \rightarrow \infty$, não existe método analítico que nos permita determinar os estados de mais baixa energia e a susceptibilidade magnética. No entanto, podemos resolver o problema tomando uma cadeia com os *spins* arranjados em forma de anel e fazendo $N \rightarrow \infty$.

Esse método foi aplicado, primeiramente, por Bonner e Fisher em 1964. Eles calcularam explicitamente a susceptibilidade magnética para um anel contendo até $N = 11$ spins e propuseram a extrapolação para o caso em que $N \rightarrow \infty$ [27].

Um problema que se apresenta no caso de $J < 0$ (interação entre os primeiros vizinhos antiferromagnética) e N finito, é o fato da susceptibilidade magnética, χ , ser diferente para N par e ímpar em baixas temperaturas. O estado fundamental do sistema com N par é diamagnético e χ (por sítio) tende a zero quando $T \rightarrow 0$. Por outro lado, o estado fundamental se N for ímpar, é um dubleto, $S = 1/2$ e χ diverge quando $T \rightarrow 0$. Precisamos, então, determinar o limite de baixas temperaturas de χ quando $N \rightarrow \infty$.

Bonner e Fisher mostraram que este limite é finito e dado por

$$(\chi)_{BT} = \frac{0,14692 N_A (g\mu_B)^2}{|J|}, \quad (3.17)$$

onde N_A é o número do Avogadro.

Posteriormente, em 1994, Eggert, Affleck e Uchida [28] calcularam com maior precisão a susceptibilidade magnética de uma cadeia de *spins* infinita em baixas temperaturas mostrando uma dependência assintótica com $(\ln T)^{-1}$. Em temperaturas mais altas os dois resultados coincidem. Eles encontraram que em temperaturas $T < 0,1J/k_B$ a susceptibilidade magnética é dada por

$$\chi(T) = \frac{N_A(g\mu_B)^2}{\pi^2 J} \left[1 + \frac{1}{2 \ln\left(\frac{T_0}{T}\right)} \right], \quad (3.18)$$

onde T_0 é um parâmetro que depende, em geral, da interação entre os segundos vizinhos. Se desprezarmos essa interação, $T_0 \simeq 7,7J/k_B$.

Bonner e Fisher obtiveram a seguinte expressão numérica para a susceptibilidade magnética em temperaturas mais altas

$$\chi(T) = \frac{N(g\mu_B)^2}{k_B T} \frac{0,25 + 0,074795x + 0,075235x^2}{1,0 + 0,9931x + 0,172135x^2 + 0,757825x^3}, \quad (3.19)$$

com $x = |J|/k_B T$.

Capítulo 4

Emaranhamento em cadeias de Heisenberg

Este capítulo destina-se a apresentar um estudo sobre o emaranhamento quântico em cadeias de Heisenberg. Estaremos interessados em sistemas unidimensionais com $spin-1/2$. Estes sistemas já vem sendo estudado por outros autores desde os anos 90 e muito avanço tem sido feito na área. As principais contribuições dessa tese serão apresentadas nesse capítulo. Mostraremos que existe uma relação direta entre a constante de troca J e a temperatura crítica de emaranhamento T_e e que quanto maior a constante de troca de um composto com acoplamento antiferromagnético, maior a temperatura crítica de emaranhamento do mesmo. Trataremos aqui de sistemas que podem ser modelados como dímero, trímero, dímero-trímero e uma cadeia infinita de $spins$. Tais sistemas apresentam o que chamamos de *emaranhamento térmico* e *emaranhamento macroscópico*.

Como contribuição original, mostramos uma forma de se calcular analiticamente o emaranhamento via distância entre estados. Como verificação do método, calculamos o emaranhamento térmico para o composto Ferro Nitrosyl e para o composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$, ambos já haviam sido calculados utilizando a concorrência na literatura e a comparação dos resultados mostra a eficiência do método. No caso do composto $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$ fizemos, ainda, uma estimativa da influência de outras possíveis fontes de emaranhamento no sistema, isso foi possível por meio da utilização da susceptibilidade magnética para o sistema trímero.

Um problema que permanecia em aberto, era como se comportava o emaranhamento com a temperatura em compostos que podem ser modelados como trímero satisfazendo a hamiltoniana de Heisenberg para $spin-1/2$. Obtivemos nesse trabalho uma expressão geral para o emaranhamento térmico em tais compostos. Além disso, para os compostos $2b \cdot 3CuCl_2 \cdot 2H_2O$ e $(3MAP)_2Cu_2Cl_2$, não havia sido mostrado se eles apresentavam emaranhamento e/ou emaranhamento térmico, bem como seu comportamento com a temperatura. Isso é feito nesse capítulo utilizando a distância entre estados e relacionando o emaranhamento com a suscep-

tibilidade magnética do material.

O emaranhamento em uma cadeia infinita de *spins* já despertou o interesse de outros autores [21, 23]. Nossa contribuição nesse problema é a determinação do emaranhamento térmico na cadeia infinita de Heisenberg, bem como a temperatura crítica de emaranhamento de tal cadeia. O composto $\beta - \text{T}_e\text{VO}_4$ pode ser modelado como uma cadeia infinita de *spin-1/2* antiferromagnética e um estudo do emaranhamento nesse composto é feito, pela primeira vez, nesse trabalho.

Os resultados apresentados nessa tese geraram quatro trabalhos. O trabalho “Quantum entanglement in trimer spin-1/2 Heisenberg chains with antiferromagnetic coupling” [26] foi publicado no Quantum Studies: Mathematics and Foundations (DOI 10.1007/s40509-015-0059-1). Os trabalhos “Geometrical aspects of quantum entanglement” [20], “Entanglement of spin-1/2 Heisenberg antiferromagnetic quantum spin chains” [29] e “Quantum entanglement in dimer spin-1/2 Heisenberg chains with antiferromagnetic coupling” [19] estão submetidos para a publicação.

4.1 Emaranhamento térmico e macroscópico

Já vimos que o emaranhamento é um fenômeno intrinsecamente quântico e, como tal, é mais comum ser observado em sistemas de poucas partículas e em temperatura zero. Em sistemas de muitos corpos e à temperatura finita, em geral, não se observa emaranhamento. Isso se deve a um fenômeno conhecido como *decoerência*. A decoerência se deve à perda das propriedades ditas quânticas de um sistema devido à influência do ambiente.

Emaranhamento térmico e emaranhamento macroscópico, embora possam estar relacionados, são dois conceitos diferentes. Emaranhamento térmico é o emaranhamento que se observa em temperaturas finitas (diferentes de zero), enquanto emaranhamento macroscópico é o emaranhamento observado em sistemas contendo muitas partículas. O estudo desse tipo de emaranhamento é de grande interesse para a ciência atual. Particularmente, em teoria de informação e processamento quântico, tendo em vista que muitas propostas de *chips* quânticos são baseados em sistemas de matéria condensada.

Muitos trabalhos teóricos sugerindo a existência do emaranhamento térmico foram publicados desde 1998, mas só em 2003 que Gosh e colaboradores publicaram um influente trabalho (*Nature*, 452, 48 (2003) *apud* [44]) em que mediram experimentalmente a susceptibilidade magnética do composto $\text{LiHo}_x\text{Y}_{1-x}\text{F}_4$ em baixas temperaturas ($T < 1\text{K}$) e perceberam que os dados experimentais não podiam ser explicados apenas com aproximações clássicas ou semi-clássicas. A conclusão dos autores era que o emaranhamento seria um ingrediente fundamental

para explicar os dados experimentais.

Em 2006 Vértesi e Bene [45] mostraram experimentalmente, pela primeira vez, que o emaranhamento poderia ser observado em temperatura ambiente. Isso foi feito via medida da susceptibilidade magnética do composto $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$.

4.2 Emaranhamento em cadeias de Heisenberg

A hamiltoniana de Heisenberg (3.1) comuta com a componente z de *spin*, ou seja $[\mathcal{H}, S^z] = 0$. Vimos de (2.13) que ρ pode ser escrito em termos de potências de \mathcal{H} , o que nos permite escrever $[\rho, S^z] = 0$. Como

$$S_1^z + S_2^z = S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (4.1)$$

e tomando a forma mais geral da matriz densidade

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{21}^* & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{31}^* & \rho_{32}^* & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{41}^* & \rho_{42}^* & \rho_{43}^* & \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

vemos que

$$[\rho, S^z] = \begin{pmatrix} 0 & -\rho_{12} & -\rho_{13} & -2\rho_{14} \\ \rho_{21}^* & 0 & 0 & -\rho_{24} \\ \rho_{31}^* & 0 & 0 & \rho_{34} \\ 2\rho_{41}^* & -\rho_{42}^* & -\rho_{43}^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Como, por hipótese, $[\rho, S^z] = 0$ segue que

$$\rho_{12} = \rho_{13} = \rho_{14} = \rho_{24} = \rho_{21}^* = \rho_{31}^* = \rho_{41}^* = \rho_{42}^* = \rho_{43}^* = 0.$$

O que implica que a matriz densidade reduzida do sistema possui a forma [21]

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & b & 0 \\ 0 & b^* & d & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e \end{pmatrix}, \quad (4.4)$$

que escreveremos como

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} v^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & z & 0 \\ 0 & z^* & x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v^- \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

uma vez que não pode haver superposição coerente dos estados com diferentes números de *spins* para cima (para baixo), pois os estados correspondentes ao restante da cadeia são ortogonais. Além disso, a invariância translacional da Eq. (3.1) implica que os elementos w e x são iguais, já que a probabilidade de termos $|\uparrow\downarrow\rangle$ no sistema é a mesma de termos $|\downarrow\uparrow\rangle$. Dessa forma,

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} v^+ & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & z & 0 \\ 0 & z^* & w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v^- \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Podemos relacionar os elementos da matriz densidade reduzida com a função de correlação e a magnetização por sítio da seguinte forma [22]

$$v^\pm = \frac{1}{4} (1 \pm 2\langle S_i^z + S_j^z \rangle + 4\langle S_i^z S_j^z \rangle), \quad (4.7)$$

e

$$z = \langle S_i^x S_j^x \rangle + \langle S_i^y S_j^y \rangle + i\langle S_i^x S_j^y \rangle - i\langle S_i^y S_j^x \rangle. \quad (4.8)$$

Como estamos tratando compostos com interação antiferromagnética $J < 0$, logo

$$\langle S_i^z + S_j^z \rangle = 0, \quad (4.9)$$

portanto, $v^+ = v^-$. Isto nos permite escrever a Eq. (4.6) na forma

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} v & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & z & 0 \\ 0 & z^* & w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Os autovalores da transposta parcial de ρ_{ij} são

$$\{w, w, v + |z|, v - |z|\}.$$

Logo, pelo critério de Perez-Horodecki [30], haverá emaranhamento no sistema quando

$$v < |z|, \quad (4.11)$$

caso contrário, o sistema será separável (não-emaranhado).

Uma vez que podemos distinguir os estados emaranhados dos separáveis, podemos proceder ao cálculo da distância entre estados para quantificar o emaranhamento do sistema. A distância será dada por

$$\mathcal{D}(\rho_s, \rho_e) = \sqrt{\text{Tr}[(\rho_s - \rho_e)^2]} = 2|v_s - v_e|, \quad (4.12)$$

com

$$\rho_s = \begin{pmatrix} v_s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_s & z & 0 \\ 0 & z^* & w_s & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_s \end{pmatrix}, \quad (4.13)$$

e

$$\rho_e = \begin{pmatrix} v_e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_e & z & 0 \\ 0 & z^* & w_e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_e \end{pmatrix}, \quad (4.14)$$

sendo as matrizes densidade separáveis e emaranhadas, respectivamente. É importante ressaltar o vínculo existente entre v e w . Uma vez que $\text{Tr}(\rho) = 1$,

$$w = \frac{1}{2} - v.$$

O que nos interessa é a menor distância entre um dado estado emaranhado e o estado separável mais próximo, pois essa é a nossa medida do quanto tal estado está emaranhado, como discutido no Capítulo 2. É fácil perceber que (4.12) será mínimo quando v_s for mínimo, ou seja, quando $v_s = |z|$, independentemente do valor de v_e .

O emaranhamento do sistema será dado por

$$\mathcal{E}(\rho_e) = \varepsilon_0 \min \mathcal{D}(\rho_s, \rho_e) = \varepsilon_0 \max [0, 2(|z| - v_e)], \quad (4.15)$$

introduzimos o termo ε_0 como constante de normalização, assegurando que

$$0 \leq \mathcal{E}(\rho) \leq 1.$$

Como, na ausência de campo magnético externo, o sistema é isotrópico, temos

$$\langle S_i^x S_j^x \rangle = \langle S_i^y S_j^y \rangle = \langle S_i^z S_j^z \rangle, \quad (4.16)$$

e

$$\langle S_i^x S_j^y \rangle = \langle S_i^y S_j^x \rangle. \quad (4.17)$$

Sendo assim, a Eq. (4.15) assume a forma

$$\mathcal{E}(\rho) = 2\varepsilon_0 \max \left[0, \left(2|\langle S_i S_j \rangle| - \frac{1}{4} - \langle S_i S_j \rangle \right) \right]. \quad (4.18)$$

A susceptibilidade magnética para o sistema de N *spins* na direção α pode ser escrito na forma [23]

$$\chi^\alpha(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \left(\sum_{j,k=1}^N \langle S_j^\alpha S_k^\alpha \rangle - \left\langle \sum_{k=1}^N S_k^\alpha \right\rangle^2 \right), \quad (4.19)$$

e

$$\bar{\chi}(T) = \frac{\chi^x + \chi^y + \chi^z}{3}. \quad (4.20)$$

Então, resolvemos a expressão (4.19) para o sistema de interesse e substituímos em (4.18) para que possamos relacionar o emaranhamento com a susceptibilidade magnética. Faremos isso abaixo para cada caso de interesse particular.

4.2.1 Testemunha de emaranhamento

Como vimos no Capítulo 2, a testemunha de emaranhamento pode ser usada para detectar emaranhamento no sistema. Uma vez que uma testemunha de emaranhamento é negativa, sabemos que o sistema está emaranhado. Caso ela seja positiva, não podemos dizer nada sobre o emaranhamento do sistema. A vantagem de se usar testemunha de emaranhamento é o fato de ela poder ser aplicada para o sistema como um todo e não apenas entre pares, como feito anteriormente. A desvantagem, é que ela não é capaz de quantificar o emaranhamento, nem identificar todos os estados separáveis.

A testemunha de emaranhamento pode nos auxiliar no sentido de detectar emaranhamento no sistema que não tenha sido considerado no cálculo de emaranhamento entre pares, como o emaranhamento tripartido (entre três *spins*), por exemplo. Isso pode ser feito da seguinte forma: calculamos o emaranhamento entre pares, depois calculamos o emaranhamento via testemunha de emaranhamento, caso a testemunha indique “menos” emaranhamento que o emaranhamento entre pares, não podemos afirmar nada sobre ter ou não mais fontes de emaranhamento no sistema, mas se ela indicar “mais” emaranhamento que o indicado via pares, temos fontes extras de emaranhamento no sistema.

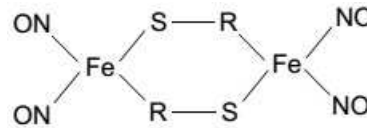


Figura 4.1: Ilustração da estrutura do Ferro Nitrosyl.

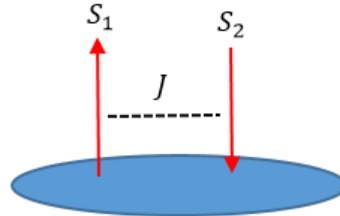


Figura 4.2: Ilustração esquemática do dímero formado no composto Ferro Nitrosyl.

Podemos encontrar uma testemunha de emaranhamento via susceptibilidade magnética que utilizaremos em nossos cálculos, a expressão obtida para essa testemunha é [44]

$$EW(N) = \frac{3k_B T \chi(T)}{(g\mu_B)^2 N S} - 1 \quad (4.21)$$

4.3 Dímero: O composto Ferro Nitrosyl

A estrutura do Nitrosyl Iron de nosso interesse tem a forma apresentada na Figura 4.1. Na figura, R é imidiazolidine-2-thiolate. Os ligantes R são heterociclos de cinco membros que consistem em três átomos de Carbono e dois de Nitrogênio separados por um Carbono.

Para mais detalhes sobre o composto ver [24]. O importante para nossos objetivos é que os centros magnetoativos são formados por íons ferro, cada um dos quais está ligado a dois grupos nitrosyl. O *spin* de cada centro individual possui $S = 1/2$. As moléculas tem uma estrutura centrosimétrica na qual os dois átomos de Ferro são conectados por duas pontes S – C – N onde C – N é uma parte do heterociclo R. Como resultado, um dímero paramagnético é formado, a Figura 4.2 mostra, esquematicamente, o dímero formado. A hamiltoniana do sistema é do tipo Heisenberg com acoplamento antiferromagnético.

A matriz densidade do sistema possui a forma (4.10) com os elementos sendo [24]

$$v = \frac{e^K}{Z}, \quad (4.22)$$

$$w = \frac{e^{-K} \cosh K}{Z}, \quad (4.23)$$

$$z = \frac{e^{-K} \sinh K}{Z}, \quad (4.24)$$

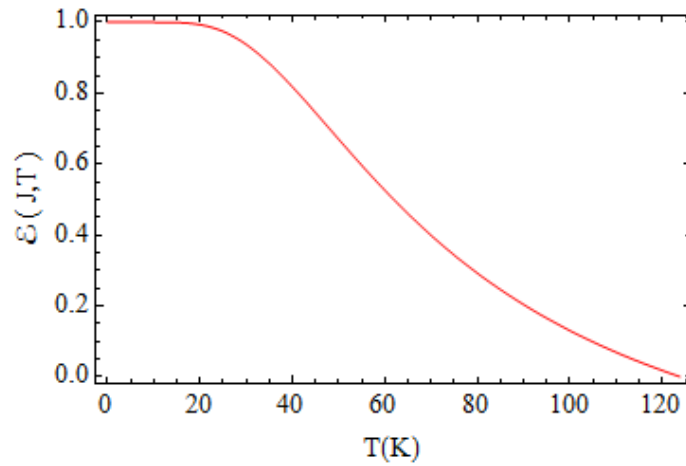


Figura 4.3: Dependência do emaranhamento com a temperatura absoluta para o composto Ferro Nitrosyl.

onde $K = J/2k_B T$, Z é a função de partição do sistema e é dada por

$$Z = 3e^K + e^{-3K}.$$

O emaranhamento do sistema será dado por (4.15), logo

$$\mathcal{E}(J, T) = \max \left(0, 2 \left(\left| \frac{e^{-K} \sinh K}{Z} \right| - \frac{e^K}{Z} \right) \right), \quad (4.25)$$

que pode ser facilmente escrito na forma

$$\mathcal{E}(J, T) = \max \left(0, \left(\frac{1 - 3e^{\frac{2J}{k_B T}}}{1 + 3e^{\frac{2J}{k_B T}}} \right) \right). \quad (4.26)$$

A Figura 4.3 apresenta o gráfico do emaranhamento versus temperatura. A temperatura crítica de emaranhamento pode ser obtida encontrando o valor de T para o qual teremos $\mathcal{E}(\rho) \equiv 0$. Fazendo isso, obtemos

$$T_e = \frac{-2J}{k_B \ln 3}. \quad (4.27)$$

Podemos ver de (4.26) que teremos emaranhamento no sistema apenas quando o acoplamento for antiferromagnético ($J < 0$), pois para o acoplamento ferromagnético ($J > 0$)

$$\left(\frac{1 - 3e^{\frac{2J}{k_B T}}}{1 + 3e^{\frac{2J}{k_B T}}} \right) < 0. \quad (4.28)$$

Sabemos de [24] que, em nosso caso, $J/k_B = -68K$, logo

$$T_e = \frac{136}{\ln 3} K.$$

Podemos usar a Equação de Bleaney-Bowers (3.14) para escrever a Eq. (4.26) em termos da susceptibilidade magnética e, com isso, relacionar o emaranhamento do sistema a parâmetros que podem ser medidos experimentalmente. Mais detalhes podem ser encontrados em [24]. Os resultados desse trabalho estão submetidos para a publicação [19]

4.4 Trímero: O composto $2b.3CuCl_2.2H_2O$

O composto $2b.3CuCl_2.2H_2O$ ($b = \text{betaine}$, $C_5H_{11}NO_2$) é um sistema $Cu(II)$ -trímero magnético. Os detalhes experimentais e aspectos estruturais desse composto podem ser encontrados em [46]. Esse composto pode ser modelado valendo-se da hamiltoniana de Heisenberg com interação de troca antiferromagnética ($J < 0$). Além da interação *intra*-trímero, entre os *spins* que compõem o trímero, os dados experimentais sugerem que existe também uma interação de troca (também antiferromagnética) *inter*-trímero, entre os trimeros que compõem o sistema. No entanto, a interação *inter*-trímero é muito menor que a interação *intra*-trímero mostrando-se relevante apenas para baixas temperaturas ($T < 5K$) e, por isso, será desprezada no tratamento que faremos aqui [46].

Usando o modelo de trímero isolado, a hamiltoniana do sistema assume a forma

$$\mathcal{H} = -J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}. \quad (4.29)$$

Com $J/k_B = -20K$ [46]. A Figura 4.4 apresenta, de forma esquemática, a estrutura do composto e a Figura 4.5 apresenta esquematicamente o sistema trímero formado.

A matriz densidade do sistema será dada por (4.10) e, conseqüentemente, o emaranhamento do sistema será dado por (4.18). Fazendo uso da Equação (4.19) podemos obter a susceptibilidade magnética do sistema em função das correlação entre os *spins*

$$\bar{\chi}(T) = \frac{2(g\mu_B)^2}{3k_B T} (2\langle S_I S_j \rangle + 1). \quad (4.30)$$

Substituindo (4.30) em (4.18) obtemos

$$\mathcal{E}(\rho) = \varepsilon_0 \frac{K_B T}{(g\mu_B)^2} \max \left[0, \left(2 \left| \frac{3}{2} \bar{\chi}(T) - \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \right| + \frac{(g\mu_B)^2}{2k_B T} - \frac{3\bar{\chi}(T)}{2} \right) \right]. \quad (4.31)$$

Por meio da Equação de Van Vleck [47] podemos obter a susceptibilidade magnética do sistema trímero [48, 49, 43].

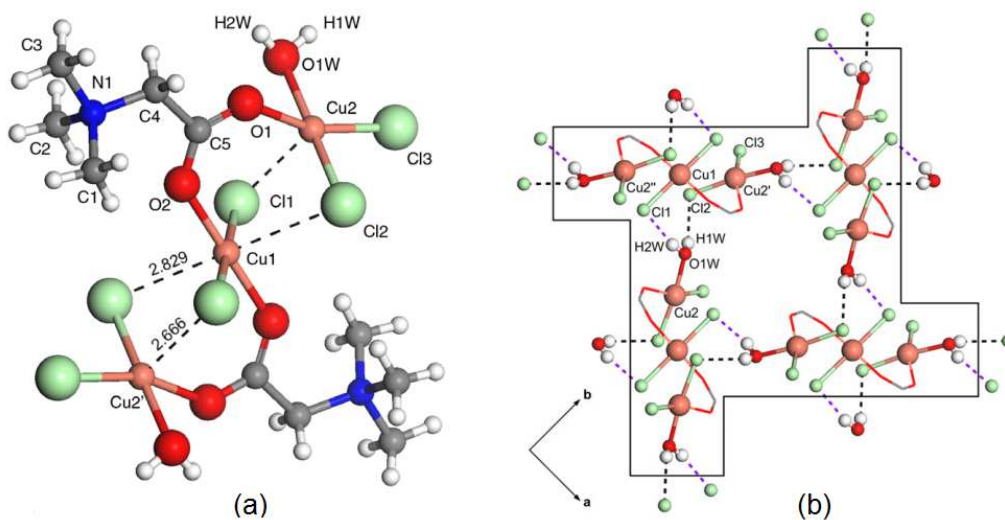


Figura 4.4: Ilustração esquemática do composto $2b \cdot 3\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Em (a) vemos o complexo trinuclear ligados pelos grupos carboxilato O1 – C5 – O2 de duas moléculas betaína. Em (b) os íons cobre e cloro e as moléculas de água são mostrados como esferas. As pontes de carboxilato são indicados por linhas e as linhas tracejadas indicam as pontes de hidrogênio [46].

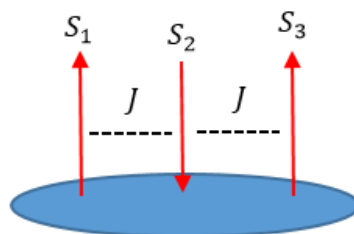


Figura 4.5: Ilustração esquemática do trímero formado.

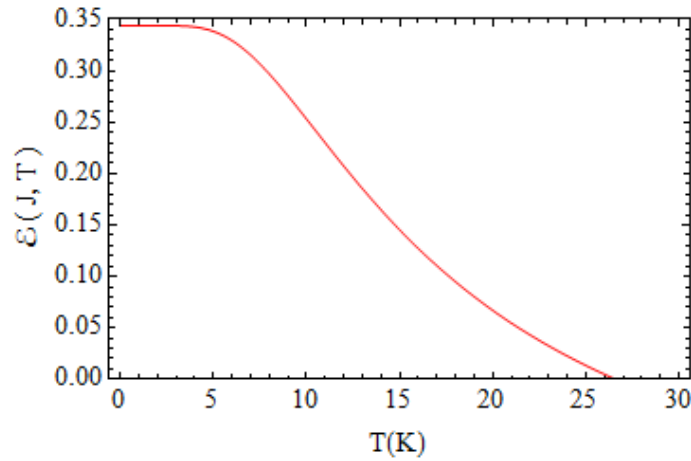


Figura 4.6: Dependência do emaranhamento com a temperatura para o composto trímero $2b.3\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Tomamos $J/k_B = -20K$ de acordo com [46].

$$\chi(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{4k_B T} \frac{(1 + e^{\frac{J}{k_B T}} + 10e^{\frac{3J}{2k_B T}})}{(1 + e^{\frac{J}{k_B T}} + 2e^{\frac{3J}{2k_B T}})}. \quad (4.32)$$

Dessa forma, substituindo (??) em (4.31) obtemos o emaranhamento do sistema em função da temperatura e da constante de troca

$$\mathcal{E}(J, T) = \varepsilon_0 \max \left[0, \left(2 \left| \frac{3(1 + e^{\frac{J}{k_B T}} + 10e^{\frac{3J}{2k_B T}})}{8(1 + e^{\frac{J}{k_B T}} + 2e^{\frac{3J}{2k_B T}})} - 1 \right| + \frac{1}{2} - \frac{3(1 + e^{\frac{J}{k_B T}} + 10e^{\frac{3J}{2k_B T}})}{8(1 + e^{\frac{J}{k_B T}} + 2e^{\frac{3J}{2k_B T}})} \right) \right]. \quad (4.33)$$

Na Figura 4.6 apresentamos um gráfico do emaranhamento versus temperatura para o composto trímero em questão. Vemos que a temperatura crítica de emaranhamento é $T_e \approx 26K$.

A fim de verificar se existem outras fontes relevantes de emaranhamento nesse sistema, vamos calcular o emaranhamento via testemunha de emaranhamento. Para tanto, lançaremos mão da Eq. (4.21), com $N = 3$ e $S = 1/2$. O gráfico da testemunha de emaranhamento é apresentado na Figura 4.7

Note que a testemunha de emaranhamento nos indica emaranhamento apenas até temperaturas em torno de $20K$, um valor inferior ao indicado pelo cálculo de emaranhamento entre pares e, dessa forma, a testemunha de emaranhamento não nos dá indicativo de haver outras fontes de emaranhamento nesse sistema.

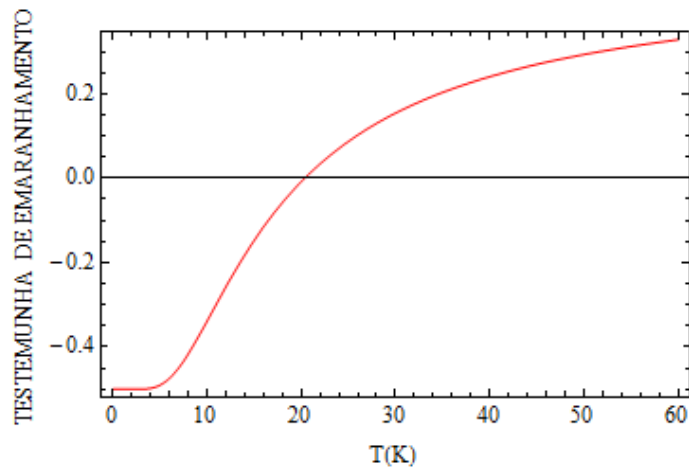


Figura 4.7: Testemunha de emaranhamento para o sistema trímero, composto $2b.3CuCl_2 \cdot 2H_2O$.

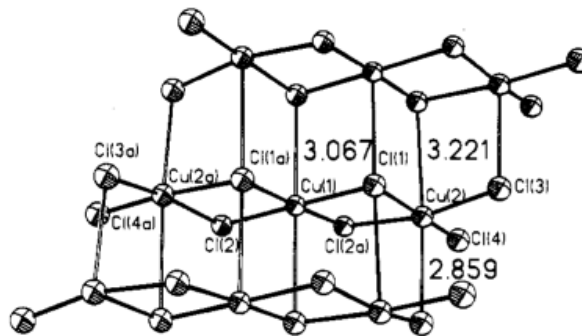


Figura 4.8: Ilustração esquemática do composto $3(MAP)_2Cu_2Cl_8$ [48].

4.4.1 Outros compostos

Podemos aplicar o método mostrado anteriormente para qualquer composto trímero com $spin-1/2$, que satisfaça a hamiltoniana de Heisenberg (4.29)¹. O que mudará, será o valor de J para cada material e a temperatura crítica de emaranhamento, T_e , será tanto maior quanto maior for J .

Consideremos, por exemplo, o composto $(3MAP)_2Cu_2Cl_8$ ². A Figura 4.8 mostra, esquematicamente, como é a estrutura do composto. Vemos que existe um “empilhamento” dos trímeros no composto. Como no caso discutido anteriormente, a interação inter-trímero é muito pequena e podemos, para nossos objetivos, desprezá-la. Uma discussão mais aprofundada a respeito desse composto pode ser encontrada em [48]. Nesse caso, a constante de troca possui um valor de $J/k_B = -30,2K$.

¹Da Equação (4.29) é evidente que estamos levando em conta apenas os primeiros vizinhos e J é constante para todos os pares de vizinhos.

²3-methyl-2-aminopyridinium (3MAP) [48].

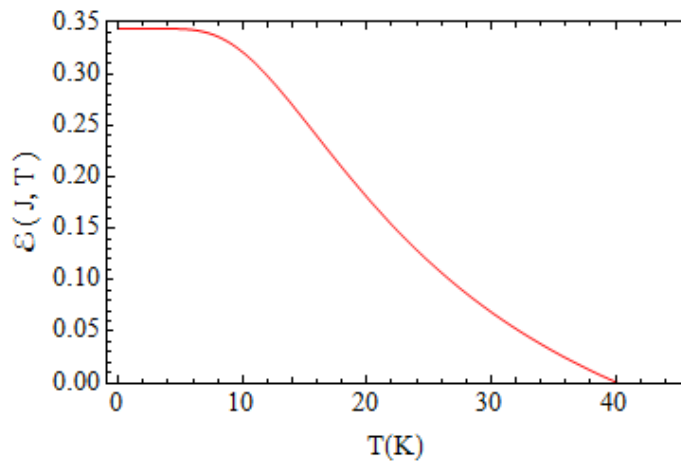


Figura 4.9: Dependência do emaranhamento com a temperatura para o composto trímero $3(MAP)_2Cu_2Cl_8$. Tomamos $J/k_B = -30, 2K$ de acordo com [48].

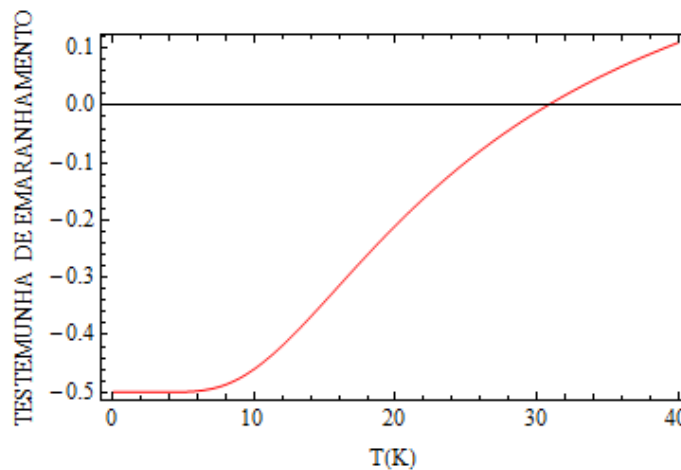


Figura 4.10: Testemunha de emaranhamento para o sistema trímero, composto $3(MAP)_2Cu_2Cl_8$.

A susceptibilidade magnética do composto será dada por (4.19) e, portanto, o emaranhamento do sistema será dado por (4.33). A Figura 4.9 apresenta o gráfico do emaranhamento do sistema em função da temperatura, vemos que agora a temperatura crítica de emaranhamento é maior que no caso do primeiro composto discutido nessa seção e isso se deve apenas ao fato de J , nesse caso, ser maior que no caso anterior.

A Figura 4.10 apresenta o gráfico da testemunha de emaranhamento para o composto em questão

Novamente, não temos indicativo de fontes extras de emaranhamento no sistema, uma vez que a testemunha de emaranhamento indica emaranhamento apenas até aproximadamente $30K$, valor menor que o indicado pelo cálculo de emaranhamento entre pares.

Os resultados descritos nessa Seção foram aceitos para publicação na *Quantum Studies: Mathematics and Foundations* [26].

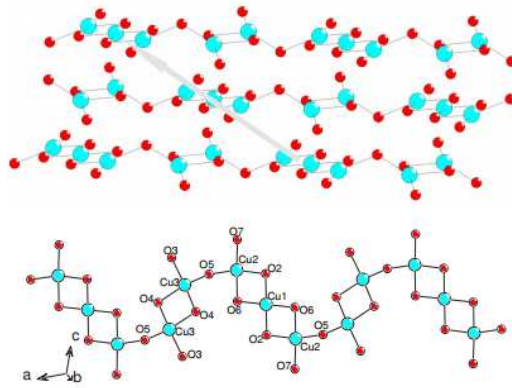


Figura 4.11: Estrutura do composto apresentada em dois pontos de vista, uma lateral (figura de cima) e uma visão superior da cadeia (figura de baixo). Os círculos vermelhos representam os átomos de oxigênio, enquanto os azuis, os átomos de cobre [44].

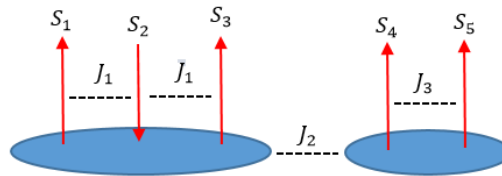


Figura 4.12: Ilustração esquemática do sistema dímero-trímero.

4.5 Dímero-trímero: O composto $\text{Na}_2\text{Cu}_5\text{Si}_4\text{O}_{14}$

Apresentaremos de forma resumida os aspectos mais relevantes do composto $\text{Na}_2\text{Cu}_5\text{Si}_4\text{O}_{14}$ para nossa discussão. Uma descrição mais detalhada pode ser encontrada em [44, 50, 51].

A Figura 4.11 ilustra a estrutura do $\text{Na}_2\text{Cu}_5\text{Si}_4\text{O}_{14}$, os átomos de cobre estão separados em dois grupos e possuem $S = \frac{1}{2}$, cada grupo contém 2 e 3 átomos chamados dímeros e trímeros, respectivamente. A nuvem eletrônica do oxigênio induz uma interação indireta de troca entre os átomos de cobre. Os *spins* dos átomos do trímero interagem antiferromagneticamente, enquanto os *spins* dos átomos do dímero interagem ferromagneticamente. Há também uma interação mútua entre o dímero e o trímero e tal interação se dá de forma antiferromagnética.

Esse sistema, na ausência de campo magnético externo, pode ser descrito pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = -J_1(\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 + \vec{S}_2 \cdot \vec{S}_3) - J_2(\vec{S}_A \cdot \vec{S}_B) - J_3(\vec{S}_4 \cdot \vec{S}_5). \quad (4.34)$$

Aqui, S_i são os *spins* representados na Figura 4.12, $\vec{S}_A = \vec{S}_4 + \vec{S}_5$ é o spin total do dímero e $\vec{S}_B = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3$ é o spin total do trímero. Os valores de J foram obtidos experimentalmente e valem $J_1/k_B = -224,9K$, $J_2/k_B = -8,01K$ e $J_3/k_B = 40,22K$ [50].

Foi mostrado por Souza *et al.* [44], via testemunha de emaranhamento, que o dímero

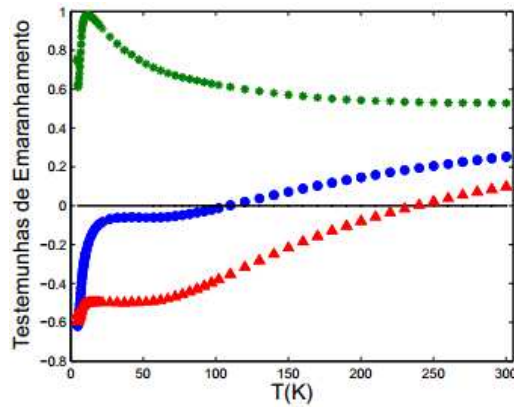


Figura 4.13: Testemunha de emaranhamento para o sistema total (pontos azuis), para o trímero (triângulos vermelhos) e para o dímero (asteriscos verdes)[44].

(interação ferromagnética) não contribui para o emaranhamento do sistema. Isso pode ser visto da Figura 4.13. Foi mostrado também que o emaranhamento de formação, que detecta apenas emaranhamento entre pares, só existe entre os pares 1-2 e 2-3. Para calcularmos o emaranhamento desse sistema utilizando a distância entre estados, basta resolvermos a expressão (4.19) para o composto dímero-trímero e substituir o valor encontrado em (4.18). Fazendo isso, teremos

$$\bar{\chi}(T) = 2 \frac{(g\mu_B)^2}{k_B T} \left(\frac{1}{4} + \langle S_i S_j \rangle \right), \quad (4.35)$$

logo,

$$\mathcal{E}(\rho) = \frac{k_B T}{(g\mu_B)^2} \max \left(0, 2 \left| \bar{\chi}(T) - \frac{(g\mu_B)^2}{2k_B T} \right| - \bar{\chi}(T) \right). \quad (4.36)$$

Note que (4.36) é a mesma expressão obtida em [44], utilizando concorrência. A Figura 4.14 apresenta o emaranhamento obtido da susceptibilidade magnética por Souza *et. al.* para os pares pertencentes ao trímero.

Há um desacordo entre os resultados obtidos para o emaranhamento entre pares e o obtido via testemunha de emaranhamento. Isso se deve ao fato de que o emaranhamento entre pares só detecta emaranhamento de pares (como o próprio nome sugere) e não o emaranhamento total do sistema. A testemunha de emaranhamento contém informação sobre o emaranhamento total do sistema, no entanto, não é capaz de quantificá-lo nem informar exatamente quais estados são separáveis (ver Capítulo 2).

Vimos que os *spins* que compõem o dímero não são emaranhados. Logo, outras possíveis fontes de emaranhamento são o emaranhamento tripartido (entre três *spins*) e o emaranhamento entre o dímero e o trímero, uma vez que a interação entre eles é antiferromagnética ($J < 0$). Com o intuito de analisar a influência do dímero no emaranhamento do sistema dímero-trímero, vamos calcular o emaranhamento do sistema considerando apenas o trímero,

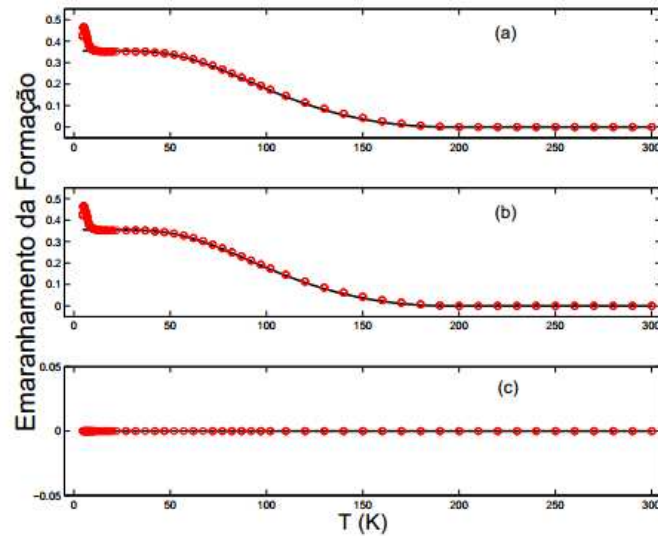


Figura 4.14: Emaranhamento de formação determinado experimentalmente para o composto $\text{Na}_2\text{Cu}_5\text{Si}_4\text{O}_{14}$. Em (a) par 1-2, (b) 2-3 e (c) 1-3. A linha sólida é a previsão teórica, baseada em cálculos numéricos. O desvio entre teoria e experimento a baixas temperaturas ($T < 8K$) está relacionado a uma transição do material para uma fase $3D$ [44].

já que o dímero não contribui para o emaranhamento. Esperamos que dessa forma, a diferença entre o emaranhamento entre pares calculado considerando apenas o trímero e o emaranhamento entre pares considerando todo o sistema dímero-trímero (Figura 4.14), seja devido à interação entre o dímero e o trímero. Essa conclusão se baseia no fato de que nenhum dos dois cálculos leva em conta o emaranhamento tripartido.

O cálculo do emaranhamento apenas do trímero, nesse estágio, é muito simples, uma vez que já possuímos uma expressão para a susceptibilidade magnética para trímeros (Equações (4.32) e (4.30)) e uma expressão para o emaranhamento desse sistema em função da susceptibilidade magnética (Equações (4.31) e (4.33)). O resultado dessa análise é mostrado na Figura 4.15 onde tomamos $J/k_B = -224,9K$.

Da comparação das Figuras 4.14 e 4.15 vemos que o emaranhamento, considerando apenas o trímero, é significativamente maior, como é significativamente maior também a temperatura crítica de emaranhamento. Enquanto para o sistema todo (dímero-trímero) observamos uma temperatura crítica em torno de $T \sim 200K$, considerando apenas o trímero vemos que a mesma sofre um aumento para um valor em torno de $T \sim 300K$. Isto nos leva a concluir que a influência do dímero com interação ferromagnética intra-dímero e interação antiferromagnética com o trímero é no sentido de diminuir o emaranhamento do sistema, tal como diminuir a temperatura crítica de emaranhamento. Esse resultado é esperado, uma vez que o aumento de partículas, tal como do tamanho do sistema, acarreta, geralmente, uma diminuição no emaranhamento devido à decoerência. Uma evidência desse fato pode ser observada ao compararmos, para um mesmo $|J|$, o comportamento do emaranhamento térmico em um

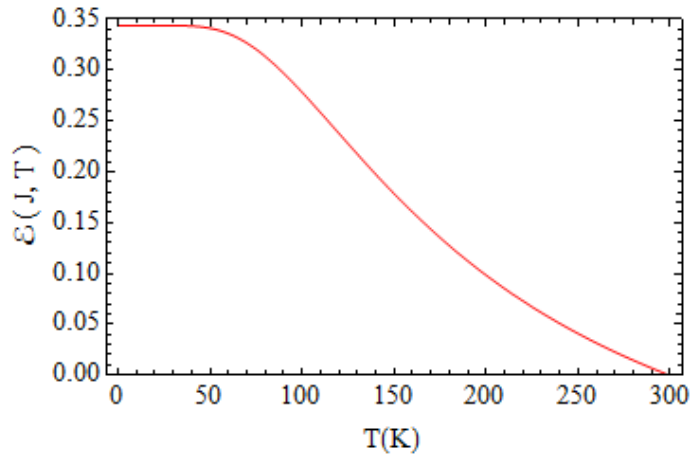


Figura 4.15: Dependência do emaranhamento com a temperatura considerando apenas o trímico no sistema dímero-trímico para o composto $\text{Na}_2\text{Cu}_5\text{Si}_4\text{O}_{14}$.

composto dímero e trímico. Veremos uma clara diminuição no emaranhamento do composto trímico, em relação ao dímero. Os resultados desse trabalho estão submetidos para publicação [20].

4.6 Cadeia com N spins

Nosso foco agora será estudar o emaranhamento em um sistema contendo N spins arranjados em uma cadeia. Consideraremos, como nos casos anteriores, que a interação entre os spins é do tipo antiferromagnética, apenas entre os primeiros vizinhos e que a hamiltoniana que descreve o sistema é a de Heisenberg.

Começaremos observando que de (4.19) e (4.20), temos que, para N par

$$\bar{\chi}(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{3k_B T} \left(2(N-1)\langle S_i S_j \rangle_{\text{par}} + \frac{3N}{4} \right), \quad (4.37)$$

ou

$$\langle S_i S_j \rangle_{\text{par}} = \frac{12k_B T \bar{\chi}(T) - 3N(g\mu_B)^2}{8(N-1)(g\mu_B)^2}. \quad (4.38)$$

Para o caso de N ser ímpar, teremos

$$\bar{\chi}(T) = \frac{(g\mu_B)^2}{3k_B T} \left(2(N-1)\langle S_i S_j \rangle_{\text{ímpar}} + \frac{3N}{4} - \frac{1}{4} \right), \quad (4.39)$$

ou

$$\langle S_i S_j \rangle_{\text{ímpar}} = \frac{12k_B T \bar{\chi}(T) - 3N(g\mu_B)^2 + (g\mu_B)^2}{8(N-1)(g\mu_B)^2}, \quad (4.40)$$

ou ainda

$$\langle S_i S_j \rangle_{\text{impar}} = \langle S_i S_j \rangle_{\text{par}} + \frac{1}{8(N-1)}. \quad (4.41)$$

Dessa forma, de (4.18) vemos que o emaranhamento do sistema será dado por

$$\mathcal{E}(\rho) = 2\varepsilon_0 \max \left[0, \left(2 \left| \frac{12k_B T \bar{\chi}(T) - 3N(g\mu_B)^2}{8(N-1)(g\mu_B)^2} \right| - \frac{1}{4} - \frac{12k_B T \bar{\chi}(T) - 3N(g\mu_B)^2}{8(N-1)(g\mu_B)^2} \right) \right], \quad (4.42)$$

e

$$\mathcal{E}(\rho) = 2\varepsilon_0 \max \left[0, \left(2 \left| \frac{12k_B T \bar{\chi}(T) - 3(N-1)(g\mu_B)^2}{8(N-1)(g\mu_B)^2} \right| - \frac{1}{4} - \frac{12k_B T \bar{\chi}(T) - 3(N-1)(g\mu_B)^2}{8(N-1)(g\mu_B)^2} \right) \right], \quad (4.43)$$

para N par e ímpar, respectivamente.

Note que no limite em que $N \rightarrow \infty$,

$$\langle S_i S_j \rangle_{\text{impar}} = \langle S_i S_j \rangle_{\text{par}},$$

sendo assim, o emaranhamento será o mesmo para os dois casos.

Basta agora substituir a susceptibilidade magnética da cadeia infinita em (4.42) ou (4.43) para obtermos o emaranhamento do sistema em função da temperatura.

Vimos no Capítulo 3, Seção 3.4 que em baixas temperaturas os resultados de Eggert *et al* e os de Bonner e Fisher discordam quanto à susceptibilidade magnética de uma cadeia de *spins* infinita. No entanto, o emaranhamento calculado utilizando os dois métodos convergem para o mesmo valor quando $T \rightarrow 0$. É fácil calcular de (4.43) ou de (4.42) que este valor é

$$\mathcal{E}(T=0) = \frac{7}{16}.$$

Em [21] O'Connor *et al* analisaram como o emaranhamento em uma cadeia varia com o número de *spins*, N , em $T=0$. O resultado que encontramos é significativamente próximo do que eles encontraram ao fazer N infinito, 0,434467.

Finalmente, para T finito, a susceptibilidade magnética obtida por Bonner e Fisher [27] é

$$\chi(T) = \frac{N_A(g\mu_B)^2}{k_B T} \frac{0,25 + 0,074975x + 0,075235x^2}{1,0 + 0,9931x + 0,172135x^2 + 0,757825x^3}, \quad (4.44)$$

onde $x = \frac{|J|}{k_B T}$. Nesse caso, o emaranhamento será dado por

$$\mathcal{E}(\rho) = \varepsilon_0 \max \left[0, \left| 6\alpha - \frac{3}{2} \right| - 3\alpha + \frac{1}{4} \right], \quad (4.45)$$

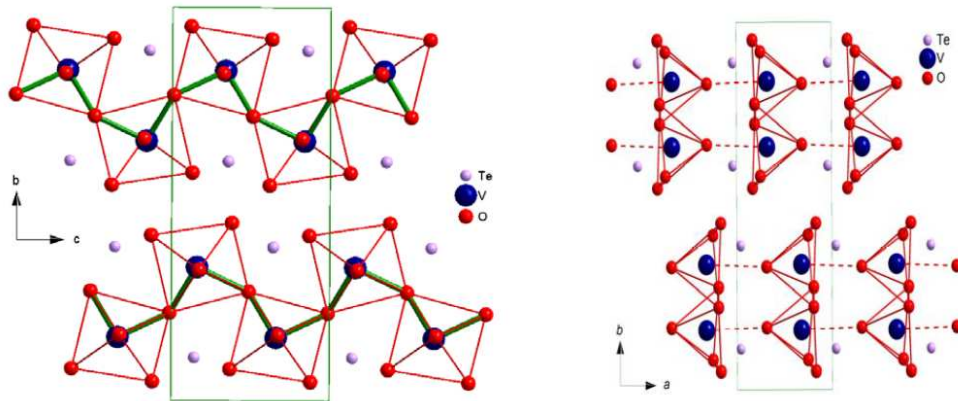


Figura 4.16: Estrutura cristalina do $\beta - \text{TeVO}_4$ vista ao longo do eixo a (esquerda) e c (direita) [52].

sendo

$$\alpha = \frac{0,25 + 0,074975x + 0,075235x^2}{1,0 + 0,9931x + 0,172135x^2 + 0,757825x^3}.$$

É importante ressaltar que para $T > 0$, mas próximo de zero, os resultados de Eggert *et al* e os de Bonner e Fisher para a susceptibilidade magnética do sistema, não coincidem. Essa pequena faixa de temperatura não será discutida aqui devido ao fato de que a maioria dos materiais que satisfazem as condições para que o método apresentado seja aplicado, sofrem transições de fase $3D$ ou de alguma outra natureza, impossibilitando a aplicação do método. Além disso, a diferença na quantidade de emaranhamento prevista pelos dois resultados são significativamente próximas, mesmo em baixas temperaturas.

4.6.1 O composto $\beta - \text{TeVO}_4$

Óxidos de Vanádio com íons V^{+4} ($S = 1/2$) são excelentes modelos para magnetos quânticos $1D$ de *spins*. Sua estrutura consiste de cadeias em zig-zag, como mostrado na Figura 4.16.

A interação entre os primeiros vizinhos, representado por J_1 na Figura 4.17 é fraca em magnitude. De fato, em [52] os autores mostram que na faixa de temperatura entre $5 - 130\text{K}$ a interação é dominada por J_2 e é de caráter antiferromagnética, ou seja $|J_1| \ll |J_2|$. Portanto, nesse caso, levaremos em conta a interação entre os segundos vizinhos, representado por J_2 na Figura 4.17. A interação entre as cadeias em zig-zag, J_\perp também é muito fraca e será desprezada aqui. Em baixas temperaturas ($T < 5\text{K}$) o sistema apresenta três diferentes características magnéticas, devido a transições de fase de origem desconhecida e nosso modelo $1D$ não corresponde bem à realidade.

Em resumo, na faixa de temperatura de $5 - 130\text{K}$, podemos considerar esse sistema como sendo uma cadeia infinita de *spin-1/2* com interação antiferromagnética modelado pela

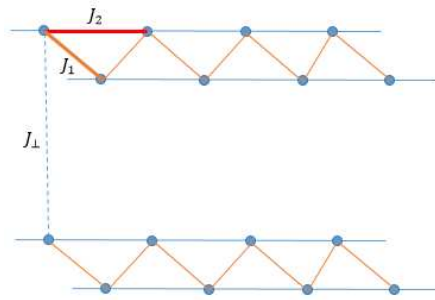


Figura 4.17: Visão esquemática das interações entre os íons V^{4+} na cadeia $\beta - \text{TeVO}_4$.

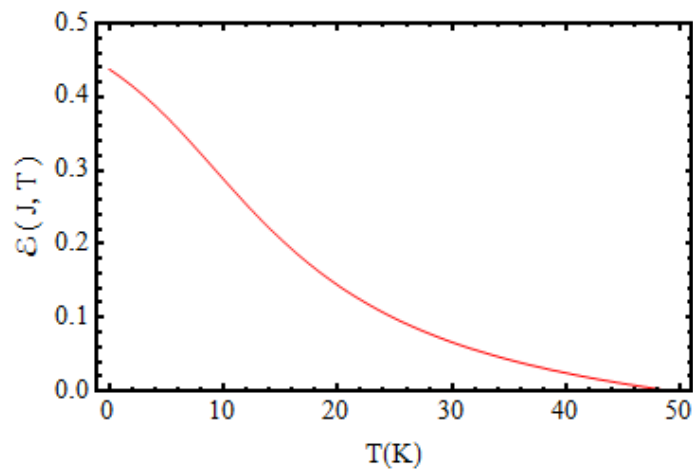


Figura 4.18: Dependência do emaranhamento com a temperatura no composto $\beta - \text{TeVO}_4$.

hamiltoniana (4.29).

O valor encontrado em [52] para a interação de troca entre os *spins* nesse sistema é $J/k_B = -21,4\text{K}$. Substituindo-o em (4.45) obtemos o emaranhamento térmico do sistema, bem como a temperatura crítica de emaranhamento. A Figura 4.18 apresenta o gráfico do emaranhamento versus temperatura para esse composto. Os resultados desse trabalho estão submetidos para publicação³[29].

³Nesse ponto, gostaria de agradecer ao Professor Géza Tóth pela leitura e posteriores críticas e sugestões que muito acrescentaram ao trabalho.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Como conclusão, salientamos o cálculo de emaranhamento valendo-se da distância entre estados quânticos utilizando a norma de Hilbert-Schmidt. Esse cálculo foi feito analiticamente de forma simples e de fácil aplicação. Em relação à concorrência, por exemplo, esse método tem a vantagem de não se restringir apenas a sistemas cuja dimensão no espaço de Hilbert seja $2 \otimes 2$.

Tratamos o problema do emaranhamento térmico em dímero, trímero, dímero-trímero e em uma cadeia infinita de $spin-1/2$. Os tratamentos dos sistemas dímero e dímero-trímero já haviam sido estudados na literatura e foi acrescentado em nosso estudo como uma forma de confirmação da validade do método utilizado. O tratamento feito para sistemas trímero é inédito e mostramos que tais sistemas (com interação antiferromagnética) possuem emaranhamento em temperaturas finitas. Analisamos o emaranhamento em função da temperatura e determinamos a temperatura crítica de emaranhamento para os compostos $2b \cdot 3CuCl_2 \cdot 2H_2O$ e $(3MAP)_2Cu_2Cl_8$, resultados que ainda não haviam sido obtidos na literatura. Mostramos como é possível calcular o emaranhamento térmico em uma cadeia infinita de $spins$ e que nossos resultados estão em acordo com o que se espera para $T = 0$. O composto $\beta - TeVO_4$ foi analisado pela primeira vez sob a ótica do emaranhamento e obtivemos como o emaranhamento se comporta com a temperatura nesse composto, bem como sua temperatura crítica de emaranhamento.

Como perspectivas do trabalho, pretendemos calcular o emaranhamento de sistemas consistindo de cadeias com $spin-1/2$ e $spin-1$ alternadamente na cadeia. Para tanto, devemos obter, primeiramente a matriz densidade de tal sistema, que é obtida da hamiltoniana do sistema. Tomando a hamiltoniana de Heisenberg para o sistema, que possui simetria $SU(2)$, podemos utilizar a simetria do sistema para obter a matriz densidade. Outra vantagem de tal sistema é a possibilidade de se utilizar o critério de Peres-Horodecki, uma vez que o sistema possui dimensão $2 \otimes 3$. Além disso, temos interesse em estudar o emaranhamento em dímeros a baixas temperaturas e como esse emaranhamento pode ser relacionado à susceptibilidade

magnética. Fizemos essa análise no trabalho que acabamos de apresentar, mas apenas em temperaturas altas, onde a equação de Bleaney-Bowers é válida.

Apêndice A - Norma de Hilbert-Schmidt e a desigualdade de Bell generalizada

O problema central abordado ao longo deste trabalho foi encontrar uma forma de identificar o estado separável mais próximo de um determinado estado emaranhado; para isto adotamos a norma de Hilbert-Schmidt. Neste apêndice, de caráter mais técnico, fundamentamos o uso dessa norma como uma medida simples e bastante natural para o emaranhamento de um sistema. Nos basearemos em um Teorema de Bertlmann-Narnhofer-Thirring [14] que relaciona a norma de Hilbert-Schmidt com o valor máximo da violação de uma desigualdade de Bell generalizada (DBG). Os resultados neste apêndice são apresentados sem provas (veja as Refs. [14, 53, 54, 55, 56, 57] para as provas e informações adicionais).

Operadores classe-traço e Hilbert-Schmidt

Vamos iniciar lembrando as noções relacionadas com o traço de um operador em um espaço de Hilbert. Como de costume, vamos denotar por \mathcal{H} um espaço de Hilbert complexo e separável.¹

Um operador linear A em \mathcal{H} é dito ser *limitado* se a *norma do operador* A ,

$$\|A\| = \sup_{\psi \in \mathcal{H} \setminus \{0\}} \frac{\|A\psi\|}{\|\psi\|}, \quad (5.1)$$

é finita. No espaço de operadores limitados em \mathcal{H} nós temos a validade da seguinte desigualdade para o produto de dois operadores A e B :

$$\|AB\| \leq \|A\| \|B\|.$$

Definição 5.0.1 *O espaço de operadores limitados em \mathcal{H} , com respeito à norma do operador (5.1), é denotado $\mathcal{B}(\mathcal{H})$.*

¹A separabilidade de \mathcal{H} garante a existência de uma base ortonormal.

Para qualquer $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, existe um único operador $A^* \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, chamado o adjunto de A , de tal modo que

$$\langle \phi, A\psi \rangle = \langle A^*\phi, \psi \rangle ,$$

para todo $\phi, \psi \in \mathcal{H}$. Um operador $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é chamado de *auto-adjunto* se $A^* = A$. Dizemos que $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é *não-negativo* ou *positivo* se

$$\langle \psi, A\psi \rangle \geq 0 ,$$

para todo $\psi \in \mathcal{H}$.

Proposição 5.0.2 *Suponha que $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é positivo e auto-adjunto. Então, para quaisquer duas bases ortonormais $\{\phi_j\}$ e $\{\psi_j\}$ para \mathcal{H} , temos*

$$\sum_j \langle \phi_j, A\phi_j \rangle = \sum_j \langle \psi_j, A\psi_j \rangle .$$

Dado que A é não-negativo, $\langle \phi_j, A\phi_j \rangle$ e $\langle \psi_j, A\psi_j \rangle$ são números reais positivos. Assim, as somas são sempre bem definidas, mas podem ter o valor de $+\infty$.

Definição 5.0.3 *Se $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é auto-adjunto e positivo, o valor de $\sum_j \langle \phi_j, A\phi_j \rangle$, para qualquer base ortonormal escolhida arbitrariamente, é chamado de **traço** de A , denotado por $Tr A$. Dizemos que A é de **classe-traço** se, e somente se, $Tr A < +\infty$.*

Observe que para qualquer $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, A^*A é auto-adjunto e não-negativo! Além disso, segue diretamente da Proposição 5.0.2 e Definição 5.0.3 o seguinte

Teorema 5.0.4 *Sejam \mathcal{H} um espaço de Hilbert separável e $\{\psi_j\}$ uma base ortonormal. Então, para qualquer operador positivo $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ o traço de A é independente da escolha da base ortonormal.*

Definição 5.0.5 *Um operador $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é dito ser **Hilbert-Schmidt** se*

$$Tr(A^*A) < \infty .$$

Uma vez que A^*A é auto-adjunto e não-negativo, $Tr(A^*A)$ é definido (mas possivelmente infinito) para qualquer $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$. Se A é de classe-traço, então (por definição) o traço de $\sqrt{A^*A}$ é finito. Assim, cada operador de classe-traço é Hilbert-Schmidt (mas não vice-versa).

Proposição 5.0.6 *Se $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é Hilbert-Schmidt, assim o é A^* . Se $A, B \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ são Hilbert-Schmidt, então, AB e BA são de classe-traço e $Tr(AB) = Tr(BA)$.*

Se A e B são operadores Hilbert-Schmidt, o produto interno de Hilbert-Schmidt de A e B é

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr}(A^* B),$$

e a norma Hilbert-Schmidt de A satisfaz

$$\|A\|^2 = \langle A, A \rangle = \text{Tr}(A^* A).$$

O espaço de operadores de Hilbert-Schmidt é um espaço de Hilbert com relação ao produto interno definido acima.

Matriz densidade

Tipicamente, na Mecânica Quântica consideramos o estado de um sistema quântico como sendo descrito por um vetor unitário no espaço de Hilbert correspondente, ou, mais precisamente, como uma classe de equivalência de vetores unitários dados pela relação de equivalência $\psi \sim e^{i\theta}\psi$. No entanto, esta noção de estado de um sistema quântico é muito limitada (veja os detalhes na Ref. [53]). Para contornar as limitações, introduzimos uma noção mais geral de estado de um sistema, descrito por uma *matriz densidade*. O caso especial em que o sistema pode ser descrito por um vetor unitário é chamado *estado puro*.

Naturalmente, a noção geral de “estado” de um sistema quântico proposta deve satisfazer algumas hipóteses razoáveis relacionadas aos valores esperados de todos operadores (limitados), como as listadas abaixo:

Definição 5.0.7 *Um mapeamento linear $\Phi : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ é uma família de valores esperados se as seguintes condições são satisfeitas:*

1. $\Phi(\mathbf{1}) = 1$.
2. $\Phi(A)$ é real quando A é auto-adjunto.
3. $\Phi(A) \geq 0$ quando A é auto-adjunto e positivo.
4. Para qualquer sequência A_n em $\mathcal{B}(\mathcal{H})$, se

$$\|A_n \psi - A \psi\| \rightarrow 0$$

para todo $\psi \in \mathcal{H}$, então $\Phi(A_n) \rightarrow \Phi(A)$.

O ponto 4 na definição acima diz que o mapeamento Φ é contínuo com respeito à topologia da norma do operador, o que significa que se $\|A_n - A\| \rightarrow 0$, então, $\Phi(A_n) \rightarrow \Phi(A)$.

Definição 5.0.8 *Um operador $\rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ que é auto-adjunto, positivo e $\text{Tr}(\rho) = 1$, é chamado **matriz densidade**.*

Uma vez que o traço de uma matriz densidade é assumido ser finito, toda matriz densidade é de classe-traço. Os próximos dois resultados dão uma caracterização precisa das famílias de valores esperados em termos de matrizes densidade.

Proposição 5.0.9 *Suponha que ρ é a matriz densidade em \mathcal{H} . Então, o mapeamento $\Phi_\rho : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$ dada por*

$$\Phi_\rho(A) = \text{Tr}(\rho A) = \text{Tr}(A\rho)$$

é uma família de valores esperados.

Note que, por definição, $\Phi_\rho(A)$ é exatamente o produto interno $\langle \rho, A \rangle$.

Proposição 5.0.10 *Para qualquer família de valores esperados $\Phi_\rho : \mathcal{B}(\mathcal{H}) \rightarrow \mathbb{C}$, existe uma única matriz densidade ρ tal que $\Phi(A) = \text{Tr}(\rho A)$ para todo $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$.*

O próximo resultado mostra que a nova noção de estado de um sistema inclui a velha noção.

Proposição 5.0.11 *Para qualquer vetor unitário $\psi \in \mathcal{H}$, vamos denotar por $|\psi\rangle\langle\psi|$ o operador projeção ortogonal sobre o subespaço gerado por ψ . Então, $|\psi\rangle\langle\psi|$ é uma matriz densidade e para todo $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$, temos*

$$\text{Tr}(|\psi\rangle\langle\psi|A) = \langle\psi, A\psi\rangle.$$

Definição 5.0.12 *Uma matriz densidade $\rho \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ é um estado puro, se existe um vetor unitário $\psi \in \mathcal{H}$ tal que ρ é igual à projeção ortogonal sobre o subespaço gerado por ψ . A matriz densidade ρ é chamada um estado misturado, se existe tal vetor unitário ψ não existe.*

Um sistema isolado que está inicialmente em um estado puro permanecerá em um estado puro para todo instante de tempo posterior, uma vez que o estado inicial ψ_0 evolui para o estado puro $e^{-i\frac{Ht}{\hbar}}\psi_0$, onde H é o hamiltoniano para o sistema. Mas, se um sistema está interagindo com o seu ambiente, então, o sistema pode evoluir para um estado misturado em um instante posterior.

Existem várias maneiras de se caracterizar estados puro como um subconjunto das matrizes densidade. Em primeiro lugar, não é difícil ver que uma matriz densidade ρ é um estado puro se, e somente se, $\text{Tr}(\rho^2) = 1$. Em segundo lugar, o conjunto das matrizes densidade compõem um conjunto convexo, uma vez que se ρ_1 e ρ_2 são não-negativos e têm um traço 1, então toda combinação linear convexa do tipo $\lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2$, para $0 < \lambda < 1$, também é uma matriz densidade. De acordo com um dos mais importantes e elegantes resultados da análise funcional sobre os conjuntos convexos compactos, conhecido como Teorema de Krein-Milman,²

²O Teorema de Krein-Milman e sua aplicação na Mecânica Quântica é discutido em detalhes na Ref. [55].

os estados puros são precisamente os pontos extremos deste conjunto convexo. Isto é, uma matriz densidade ρ é um estado puro se, e somente se, não puder ser expressa como uma combinação linear convexa do tipo $\rho = \lambda\rho_1 + (1 - \lambda)\rho_2$, para $0 < \lambda < 1$, onde ρ_1 e ρ_2 são matrizes densidade distintas.

A desigualdade de Bell generalizada

Passemos para a construção de uma desigualdade de Bell generalizada proposta por Bertlmann-Narnhofer-Thirring [14]. Considere um espaço de Hilbert de dimensão finita, $\mathcal{H} = \mathbb{C}^N$, onde os observáveis A são representados por todas as matrizes hermitianas e os estados σ por matrizes densidade. Será útil considerar essas quantidades como elementos de um espaço de Hilbert real, $\mathcal{H}_s = \mathbb{R}^{N^2}$, com o produto escalar

$$\langle \sigma, A \rangle = \text{Tr}(\sigma A) ,$$

e a norma correspondente

$$\|A\| = (\text{Tr} A^2)^{1/2} .$$

Ambas as matrizes densidade e observáveis são representadas por vetores em \mathcal{H}_s . Lembre-se que, por definição, a matriz densidade deve ser positiva e ter traço 1. Seja Ω o conjunto das matrizes densidade constituído pelo conjunto das matrizes densidades separáveis, \mathcal{S} , e o conjunto das matrizes densidade emaranhadas, $\Sigma = \Omega - \mathcal{S}$ (veja a Figura 2.3). De acordo com Bertlmann-Narnhofer-Thirring uma desigualdade de Bell em um sentido generalizado é dada por um observável $A \not\equiv 0$ para o qual

$$\langle \rho, A \rangle \geq 0 , \quad \forall \rho \in \mathcal{S} . \quad (5.2)$$

Logo, existe um σ tal que

$$\langle \sigma, A \rangle < 0 , \quad \text{para algum } \sigma \in \Sigma . \quad (5.3)$$

Consequentemente, a DBG (5.2) é violada por um estado emaranhado $\sigma \in \Sigma$, Eq.(5.3), e isto nos leva à seguinte desigualdade para A :

$$\langle \rho, A \rangle > \langle \sigma, A \rangle . \quad (5.4)$$

Considerando a violação máxima da DBG,

$$B(\sigma, \rho) = \max_{\|A - \alpha \mathbf{1}\| \leq 1} \left(\min_{\rho \in \mathcal{S}} \langle \rho, A \rangle - \langle \sigma, A \rangle \right) , \quad \text{com } \alpha \in \mathbb{R} , \quad (5.5)$$

Bertlmann-Narnhofer-Thirring provaram o seguinte

Teorema 5.0.13 (Teorema BNT) (i) A violação máxima da DBG é igual à distância de σ ao conjunto \mathcal{S} , isto é,

$$B(\sigma, \rho) = D(\sigma, \rho), \quad \forall \sigma \in \Sigma. \quad (5.6)$$

(ii) O min de D é obtido para algum ρ_0 e o max de B para

$$A_{\max} = \frac{\rho_0 - \sigma - \langle \rho_0, (\rho_0 - \sigma) \rangle \mathbf{1}}{\|\rho_0 - \sigma\|}. \quad (5.7)$$

(iii) Para $D = B$ o seguinte acontece:

$$\min_{\rho \in \mathcal{S}} \left\{ \rho - \sigma \left| \frac{\rho' - \sigma}{\|\rho' - \sigma\|} \right. \right\} \leq B(\sigma, \rho) \leq \|\rho' - \sigma\|, \quad \forall \rho' \in \mathcal{S}. \quad (5.8)$$

É importante enfatizar que o Teorema BNT tem uma representação geométrica simples, que pode ser obtida a partir de outros dois importantes resultados: o *Teorema do Hiperplano Suporte* e o *Teorema do Hiperplano de Separação*. O conceito de hiperplano suporte generaliza o conceito de linha tangente ou plano tangente.

Definição 5.0.14 *Sejam \mathcal{S} um subconjunto convexo de \mathcal{H}_s e ρ um elemento da fronteira de \mathcal{S} .³ Diz-se que H é um hiperplano suporte de \mathcal{S} se H intercepta \mathcal{S} e \mathcal{S} se situa em um dos lados de H . Se H é um hiperplano suporte de \mathcal{S} e $\rho \in \mathcal{S} \cap H$, ρ é chamado um ponto suporte de \mathcal{S} . Se existe um único hiperplano suporte H em $\rho \in \mathcal{S}$ diz-se que ρ é um ponto suave de \mathcal{S} . Chamamos H o hiperplano tangente.*

As provas dos dois próximos resultados podem ser encontradas nas Refs. [56, 57], nas páginas 270 e 46, respectivamente (os enunciados foram adaptados para a situação tratada aqui).

Teorema 5.0.15 (Teorema do Hiperplano Suporte) *Sejam \mathcal{S} um subconjunto convexo de \mathcal{H}_s e ρ_0 um ponto na fronteira de \mathcal{S} . Então existe um hiperplano suporte contendo ρ_0 . Reciprocamente, se \mathcal{S} é um conjunto fechado com interior não vazio tal que cada ponto na fronteira tem um hiperplano suporte, então \mathcal{S} é um conjunto convexo.*

Teorema 5.0.16 (Teorema do Hiperplano de Separação) *Sejam Σ e \mathcal{S} dois subconjuntos convexos não vazios disjuntos de \mathcal{H}_s . Então, existe um vetor ρ_0 diferente de zero e um número real c tal que $\langle \sigma, \rho_0 \rangle \geq c$ e $\langle \rho, \rho_0 \rangle \leq c$, para todo $\sigma \in \Sigma$ e $\rho \in \mathcal{S}$; ou seja, o hiperplano $\langle \cdot, \rho_0 \rangle = c$, separa Σ e \mathcal{S} .*

Note que, se reunirmos os Teoremas do Hiperplano Suporte e do Hiperplano de Separação, fica claro que o hiperplano tangente a $\rho_0 \in \mathcal{S} \subset \mathcal{H}_s$ separa o conjunto \mathcal{S} dos estados separáveis de um estado emaranhado $\sigma \in \Sigma$ (veja a Figura 5.1). Como resultado do Teorema BNT segue que o hiperplano tangente a $\rho_0 \in \mathcal{S}$ que maximiza a DBG é exatamente o plano tangente tal que $D(\sigma, \rho_0)$ é mínima. Este hiperplano é chamado *testemunha de emaranhamento*.

³Lembramos que um elemento ρ pertence à fronteira de um conjunto \mathcal{S} se a bola aberta centrada em ρ de raio arbitrário $\varepsilon > 0$ contém elementos que estão em \mathcal{S} e elementos que não estão em \mathcal{S} .

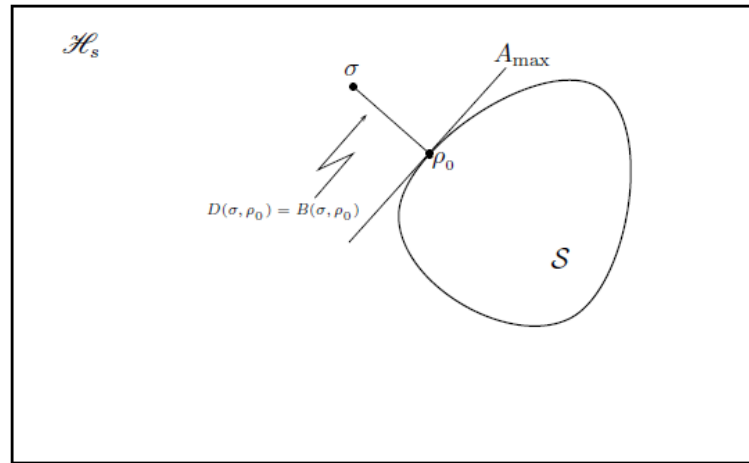


Figura 5.1: Ilustração geométrica do Teorema BNT. A violação máxima da DBG, $B(\sigma, \rho)$, que é igual à distância $D(\sigma, \rho)$ de um estado emaranhado σ ao conjunto \mathcal{S} de estados separáveis, é mostrada junto com o plano tangente definido por A_{\max} .

Desigualdade de Bell generalizada em cadeias de Heisenberg

Estamos agora preparados para provar o principal resultado deste apêndice. Queremos determinar $B(\sigma, \rho)$ para o emaranhamento em cadeias de Heisenberg e verificar que

$$\mathcal{E}(\sigma) = B(\sigma, \rho) = D(\sigma, \rho) .$$

Isto justificará o uso da norma de Hilbert-Schmidt como uma medida para o emaranhamento de um sistema.

No Capítulo 4 determinamos o conjunto das matrizes densidade separáveis e emaranhadas como sendo, respectivamente

$$\rho_s = \rho = \begin{pmatrix} v_s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_s & z & 0 \\ 0 & z^* & w_s & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_s \end{pmatrix}, \quad (5.9)$$

e

$$\rho_e = \sigma = \begin{pmatrix} v_e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w_e & z & 0 \\ 0 & z^* & w_e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & v_e \end{pmatrix}, \quad (5.10)$$

com $w_s = 1/2 - v_s$ e $w_e = 1/2 - v_e$. Mostramos, também no Capítulo 4, que o mínimo de D é obtido quando $v_s = |z|$ (ver Eqs. (4.12) e (4.15)). Sendo assim, podemos escrever

$$\rho_0 = \begin{pmatrix} |z| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 - |z| & z & 0 \\ 0 & z^* & 1/2 - |z| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |z| \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Agora podemos calcular o operador A utilizando a expressão (5.7), com

$$\rho_0 - \sigma = \begin{pmatrix} |z| - v_e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & v_e - |z| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v_e - |z| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & |z| - v_e \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

$$\langle \rho_0, (\rho_0, \sigma) \rangle \mathbf{1} = (|z| - v_e)(4|z| - 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.13)$$

e

$$\|\rho_0 - \sigma\| = 2(|z| - v_e). \quad (5.14)$$

Portanto,

$$A = \begin{pmatrix} 1 - 2|z| & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2|z| & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2|z| & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - 2|z| \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Agora podemos calcular explicitamente a violação máxima da DBG utilizando a Eq. (5.6).

Note que

$$\langle \rho, A \rangle = 2(v_s - |z|), \quad (5.16)$$

e como $v_s \geq |z|$, temos

$$\min \langle \rho, A \rangle = 0, \quad (5.17)$$

observe também que

$$\langle \sigma, A \rangle = -2(|z| - v_e), \quad (5.18)$$

sendo assim,

$$B(\sigma, \rho) = 2(|z| - v_e), \quad (5.19)$$

que é o mesmo resultado obtido no Capítulo 4 utilizando a norma de Hilbert-Schmidt (Eqs. (4.12) e (4.15)).

Portanto,

$$\mathcal{E}(\sigma) = B(\sigma, \rho) = D(\sigma, \rho) ,$$

como queríamos demonstrar. Fica assim justificado o uso da norma de Hilbert-Schmidt como medida do emaranhamento de um sistema.

Referências Bibliográficas

- [1] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, 47:777, 1935.
- [2] J. S. Bell. On the Einstein Podolsky Rosen paradox. *Physics*, 1:195, 1964.
- [3] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger. Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm gedankenexperiment: A new violation of Bell's inequalities. *Phys. Rev. Lett.*, 49:91, 1982.
- [4] Subir Sachdev. Quantum phase transitions. *Cambridge University Press*, 2011.
- [5] T. J. Osborne and M. A. Nielsen. Entanglement in a simple quantum phase transition. *Phys. Rev. A*, 66:032110, 2002.
- [6] X. Wang and Shi-Jian Gu. Negativity, entanglement witness and quantum phase transition in spin-1 heisenberg chains. *J. Phys. A: Math Theor.*, 40:10759, 2007.
- [7] M. A. Nielsen and I. L. Chuang. Quantum computation and quantum information. *Cambridge University Press*, 2000.
- [8] V. Vedral. Introduction to quantum information science. *Oxford University Press*, 2006.
- [9] P. Ball. The dawn of quantum biology. *Nature*, 474:272, 2011.
- [10] E. M. Ganger, E. Rieper, J. J. L. Morton, S. C. Benjamin, and V. Vedral. Sustained quantum coherence and entanglement in the avian compass. *Phys. Rev. Lett.*, 106:040503, 2011.
- [11] H. Lee, Y. Cheng, and G. R. Fleming. Coherence dynamics in photosynthesis: protein protection of excitonic coherence. *Science*, 316:1462, 2007.
- [12] C. Witte and M. Trucks. A new entanglement measure induced by the Hilbert-Schmidt norm. *Phys. Lett. A*, 257:14, 1999.
- [13] M. Ozawa. Entanglement measures and the Hilbert-Schmidt distance. *Phys. Lett. A*, 268:158, 2000.

- [14] R. A. Bertlmann, H. Narnhofer, and W. Thirring. Geometric picture of entanglement and bell inequalities. *Phys. Rev. A*, 66:032319, 2002.
- [15] G. Dahl, J. M. Leinaas, J. Myrheim, and E. Ovrum. A tensor product matrix approximation problem in quantum physics. *Linear Algebra and its applications*, 420:711, 2007.
- [16] D. Pérez-García, M. M. Wolf, D. Petz, and M. B. Ruskai. Contractivity of positive and trace preserving maps under l_p norms. *J. Math. Phys.*, 47:083506, 2006.
- [17] V. Vedral, M. B. Plenio, M. A. Rippin, and P. L. Knight. Quantifying entanglement. *Phys. Rev. Lett.*, 78:2275, 1997.
- [18] M. Horodecki, P. Horodecki, and R. Horodecki. Separability of mixed states: Necessary and sufficient conditions. *Phys. Lett. A*, 223:1, 1996.
- [19] O. M. Del Cima, D. H. T. Franco, and S. L. L. Silva. Quantum entanglement in dimer spin-1/2 Heisenberg chains with antiferromagnetic coupling. *Submetido para publicação*, 2015.
- [20] O. M. Del Cima, D. H. T. Franco, and S. L. L. Silva. Geometrical aspects of quantum entanglement. *Submetido para publicação*, 2015.
- [21] K. M. O'Connor and W. K. Wootters. Entangled rings. *Phys. Rev. A*, 63:052302, 2001.
- [22] X. Wang and P. Zanardi. Quantum entanglement and Bell inequalities in Heisenberg spin chains. *Phys. Lett. A*, 301:1, 2002.
- [23] M. Wiesniak, V. Vedral, and C. Brukner. Magnetic susceptibility as a macroscopic entanglement witness. *New. J. Phys.*, 7:258, 2005.
- [24] S. M. Aldoshin, E. B. Feldman, and M. A. Yurishchev. Quantum entanglement in nitrosyl iron complexes. *Journal of experimental and theoretical physics*, 107:804, 2008.
- [25] B. Bleaney, F. R. S., and K. D. Bowers. Anomalous paramagnetism of Cooper acetate. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 214:451, 1952.
- [26] O. M. Del Cima, D. H. T. Franco, and S. L. L. Silva. Quantum entanglement in trimer spin-1/2 Heisenberg chains with antiferromagnetic coupling. *Quantum Stud.: Math. Found.*, (DOI10.1007/s40509-015-0059-1):1–7, 2015.
- [27] J. C. Bonner and M. E. Fisher. Linear magnetic chains with anisotropic coupling. *Phys. Rev.*, 135:A640, 1964.

- [28] S. Eggert, I. Affleck, and M. Takahashi. Susceptibility of the spin-1/2 Heisenberg anti-ferromagnetic chain. *Phys. Rev. Lett.*, 73:2, 1994.
- [29] S. L. L. Silva. Entanglement of spin-1/2 Heisenberg antiferromagnetic quantum spin chains. *Submetido para publicação*, 2015.
- [30] M. Horodecki, P. Horodecki, and R. Horodecki. Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions. *Phys. Lett. A*, 223:1, 1996.
- [31] M. R. Dowling, A. C. Doherty, and S. D. Bartlett. Energy as an entanglement witness for quantum many-body systems. *Phys. Rev. A*, 70:062113, 2004.
- [32] N. Bohr. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys. Rev.*, 48:696, 1935.
- [33] Antonio S. T. Pires. Evolução das ideias da física. *Livraria da Física editorial*, 2^a edição, 2011.
- [34] O. Freire Jr., O. Pessoa Jr., and J. L. Bromberg. Teoria quântica, estudos históricos e implicações culturais. *Eduepb*, 2011.
- [35] O. Pessoa Jr. Conceitos de física quântica vol. I e II. *Livraria da Física*, 2006.
- [36] J. J. Sakurai. Modern quantum mechanics. *Addison-Wesley Publishing Company*, 1994.
- [37] B. E. Baaquie. The theoretical foundations of quantum mechanics. *Springer*, 2013.
- [38] B. M. Terhal. Bell inequalities an the separability criterion. *Phys. Lett. A*, 271:319, 2000.
- [39] G. Vidal and R. F. Werner. Computable measure of entanglement. *Phys. Rev. A*, 65:032314, 2002.
- [40] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin, and W. K. Wootters. Mixed-state entanglement and quantum error correction. *Phys. Rev. A*, 54:3824, 1996.
- [41] W. K. Wootters. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Phys. Rev. Lett.*, 80:2245, 1998.
- [42] H. H. Bauschke and P. L. Combettes. Convex analysis and monotone operator theory in Hilbert spaces. *Springer*, 2010.
- [43] O. Kahn. Molecular magnetism. *Wiley-VCH, New York*, 1993.
- [44] A. M. Souza, M. S. Reis, D. O. Soares-Pinto, I. S. Oliveira, and R. S. Sarthour. Experimental determination of thermal entanglement in spin clusters using magnetic susceptibility measurements. *Phys. Rev. B*, 77:104402, 2008.

- [45] T. Vértesi and E. Bene. Thermal entanglement in the nanotubular system $\text{Na}_2\text{V}_3\text{O}_7$. *Phys. Rev. B*, 73:134404, 2006.
- [46] K. Removic-Langer, E. Haussuhl, L. Wiehl, B. Wolf, F. Sauli and N. Hasselmann, P. Kopietz, and M. Lang. Magnetic properties of a novel quasi-2D Cu(II) -trimer system. *J. Phys.: Cond. Matt.*, 21:185013, 2009.
- [47] J. H. Van Vleck. The theory of electric and magnetic susceptibilities. Oxford, UK, 1932.
- [48] T. E. Grigereit, B. L. Ramakrishna, H. Place, R. D. Willett, G. C. Pellacani, T. Manfredini, L. Manabue, A. Bonamartini-Corradi, and L. P. Battaglia. Structures and magnetic properties of trinuclear Copper (II) halide salts. *Inorg. Chem.*, 26:2235, 1987.
- [49] K. Kambe. Magnetic susceptibilities of three and four spin systems. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 140:1747, 1995.
- [50] M. S. Reis, A. M. Santos, and V. S. Amaral. Homometallic ferrimagnetism in the zig-zag chain compound $\text{Na}_2\text{Cu}_5\text{Si}_4\text{O}_{14}$. *Phys. Rev. B*, 73:214415, 2006.
- [51] A. M. Santos, P. Brandão, A. Fitch, M. S. Reis, V. S. Amaral, and J. Rocha. Synthesis, crystal structure and magnetic characterization of $\text{Na}_2\text{Cu}_5\text{Si}_4\text{O}_{14}$: An inorganic ferrimagnetic chain. *J. Solid State Chem.*, 180:16, 2007.
- [52] Y. Savina, O. Bludov, V. Pashchenko, S. L. Gnatchenko, P. Lemmens, and H. Berger. Magnetic properties of the antiferromagnetic spin - 1/2 chain system $\beta\text{-TeVO}_4$. *Phys. Rev. B*, 84:104447, 2011.
- [53] B. C. Hall. Quantum theory for mathematicians. Springer, Graduate texts in mathematics, 2013.
- [54] M. Reed and B. Simon. Methods of modern mathematical physics. Academic Press, 1, 1980.
- [55] D. H. T. Franco. Métodos matemáticos da física: tópicos de análise funcional com aplicações à teoria quântica. *Notas de aula*, DPF, 2008-2016.
- [56] S. Lang. Linear algebra. Springer, terceira edição, 1987.
- [57] S. Boyd and L. Vandenberghe. Convex optimization. Cambridge University Press, 2004.