

MARLON MARQUES DA SILVA

UMA PROPOSTA DE GRANDEZA FÍSICA DE
MEDIDA DE EMARANHAMENTO QUÂNTICO

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*.

Orientador: Oswaldo Monteiro Del Cima

Coorientador: Daniel Heber T. Franco

VIÇOSA - MINAS GERAIS

2019

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

T

S586p
2019
Silva, Marlon Marques da, 1985-
Uma proposta de grandeza física de medida de
emaranhamento quântico / Marlon Marques da Silva. – Viçosa,
MG, 2019.
118 f. : il. (algumas color.) ; 29 cm.

Inclui apêndices.

Orientador: Oswaldo Monteiro Del Cima.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Viçosa.

Referências bibliográficas: f. 106-112.

1. Emaranhamento quântico. 2. Teoria do transporte.
3. Hilbert, Espaço de. I. Universidade Federal de Viçosa.
Departamento de Física. Programa de Pós-Graduação em Física.
II. Título.

CDD 22. ed. 530.12

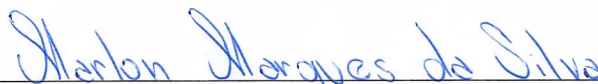
MARLON MARQUES DA SILVA

UMA PROPOSTA DE GRANDEZA FÍSICA DE
MEDIDA DE EMARANHAMENTO QUÂNTICO

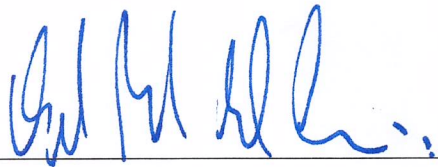
Tese apresentada à Universidade Federal
de Viçosa, como parte das exigências do
Programa de Pós-Graduação em Física,
para obtenção do título de *Doctor Scientiae*.

APROVADA: 28 de agosto de 2019.

Assentimento:



Marlon Marques da Silva
Autor



Oswaldo Monteiro Del Cima
Orientador



Ao meu amor, Liliane.

Ao meu amigo, Luizinho (In Memoriam).

Agradecimentos

Aos meus pais, irmão e irmãs, pelo amor, carinho e compreensão durante todos esses anos. Desculpem-me por tanta ausência. Amo vocês.

À minha tia Adriana Paula, por todo carinho, incentivo, apoio e dedicação sem fim nos momentos que eu mais precisei.

Ao meu amor, Liliane Duarte Marques, por todo amor, carinho, dedicação e compreensão neste longo caminho.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Oswaldo Monteiro Del Cima, obrigado por ter aceitado me orientar mesmo sem nem me conhecer e não tendo nenhuma referência ao meu respeito.

Aos meus amigos de graduação, Marco Túlio, Helder Oliveira, Roney Fonseca, Hemilly Gomes, Juliana Celestino, Malu Maira, Marília Bataglini. Obrigado pela amizade e pelos muitos momentos de risadas. Nunca esquecerei das nossas lutas.

Aos meus amigos de infância, Fabricio Carvalho (Bill), Edson Lúcio (Pé de Frango), Fernando Carvalho (Nando), Carlos Correa (Aguado), Bruno Vileneuve (Vileneuve), Anderson Gama (Kinha), Ricardo Hott (Leitão), Juliana Thasmo (Ju). Vocês me ensinaram a valorizar as pequenas coisas da vida e me mostraram que eu nunca estarei sozinho. Obrigado do fundo do meu coração, sem vocês eu não seria ninguém!

Aos meus colegas do departamento de física, agradeço pelos bons anos de convivência, seja no departamento, no bandeirão ou nas cervejas. Um agradecimento especial para Ismael Carrasco, Ricardo Lopes, Emerson Miranda, Sylvestre Carvalho e Péricles Alves, por toda ajuda e discussões durante o doutorado.

À todos aqueles que me incentivaram e acreditaram no meu potencial.

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

“ Tenho amigos que não sabem o quanto são meus amigos. Não percebem o amor que lhes devoto e a absoluta necessidade que tenho deles. A amizade é um sentimento mais nobre do que o amor, eis que permite que o objeto dela se divida em outros afetos, enquanto o amor tem intrínseco a cisma que não admite a rivalidade. E eu poderia suportar, embora não sem dor, que tivessem morrido todos os meus amores, mas enlouqueceria se morressem todos os meus amigos! Até mesmo aqueles que não percebem o quanto são meus amigos e o quanto minha vida depende de suas existências. Se um deles morrer, eu ficarei torto para um lado. Se todos eles morrerem, eu desabo! Por isso é que, sem que eles saibam, eu rezo pela vida deles. E me envergonho, porque essa minha prece é, em síntese, dirigida ao meu bem-estar. Ela é, talvez, fruto do meu egoísmo.

Por vezes, mergulho em pensamentos sobre alguns deles. Quando viajo e fico diante de lugares maravilhosos, cai-me alguma lágrima por não estarem junto de mim, compartilhando daquele prazer.

Se alguma coisa me consome e me envelhece e que a roda furiosa da vida não me permite ter sempre ao meu lado, morando comigo, andando comigo, falando comigo, vivendo comigo, todos os meus amigos, e, principalmente os que não desconfiam ou talvez nunca vão saber que são meus amigos! A gente não faz amigos, reconhece-os.”

Vinícius de Moraes

“ Imagine que o mundo seja algo como uma gigantesca partida de xadrez sendo disputada pelos deuses, e que nós fazemos parte da audiência. Não sabemos quais são as regras do jogo; podemos apenas observar seu desenrolar. Em princípio, se observarmos por tempo suficiente, iremos descobrir algumas das regras. As regras do jogo é o que chamamos de física fundamental.”

Richard Feynman

Resumo

SILVA, Marlon Marques da, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, agosto de 2019. **Uma proposta de grandeza física de medida de emaranhamento quântico.** Orientador: Oswaldo Monteiro Del Cima. Coorientador: Daniel Heber Theodoro Franco.

O Emaranhamento quântico teve seu primeiro destaque no trabalho de Einstein, Podolsky e Rosen em 1935, mas foi somente nos anos 80, após as primeiras comprovações experimentais, que o emaranhamento passou a ser de grande interesse da comunidade científica. Na década de 90 vieram as primeiras grandes aplicações baseadas em tecnologias de emaranhamento. Os grandes problemas atuais do emaranhamento são detectar e quantificar o emaranhamento. Várias propostas existem, mas o assunto ainda permanece em aberto, tanto do ponto de vista teórico como filosófico. Neste trabalho, o principal objetivo é estudar o emaranhamento quântico dando ênfase a medidas de emaranhamento via distância entre estados, tema que é pouco abordado na literatura. Particularmente, analisaremos o emaranhamento térmico em sistemas magnéticos descritos pelo modelo de Heisenberg para dímeros de spin-1/2, dímeros de spin-($\frac{1}{2}, 1$) e trímeros de spin-1/2 isotrópicos e anisotrópicos, na presença de campos magnéticos homogêneos e inhomogêneos. Mostraremos os métodos e possibilidades de abordar o assunto com a medida proposta. Apresentaremos cálculos analíticos para temperaturas críticas de emaranhamento, medidas de emaranhamento e condições necessárias para que o emaranhamento se manifeste nos modelos citados.

Palavras-chave: Emaranhamento. Distância entre estados. Norma de Hilbert-Schmidt. Modelo de Heisenberg.

Abstract

SILVA, Marlon Marques da, D.Sc., Universidade Federal de Viçosa, August, 2019. **A proposal of physical greatness of measure quantum entanglement.** Advisor: Oswaldo Monteiro Del Cima. Co-advisor: Daniel Heber Theodoro Franco.

Quantum Entanglement first featured in the work of Einstein, Podolsky, and Rosen in 1935, but it was only in the 80s, after the first experimental proofs, that entanglement became of interest to the large scientific community. The early years of the decade of 90 saw the first important applications based on entanglement technologies. The major up-to-date problems related to entanglement concern its detection and quantification. Several proposals exist but the subject remains open, from both the theoretical and philosophical points of view. In this work, the main objective is to study quantum entanglement emphasizing entanglement measurements via distance between states, a theme that is little addressed in the literature. In particular, we will analyze the thermal entanglement in magnetic systems described by Heisenberg's model for spin-1/2 dimers, spin-($\frac{1}{2}$,1) and spin-1/2 trimers, isotropic and anisotropic, in the presence of homogeneous and inhomogeneous magnetic fields. We will show the methods and possibilities of approaching the subject with the proposed measure. We will present analytical calculations for critical entanglement temperatures, entanglement measurements and conditions required for entanglement to manifest in the cited models.

Keywords: Entanglement. Distance between states. Hilbert-Schmidt norm. Heisenberg model.

Lista de Figuras

1.1	Ilustração esquemática para a testemunha de emaranhamento, onde W_t são as testemunhas que tangenciam o conjunto da matrizes densidades separáveis.	28
1.2	Representação esquemática da distância mínima entre os estados ρ_e e ρ_s .	33
2.1	Relação entre a medida de emaranhamento (2.27), o autovalor λ_4 (2.15d) e a condição de emaranhamento (2.22) para $\mathcal{B} = 10K$ e $\mathcal{J} = -10K$.	44
2.2	Medida de emaranhamento térmico para campo fraco ($ \mathcal{B} < \mathcal{J} $): $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$ com $\mathcal{J} = -10K$ e vários valores de \mathcal{B} .	45
2.3	Medida de emaranhamento térmico para campo médio ($ \mathcal{B} = \mathcal{J} $): $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$ com $\mathcal{J} = -5K$ e $\mathcal{J} = -10K$ para $\mathcal{B} = 0$ e $\mathcal{B} \neq 0$.	46
2.4	Medida de emaranhamento térmico para campo forte ($ \mathcal{B} > \mathcal{J} $): $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$ com $\mathcal{J} = -10K$ e diferente valores de \mathcal{B} .	47
2.5	Medida de emaranhamento térmico $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$ em função do campo magnético para $\mathcal{J} = -10K$ e diferentes valores de temperatura T .	48
2.6	Medida de emaranhamento $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$. (a) $\mathcal{J} = -8K$, (b) $\mathcal{B} = 2K$ e (c) $T = 0K$.	48
2.7	A medida de emaranhamento $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}_x, T)$ para $\mathcal{J} = -4K$ nos três regimes de campo magnético.	50
2.8	Comparação entre as medidas de emaranhamento com campo magnético na direção x e z para os três regimes de campo com $\mathcal{J} = -6K$: a) $\mathcal{B}_{x,z} = 4K$, b) $\mathcal{B}_{x,z} = 6K$ e c) $\mathcal{B}_{x,z} = 8K$.	51
2.9	λ_4 em função da constante de troca \mathcal{J} para $T = 3K$ com dois campos magnéticos distintos, $\mathcal{B} = 1K$ e $\mathcal{B} = 3K$.	54
2.10	λ_4 em função da temperatura T para $\mathcal{J} = -8K$ e $\mathcal{B} = 0K$. O gráfico a) com $\mathcal{J}_z = 0K$, b) com $\mathcal{J}_z = -4K$, c) com $\mathcal{J}_z = -8K$ e d) com $\mathcal{J}_z = -12K$.	55

2.11	λ_4 em função da temperatura T com $\mathcal{J} = 8K$ e $\mathcal{B} = 0K$. O gráfico a) com $\mathcal{J}_z = 4K$ e b) com $\mathcal{J}_z = 10K$	56
2.12	Emaranhamento térmico do modelo XX em função da constante de troca, para $\mathcal{B} = \pm 2K$	58
2.13	Emaranhamento térmico do modelo XX em função da constante de troca para $\mathcal{B} = \pm 3, 5K$	59
2.14	Emaranhamento térmico do modelo XX em função do campo magnético para $\mathcal{J} = \pm 10, 0K$	59
2.15	Emaranhamento térmico do modelo XX em função da temperatura para $\mathcal{J} = \pm 8K$. Curva 1 representa o campo fraco ($\mathcal{B} = \pm 3K$), curva 2 o campo médio ($\mathcal{B} = \pm 4K$) e curva 3 o campo forte ($\mathcal{B} = \pm 5K$).	60
2.16	Emaranhamento do modelo XX : (a) $\mathcal{J} = 10K$, (b) $\mathcal{B} = 2K$ e (c) $T = 2K$	61
2.17	Emaranhamento térmico do modelo XXZ antiferromagnético. Todas as curvas são para $\mathcal{J} = -6K$ e $\mathcal{B} = 1K$. Curvas 1 e 2 correspondem aos modelos XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e XX ($\mathcal{J}_z = 0$). Curvas 3 e 4 correspondem ao modelo XXZ com \mathcal{J}_z igual a $-4K$ e $-8K$, respectivamente.	62
2.18	Emaranhamento térmico do modelo XXZ antiferromagnético com $\mathcal{J} = -6K$. As curvas 1 e 2 correspondem aos modelos XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e XX ($\mathcal{J}_z = 0$), respectivamente. As curvas 3 e 4 correspondem ao modelo XXZ com \mathcal{J}_z iguais a $-4K$ e $-8K$, respectivamente. (a) $\mathcal{B} = 6K$. (b) $\mathcal{B} = 7K$	63
2.19	Emaranhamento térmico do modelo XXZ antiferromagnético em função da constante de troca \mathcal{J} para três temperaturas, $1K$, $2K$ e $3K$, na ausência de campo magnético e com $\mathcal{J}_z = -4K$	64
2.20	Emaranhamento térmico do modelo XXZ antiferromagnético em função da constante de troca \mathcal{J} para duas temperaturas, $1K$ e $2K$. As duas curvas são para $\mathcal{J}_z = -2K$ e $\mathcal{B} = \pm 6K$	64
2.21	Emaranhamento térmico do modelo XXZ para $\mathcal{B} = 2K$ com (a) $T = 2K$, (b) $\mathcal{J}_z = -8K$ e (c) $\mathcal{J} = -8K$	65

2.22	Emaranhamento térmico do modelo XXZ ferromagnético. Em todos os três gráficos temos: $\mathcal{J} = 10K$ e curva 1 com $\mathcal{J}_z = 11K$ para qualquer valor de campo. Curva 2 com $\mathcal{J}_z = 0K$ (modelo XX) e (a) $\mathcal{B} = 1K$, (b) $\mathcal{B} = 5K$, (c) $\mathcal{B} = 6K$. Curva 3 com $\mathcal{J}_z = 6K$ e (a) $\mathcal{B} = 1K$, (b) $\mathcal{B} = 2K$, (c) $\mathcal{B} = 3K$. Curva 4 com $\mathcal{J}_z = 4K$ e (a) $\mathcal{B} = 1K$, (b) $\mathcal{B} = 3K$, (c) $\mathcal{B} = 4K$	66
2.23	Emaranhamento térmico do modelo XXZ ferromagnético em função da constante de troca para três temperaturas, $1K$, $2K$ e $3K$, e $\mathcal{J}_z = 4K$. Os campos magnéticos são (a) $\mathcal{B} = 2K$ e (b) $\mathcal{B} = 5K$	66
2.24	Emaranhamento térmico do modelo XXZ ferromagnético para $\mathcal{B} = 2K$ e com (a) $T = 2K$, (b) $\mathcal{J}_z = 2K$ e (c) $\mathcal{J} = 8K$	67
2.25	Emaranhamento térmico do modelo XXX : a) Caso antiferromagnético com $\Delta B = 2K$, $\mathcal{J} = -6K$ e as curvas 1 e 2 com $\delta\mathcal{B} = 0K$ e $\delta\mathcal{B} = 10K$, respectivamente. b) Caso ferromagnético com $\Delta B = 2K$, $\mathcal{J} = 6K$ e as curvas 1 e 2 com $\delta\mathcal{B} = 0K$ e $\delta\mathcal{B} = 10K$, respectivamente.	69
2.26	Emaranhamento térmico do modelo XXX : a) $\Delta\mathcal{B} = 4K$ com $\mathcal{J} = -6K$ e b) $\Delta\mathcal{B} = 0K$ com $T = 1K$	70
2.27	Emaranhamento térmico do modelo XX para $\mathcal{J} = 5K$ e $\delta\mathcal{B} = 8K$: a) $\Delta\mathcal{B} = 4K$ e b) $\Delta\mathcal{B} = 6K$	71
2.28	Emaranhamento térmico do modelo XXZ : a) Caso antiferromagnético com $\Delta B = 2K$, $\mathcal{J} = -6K$ e $\delta\mathcal{B} = 4K$. As curvas 1 e 2 correspondem as modelos XX ($\mathcal{J}_z = 0K$) e XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$). As curvas 3 e 4 correspondem ao modelo XXZ com \mathcal{J}_z iguais a $-4K$ e $-8K$, respectivamente. b) e c) Caso ferromagnético com $\Delta B = 2K$, $\mathcal{J} = 6K$. As curvas 1 e 2 correspondem as modelos XX ($\mathcal{J}_z = 0K$) e XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$), respectivamente. As curvas 3 e 4 correspondem ao modelo XXZ com \mathcal{J}_z iguais a $4K$ e $8K$, respectivamente. Foram usados em b) $\delta\mathcal{B} = 10K$ e c) $T = 1,4K$	71
3.1	Diagrama da condição de emaranhamento.	76

3.2	<p>Comparação entre o emaranhamento térmico dos modelos XXX, XX e XXZ na ausência de campo. Em a) temos o caso antiferromagnético, com $\mathcal{J} = -7K$. As curvas 1 e 2 representam o modelo XXZ com $\mathcal{J}_z = -4K$ e $\mathcal{J}_z = -10K$, respectivamente. A curva 3 representa o modelo XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e a curva 4 representa o modelo XX ($\mathcal{J}_z = 0$). Em b) temos o caso ferromagnético, com $\mathcal{J} = 7K$. Curva 1 e 2 representam o modelo XXZ com $\mathcal{J}_z = 4K$ e $\mathcal{J}_z = 10K$, respectivamente. A curva 3 representa o modelo XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e a curva 4 representa o modelo XX ($\mathcal{J}_z = 0$). . .</p>	79
3.3	<p>Modelos XXX e XX com $\mathcal{J} = -7K$ na presença de campo magnético uniforme. Em a) temos o modelo XXX com as curvas 1, 2, 3 e 4 com campos $\mathcal{B} = 0K$, $3 \times 6/2K$ (campo fraco), $3 \times 7/2K$ (campo médio) e $3 \times 8/2K$ (campo forte), respectivamente. Em b) temos o modelo XX com as curvas 1, 2, 3 e 4 com campos $\mathcal{B} = 0K$, $6/\sqrt{2}K$ (campo fraco), $7/\sqrt{2}K$ (campo médio) e $8/\sqrt{2}K$ (campo forte), respectivamente.</p>	81
3.4	<p>a) Comparação da medida de emaranhamento dos três modelos em função da temperatura para $\mathcal{J} = -7K$ e $\mathcal{B} = 3K$. As curvas 1 e 2 representam o modelo XXZ com \mathcal{J}_z igual a $-10K$ e $-4K$, respectivamente. As curvas 3 e 4 representam os modelos XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e XX ($\mathcal{J}_z = 0K$). b) Medida de emaranhamento em função do campo magnético para $\mathcal{J} = -7K$ e $T = 0,5K$. As curvas 1, 2 e 3 representam os modelos XXZ ($\mathcal{J}_z = -10K$), XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e XX ($\mathcal{J}_z = 0K$), respectivamente</p>	82
3.5	<p>Efeito da inhomogeneidade do campo magnético. Em a) e b) temos o modelo XXX com $\mathcal{J} = -6K$. a) Curva 1: $\mathcal{B}_1 = -3K$ e $\mathcal{B}_2 = -8K$. Curva 2: $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = -3K$. Curva 3: $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = 0K$. b) Curva 1: $\mathcal{B}_1 = 3K$ e $\mathcal{B}_2 = 8K$. Curva 2: $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = 3K$. Curva 3: $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = 0K$. Em c), temos $\mathcal{B}_1 = -10K$ e $\mathcal{B}_2 = +10K$. Curva 1: Modelo XXX com $\mathcal{J} = 6K$. Curva 2: Modelo XXZ com $\mathcal{J} = 6K$ e $\mathcal{J}_z = 10K$.</p>	83
3.6	<p>Efeito da inhomogeneidade do campo magnético para $T = 1K$. a) Modelo XXX com $\mathcal{J} = -6K$, b) Modelo XX com $\mathcal{J} = -6K$ e c) Modelo XXZ com $\mathcal{J} = -6K$ e $\mathcal{J}_z = -10K$.</p>	84
4.1	<p>Esquema da configuração de spins do trímero.</p>	86

4.2	Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=0}$ com $\mathcal{J}_1 = -6K$. a) As curvas 1, 2, 3 e 4 são para $\mathcal{B} = 8K, 9K, 10K$ e $0K$. b) A temperatura é $T = 1K$ e as curvas 1 e 2 são para $\mathcal{B} = 6K$ e $0K$	90
4.3	Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=-\mathcal{J}_1}$ com $\mathcal{J}_1 = -6K$. a) As curvas 1, 2, 3 e 4 são para $\mathcal{B} = 8K, 9K, 10K$ e $0K$. b) As curvas 2 e 4 são para $\mathcal{B} = 0$ e as curvas 1 e 3 são para $\mathcal{B} = 8K$	92
4.4	Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2>0}$ com $\mathcal{J}_1 = -6K$ e $\mathcal{B} = 9K$. As curvas 1, 2, 3 e 4 são para \mathcal{J}_2 iguais a $3K, 12K, 0K$ e $6K$, respectivamente	93
4.5	Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=0}$ onde as curvas 1, 2, 3 e 4 tem campos magnéticos \mathcal{B} iguais a $5/\sqrt{2}K, 6/\sqrt{2}K, 7/\sqrt{2}K$ e $0K$, respectivamente. a) $T = 1K$ e b) $\mathcal{J}_1 = -6K$	94
4.6	Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=\mathcal{J}_1}$ com $\mathcal{J}_1 = 6K$ onde as curvas 1, 2, 3 e 4 tem campo magnético \mathcal{B} iguais a $5K, 6K, 7K$ e $0K$, respectivamente.	95
4.7	Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2\neq 0}$ com $\mathcal{J}_1 = -6K$ e $\mathcal{B} = 2K$. As curva 1, 2, 3 e 4 são para \mathcal{J}_2 iguais a $0K, 6K, 4K$ e $8K$, respectivamente	96
4.8	Medida de emaranhamento entre o par 1 e 3 para $\mathcal{J}_2 = 0$, $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=0}$. Em a) $T = 1K$ e as curvas 1, 2, 3 e 4 com \mathcal{B} iguais a $0K, 4K, 6K$ e $8K$, respectivamente. Em b) $\mathcal{J}_1 = -6K$ e as curvas 1, 2 e 3 com T iguais a $0, 5K, 1, 0K$ e $1, 5K$, respectivamente. c) $\mathcal{J}_1 = -6K$ e as curvas 1, 2, 3 e 4 com \mathcal{B} iguais a $0K, 8K, 9K$ e $10K$, respectivamente.	99
4.9	Medida de emaranhamento no par 13 para $\mathcal{J}_2 = 0$. Em a) $T = 1K$ e as curvas 1, 2, 3 e 4 com \mathcal{B} iguais a $0K, 4K, 6K$ e $8K$, respectivamente. Em b) $\mathcal{J}_1 = -6K$ e as curvas 1, 2 e 3 com T iguais a $1, 0K, 1, 5K$ e $2, 0K$, respectivamente. Em c) $\mathcal{J}_1 = -6K$ e as curvas 1, 2, 3 e 4 com \mathcal{B} iguais a $0K, 2\sqrt{2}K, 3\sqrt{2}K, 4\sqrt{2}K$, respectivamente.	100
4.10	Emaranhamento nos pares 12 e 13 do modelo XXX em função do campo magnético para $\mathcal{J}_1 = \mathcal{J}_T = -224, 9K$. a) Curvas 1, 2, 3 e 4 são para T igual a $8K, 50K, 100K$ e $150K$. c) Curvas 1, 2, 3 e 4 são para T iguais a $8K, 30K, 50K$ e $70K$. b) e d) são os resultados do trabalho [68].	102
A.1	Medida de emaranhamento (A.11), autovalor λ_4 (A.5d) e a condição de emaranhamento (A.6) para $\mathcal{B}_x = 10K$ e $\mathcal{J} = -10K$	116

Sumário

Introdução	16
1 Emaranhamento	19
1.1 Correlações quânticas	19
1.2 Emaranhamento de estados puros	24
1.3 Emaranhamento de estados mistos	25
1.4 Critérios de separabilidade	26
1.4.1 Critério de Peres	26
1.4.2 Critério de Peres-Horodecki	27
1.4.3 Testemunha de emaranhamento	27
1.4.4 Critérios de entropia	28
1.4.5 Critério da majoração	29
1.5 Quantificadores de emaranhamento	29
1.5.1 Emaranhamento de formação e concorrência	30
1.5.2 Negatividade	31
1.5.3 A distância entre estados como quantificador de emaranhamento	32
2 Dímero de spin-1/2	35
2.1 Modelo XXX na presença de campo magnético $\vec{B} = B_z \hat{z}$	36
2.1.1 Condição de emaranhamento e determinação da temperatura crítica	38
2.1.2 A medida de emaranhamento via distância entre estados	41
2.1.3 Emaranhamento como função da temperatura	45
2.1.4 Emaranhamento em função do campo magnético	47
2.1.5 Emaranhamento e susceptibilidade	49
2.2 Modelo XXX na presença de campo magnético $\vec{B} = B_x \hat{x}$	49

2.3	Modelo XXZ na presença de campo magnético $\vec{B} = B_z \hat{z}$	52
2.3.1	Condição de emaranhamento e determinação da temperatura crítica	53
2.3.2	Análise do autovalor λ_4 no modelo XXZ	54
2.3.3	Distância entre estados	55
2.3.4	Modelo XX	57
2.3.5	Modelo XXZ	61
2.4	O efeito da inhomogeneidade do campo magnético no dímero de spin-1/2	67
2.4.1	Modelo XXX	69
2.4.2	Modelo XX	70
2.4.3	Modelo XXZ	70
3	Dímeros de spin-$(\frac{1}{2}, 1)$	73
3.1	Modelo anisotrópico na presença de um campo magnético inhomogêneo	73
3.2	Análise do emaranhamento na ausência de campo magnético	77
3.2.1	Modelo XXX	77
3.2.2	Modelo XX	78
3.2.3	Modelo XXZ	78
3.3	Análise do emaranhamento na presença de campo magnético uniforme	80
3.3.1	Modelo XXX	80
3.3.2	Modelo XX	81
3.3.3	Modelo XXZ	82
3.4	Análise dos efeitos do campo magnético inhomogêneo	83
4	Trímero de spin-$\frac{1}{2}$	85
4.1	Trímero de spin-1/2 na presença de campo magnético	85
4.2	Emaranhamento \mathcal{E}_{12}	88
4.2.1	Modelo XXX	89
4.2.2	Modelo XX	92
4.3	Emaranhamento \mathcal{E}_{13}	97
4.3.1	Modelo XXX	98
4.3.2	Modelo XX	99
	Conclusões e perspectivas	103

Bibliografia	106
A Modelo XXX na presença de campo magnético $\vec{B} = B\hat{x}$	113
B Modelo XXX na presença de campo magnético $\vec{B} = B\hat{x} + B\hat{z}$	117

Introdução

Em um artigo de 1935 [1], Einstein, Podolsky e Rosen questionaram se a mecânica quântica era uma teoria completa e além disso questionaram a sua realidade, isto é, se os fenômenos que ela descrevia eram fenômenos reais. Nesse trabalho, frequentemente chamado de EPR, os autores evidenciam, pela primeira vez, o caráter não local da mecânica quântica. As críticas dos autores a teoria quântica acabaram por dar origem à percepção do fenômeno do emaranhamento. Isso leva Niels Bohr, no volume seguinte da revista [2], a publicar sua resposta refutando, em termos um tanto obscuros, as ideias Einstein, Podolsky e Rosen. Debates posteriores sobre o fenômeno fizeram Einstein chamar o emaranhamento de “ação fantasmagórica à distância”. Para Einstein, criador da teoria de relatividade, que tem como base o fato de que toda comunicação é propagada a uma velocidade não superior à da luz, ver que a teoria quântica previa correlações instantaneamente estabelecidas entre duas partículas distantes só podia ser um artefato de uma teoria incompleta.

Passados quase três décadas desde o artigo de Einstein, a questão se o emaranhamento é algo real ou apenas uma consequência abstrata do formalismo matemático da teoria ainda estava em aberto até que, em 1964, John Bell mostrou que, se nos ativermos à suposição de localidade, então não pode haver uma conclusão da mecânica quântica no sentido do EPR. Bell apresentou desigualdades matemáticas, as chamadas “desigualdades de Bell” [3], que sempre são satisfeitas no âmbito da física clássica, mas que no âmbito da física quântica podem ser violadas em casos especiais, tais como nos casos em que haja emaranhamento. O trabalho de Bell causou uma euforia no mundo filosófico, pois parecia impor limites severos à visão do mundo oferecida pela física. A partir dos trabalhos de Bell, quase 20 anos depois, foi possível mostrar experimentalmente [4] que as desigualdades de Bell eram violadas em casos especiais, previstos apenas no contexto da física quântica e corroborando a favor de Bohr contra Einstein.

No início de década de 90 o emaranhamento passou a ser considerado como um recurso que permite fazer coisas que seriam impossíveis de outras maneiras, tal como o teletransporte quântico [5, 6]. O emaranhamento também tem se mostrado fundamental para o avanço de várias áreas da física, tais como nas transições de fases quânticas [7, 8], informação quântica [9], biologia quântica [10–12].

Nesta tese, estudaremos o emaranhamento em materiais magnéticos ferromagnéticos e antiferromagnéticos, que são descritos pelo modelo de Heisenberg. Estudos em cadeias de Heisenberg vêm sendo realizados em modelos cujo Hamiltoniano comuta com a componente z do spin total [13, 14]. O emaranhamento através da susceptibilidade magnética, da magnetização ou da energia interna podem ser encontrados nos trabalhos [15–17]. Experimentos mostraram que spins desemparelhados por algumas centenas de angstroms são emaranhados através de uma coleção de singletos de spins feitos de cadeias de spin-1/2 antiferromagnéticas [18].

Queremos quantificar o grau de emaranhamento de um sistema e para isso utilizaremos um método denominado *distância entre estados*. Nossa escolha por esse método se deve à sua interpretação física e seu apelo geométrico. Outro ponto que motivou a sua utilização é o fato dele ser independente da dimensão e do tamanho do sistema. Apesar da proposta de medir o emaranhamento via distância entre estados ser de 1997 [19, 20], ela não vem sendo utilizada na literatura devido ao fato da necessidade de se usar métodos numéricos para aplicá-la. Como medida de distância, utilizaremos a norma de Hilbert-Schmidt para medir a distância entre os estados quânticos para os quais estamos interessados em saber o grau de emaranhamento. Foi amplamente estudado que essa norma satisfaz as condições de uma boa medida de emaranhamento [21–23]. Veremos que tal norma mostrou-se prática e eficiente como quantificador de emaranhamento. Mostraremos que, em sistemas de dimensão $2 \otimes 2$, nosso método é equivalente, em resultados, ao método mais amplamente utilizado, a concorrência. Além disso, aplicaremos esse método em sistemas onde a concorrência não se aplica, tais como sistemas de dimensão $2 \otimes 3$.

Esta tese está estruturada da seguinte forma:

No primeiro capítulo, revisamos o conceito fenomenológico e matemático do emaranhamento. Apresentamos alguns critérios para dizer se um dado estado é ou não emaranhado. Uma vez detectado o emaranhamento, apresentamos alguns quantificadores de emaranha-

mento e em especial, o objeto de trabalho chave desta tese, a distância entre estados.

No segundo capítulo, estudamos o emaranhamento em sistema dímeros de spin-1/2 na presença de campo magnético uniforme e não uniforme, em modelo isotrópicos e anisotrópicos. Nesse capítulo, será discutido em detalhes o método para se calcular o emaranhamento via distância entre estados utilizando a norma de Hilbert-Schmidt. Por esse motivo, será o capítulo mais longo da tese para proporcionar aos leitores uma maior familiaridade com o método. Mostraremos que, em algumas situações, a temperatura crítica de emaranhamento pode ser obtida antes mesmo de se calcular o emaranhamento.

No terceiro capítulo, continuaremos analisando sistemas dímeros, mas agora num sistema de dimensão maior, composto de spin $\frac{1}{2}$ e spin 1. Apresentaremos as semelhanças e diferenças entre os dois sistemas.

No quarto capítulo, estenderemos o método para um sistemas tripartite, um trímero de spin-1/2. Aqui, analisamos o emaranhamento entre pares de spins vizinhos que são conectados por constante de troca e também de spins que não são vizinhos e não interagem via constante de troca. Mostraremos quais são os efeitos sobre o emaranhamento entre pares quando estes estiverem interagindo com terceiro spin e comparamos com o emaranhamento entre pares isolados calculados no capítulo 2.

Finalmente, encerraremos o texto com as conclusões e perspectivas futuras.

Capítulo 1

Emaranhamento

Neste capítulo, apresentaremos o conceito de emaranhamento quântico. Começaremos apresentando o fenômeno e suas “estranhezas” com relação à física clássica. Posteriormente, daremos uma definição mais formal e matemática para o emaranhamento e apresentaremos alguns critérios para classificar se um sistema está ou não emaranhado. Uma vez detectado o emaranhamento, apresentaremos algumas técnicas para quantificar o emaranhamento, dentre as quais a medida que usaremos neste trabalho, a distância entre estados.

1.1 Correlações quânticas

O emaranhamento é uma característica fundamental da mecânica quântica que chamou a atenção da comunidade científica pela primeira vez em 1935 quando Einstein, Podolsky e Rose publicaram o artigo “*Can Quantum-Mechanics Description of Physical Reality Be Considered Complete?*” (EPR) [1], onde encontram uma característica “assustadora” da mecânica quântica. Eles viram a existência de estados globais de um sistema composto que não podem ser escritos como o produto dos estados de subsistemas individuais. Nesse artigo, os autores questionam a interpretação de Copenhague da mecânica quântica. Tal interpretação fora criada e defendida por Niels Bohr. Esse foi o auge das famosas discussões entre Einstein e Bohr, iniciadas nas conferências de Solvay [24].

Uma das ideias centrais do artigo EPR é a definição dos autores sobre o que eles consideram como requisitos necessários para uma “teoria completa”, dada por: “*Todos*

os elementos da realidade física devem ter uma papel na teoria física". A outra é o que os autores consideram como "elemento de realidade", dada por: *"Se pudermos prever com certeza o valor de uma quantidade física sem perturbar o sistema, então existe um elemento de realidade correspondente a essa quantidade física."*

Para uma quantidade fisicamente observável, existe um operador \mathbb{A} que ao atuar sobre uma autofunção Ψ_a resulta em um autovalor a que pode ser medido ($\mathbb{A}\Psi_a = a\Psi_a$). Isso significa que o observável \mathbb{A} tem certamente o valor a quando o sistema está no estado Ψ_a , implicando, segundo EPR, na existência de um elemento de realidade correspondente à medida \mathbb{A} .

Sejam a e b os autovalores de duas quantidades físicas, digamos \mathbb{A} e \mathbb{B} , respectivamente. Se essas quantidades não comutam, ou seja, $\mathbb{A}\mathbb{B} \neq \mathbb{B}\mathbb{A}$, isto significa que o conhecimento preciso de um deles depende do conhecimento do outro (Princípio da incerteza). Além disso, qualquer tentativa de determinar experimentalmente o último, implicará em alterar o estado do sistema de maneira a destruir o conhecimento do primeiro. Assim, da definição de elemento de realidade do EPR, conclui-se que se a é conhecido, b não apresenta realidade física. Dessa forma, podemos chegar a duas hipóteses: (1) *a descrição da mecânica quântica da realidade dada pela função de onda não é completa* ou (2) *quando dois operadores não comutam, as duas quantidades físicas relacionadas a eles não apresentam realidade física simultaneamente*. Eles alegam que se ambos tivessem realidade simultânea, e conseqüentemente valores bem definidos, esses valores entrariam na descrição completa, de acordo com a condição de completude. Se a função de onda fornecesse uma descrição tão completa da realidade, ela conteria esses valores; sendo esses, então, previsíveis. Não sendo este o caso, eles ficam com uma das hipótese acima.

Agora, consideremos que conheçamos, em $t = 0$, o estado de dois sistemas, A e B, que interagiram entre si por um tempo finito t_1 . O estado do sistema combinado, em um tempo $t > t_1$ é dado por

$$\Psi_{AB}(x_A, x_B) = \sum_{m=1}^{\infty} \psi_m(x_B)u_m(x_A) , \quad (1.1)$$

onde x_A e x_B são variáveis que descrevem os respectivos sistemas. $u_m(x_A)$ são autofunções de um operador \mathbb{A} relacionado ao sistema A com autovalores a_1, a_2, \dots . $\psi_m(x_B)$ são os coeficientes da expansão Ψ_{AB} na base ortogonal $u_m(x_A)$. Quando efetuamos um medida \mathbb{A} no sistema A, obtemos o autovalor a_r , e o estado do sistema colapsa para $\psi_r(x_B)u_r(x_A)$ e

dizemos que o sistema A encontra-se no estado $u_r(x_A)$ e o sistema B encontra-se no estado $\psi_r(x_B)$.

O conjunto de funções $u_m(x_A)$ é determinado pela escolha da quantidade física \mathbb{A} . Se ao invés disto, tivéssemos escolhido uma outra quantidade física, digamos \mathbb{B} , com autofunções $v_n(x_A)$ e autovalores b_1, b_2, \dots , então o sistema teria a seguinte expansão

$$\Psi_{AB}(x_A, x_B) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x_B) v_n(x_A), \quad (1.2)$$

com coeficientes $\phi_n(x_B)$. Ao aplicarmos o operador \mathbb{B} no sistema A, obtemos b_s e assim o estado do sistema colapsa para $\phi_s(x_B) v_s(x_A)$, de modo que o sistema A encontra-se no estado $v_s(x_A)$ e o sistema B no estado $\phi_s(x_B)$.

Nesse experimento mental (Gedankenexperiment) proposto no EPR, conclui-se que duas medidas diferentes no sistema A deixam o sistema B em dois estados distintos (diferentes funções de onda). Como para $t > t_1$ os sistemas já não interagem mais, algo que seja feito no sistema A não deveria provocar nenhuma alteração no sistema B. Então, conclui-se que os dois estados ψ_r e ϕ_s correspondem ao mesmo elemento de realidade, ou seja, os estados correspondem ao sistema B após a interação com A.

Os autores mostram que medindo \mathbb{A} ou \mathbb{B} , associados ao momento e posição de uma partícula (logo não comutam), eles são capazes de prever com toda a certeza e sem perturbar uma segunda partícula, o valor do momento ou da posição da segunda partícula. Dessa forma, autofunções de operadores que não comutam pertencem ao mesmo elemento de realidade.

Os autores consideraram como falsa a hipótese (1) e chegaram a conclusão que as autofunções de operadores que não comutam correspondem à mesma realidade. Assim, chega-se a uma contradição, pois a negação de (1) leva a negação de (2), fazendo os autores concluírem que a função de onda não fornece uma descrição completa. Por fim, eles finalizam o trabalho justificando que a realidade do momento e posição do segundo sistema depende do processo de medição realizado no primeiro sistema, o que não perturba o segundo sistema de forma alguma, e concluem que nenhuma definição razoável de realidade poderia permitir isso.

Motivado pelo trabalho de Einstein, no mesmo ano, Schrödinger publica o seu famoso trabalho onde ele analisou as consequências físicas da mecânica quântica, e percebeu que o EPR para duas partículas não permite que os estados individuais de cada partícula

sejam atribuídos ao subsistema, resultando no emaranhamento de previsões para os subsistemas [25]. Schrödinger conclui que há uma disposição (até que o outro seja resolvido pela observação real) de apenas uma criação comum dos dois estados naquele espaço de maior dimensão. Esta é a razão pela qual o conhecimento dos sistemas individuais pode diminuir ou desaparecer, enquanto que o sistema combinado permanece continuamente máximo. Isso quer dizer que o melhor conhecimento possível de um todo não inclui o melhor conhecimento possível de suas partes.

Como exemplo, considere um sistema com duas partículas de spin- $\frac{1}{2}$, ou de massa nula, que são descritas, por simplicidade, apenas por seus spins (ou helicidades). Temos então quatro estados diferentes: $|++\rangle$, $|+-\rangle$, $|-\rangle$ e $|--\rangle$. O estado mais geral desse sistema será uma combinação qualquer dos estados $|\Psi\rangle = a|++\rangle + b|+-\rangle + c|-\rangle + d|--\rangle$. Observe que, para um estado com a forma $|\Psi\rangle_s = a|++\rangle + b|+-\rangle$, somos capazes de fatorá-lo, isto é, escreve-lo como

$$|\Psi\rangle_s = |+\rangle \otimes (a|+\rangle + b|-\rangle) . \quad (1.3)$$

Isto significa que o primeiro elétron tem spin *up*, enquanto o segundo está em um estado de superposição de spin, com spin *up* e *down*.

Agora, considere o estado $|\Psi\rangle_e = a|+-\rangle + b|-\rangle$. Este estado não pode ser fatorado como fizemos com o estado anterior. Isto significa que nenhuma das partículas tem um estado de spin bem definido. Nessa situação, o máximo que podemos dizer é que o sistema está em uma configuração na qual existe uma probabilidade $|a|^2$ de que a primeira partícula tenha spin *up* e a segunda spin *down*, e probabilidade de $|b|^2$ do primeiro elétron ter spin *down* e o segundo de ter spin *up*.

Este é um caso típico de partículas correlacionadas, pois o estado de uma delas depende do estado da outra. O sistema como um todo possui um estado bem definido, mas as partículas individuais não possuem. É esse tipo de estado que foi abordado no artigo do EPR e que leva os autores a considerarem a mecânica quântica como uma teoria não completa. A esta propriedade chamamos de *emaranhamento quântico* e estados com essa propriedade, tal como $|\psi\rangle_e$, são chamados de *estados emaranhados*.

Atualmente sabemos que o emaranhamento é a manifestação mais radicalmente não clássica do formalismo da mecânica quântica e que foi usado no EPR para atribuir valores a quantidades físicas antes da medição. Em 1964, Bell aceitou a conclusão do artigo EPR

(de que a descrição quântica da realidade física não está completa) como uma hipótese de trabalho e formalizou a ideia de EPR do mundo determinista em termos do modelo de variáveis ocultas locais. Assumiu que (i) os resultados das medidas são determinados pelas propriedades que as partículas carregam antes e independente da medida (realismo); (ii) os resultados obtidos em um local são independentes de quaisquer ações realizadas em uma separação espacial (localidade); e (iii) a configuração do aparelho local é independente das variáveis ocultas que determinam os resultados locais (livre arbítrio). Bell provou que essas suposições impõem restrições na forma de desigualdades, as chamadas “*Desigualdades de Bell*”. Ele mostrou que as probabilidades para os resultados obtidos quando algum estado quântico emaranhado tem propriedades adequadamente medidas violam a desigualdade de Bell. Desta forma, o emaranhamento é a característica do formalismo quântico que torna impossível simular correlações quânticas em qualquer formalismo clássico [3].

Agora vamos analisar um pouco do experimento de Bell e ver o efeito que uma medição do spin de uma das partículas tem sobre o sistema. Considere que em algum instante essas partículas interagiram formando um estado singlete, isto é, um estado com spin total nulo. Posteriormente, as partículas foram levadas para laboratórios distintos: a partícula A está no laboratório L_A e a partícula B está no laboratório L_B . Considere novamente o estado $|\Psi\rangle_e = a|+-\rangle + b|-+\rangle$. Uma medida na componente z do spin da partícula B, realizado em L_B , tem probabilidade $|a|^2$ de obter o resultado *down* e $|b|^2$ de obter o resultado *up*. Ao invés disso, realiza-se uma medida (componente z) no spin de A, realizada no laboratório L_A , e obtemos o resultado *up*. Então, automaticamente, o spin da partícula B, localizada no laboratório L_B , passa a ser spin *down*. Note que a experiência de medir o spin da partícula B, que era um processo aleatório em L_B , passa a ser um processo determinístico depois da medição de A.

Nota-se que medidas sobre a partícula A, realizadas no laboratório L_A , influenciam instantaneamente os resultados de medidas sobre a partícula B, realizadas no laboratório B. A função de onda colapsa instantaneamente. Essa ação à distância é completamente inútil como mecanismo de transmissão de informação. Essa ação é revelada somente através da comparação entre os experimentos feitos independentemente, não violando assim a causalidade. A proposta de Bell possibilitou levar o emaranhamento aos testes experimentais e um dos primeiros testes que verificaram o emaranhamento foi realizado em 1982 por

Aspect e colaboradores [4]. Eles utilizaram as ideias do EPR para medir a correlação da polarização linear de pares de fótons emitidos por uma fonte radiativa. Os resultados violaram a desigualdade de Bell e tiveram grande concordância com a mecânica quântica. Outros experimentos podem ser encontrados na referências [26–30].

Mesmo tendo passado mais de 80 anos dos primeiros debates entre Bohr e Einstein, o tema não é considerado totalmente compreendido e é motivo de muitas discussões na comunidade científica. Isso fez com que o emaranhamento tenha se tornado um dos temas mais interessantes da mecânica quântica.

1.2 Emaranhamento de estados puros

Vamos começar definindo matematicamente o emaranhamento quântico para um sistema quântico bipartite, isto é, formado por duas partes. Sejam A e B dois subsistemas com \mathbb{H}_A e \mathbb{H}_B sendo espaços de Hilbert associados a cada subsistema.

O subsistema A é descrito por $|a\rangle$ cujo espaço dos estados é o espaço de Hilbert \mathbb{H}_A , e o subsistema B é descrito por $|b\rangle \in \mathbb{H}_B$. Se o espaço de Hilbert de A é de dimensão d_A e o sistema B está em um espaço de Hilbert \mathbb{H}_B de dimensão d_B , o sistema composto por ambas as partes, denotado por $|a\rangle \otimes |b\rangle = |a\rangle|b\rangle = |ab\rangle$, é descrito por um produto tensorial dos dois subespaços $\mathbb{H} = \mathbb{H}_A \otimes \mathbb{H}_B$, cuja dimensão é $d_A \times d_B$. Podemos agora definir o emaranhamento de estados puros.

Definição 1: *Um estado puro $|\psi\rangle \in \mathbb{H}$ é dito ser um estado separável se puder ser escrito (decomposto) na forma*

$$|\psi\rangle = |\psi^A\rangle \otimes |\psi^B\rangle, \quad (1.4)$$

onde $|\psi^A\rangle \in \mathbb{H}_A$ e $|\psi^B\rangle \in \mathbb{H}_B$. Caso contrário (se a decomposição não for possível), $|\psi\rangle$ é dito ser um estado emaranhado.

Um estado $|\psi^A\rangle$ produzido em A e outro produzido independentemente em B, $|\psi^B\rangle$, são estados separáveis. Se uma medida do observável A é feita no subsistema A e outra medida do observável B é feita no subsistema B, a probabilidade de ambos os resultados são independentes. Qualquer intervenção feita em um dos subsistemas é dita ser uma operação local. Uma comunicação por “meios clássicos” (telefone, jornal, e-mail...) entre o subsistemas, A e B, para combinar operações locais sem envolver “meios quânticos” (sem

interação direta das partes e sem interação de ambos com outros sistemas quânticos) é denominada operação local com comunicação clássica (com sigla em inglês LOCC), podendo gerar correlações que são descritas classicamente mas não gerando emaranhamento [31].

Para um estado $|\psi\rangle$ formado por N subsistemas, temos a seguinte definição para o emaranhamento:

Definição 2: *O estado puro $|\psi\rangle \in \mathbb{H} = \otimes_{i=1}^N \mathbb{H}_i$ é dito ser k -separável se puder ser escrito na forma*

$$|\psi\rangle = \otimes_{i=1}^k |\psi_i\rangle \text{ com } |\psi_i\rangle \in \mathbb{H}_i. \quad (1.5)$$

Se $k = N$ o estado é completamente separável.

1.3 Emaranhamento de estados mistos

Quando não conhecemos o estado exato de um sistema quântico e o máximo que conhecemos é a probabilidade p_i de alguns estados $|\psi_i\rangle \in \mathbb{H}$, o sistema é então descrito pelo operador densidade

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (1.6)$$

com $0 < p_i < 1$ e $\sum_i p_i = 1$. O operador densidade é positivo semidefinido ($\rho \geq 0$), é Hermitiano ($\rho^\dagger = \rho$) e possui traço unitário ($Tr(\rho) = 1$). Se o estado é puro, o operador densidade é idempotente ($\rho = \rho^2$) enquanto para estados mistos o operador densidade não é idempotente ($\rho \neq \rho^2$).

Considere que ρ^A seja o operador densidade que atua em \mathbb{H}_A e ρ^B o operador densidade que atua em \mathbb{H}_B .

Definição 3: *O estado é dito separável se existe p_i e $\rho_i^A \otimes \rho_i^B$ de forma que o operador densidade do sistema composto puder ser escrito na forma*

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^A \otimes \rho_i^B. \quad (1.7)$$

Caso contrário, o estado é dito emaranhado.

Em analogia ao sistema bipartite, segue a definição de emaranhamento de estados mistos. Considere um estado misto formado por N sistemas $A_1 \cdots A_N$ com espaço de Hilbert $\mathbb{H}_{A_1 \cdots A_N} = \otimes_{i=1}^N \mathbb{H}_{A_i}$.

Definição 4: O estado misto ρ é dito ser k -separável se puder ser escrito na forma

$$\rho = \sum_i p_i \left(\otimes_{j=1}^k \rho_i^{A_j} \right) \quad (1.8)$$

Se $k = N$ o estado é completamente separável.

Dadas as definições de emaranhamento, resta agora saber determinar quais estados são ou não emaranhados, o que de certa forma se resume a saber se a matriz densidade que descreve o sistema pode ou não ser escrita na forma (1.8). As definições de emaranhamento dadas acima são muito úteis em vários aspectos, mas são muito pouco aplicáveis em modos gerais. O problema consiste em sabermos se um dado estado será ou não emaranhado. Este não é um problema fácil, devido a não existir um critério geral para a separabilidade. Na seção seguinte, apresentaremos alguns critérios úteis para determinar se um estado está ou não emaranhado.

1.4 Critérios de separabilidade

Apresentaremos alguns critérios mais importantes para o emaranhamento bipartite e que serão utilizados ao longo deste trabalho.

1.4.1 Critério de Peres

O critério de Peres [32] baseia-se na aplicação de mapas positivos¹ (via transposição parcial) que não são completamente positivos. Podemos expandir qualquer matriz densidade de um sistema quântico composto em um produto de bases [33], tal como

$$\rho = \sum_{i,j} \sum_{k,l} p_{ij,kl} |i\rangle\langle j| \otimes |k\rangle\langle l| . \quad (1.9)$$

Dada essa decomposição, a transposição parcial de ρ com respeito a um subsistema consiste em tomar a transposta apenas de um dos subsistemas do produto tensorial, isto é, $\mathbb{H}^{T_A} = \mathbb{H}_A^T \otimes \mathbb{H}_B$ ou $\mathbb{H}^{T_B} = \mathbb{H}_A \otimes \mathbb{H}_B^T$. A transposta parcial com respeito ao subsistema B é dada por

$$\rho^{T_B} = \sum_{i,j} \sum_{k,l} p_{ij,kl} |i\rangle\langle j| \otimes |l\rangle\langle k| . \quad (1.10)$$

¹Um mapa Λ é dito positivo quando leva operadores positivos A em operadores positivos: $\Lambda(A) \geq 0, \forall A \geq 0$.

Podemos agora apresentar o primeiro critério.

Critério 1: *Se algum autovalor da transposta parcial de ρ for negativo, ρ é emaranhado.*

O critério de Peres (ou critério PPT)² afirma que se ρ^T for negativo, isto é, tiver pelo menos um autovalor negativo, o sistema é emaranhado. Dado este critério, resta saber se ele é uma condição suficiente para a separabilidade, isto é, será que $\rho^T \geq 0$ implica em separabilidade? A resposta para essa pergunta será dada pelo próximo critério.

1.4.2 Critério de Peres-Horodecki

Para sistemas de dimensão $2 \otimes 2$ e $2 \otimes 3$ o critério de Peres deixa de ser uma condição apenas necessária e torna-se uma condição necessária e suficiente para a separabilidade [34].

Critério 2: *Se ρ é um estado de dimensão $2 \otimes 2$ e $2 \otimes 3$ e os autovalores da sua transposta parcial são positivos, ρ é separável.*

Para estados com dimensões maiores, $2 \otimes 4$ ou $3 \otimes 3$, existem exemplos de estados emaranhados cuja transposta parcial é positiva [35].

1.4.3 Testemunha de emaranhamento

Outra forma de detectar o emaranhamento é denominada testemunha de emaranhamento (com sigla em inglês *EW*) [34, 36, 37]. Podemos definir a testemunha de emaranhamento da seguinte forma.

Critério 3: *Um observável W é chamado uma testemunha de emaranhamento, se*

$$\begin{aligned} \text{Tr}(W\rho_s) &\geq 0 \text{ para todo } \rho_s \text{ separável} \\ \text{Tr}(W\rho_e) &< 0 \text{ para alguns } \rho_e \text{ emaranhados.} \end{aligned} \quad (1.11)$$

Isto significa que se $\text{Tr}(W\rho) < 0$ não sabemos se o estado ρ é emaranhado ou separável.

O fato das testemunhas de emaranhamento serem quantidades mensuráveis as tornam ferramentas muito úteis na análise experimental do emaranhamento, sendo o principal método experimental para detectar emaranhamento. O valor esperado de um observável depende do estado. Assim, o conjunto de todos os estados onde $\text{Tr}(W\rho) = 0$ é um hiperplano no conjunto de todos os estados, separando este conjunto em duas partes. Na

²PPT é a sigla para a denominação em inglês para *Positive Partial Transpose Criterion*

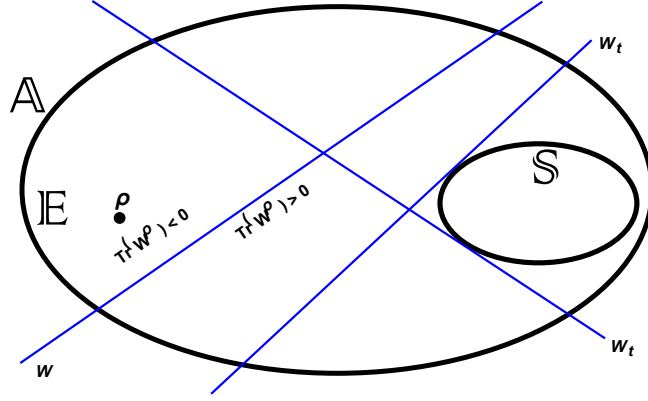


Figura 1.1: Ilustração esquemática para a testemunha de emaranhamento, onde W_t são as testemunhas que tangenciam o conjunto da matrizes densidades separáveis.

parte com $Tr(W\rho) > 0$ está o conjunto de todos os estados separáveis e a outra parte com $Tr(W\rho) < 0$ é o conjunto dos estados detectados por W . A Figura 1.1 ilustra o significado geométrico da testemunha de emaranhamento, onde \mathbb{A} é o conjunto de todas as matrizes densidade, \mathbb{S} é o conjunto das matrizes densidades separáveis e $\mathbb{E} = \mathbb{A} - \mathbb{S}$ é o conjunto das matrizes densidades emaranhadas. Desta interpretação geométrica segue que todos os estados emaranhados podem ser detectados por testemunhas de emaranhamento, sendo que para cada estado emaranhado ρ_e existe uma testemunha de emaranhamento que o detecta [34].

1.4.4 Critérios de entropia

Vale-se da observação clássica de que, em um sistema de duas partes, a desordem do sistema global é maior que a desordem de cada parte. Da estatística, sabemos que uma das formas de quantificar a desordem de um sistema é utilizando entropia. Assim, a entropia do sistema global não pode ser menor que a entropia de uma das partes. Escolhida uma entropia $S(\rho)$, a entropia condicional é dada por $S(A|B) = S(A, B) - S(B)$, sendo $S(A, B)$ a entropia global, e $S(A|B)$ a entropia de A uma vez que tenha ocorrido B. Devido a convexidade de S , $S(A|B)$ será não-negativa para um estado separável. Assim, podemos introduzir mais um critério [38].

Critério 4: Se $S(A|B) < 0$, então ρ_{AB} é emaranhado.

Para estados separáveis, o fato do estado global ρ_{AB} ser necessariamente mais mistu-

rado que os estados locais ρ_A e ρ_B , conduz a mais um critério.

1.4.5 Critério da majoração

Critério 5: *Se ρ_A (ou ρ_B) for mais misturado que ρ_{AB} , então ρ_{AB} é um estado emaranhado.*

O nome é devido aos autores chamarem a relação de “ser mais misturado que” de “majoração”. Para outros critérios baseados em entropias, ver refs. [39–41].

Uma vez que temos alguns critérios que nos permitem determinar se um dado estado é separável ou emaranhado, resta-nos dizer o quanto um determinado estado está emaranhado, ou quando e sob quais condições determinado estado será emaranhado, sendo essa uma tarefa nada simples. Na próxima seção, apresentaremos algumas técnicas para quantificar o estado emaranhado.

1.5 Quantificadores de emaranhamento

Nos últimos anos, diversas propostas foram feitas nesse sentido, com quantificadores baseados em desordem, em aspectos geométricos etc [15, 42, 43]. Nesta seção, apresentaremos alguns quantificadores de emaranhamento mais frequentemente utilizados.

Listaremos a seguir alguns critérios mais aceitos para uma medida de emaranhamento $\mathcal{E}(\rho)$. Esse é um assunto ainda não fechado na física, existindo assim muitas propostas de quantificadores de emaranhamento que não satisfazem os critérios a seguir, o que não significa que não possam ser utilizados.

Listaremos aqui a proposta apresentada por Vedral *et al.* [19], para que uma função seja uma boa medida de emaranhamento:

- *Se ρ é separável, então $\mathcal{E}(\rho) = 0$.*

Estados separáveis não possuem emaranhamento.

- *Operações locais unitárias deixam \mathcal{E} invariante, isto é, $\mathcal{E}(\rho) = \mathcal{E}(U_A \otimes U_B \rho U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger)$.*

Transformações unitárias produzem apenas uma mudança nas bases do sistema de caráter local, o que não altera as correlações.

- Como o emaranhamento não pode ser criado por LOCC, devemos ter que o emaranhamento do sistema não pode aumentar devido a operações locais com comunicação clássica, isto é, $\mathcal{E}(\Lambda_{LOCC}(\rho)) \leq \mathcal{E}(\rho)$.

Qualquer aumento nas correlações do sistema por meio de LOCC deve ser de natureza clássica, portanto não aumenta o emaranhamento do sistema.

Na sequência apresentaremos alguns quantificadores de emaranhamento mais utilizados na literatura. Por último, apresentaremos a distância entre estados como medida de emaranhamento.

1.5.1 Emaranhamento de formação e concorrência

O emaranhamento de formação vem do fato de que o emaranhamento de estados mistos pode ser visto como uma mistura de estados puros. Tendo que estado ρ_{AB} pode ser escrito como uma decomposição em combinações convexas de estados puros, isto é

$$\rho_{AB} = \sum_k p_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|. \quad (1.12)$$

A ideia é quantificar a desordem usando a entropia. O problema é que uma mistura tem muitas decomposições diferentes e cada uma com uma média de entropia diferente. Calcula-se a entropia de cada estado puro, $S(\psi_k)$, e posteriormente toma-se uma combinação convexa destes resultados. Então, para não termos ambiguidades, escolheremos a entropia de mistura que possuir a menor média de entropia. Isto é a chamada entropia de formação [31, 44, 45], dada por

$$E_F(\rho_{AB}) = \min \sum_k p_k S(\psi_k). \quad (1.13)$$

Escolher uma entropia de mistura que forneça a menor média de entropia, isto é, uma minimização sobre todas as possíveis decomposições (preparações) do estado ρ_{AB} , faz com que o emaranhamento de formação seja difícil de se aplicar, ou seja, torna-se não operacional. Para sistemas de dimensão $2 \otimes 2$ é possível obter uma expressão analítica para o emaranhamento de formação [46], dada por

$$E_F(C) = H\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1-C}\right), \quad (1.14)$$

para $0 \leq C \leq 1$ e a função H é dada por

$$H(C) = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x) , \quad (1.15)$$

com

$$x = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1-C} , \quad (1.16)$$

sendo C chamado de *concorrência* (do inglês, *concurrence*), que também é considerada uma medida de emaranhamento, sendo uma função monótona do emaranhamento, podendo variar de 0, não emaranhado, até 1, maximamente emaranhado. A concorrência é definida como

$$C = \max \left[0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4} \right] , \quad (1.17)$$

sendo os λ_i^s autovalores, em ordem decrescente, do operador

$$R = \rho (\sigma^y \otimes \sigma^y) \rho^* (\sigma^y \otimes \sigma^y) \quad (1.18)$$

com σ^y sendo a matriz de Pauli

$$\sigma^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} . \quad (1.19)$$

1.5.2 Negatividade

Uma simples e calculável medida de emaranhamento é a negatividade [47], que é relacionada ao critério de Peres-Horodecki; mais especificamente, é dada como uma violação do critério PPT. Tal medida é dada por

$$\mathcal{N}(\rho) = \sum_{i, \lambda < 0} \lambda_i \quad (1.20)$$

onde λ_i são os autovalores da transposta parcial de ρ . Uma outra versão da negatividade, chamada negatividade logarítmica, proposta para tornar esta quantidade aditiva é

$$E_{\mathcal{N}}(\rho) = \log_2 \|\rho^{TB}\| , \quad (1.21)$$

onde $\|\dots\|$ denota a norma traço, isto é, $\|A\| = \text{Tr} \left[\sqrt{A^\dagger A} \right]$, que é igual a soma dos valores absolutos dos autovalores do operador A , quando A é Hermitiano [48]. Para matrizes

densidade, todos os autovalores são positivos e assim $\|\rho\| = \text{Tr}[\rho] = 1$. A transposta parcial ρ^{TA} também satisfaz $\text{Tr}[\rho^{TA}] = 1$, mas como pode ter autovalores negativos $\lambda_i < 0$, esta norma traço em geral é $\|\rho^{TA}\| = 1 + 2|\sum \lambda_i| = 1 + 2\mathcal{N}(\rho)$. Logo, podemos escrever a negatividade como

$$\mathcal{N}(\rho) = \frac{\|\rho^{TA}\| - 1}{2}, \quad (1.22)$$

que se anula para estados separáveis.

1.5.3 A distância entre estados como quantificador de emaranhamento

Nesta seção, vamos apresentar alguns conceitos de medida de emaranhamento baseados em distância entre estados. Como mencionamos, a quantidade física proposta para medir o emaranhamento térmico é a distância entre estados introduzida em [19, 20]. Para isso, considere \mathbb{A} sendo o conjunto de todas as matrizes densidades, que consiste de dois subconjuntos disjuntos: o subconjunto dos estados separáveis (não emaranhado), \mathbb{S} , e o subconjunto dos estados emaranhados, $\mathbb{E} = \mathbb{A} - \mathbb{S}$. A proposta de medida de emaranhamento (\mathcal{E}) é uma quantidade física que “mede” a distância entre o estado emaranhado em análise e um estado separável do subconjunto \mathbb{S} . Considere que ρ_e seja o estado emaranhado e ρ_s seja um estado separável. A ideia fundamental é a de que ρ_s não seja qualquer estado separável, e sim o estado separável mais próximo de ρ_e , que conseqüentemente está na borda de \mathbb{S} , conforme a Figura 1.2. Assim, nossa medida de emaranhamento é realizada medindo a menor distância entre o estado emaranhado $\rho_e \in \mathbb{E}$ e o estado separável $\rho_s \in \mathbb{S}$, sendo dada por

$$\mathcal{E}(\rho_e) = \mathcal{E}_0 \min_{\rho_s \in \mathbb{S}} \mathcal{D}(\rho_e || \rho_s), \quad (1.23)$$

onde $\mathcal{D}(\rho_e || \rho_s)$ é uma medida de distância entre ρ_e e ρ_s . O parâmetro \mathcal{E}_0 é a constante de normalização para assegurar que a condição $0 \leq \mathcal{E} \leq 1$ seja satisfeita. A equação (1.23) mede apenas as correlações quânticas remanescentes. As correlações clássicas são dadas por

$$\mathcal{E}(\rho_e) = \mathcal{D}(\rho_s || \rho_s^*), \quad (1.24)$$

onde ρ_s é o estado separável que minimiza a distância \mathcal{D} até o estado emaranhado ρ_e e $\rho_s^* = \rho_A^* \otimes \rho_B^*$, sendo ρ_A^* e ρ_B^* as matrizes densidades reduzidas do estado ρ_s [19].

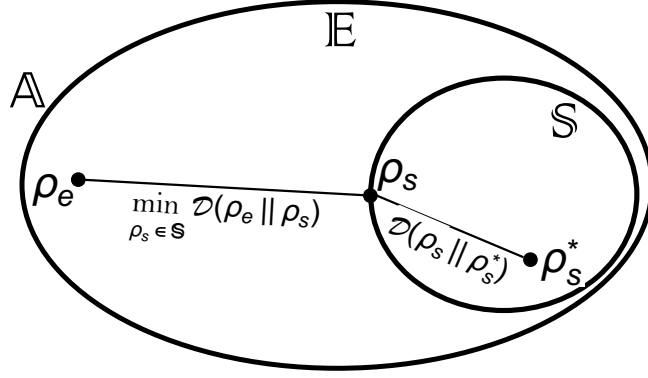


Figura 1.2: Representação esquemática da distância mínima entre os estados ρ_e e ρ_s .

Um ponto chave é garantir que exista apenas uma única menor distância entre ρ_e e ρ_s . Para isso, devemos observar a convexidade do conjunto das matrizes densidade. Considere um conjunto C em um espaço vetorial \mathbb{V} . Dizemos que C é convexo, se para qualquer dois pontos $u, v \in C$ e $\lambda \in [0, 1]$, a combinação $\lambda u + (1 - \lambda)v$ (combinação convexa) pertence a C [49]. Isto significa que a reta que liga dois pontos quaisquer desse conjunto também pertence a esse conjunto.

Sejam ρ_A e ρ_B duas matrizes densidades. Considere a combinação convexa da forma

$$\rho = \lambda\rho_A + (1 - \lambda)\rho_B \quad (1.25)$$

com $\lambda \in [0, 1]$. Como ρ é positivo semidefinido, Hermitiano e possui traço unitário, o conjunto das matrizes densidade é um conjunto convexo [50]. Pode-se mostrar que todos os conjuntos convexos fechados não vazios são um conjunto de Chebyshev e, portanto, todo ponto do espaço vetorial \mathbb{V} contém uma única menor distância ao conjunto \mathbb{S} [51]. Isso significa que ao medir a distância (1.23) entre o estado emaranhado ρ_e e o estado separável $\rho_s \in \mathbb{S}$, estaremos fazendo isso de forma única.

Usaremos a distância entre estados quânticos para quantificar o grau de emaranhamento de um estado ρ_e e precisamos definir qual a quantidade $\mathcal{D}(\rho_e || \rho_s)$ que utilizaremos para isso. Como medida de distância entre estados usaremos a norma de Hilbert-Schmidt [21, 22]. A norma de Hilbert-Schmidt vem do produto interno definido no espaço vetorial das matrizes Hermitianas dado

$$\langle A, B \rangle = \text{Tr}(AB) \quad , \quad (1.26)$$

que gera a norma

$$|A| = \sqrt{\langle A, A \rangle} = \sqrt{\text{Tr}(A^2)}, \quad (1.27)$$

que fornece a métrica Euclidiana no espaço vetorial real das matrizes Hermitianas, a métrica de Hilbert-Schmidt. Logo, a distância entre duas matrizes pela norma de Hilbert-Schmidt (ou norma de Frobenius) é dada por

$$|A - B| = \sqrt{\text{Tr}[(A - B)^2]}. \quad (1.28)$$

A medida de emaranhamento (1.23) pode ser reescrita como

$$\mathcal{E}(\rho_e) = \mathcal{E}_0 \min_{\rho_s \in \mathcal{S}} \sqrt{\text{Tr}[(\rho_e - \rho_s)^2]}, \quad (1.29)$$

A norma de Hilbert-Schmidt é preservada sob o mapa de transposição parcial. Então, a medida proposta pode ser definida no espaço de matrizes densidade de transposta parcial como a distância mínima de ρ_e à superfície de matrizes positivas semidefinidas com traço 1, sendo está superfície o contorno dos estados PPT [52].

Capítulo 2

Dímero de spin-1/2

Nesta tese, estudaremos o emaranhamento térmico no modelo de Heisenberg unidimensional com um campo magnético externo uniforme e não uniforme. Estes sistemas vêm sendo estudados por vários autores desde os anos 90, e muitos avanços têm sido feitos na área. Particularmente, analisaremos os modelos XXX , XX e XXZ .

Neste capítulo, mostraremos uma forma de se calcular analiticamente o emaranhamento térmico na presença de campo magnético externo, na direção z , via distância entre estados. Algumas análises com campo magnético em outras direções são feitas para efeito de comparação. Primeiramente, obteremos as condições de emaranhamento do sistema e apresentaremos uma maneira de se calcular a temperatura crítica de emaranhamento apenas pela análise de autovalores do sistema. Uma vez encontradas as condições de emaranhamento e separabilidade, usaremos essas condições para construir a distância entre estados via norma de Hilbert-Schmidt. Para os modelos XXX , mostramos que não existe emaranhamento quando a interação é ferromagnética e que neste caso o campo magnético não induz emaranhamento no sistema. Para interações antiferromagnéticas, temos uma temperatura crítica que não depende do campo magnético quando este for uniforme. Na sequência, analisamos os efeitos da anisotropia e encontramos as condições para a existência de emaranhamento no modelo XXZ , e mostramos que, no modelo XX , temos emaranhamento tanto no caso ferromagnético quanto antiferromagnético.

Por fim, analisamos os efeitos de um campo magnético inhomogêneo. Encontramos que a temperatura crítica dos modelos XXX e XX depende apenas da diferença dos campos em cada spin, sendo que, para o modelo XX , obtivemos um resultado analítico.

Os resultados apresentados neste capítulo geraram o artigo “*Magnetic shielding of quantum entanglement states*” publicado na revista Quantum Studies: Mathematics and Foundations (DOI /10.1007/s40509-018-0172-z) [53].

2.1 Modelo XXX na presença de campo magnético

$$\vec{B} = B_z \hat{z}$$

No modelo de Heisenberg, um dímero de spin-1/2 submetido a um campo magnético constante é descrito pelo seguinte Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_{XXX} + \mathcal{H}_{mag} \\ \mathcal{H}_{XXX} &= -J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \\ \mathcal{H}_{mag} &= -g\mu_B \sum_{i=1}^2 \vec{B} \cdot \vec{S}_i \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde J é a constante de troca, \vec{S}_i ($i=1,2$) são os operadores de spin, \vec{B} é o campo magnético externo aplicado ao sistema, μ_B é o magneton de Bohr e g é o fator giromagnético.

A fim de trabalhar no formalismo matricial, vamos escrever os operadores de spin em termos das matrizes de Pauli

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

tal que os operadores de spins (para $\hbar = 1$) em termos das matrizes de Pauli são $\vec{S}_1 = \frac{1}{2}\vec{\sigma}_1 = \frac{1}{2}(\sigma_1^x, \sigma_1^y, \sigma_1^z)$ e $\vec{S}_2 = \frac{1}{2}\vec{\sigma}_2 = \frac{1}{2}(\sigma_2^x, \sigma_2^y, \sigma_2^z)$, onde as matrizes $\vec{\sigma}$ são

$$\vec{\sigma}_1 = \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I}_2 = (\sigma_1^x, \sigma_1^y, \sigma_1^z) = (\sigma^x \otimes \mathbb{I}_2, \sigma^y \otimes \mathbb{I}_2, \sigma^z \otimes \mathbb{I}_2) \quad (2.3a)$$

$$\vec{\sigma}_2 = \mathbb{I}_2 \otimes \vec{\sigma} = (\sigma_2^x, \sigma_2^y, \sigma_2^z) = (\mathbb{I}_2 \otimes \sigma^x, \mathbb{I}_2 \otimes \sigma^y, \mathbb{I}_2 \otimes \sigma^z), \quad (2.3b)$$

onde $\mathbb{I}_2 = \mathbb{I}_{2 \times 2}$ é a matriz identidade 2×2 .

Considerando que o campo magnético aplicado é constante e na direção z , $\vec{B} = B_z \hat{z}$, o Hamiltoniano (2.1) é reescrito como

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{4} \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 - \frac{1}{2} g\mu_B B_z (\sigma_1^z + \sigma_2^z) = -\frac{J}{4} (\sigma_1^x \sigma_2^x + \sigma_1^y \sigma_2^y + \sigma_1^z \sigma_2^z) - \frac{1}{2} g\mu_B B_z (\sigma_1^z + \sigma_2^z). \quad (2.4)$$

Desta forma, temos¹

$$\begin{aligned}
\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 &= (\sigma^x \otimes \mathbb{I}_2)(\mathbb{I}_2 \otimes \sigma^x) + (\sigma^y \otimes \mathbb{I}_2)(\mathbb{I}_2 \otimes \sigma^y) + (\sigma^z \otimes \mathbb{I}_2)(\mathbb{I}_2 \otimes \sigma^z) \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{2.6}
\end{aligned}$$

e o termo de interação com o campo magnético é

$$\sigma_1^z + \sigma_2^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \tag{2.7}$$

Na forma matricial, o Hamiltoniano do sistema pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -\frac{J}{4} - B_z g \mu_B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{J}{4} & -\frac{J}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{J}{2} & \frac{J}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{J}{4} + B_z g \mu_B \end{pmatrix}. \tag{2.8}$$

O estado do sistema em equilíbrio térmico para temperatura finita é representado pelo operador densidade $\rho = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta \mathcal{H}}$, onde $\mathcal{Z} = Tr(e^{-\beta \mathcal{H}})$ é a função partição do sistema e $\beta = (\kappa_B T)^{-1}$. A matriz densidade de um dímero de Heisenberg de spin-1/2, sujeito a um

¹O produto tensorial de duas matrizes A e B de dimensão $(m \times n)$ e $(p \times q)$, respectivamente, é

$$A \otimes B = \begin{bmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & a_{m2}B & \cdots & a_{mn}B \end{bmatrix}, \tag{2.5}$$

onde $A \otimes B$ é uma matriz $(mp \times nq)$.

campo magnético uniforme na direção z é escrita como

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

onde

$$\rho_{11} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{\mathcal{J}}{4T} + \frac{\mathcal{B}}{T}} \quad (2.10a)$$

$$\rho_{22} = \rho_{33} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\mathcal{J}}{4T}} \cosh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right) \quad (2.10b)$$

$$\rho_{23} = \rho_{32} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\mathcal{J}}{4T}} \sinh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right) \quad (2.10c)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{\mathcal{J}}{4T} - \frac{\mathcal{B}}{T}} \quad (2.10d)$$

e a função partição, $\mathcal{Z} \equiv \mathcal{Z}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$, é dada por

$$\mathcal{Z} = e^{-\frac{4\mathcal{B}+3\mathcal{J}}{4T}} \left(e^{\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}}{T}} + e^{\frac{2\mathcal{B}+\mathcal{J}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} \right), \quad (2.11)$$

sendo $\mathcal{J} = J/\kappa_B$ e $\mathcal{B} = B_z g \mu_B / \kappa_B$, onde κ_B é a constante de Boltzmann.

2.1.1 Condição de emaranhamento e determinação da temperatura crítica

A distância entre estados é aplicada para medir a distância entre um estado emaranhado, ρ_e e um estado separável, ρ_s . Logo, necessitamos encontrar uma maneira que garanta a separabilidade do sistema. Para isso, usaremos o critério de Peres-Horodecki [32, 34] para determinar qual a condição de separabilidade do sistema. Vimos na seção 1.4 que a positividade da transposta parcial é uma condição necessária e suficiente para garantir a separabilidade. A transposta parcial consiste em tomar a transposta somente em um dos subespaços do sistemas e depois realizar o produto tensorial. Se $|m_1\rangle$ e $|n_1\rangle \in \mathbb{H}_1$ e $|m_2\rangle$ e $|n_2\rangle \in \mathbb{H}_2$ são bases ortonormais arbitrárias de dois subsistemas, **1** e **2**, temos que $|m_1\rangle \otimes |m_2\rangle = |m_1, m_2\rangle$ e $|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle = |n_1, n_2\rangle \in \mathbb{H}_1 \otimes \mathbb{H}_2$, a transposta usual atuaria da seguinte forma: $\langle m_1, m_2 | \rho | n_1, n_2 \rangle \xrightarrow{T} \langle n_1, n_2 | \rho | m_1, m_2 \rangle$. Já a transposta parcial em relação a um dos subsistemas, digamos o subsistema **2**, consiste em trocar apenas os

índices relativos ao sistema **2**, isto é, $\langle m_1, m_2 | \rho | n_1, n_2 \rangle \xrightarrow{T_p^{(2)}} \langle m_1, n_2 | \rho | n_1, m_2 \rangle$. A matriz densidade (2.9) na base padrão $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ é²:

$$\rho = \begin{pmatrix} \langle 00 | \rho | 00 \rangle & \langle 00 | \rho | 01 \rangle & \langle 00 | \rho | 10 \rangle & \langle 00 | \rho | 11 \rangle \\ \langle 01 | \rho | 00 \rangle & \langle 01 | \rho | 01 \rangle & \langle 01 | \rho | 10 \rangle & \langle 01 | \rho | 11 \rangle \\ \langle 10 | \rho | 00 \rangle & \langle 10 | \rho | 01 \rangle & \langle 10 | \rho | 10 \rangle & \langle 10 | \rho | 11 \rangle \\ \langle 11 | \rho | 00 \rangle & \langle 11 | \rho | 01 \rangle & \langle 11 | \rho | 10 \rangle & \langle 11 | \rho | 11 \rangle \end{pmatrix}. \quad (2.12)$$

A transposta parcial de ρ relativa ao subespaço **2**, denotada por $\rho^{T_p^{(2)}} \in \mathbb{H}_1 \otimes \mathbb{H}_2^T$, é dada por

$$\rho^{T_p^{(2)}} = \begin{pmatrix} \langle 00 | \rho | 00 \rangle & \langle 01 | \rho | 00 \rangle & \langle 00 | \rho | 10 \rangle & \langle 01 | \rho | 10 \rangle \\ \langle 00 | \rho | 01 \rangle & \langle 01 | \rho | 01 \rangle & \langle 00 | \rho | 11 \rangle & \langle 01 | \rho | 11 \rangle \\ \langle 10 | \rho | 00 \rangle & \langle 11 | \rho | 00 \rangle & \langle 10 | \rho | 10 \rangle & \langle 11 | \rho | 10 \rangle \\ \langle 10 | \rho | 01 \rangle & \langle 11 | \rho | 01 \rangle & \langle 10 | \rho | 11 \rangle & \langle 11 | \rho | 11 \rangle \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

que comparada com (2.9) e (2.12), resulta em

$$\rho^{T_p^{(2)}} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{23} \\ 0 & \rho_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{32} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

Claro que quando tomamos a transposta parcial de ρ com relação ao subsistema **1**, obtemos a transposta parcial $\rho^{T_p^{(1)}} \in \mathbb{H}_1^T \otimes \mathbb{H}_2$, que é uma matriz diferente de $\rho^{T_p^{(2)}}$, mas que resulta nos mesmos autovalores. Logo, deste ponto em diante, não nos referiremos mais com relação a qual subespaço a transposta parcial foi tomada e diremos apenas transposta parcial.

O critério de Peres-Horodecki nos diz que se um dos autovalores da transposta parcial for negativo, isto implica que o sistema é emaranhado. Calculando os autovalores da

²Devemos lembrar que a transposta parcial depende da base em que é realizada, mas o seu espectro independe da escolha da base

transposta parcial de ρ , isto é, os autovalores de ρ^{T_p} , obtemos

$$\lambda_1 = \rho_{22} \quad (2.15a)$$

$$\lambda_2 = \rho_{33} \quad (2.15b)$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{2} \left(\rho_{11} + \rho_{44} + \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{44})^2 + 4\rho_{23}\rho_{32}} \right) \quad (2.15c)$$

$$\lambda_4 = \frac{1}{2} \left(\rho_{11} + \rho_{44} - \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{44})^2 + 4\rho_{23}\rho_{32}} \right) \quad (2.15d)$$

Usando os elementos de matriz ρ_{ij} da equação (2.10) podemos verificar que os autovalores λ_1 , λ_2 e λ_3 são todos positivos para qualquer valor, positivo ou negativo, da constante de troca³ \mathcal{J} . Já o autovalor λ_4 merece uma atenção um pouco mais detalhada. O autovalor λ_4 é positivo ($\lambda_4 > 0$) para qualquer temperatura desde que $\mathcal{J} > 0$ (ferromagnético). Isso é suficiente para garantir que o sistema é separável (não emaranhado) se $\mathcal{J} > 0$, mostrando que não existe emaranhamento no dímero ferromagnético de spin-1/2 na presença de um campo magnético constante na direção z . Se $\mathcal{J} < 0$ (antiferromagnético), o autovalor λ_4 pode ser negativo ou positivo, dependendo apenas da temperatura T . λ_4 é positivo se a temperatura T for maior ou igual a uma temperatura crítica do sistema, denotada por T_c . Nessas condições o sistema é não emaranhado. Mas se $T < T_c$, o autovalor λ_4 é negativo ($\lambda_4 < 0$) e o sistema está emaranhado.

A temperatura crítica, T_c , citada acima é definida como a menor temperatura para qual o sistema não exibe emaranhamento. Para determina-la, basta igualar o autovalor λ_4 a zero e assim encontrar o valor de T em que λ_4 se anula. Assim, tomando $\lambda_4(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T_c) = 0$ obtemos $2e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} + 3e^{\frac{2\mathcal{J}}{T}} - 1 = 0$, cuja solução é

$$T_c = -\frac{\mathcal{J}}{\ln(3)}. \quad (2.16)$$

A equação (2.16) não depende do valor do campo magnético externo (na direção z). Para qualquer que seja o valor do campo magnético externo na direção z o sistema antiferromagnético ($\mathcal{J} < 0$) permanece emaranhado abaixo da T_c , independente do campo magnético externo aplicado, \mathcal{B} . Isto significa que o emaranhamento nesse sistema não pode ser destruído por exposição ao campo magnético, sendo magneticamente blindado. Uma das vantagens deste método de análise é que podemos determinar a temperatura

³Usaremos este abuso de linguagem para nos referir a \mathcal{J} como constante de troca, já que $\mathcal{J} = J/\kappa_B$. Pelo mesmo motivo, chamaremos \mathcal{B} de campo magnético, uma vez que $\mathcal{B} = B_z g \mu_B / \kappa_B$.

crítica de uma forma simples, direta, e antes mesmo de obtermos uma medida do emaranhamento. Na seção seguinte, calcularemos a medida de emaranhamento via distância entre estados e , a partir dessa, obteremos a mesma temperatura crítica da equação (2.16).

2.1.2 A medida de emaranhamento via distância entre estados

Nesta seção, a quantidade física proposta para quantificar o emaranhamento é a distância entre estados [19,20]. A distância é definida pela norma de Hilbert-Schmidt [22]. Agora que já vimos quais são as condições para o sistema estar emaranhado ou separável, podemos determinar o emaranhamento via distância entre estados. A medida de emaranhamento mostrada na equação (1.23) é reescrita aqui:

$$\mathcal{E}(\rho_e) = \mathcal{E}_0 \min_{\rho_s \in \mathbb{S}} \mathcal{D}(\rho_e || \rho_s) , \quad (2.17)$$

onde $\mathcal{D}(\rho_s || \rho_e)$ é a medida de distância entre o estado emaranhado $\rho_e \in \mathbb{E} = \mathbb{A} - \mathbb{S}$ e o estado separável $\rho_s \in \mathbb{S}$ e \mathcal{E}_0 é a constante de normalização que garante que $0 \leq \mathcal{E}(\rho_e) \leq 1$. Os estados ρ_s e ρ_e são determinados pela condição de separabilidade (emaranhamento) baseada na positividade (negatividade) dos autovalores da transposta parcial de ρ , ρ^{Tp} . O estado separável ρ_s é definido como o estado com todos os autovalores da transposta parcial (2.15) sendo positivo-definidos. Já ρ_e é a matriz densidade que tenha pelo menos um dos autovalores da sua transposta parcial sendo negativo. Como mencionamos na seção anterior, entre todos os autovalores (2.15), somente o autovalor λ_4 (2.15d) tem possibilidade de ser negativo, dependendo da constante de troca \mathcal{J} . Dessa forma, podemos escrever a seguinte desigualdade:

$$(\rho_{23}^e)^2 > \rho_{11}\rho_{44} \quad (2.18a)$$

$$(\rho_{23}^s)^2 \leq \rho_{11}\rho_{44}, \quad (2.18b)$$

onde o índice “ e ” indica a condição de emaranhamento e o índice “ s ” indica a condição de separabilidade. Desta maneira, a matriz densidade $\rho_{s(e)}$ é dada por

$$\rho_{s(e)} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23}^{s(e)} & 0 \\ 0 & \rho_{23}^{s(e)} & \rho_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (2.19)$$

onde ρ_{23}^e é o elemento da matriz densidade do estado emaranhado e satisfaz a equação (2.18a). Já ρ_{23}^s é o elemento da matriz densidade do estado separável e satisfaz a condição (2.18b).

Como já mencionamos, para medir a distância entre o estado ρ_e e ρ_s usaremos a norma de Hilbert-Schmidt. Tal norma é dada por $\mathcal{D}(\rho_e||\rho_s) = \sqrt{\text{Tr}[(\rho_s - \rho_e)^2]}$, onde

$$\rho_e - \rho_s = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23}^e & 0 \\ 0 & \rho_{23}^e & \rho_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23}^s & 0 \\ 0 & \rho_{23}^s & \rho_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

Da operação matricial acima, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\rho_e||\rho_s) &= \sqrt{\text{Tr}[(\rho_s - \rho_e)^2]} = \sqrt{2(\rho_{23}^e - \rho_{23}^s)^2} \\ &= \sqrt{2}|\rho_{23}^e - \rho_{23}^s|. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Para assegurar que a distância seja mínima devemos usar a condição (2.18), observando que ρ_{11} e ρ_{44} são positivos e, para $\mathcal{J} < 0$, ρ_{23} é negativo. Tal condição (2.18) pode ser reescrita como

$$\rho_{23}^e < -\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}} \quad (2.22a)$$

$$-\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}} \leq \rho_{23}^s < 0. \quad (2.22b)$$

Observe que $\mathcal{D}(\rho_e||\rho_s)$ será mínimo quando ρ_{23}^s for mínimo, ou seja, quando $\rho_{23}^s = -\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}$. Assim, a medida de emaranhamento é dada por $\mathcal{E}(\rho_e) = \mathcal{E}_0\sqrt{2}|\rho_{23}^e + \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}|$. Como o elemento ρ_{23}^e é negativo e menor do que $-\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}$, o argumento da norma é negativo e podemos escrever a medida de emaranhamento do estado emaranhado ρ_e como

$$\mathcal{E}(\rho_e) = -\mathcal{E}_0\sqrt{2}(\rho_{23}^e + \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}). \quad (2.23)$$

Pode-se verificar que o valor máximo de $\mathcal{E}(\rho_e)$ é $1/\sqrt{2}$ e com isso a constante de normalização é $\mathcal{E}_0 = \sqrt{2}$, para garantir que $0 \leq \mathcal{E} \leq 1$, com $\mathcal{E} = 0$ sendo não emaranhado e $\mathcal{E} = 1$ sendo maximamente emaranhado.

Vimos que mesmo para $\mathcal{J} < 0$ podemos ter um estado separável se a temperatura T for maior ou igual a temperatura crítica T_c . Esta mudança de um $T < T_c$ para um $T \geq T_c$ corresponde ao elemento ρ_{23} mudar de índice “e” para índice “s”, ou seja, ρ_{23} mudar de

elemento de um estado emaranhado para elemento de um estado separável. Observe que a equação (2.23) é válida para um estado emaranhado ρ_e . Assim, com o intuito de escrever uma expressão geral para a medida de emaranhamento, isto é, que seja válida tanto para estados emaranhados (ρ_e) quanto para estados separáveis (ρ_s), a equação (2.23) pode ser escrita como:

$$\mathcal{E}(\rho) = \max [0, -2(\rho_{23} + \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}})] . \quad (2.24)$$

Nessa equação, o “max” significa que deve-se escolher o maior valor entre as duas funções dentro do colchetes. A equação (2.24) pode ser obtida através da matriz densidade (2.9) pelo cálculo da concorrência [54, 55]. Isso mostra que apesar de serem métodos completamente diferentes, temos uma equivalência entre as medidas. Se $T < T_c$, o segundo termo é sempre maior que zero e temos um estado emaranhado ($\rho_{23} \rightarrow \rho_{23}^e$), sendo a medida de emaranhamento dada pelo segundo termo entre colchetes. Se $T \geq T_c$, o segundo termo é menor ou igual a zero e teremos um estado separável ($\rho_{23} \rightarrow \rho_{23}^s$) e assim a medida de emaranhamento é zero.

A medida de emaranhamento (2.24) pode ser expressa em termos da função partição, numa fórmula que engloba a medida para o emaranhamento de um dímero de spin-1/2 tanto na ausência quanto na presença de campo magnético. Tal forma é dada por

$$\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T) = \max \left[0, \frac{e^{-\frac{3\mathcal{J}}{4T}} (1 - 3e^{\frac{\mathcal{J}}{T}})}{\mathcal{Z}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)} \right], \quad (2.25)$$

onde

$$\mathcal{Z} = \begin{cases} \mathcal{Z}_{\mathcal{B}=0} = e^{-\frac{3\mathcal{J}}{4T}} + 3e^{\frac{\mathcal{J}}{4T}}, & \text{quando } \mathcal{B} = 0 \\ \mathcal{Z}_{\mathcal{B}\neq 0}, & \text{quando } \mathcal{B} \neq 0 \end{cases} . \quad (2.26)$$

Na ausência de campo magnético, usa-se a função partição $\mathcal{Z}_{\mathcal{B}=0}$, e, na presença de campo magnético, usa-se a função partição $\mathcal{Z}_{\mathcal{B}\neq 0}$ dada em (2.11). Considerando os elementos da matriz densidade (2.10) e efetuando as devidas substituições, obtemos

$$\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T) = \max \left[0, \frac{1 - 3e^{\frac{\mathcal{J}}{T}}}{e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} (2 \cosh(\frac{\mathcal{B}}{T}) + 1) + 1} \right]. \quad (2.27)$$

A Figura 2.1 ilustra a relação entre a medida de emaranhamento (2.24, 2.27) com o autovalor λ_4 (2.15d) e a condição de emaranhamento (2.22), que depende de como o elemento ρ_{23} se comporta com relação a $-\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}$. Podemos ver que só existe emaranhamento \mathcal{E}

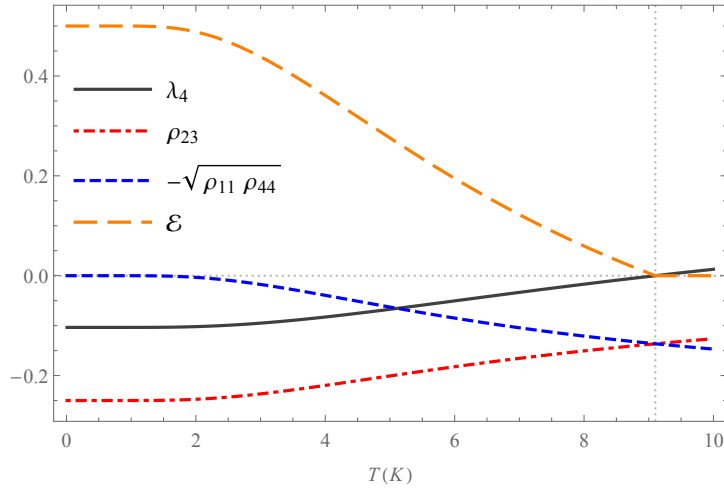


Figura 2.1: Relação entre a medida de emaranhamento (2.27), o autovalor λ_4 (2.15d) e a condição de emaranhamento (2.22) para $\mathcal{B} = 10\text{K}$ e $\mathcal{J} = -10\text{K}$.

enquanto o autovalor λ_4 for negativo. Mas isto só ocorre se o elemento ρ_{23} da matriz densidade (2.9) for menor que $-\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}$, fato que só é verdade abaixo da temperatura crítica T_c , representada pela linha vertical pontilhada que passa na intersecção das curvas. Se isto ocorre, então o elemento ρ_{23} é ρ_{23}^e e o estado é emaranhado (ρ^e). Quando $T \geq T_c$, temos $\rho_{23} \geq -\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}$ de modo que ρ_{23} é ρ_{23}^s , o que indica que o estado é não emaranhado (ρ^s).

Este mesmo resultado é similar ao obtido via concorrência [56]. Na ausência de campo magnético externo ($\mathcal{B} = 0$), a medida de emaranhamento (2.27) recupera o resultado obtido pela concorrência [57]. A proposta de medida de emaranhamento (2.17), baseada na distância entre estados, é definida através da norma de Hilbert-Schmidt e pode ser usada de modo similar para obter medidas de emaranhamento em sistemas de dimensão $2 \otimes 3$, tal como dímeros de spin-(1/2,1).

Como já mencionado e calculado anteriormente, a temperatura crítica (T_c)—definida como a temperatura a partir do qual o emaranhamento se anula— pode ser obtida também através da equação (2.27) ou, mais facilmente, pela equação (2.25). Resolvendo $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T_c) = 0$, a solução é exatamente a mesma obtida somente pelo critério de Peres-Horodecki. Tal congruência entre o critério de Peres-Horodecki e medida de emaranhamento proposta—expressada através da norma de Hilber-Schmidt mostra o potencial da medida de emaranhamento.

A medida de emaranhamento (2.27) depende de três parâmetros: um intrínseco ao sistema, a constante de troca (\mathcal{J}); e dois extrínsecos, a temperatura (T) e o campo magnético externo (\mathcal{B}). A seguir, analisaremos o resultado (2.27) e a dependência com respeito às quantidades físicas extrínsecas.

2.1.3 Emaranhamento como função da temperatura

O comportamento da medida de emaranhamento (2.27) com respeito à temperatura pode ser explicitado em três regimes de campo magnético externo em comparação com a constante de troca: campo fraco ($|\mathcal{B}| < |\mathcal{J}|$), campo médio ($|\mathcal{B}| = |\mathcal{J}|$) e campo forte ($|\mathcal{B}| > |\mathcal{J}|$). Como vimos, independente de qual seja o regime, a temperatura crítica é independente do campo magnético aplicado e, além disso, esteja o sistema submetido ou não a um campo magnético externo, quanto maior for o módulo da constante de troca maior será a temperatura crítica.

A Figura 2.2 mostra a condição de campo fraco para um valor fixo de $\mathcal{J} = -10\text{ K}$ e diferentes valores de campo magnético. Na condição de campo fraco, nós temos que o emaranhamento sempre diminui com o aumento da temperatura. Observamos que quanto mais \mathcal{B} aproxima-se de \mathcal{J} , menor o emaranhamento do sistema, mas sempre com $\mathcal{E}(T \rightarrow 0) = 1$.

O comportamento do emaranhamento no regime de campo médio ($|\mathcal{B}| = |\mathcal{J}|$) é mos-

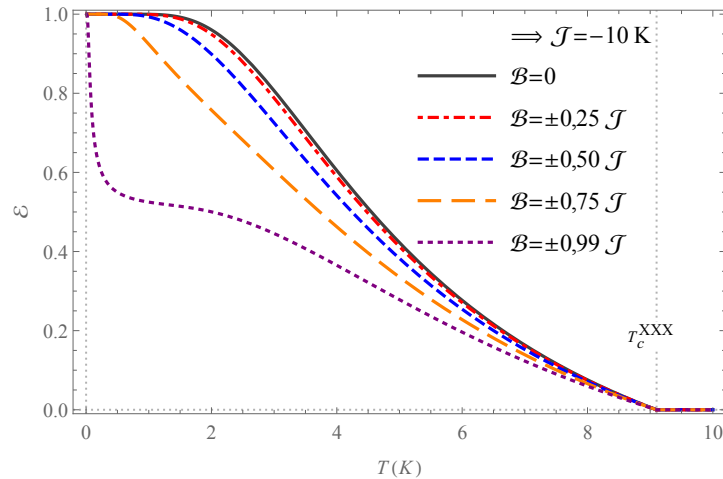


Figura 2.2: Medida de emaranhamento térmico para campo fraco ($|\mathcal{B}| < |\mathcal{J}|$): $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$ com $\mathcal{J} = -10\text{K}$ e vários valores de \mathcal{B} .

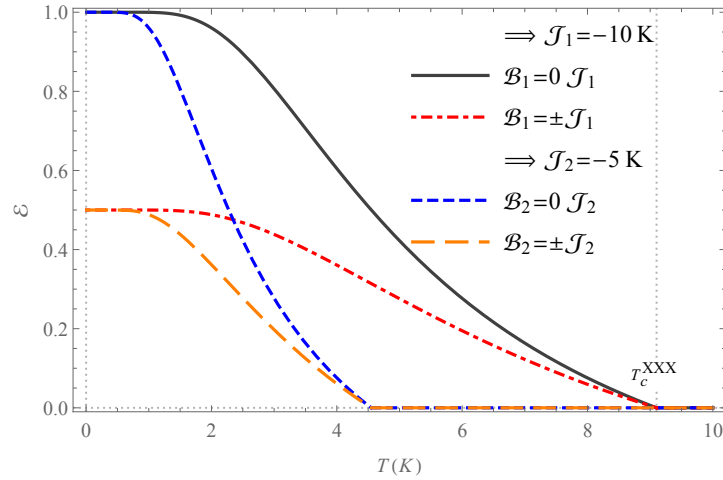


Figura 2.3: Medida de emaranhamento térmico para campo médio ($|\mathcal{B}| = |\mathcal{J}|$): $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$ com $\mathcal{J} = -5\text{K}$ e $\mathcal{J} = -10\text{K}$ para $\mathcal{B} = 0$ e $\mathcal{B} \neq 0$.

trado na Figura 2.3 para $\mathcal{J} = -5\text{K}$ e $\mathcal{J} = -10\text{K}$, observando que não importa qual o valor da constante de troca, o emaranhamento quando a temperatura tende a zero é reduzido pela metade, $\mathcal{E} = 1/2$, desde que $|\mathcal{B}| = |\mathcal{J}|$. Também ilustramos o emaranhamento na ausência de campo para os mesmos valores de \mathcal{J} com linha tracejada e linha sólida, respectivamente para \mathcal{J}_1 e \mathcal{J}_2 . Independente da situação, temos o mesmo valor de temperatura crítica para os mesmos \mathcal{J} . Observe que para campo médio, a medida de emaranhamento também sempre diminui com o aumento da temperatura.

Por último, nós temos a única situação em que o aumento da temperatura pode aumentar o grau de emaranhamento, que acontece na condição de campo forte ($|\mathcal{B}| > |\mathcal{J}|$). A Figura 2.4 mostra a condição de campo forte para $\mathcal{J} = -10\text{K}$ a vários valores de \mathcal{B} . Nesta situação, para qualquer valor de \mathcal{B} , o emaranhamento é zero em $T \rightarrow 0$ e aumenta com o aumento da temperatura até atingir um valor máximo e então decresce até zero, quando atinge a temperatura crítica. Assim, os três regimes de campos comportam-se, quando $T = 0$, da seguinte forma:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}(T, \mathcal{J}, \mathcal{B}) = \begin{cases} 1, & \text{se } |\mathcal{B}| < |\mathcal{J}| \\ \frac{1}{2}, & \text{se } |\mathcal{B}| = |\mathcal{J}| \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > |\mathcal{J}| \end{cases} . \quad (2.28)$$

Vemos nesse modelo *XXX* que, quanto maior o campo magnético, menor será o emaranhamento do sistema para um dado valor de T . Verifica-se, através da equação (2.27), que a medida de emaranhamento permanece inalterada com a orientação do campo magnético

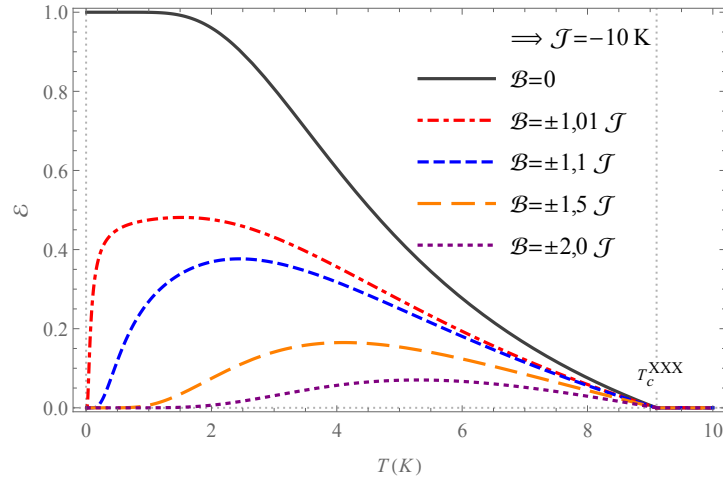


Figura 2.4: Medida de emaranhamento térmico para campo forte ($|\mathcal{B}| > |\mathcal{J}|$): $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$ com $\mathcal{J} = -10\text{K}$ e diferentes valores de \mathcal{B} .

externo ao longo da direção z , isto é, $\mathcal{E}(T, \mathcal{J}, \mathcal{B}) = \mathcal{E}(T, \mathcal{J}, -\mathcal{B})$. Isto é devido ao fato de ser um dímero de spin-1/2, não privilegiando nenhum sentido do campo magnético. Mais adiante trataremos um sistema dímero onde a medida de emaranhamento irá se alterar com o sentido do campo.

2.1.4 Emaranhamento em função do campo magnético

O comportamento da medida de emaranhamento para um determinado material com uma constante de troca \mathcal{J} numa temperatura fixa mas com campo magnético variando é mostrado na Figura 2.5. Como esperado, e já mencionado, o emaranhamento depende apenas do valor absoluto do campo magnético externo ($|\mathcal{B}|$) e não da sua orientação ao longo da direção z . Na Figura 2.5, com constante de troca $\mathcal{J} = -10\text{K}$, sempre que $\mathcal{B} = \mp \mathcal{J}$, temos a transição do regime de campo fraco para o regime de campo forte. Além disso, o eixo das abscissas é a assíntota horizontal da medida de emaranhamento como função do campo magnético, não existindo nesse modelo um \mathcal{B} que anule \mathcal{E} . Da equação (2.27), somente quando $\mathcal{B} \rightarrow \pm\infty$ que teríamos $\mathcal{E} \rightarrow 0$. Um gráfico 3D da medida de emaranhamento da equação (2.27) é mostrado na Figura 2.6. O gráfico (a) mostra como o emaranhamento cai com o aumento do campo e a independência da temperatura crítica com o campo. O gráfico (b) ilustra a linearidade da temperatura crítica com a constante de troca \mathcal{J} . O gráfico (c) mostra a ausência de emaranhamento no caso ferromagnético, que também

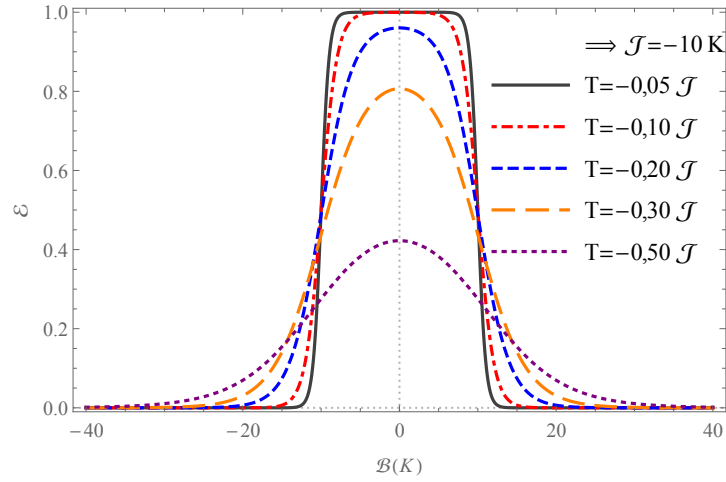


Figura 2.5: Medida de emaranhamento térmico $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$ em função do campo magnético para $\mathcal{J} = -10\text{K}$ e diferentes valores de temperatura T .

pode ser observado em (b).

Para ilustrar o efeito da blindagem magnética, um sistema $[\text{Fe}_2(\text{SC}_3\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{NO})_4]$, o ferro nitrosyl, um composto binuclear [16], pode ser considerado. O ferro nitrosyl é um dímero antiferromagnético de spin-1/2 com $\mathcal{J} = -136\text{K}$, e que, pela equação (2.16) apresenta uma temperatura crítica de aproximadamente $T_c \approx 123,793\text{K}$. Se submetido a um campo magnético externo $|\mathcal{B}| = 10\text{K}$ ($|B| \approx 7,456\text{T}$) na temperatura $T = 60\text{K}$, a medida de emaranhamento será $\mathcal{E} \approx 0,52$, assim como, se $|\mathcal{B}| = 140\text{K}$ ($|B| \approx 104,238\text{T}$) então $\mathcal{E} \approx 0,32$. O emaranhamento quântico em dímeros antiferromagnéticos de spin-1/2 no modelo XXX sobrevivem mesmo sob a ação de campos magnéticos muito altos, da ordem de magnitudes de vários Teslas.

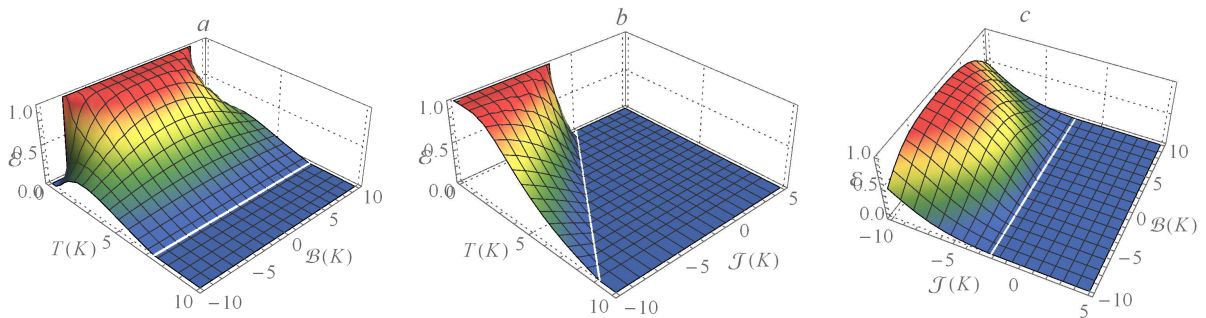


Figura 2.6: Medida de emaranhamento $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}, T)$. (a) $\mathcal{J} = -8\text{K}$, (b) $\mathcal{B} = 2\text{K}$ e (c) $T = 0\text{K}$.

2.1.5 Emaranhamento e susceptibilidade

Para o modelo XXX , a susceptibilidade magnética para um dímero de spin-1/2 é dada pela equação de Bleaney e Bowers [58, 59]

$$\chi = \frac{2N_A\beta(g\mu_B)^2 e^{\frac{\mathcal{J}}{T}}}{1 + 3e^{\frac{\mathcal{J}}{T}}}, \quad (2.29)$$

onde N_A é o número de Avogadro.

Queremos escrever a equação (2.24) em função da susceptibilidade magnética. Na ausência de campo magnético, a equação (2.24) torna-se

$$\mathcal{E}(\mathcal{J}, T, \mathcal{B} = 0) = \max \left[0, \frac{1 - 3e^{\frac{\mathcal{J}}{T}}}{3e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} + 1} \right] \quad (2.30)$$

Invertendo a equação (2.29), temos $e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} = \frac{\chi}{2N_A\beta(g\mu_B)^2 - 3\chi}$. Substituindo na equação (2.30), obtemos o emaranhamento em função da susceptibilidade magnética, dado por

$$\mathcal{E}(\mathcal{J}, T, \mathcal{B} = 0) = \max \left[0, 1 - \frac{3\chi(T)}{2N_A\beta(g\mu_B)^2} \right]. \quad (2.31)$$

A equação 2.31 é a medida de emaranhamento na ausência de campo magnético colocada em função da susceptibilidade, recuperando, de uma forma diferente, o resultado apresentado na referência [16]. Algo que estamos trabalhando no momento é escrever o emaranhamento em função da susceptibilidade em outros modelos, tais como o modelo dímero XXZ e para trímeros.

2.2 Modelo XXX na presença de campo magnético

$$\vec{B} = B_x \hat{x}$$

Todo modelo construído até aqui foi feito para o caso de um campo magnético aplicado na direção z . Podemos comparar essa situação com o caso em que temos um campo magnético aplicado na direção x . Os cálculos para a medida de emaranhamento para um dímero submetido a um campo magnético constante na direção x é feito no Apêndice A, resultando em

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{-2e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} - 3e^{\frac{2\mathcal{J}}{T}} + 1}{4e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} \cosh\left(\frac{\mathcal{B}}{T}\right) + 2e^{\frac{2\mathcal{J}}{T}} \cosh\left(\frac{2\mathcal{B}}{T}\right) + e^{\frac{2\mathcal{J}}{T}} + 1} \right]. \quad (2.32)$$

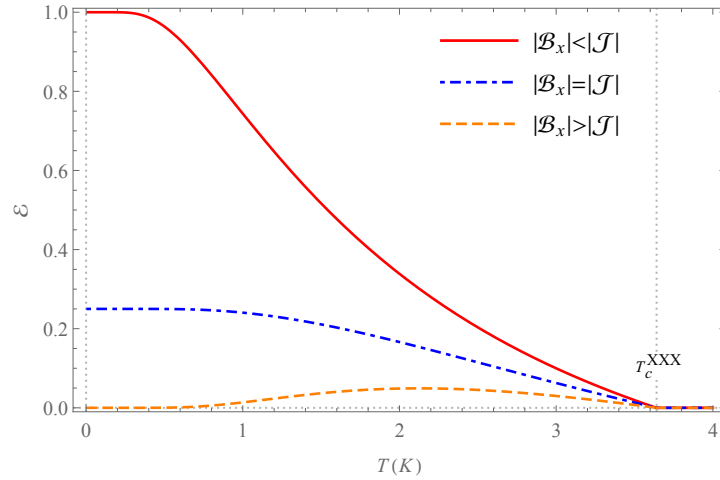


Figura 2.7: A medida de emaranhamento $\mathcal{E}(\mathcal{J}, \mathcal{B}_x, T)$ para $\mathcal{J} = -4\text{K}$ nos três regimes de campo magnético.

Mostra-se, que para o campo magnético na direção x , também temos que $\mathcal{E}(T, \mathcal{J}, \mathcal{B}_x) = \mathcal{E}(T, \mathcal{J}, -\mathcal{B}_x)$, e que a temperatura crítica nessa situação também é independente do campo magnético (\mathcal{B}_x), tendo o mesmo valor que obtivemos quando o campo magnético era na direção z , dado em (2.16). A Figura 2.7 mostra os três tipos de comportamento da medida de emaranhamento em termos de como o campo magnético externo se compara com a constante de troca.

Segue que os três regimes de campo obedecem à seguinte relação:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}(T, \mathcal{J}, \mathcal{B}_x) = \begin{cases} 1, & \text{se } |\mathcal{B}_x| < |\mathcal{J}| \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{4}, & \text{se } |\mathcal{B}_x| = |\mathcal{J}| \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}_x| > |\mathcal{J}| \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases} . \quad (2.33)$$

A principal diferença com relação ao caso anterior é que para a situação de campo médio ($|\mathcal{B}_x| = |\mathcal{J}|$), no limite em que T tende a zero, o emaranhamento é igual a $1/4$, isto é, $\mathcal{E}(T \rightarrow 0, |\mathcal{B}| = |\mathcal{J}|) = 1/4$.

Em todas as situações em que comparamos as medidas de emaranhamento com campos \mathcal{B}_x e \mathcal{B}_z de mesma intensidade, isto é, $|\mathcal{B}_x| = |\mathcal{B}_z|$, o emaranhamento com campo na direção z mostrou-se maior do que o emaranhamento com campo na direção x conforme a Figura 2.8.

As equações de medida de emaranhamento, (2.32) e (2.27), nos fornecem uma forma de igualar uma com a outra. Para uma dada temperatura T e um dada constante de troca \mathcal{J} , podemos aplicar um campo magnético, digamos na direção z , mas que seja equivalente

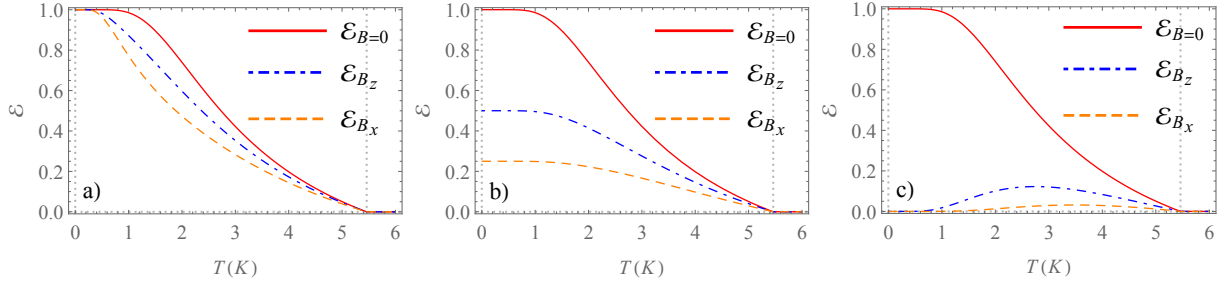


Figura 2.8: Comparação entre as medidas de emaranhamento com campo magnético na direção x e z para os três regimes de campo com $\mathcal{J} = -6K$: a) $\mathcal{B}_{x,z} = 4K$, b) $\mathcal{B}_{x,z} = 6K$ e c) $\mathcal{B}_{x,z} = 8K$.

a um campo na direção x . Tomando $\mathcal{E}(T, \mathcal{J}, \mathcal{B}_z) = \mathcal{E}(T, \mathcal{J}, \mathcal{B}_x)$, cujo resultado é

$$\mathcal{B}_z = T \log \left[\left(\sqrt{\left(-2e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} \cosh\left(\frac{2\mathcal{B}_x}{T}\right) - 4 \cosh\left(\frac{\mathcal{B}_x}{T}\right) + 2 \right)^2 - 4 \left(e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} + 1 \right)^2} + 2e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} \cosh\left(\frac{2\mathcal{B}_x}{T}\right) + 4 \cosh\left(\frac{\mathcal{B}_x}{T}\right) - 2 \right) \left(2 \left(e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} + 1 \right) \right)^{-1} \right]. \quad (2.34)$$

Isso significa que se aplicarmos o campo magnético da equação 2.34 na direção z , seria equivalente a aplicar um campo na direção x (\mathcal{B}_x), pois obteríamos o mesmo resultado na medida de emaranhamento. Mesmo quando temos um campo magnético do tipo $\vec{B} = B_x \hat{x} + B_z \hat{z}$, com $B_x = B_z$, a temperatura crítica permanece inalterada pelo campo, sendo a mesma que encontramos para os campos separadamente. Nesta situação, o autovalor λ_4 (ver Apêndice B) é igual a

$$\lambda_4 = \frac{1}{2\mathcal{Z}} x^{-\frac{3}{4}} y^{-\frac{1}{2}} \left(x(y+1) - \sqrt{x^2(y^2 - y + 1) - 2xy + y} \right), \quad (2.35)$$

onde $x = e^{\frac{\mathcal{J}}{T}}$ e $y = e^{\frac{2\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}}$. Igualando a equação (2.35) a zero, obtemos $x(3x+2) = 1$. Observe que, pelas definições de x e y , esta equação também não depende do campo magnético, e com isso a temperatura crítica não varia com esse campo. Tomando apenas as soluções reais para T , obtemos a mesma temperatura crítica ($T_c = \frac{-\mathcal{J}}{\ln(3)}$) dos resultados anteriores, equação (2.16).

2.3 Modelo XXZ na presença de campo magnético

$$\vec{B} = B_z \hat{z}$$

Nesta seção analisaremos um modelo com anisotropia, onde o Hamiltoniano \mathcal{H}_{XXX} dá lugar a \mathcal{H}_{XXZ} , tal que $\mathcal{H}_{XXZ} = -(Js_1^x s_2^x + Js_1^y s_2^y + J_z s_1^z s_2^z)$. Dessa forma, o modelo XXZ para um dímero de spin-1/2 em um campo magnético (externo) constante na direção z , $\vec{B} = B_z \hat{z}$, é descrito pelo Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J (s_1^x s_2^x + s_1^y s_2^y) - J_z s_1^z s_2^z - \mu_B g B (s_1^z + s_2^z) , \quad (2.36)$$

onde J e J_z são as constantes de troca. Desta forma, a matriz Hamiltoniana é escrita como

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -Bg\mu_B - \frac{J_z}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{J_z}{4} & -\frac{J}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{J}{2} & \frac{J_z}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Bg\mu_B - \frac{J_z}{4} \end{pmatrix} . \quad (2.37)$$

A matriz densidade (2.9) tem agora os seguintes elementos

$$\rho_{11} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{4\mathcal{B} + \mathcal{J}_z}{4T}} \quad (2.38a)$$

$$\rho_{22} = \rho_{33} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \cosh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right) \quad (2.38b)$$

$$\rho_{23} = \rho_{32} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \sinh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right) \quad (2.38c)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{\mathcal{J}_z - 4\mathcal{B}}{4T}} , \quad (2.38d)$$

sendo $\mathcal{Z} \equiv \mathcal{Z}(\mathcal{J}, \mathcal{J}_z, \mathcal{B}, T)$ a função partição, dada por

$$\mathcal{Z} = 2e^{-\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \left(\cosh\left(\frac{\mathcal{B}}{T}\right) e^{\frac{\mathcal{J}_z}{2T}} + \cosh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right) \right) , \quad (2.39)$$

onde $\mathcal{J} = J/k_B$, $\mathcal{J}_z = J_z/k_B$ e $\mathcal{B} = g\mu_B B/k_B$. Observe que estes elementos são muito similares aos elementos da equação (2.10), com a diferença de que agora \mathcal{J}_z aparece explicitamente separado dos demais.

2.3.1 Condição de emaranhamento e determinação da temperatura crítica

O cálculo da transposta parcial é exatamente o mesmo do caso XXX , dado na equação (2.14), tendo os mesmos autovalores das equação (2.15), de forma que teremos a mesma condição de emaranhamento (2.18). Uma rápida análise dos elementos (2.38) mostra que os três primeiros autovalores da transposta parcial são todos positivos, para qualquer valor, positivo ou negativo, das constantes de troca. Já λ_4 pode ser positivo (não emaranhado) ou negativo (emaranhado) sob certas circunstâncias. Dos elementos (2.38), conclui-se que o autovalor λ_4 é invariante sob mudança de sinal de \mathcal{B} , \mathcal{J} ou ambos, $\lambda_4(\mathcal{B}, \mathcal{J}) = \lambda_4(-\mathcal{B}, -\mathcal{J})$. Isto mostra que o modelo XX apresenta emaranhamento tanto para $\mathcal{J} > 0$ (ferromagnético) quanto para $\mathcal{J} < 0$ (antiferromagnético), e que eles são para o mesmo $|\mathcal{J}|$.

Análise do autovalor λ_4 no modelo XX

No modelo XX ($\mathcal{J}_z = 0$), o autovalor λ_4 é negativo ($\lambda_4 < 0$) desde que a temperatura esteja abaixo da temperatura crítica. A temperatura crítica pode ser facilmente calculada substituindo os elementos de matriz da equação (2.38) no autovalor λ_4 (2.15d), tomando $\mathcal{J}_z = 0$ e igualando a zero, obtendo $\sinh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right) = 1$. A solução desta equação é dada por

$$T_c^{XX} = \frac{\pm \mathcal{J}}{2 \ln(1 + \sqrt{2})} \begin{cases} - \text{ se } \mathcal{J} < 0 \\ + \text{ se } \mathcal{J} > 0 \end{cases}. \quad (2.40)$$

Observe que a temperatura crítica do sistema também não depende do campo magnético. Isto significa que o sistema, abaixo da temperatura crítica T_c^{XX} , permanece emaranhado independentemente do campo magnético aplicado, assim como no modelo XXX . Devido a λ_4 não mudar com respeito à mudança de sinal de \mathcal{J} , o modelo XX apresenta emaranhamento em ambos os casos, antiferromagnético ferromagnético, o que pode ser observado no gráfico da Figura 2.9.

A Figura 2.9 também mostra que para uma dada temperatura fixa, T , existe um valor mínimo que \mathcal{J} necessita ter para que o autovalor λ_4 seja negativo e que, conseqüentemente, o sistema seja emaranhado. Este valor mínimo, \mathcal{J}_{min} , é obtido diretamente da equação da temperatura crítica. Assim, podemos afirmar que para uma dada temperatura T , teremos

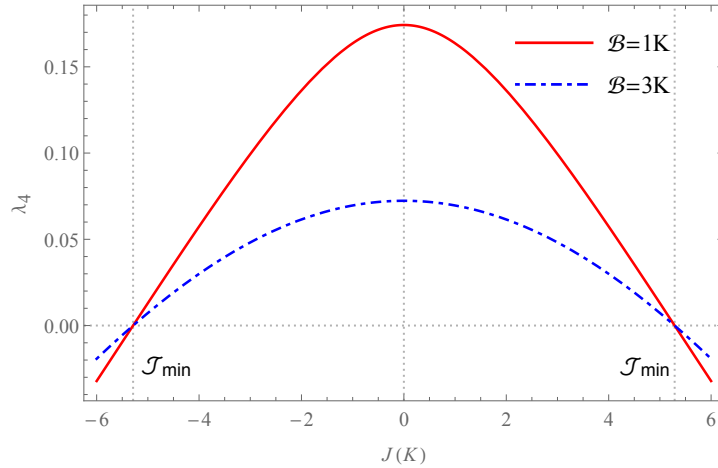


Figura 2.9: λ_4 em função da constante de troca \mathcal{J} para $T = 3K$ com dois campos magnéticos distintos, $\mathcal{B} = 1K$ e $\mathcal{B} = 3K$.

emaranhamento somente se $|\mathcal{J}| > |\mathcal{J}_{min}|$, dado por

$$\mathcal{J}_{min} = \pm 2T \ln(1 + \sqrt{2}) \begin{cases} - & \text{se } \mathcal{J} < 0 \\ + & \text{se } \mathcal{J} > 0 \end{cases} . \quad (2.41)$$

Isto significa que se $-2T \ln(1 + \sqrt{2}) \leq \mathcal{J} \leq +2T \ln(1 + \sqrt{2})$, o autovalor λ_4 é positivo e o sistema é emaranhado, para uma dada temperatura T .

2.3.2 Análise do autovalor λ_4 no modelo XXZ

No modelo XXZ , se tomarmos $\lambda_4 = 0$ e utilizarmos os elementos de matriz (2.38) para obter a temperatura crítica, veremos que não podemos obter uma expressão analítica, resultando na equação

$$e^{\frac{\mathcal{J}_z}{T}} = \sinh^2\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right) , \quad (2.42)$$

que pode ser resolvida numericamente. De qualquer forma, a equação (2.42) mostra que a temperatura crítica não depende do campo magnético.

A positividade ou negatividade do λ_4 deve ser considerada para o caso ferromagnético ($\mathcal{J}, \mathcal{J}_z > 0$) e para o caso antiferromagnético ($\mathcal{J}, \mathcal{J}_z < 0$) separadamente.

Antiferromagnético

Nós podemos ter emaranhamento no caso antiferromagnético se a temperatura for menor que a temperatura crítica. Na Figura 2.10, as linhas verticais referem-se às temperaturas

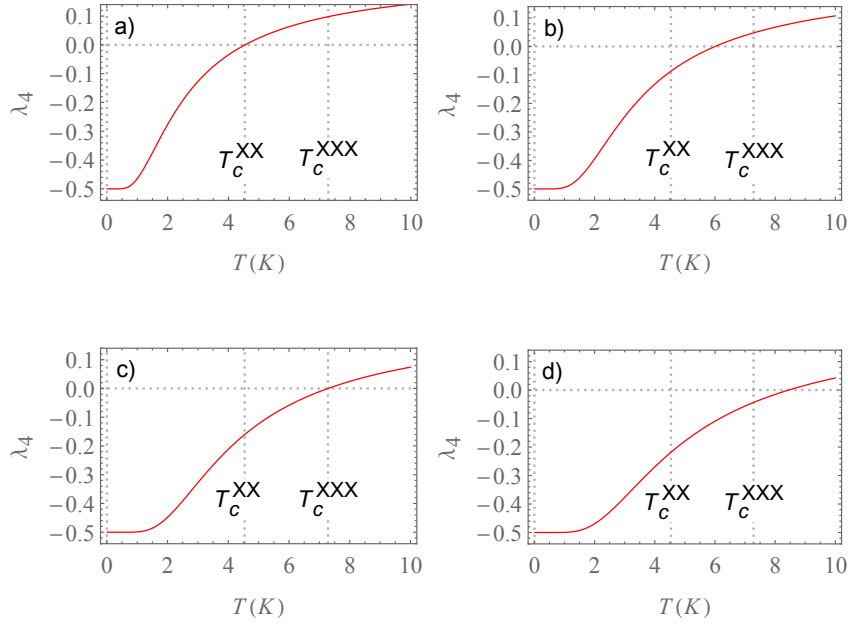


Figura 2.10: λ_4 em função da temperatura T para $\mathcal{J} = -8K$ e $\mathcal{B} = 0K$. O gráfico a) com $\mathcal{J}_z = 0K$, b) com $\mathcal{J}_z = -4K$, c) com $\mathcal{J}_z = -8K$ e d) com $\mathcal{J}_z = -12K$.

críticas dos modelos XX e XXX . Quando $|\mathcal{J}_z| < |\mathcal{J}|$ (Figura 2.10b)), a temperatura crítica do modelo XXZ é menor que a temperatura crítica do modelo XXX (2.16), mas sempre maior do que a temperatura crítica do modelo XX (2.40). Quando $|\mathcal{J}_z| > |\mathcal{J}|$ (Figura 2.10d)), a temperatura crítica do modelo XXZ é maior que a temperatura crítica do modelo XXX . Os gráficos a) e c) da Figura 2.10 representam λ_4 como uma função da temperatura dos modelos XX e XXX .

Ferromagnético

No caso ferromagnético, temos emaranhamento no sistema se T está abaixo da temperatura crítica, mas desde que $\mathcal{J}_z < \mathcal{J}$. Para $\mathcal{J}_z \geq \mathcal{J}$, λ_4 é positivo e não temos nenhum emaranhamento no sistema como mostra a Figura 2.11b). A temperatura crítica para o caso ferromagnético, quando $\mathcal{J}_z < \mathcal{J}$, é sempre menor que a temperatura crítica do modelo XX (Figura 2.11a)) .

2.3.3 Distância entre estados

A condição de emaranhamento (2.18), diferentemente do que foi feito no modelo XXX , necessita ser analisada separadamente para os casos ferromagnético e antiferromagnético.

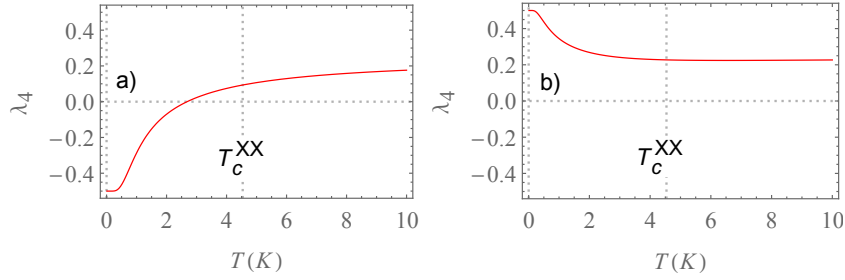


Figura 2.11: λ_4 em função da temperatura T com $\mathcal{J} = 8K$ e $\mathcal{B} = 0K$. O gráfico a) com $\mathcal{J}_z = 4K$ e b) com $\mathcal{J}_z = 10K$.

Com o auxílio dos elementos (2.38), temos que ρ_{11} e ρ_{23} são positivos para qualquer constante de troca, positiva ou negativa; já o elemento $\rho_{23} > 0$ se $\mathcal{J} > 0$ e $\rho_{23} < 0$ se $\mathcal{J} < 0$. Assim, a condição de emaranhamento (2.18) deve ser reescrita como:

$$\lambda_4 < 0 \begin{cases} \mathcal{J} < 0 \Rightarrow \rho_{23}^e < -\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}} \\ \mathcal{J} > 0 \Rightarrow \rho_{23}^e > +\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}} \end{cases} \quad (2.43a)$$

$$\lambda_4 \geq 0 \begin{cases} \mathcal{J} < 0 \Rightarrow -\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}} \leq \rho_{23}^s < 0 \\ \mathcal{J} > 0 \Rightarrow 0 < \rho_{23}^s \leq +\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}} \end{cases} . \quad (2.43b)$$

A medida de emaranhamento, $\mathcal{E}(\rho_e)$, ocorre quando a distância $\mathcal{D}(\rho_s||\rho_e) = \sqrt{2(\rho_{23}^e - \rho_{23}^s)^2}$ for mínima, isto é

$$\mathcal{E}(\rho_e) = \mathcal{E}_0 \sqrt{2} \min_{\rho_s \in \mathbb{S}} |\rho_{23}^e - \rho_{23}^s| , \quad (2.44)$$

onde \mathcal{E}_0 é a constante de normalização.

Para o caso $\mathcal{J}^s < 0$ (antiferromagnético), a condição (2.43) nos mostra que a distância $\mathcal{D}(\rho_s||\rho_e)$ será mínima quando $\rho_{23}^s = -\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}$. Assim, a medida de emaranhamento $\mathcal{E}(\rho_e)$ é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(\rho_e) &= \mathcal{E}_0 \sqrt{2} |\rho_{23}^e + \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}| \\ &= -\mathcal{E}_0 \sqrt{2} (\rho_{23}^e + \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}) , \end{aligned} \quad (2.45)$$

já que $|\rho_{23}^e| > |-\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}|$. Esta equação é válida para o caso onde o estado é emaranhado (ρ_e), isto é, satisfaz a condição (2.43a). Essa equação pode ser facilmente generalizada para qualquer estado ρ e é dada por

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, -\mathcal{E}_0 \sqrt{2} (\rho_{23} + \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}) \right] . \quad (2.46)$$

Para o caso onde $\mathcal{J}^s > 0$ (ferromagnético), a condição (2.43) nos mostra que $\mathcal{D}(\rho_s || \rho_e)$ será mínimo quando ρ_{23}^s for máximo, isto é, quando $\rho_{23}^s = \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}$. Assim, a medida de emaranhamento é dada por

$$\begin{aligned}\mathcal{E}(\rho_e) &= \mathcal{E}_0 \sqrt{2} |\rho_{23}^e - \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}| \\ &= \mathcal{E}_0 \sqrt{2} (\rho_{23}^e - \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}) ,\end{aligned}\tag{2.47}$$

já que $\rho_{23}^e > \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}$. Esta equação é válida para o caso onde o estado é um estado emaranhado (ρ_e), isto é, satisfaz a condição (2.43b). Novamente, podemos colocar numa forma em que seja válido para qualquer estado ρ , tal que

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \mathcal{E}_0 \sqrt{2} (\rho_{23} - \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}) \right] .\tag{2.48}$$

Das condições dadas na equação (2.43), podemos escrever uma equação que satisfaça simultaneamente os dois casos, equações (2.46) e (2.48). Isto significa que podemos descrever a medida de emaranhamento para ambos os casos, antiferromagnético ($\mathcal{J}^s < 0$) e ferromagnético ($\mathcal{J}^s > 0$). Esta equação é escrita como

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \mathcal{E}_0 \sqrt{2} (|\rho_{23}| - \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}) \right] .\tag{2.49}$$

Observe que se $\rho_{23} < 0$, recuperamos a equação (2.46) e se $\rho_{23} > 0$, recuperamos a equação (2.49). Substituindo os elementos de matriz (2.38), obtemos

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, 2 \frac{e^{-\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \left(|\sinh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right)| - e^{\frac{\mathcal{J}_z}{2T}} \right)}{\mathcal{Z}} \right]\tag{2.50}$$

onde \mathcal{Z} é dado na equação (2.39) e a constante de normalização utilizada foi $\mathcal{E}_0 = \sqrt{2}$ para assegurar que $0 \leq \mathcal{E}(\rho) \leq 1$. A seguir, quantificaremos o emaranhamento em cada caso separadamente.

2.3.4 Modelo XX

Tomando $\mathcal{J}_z = 0$ na equação (2.50), obtemos

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{|\sinh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right)| - 1}{\cosh\left(\frac{\mathcal{B}}{T}\right) + \cosh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right)} \right] .\tag{2.51}$$

A Figura 2.12 é um plot da medida de emaranhamento (2.51) em função da constante de troca \mathcal{J} . Ela mostra o que já havíamos antecipado pela análise do autovalor λ_4 , onde

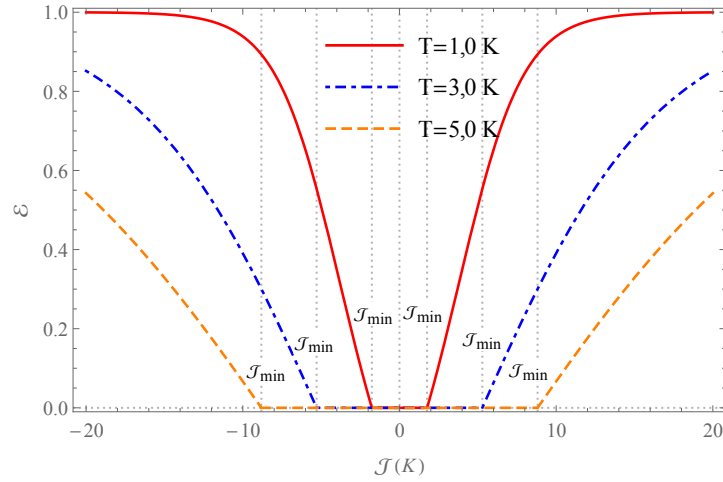


Figura 2.12: Emaranhamento térmico do modelo XX em função da constante de troca, para $\mathcal{B} = \pm 2K$.

observamos que o modelo XX exibe emaranhamento tanto no caso ferromagnético quanto no caso antiferromagnético. Neste modelo, a medida de emaranhamento exibe paridade com relação à constante de troca, $\mathcal{E}(T, \mathcal{B}, \mathcal{J}) = \mathcal{E}(T, \mathcal{B}, -\mathcal{J})$. As linhas verticais indicam o \mathcal{J}_{min} (2.41) e mostram que abaixo deste valor de \mathcal{J} o sistema não ficará emaranhado. A situação em que $|\mathcal{J}| < 2T \ln(1 + \sqrt{2})$ refere-se à positividade do autovalor λ_4 mostrado na Figura 2.9. Observe que se fixarmos uma temperatura, o emaranhamento sempre aumenta com o aumento do módulo da constante de troca.

Uma situação muito interessante é que o emaranhamento em uma temperatura menor nem sempre será maior que o emaranhamento em uma temperatura mais alta, com ambos sujeitos ao mesmo campo magnético. A Figura 2.13 mostra que existe um intervalo de valores de \mathcal{J} em que o emaranhamento é maior no sistema que tem maior temperatura. Para um campo $\mathcal{B} = \pm 3,5K$, podemos observar que o emaranhamento no sistema com uma temperatura de $T = 0,5 K$ entre $\mathcal{J} \approx 2,8293 K$ e $\mathcal{J} \approx 6,2378 K$ é menor do que o emaranhamento na temperatura $T = 1,5 K$. Isto significa que mantendo $\mathcal{B} = \pm 3,5 K$, seja qual for \mathcal{J} entre $2,8293 K$ e $6,2378 K$, o emaranhamento do sistema com maior temperatura será maior que o emaranhamento do sistema com menor temperatura.

O gráfico da Figura 2.14 mostra que se mantivermos \mathcal{J} fixo e aumentarmos a intensidade do campo magnético, observamos que a partir de um uma certa intensidade de campo, o sistema que tem maior temperatura apresenta maior emaranhamento do que o sistema que está em uma menor temperatura. Isto mostra que nem sempre os sistemas

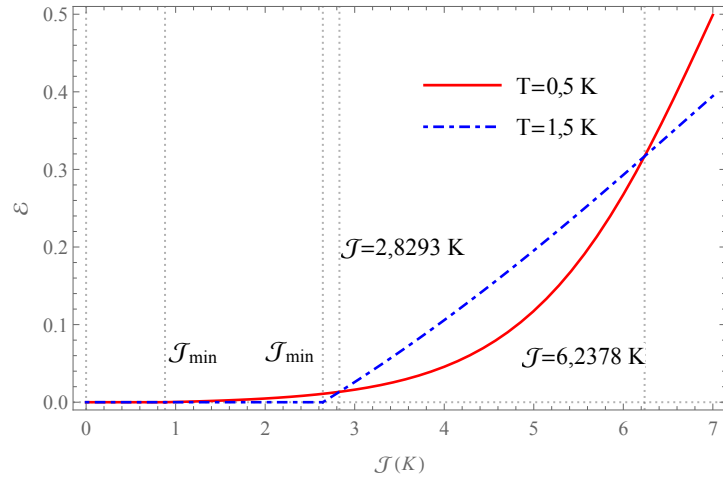


Figura 2.13: Emaranhamento térmico do modelo XX em função da constante de troca para $\mathcal{B} = \pm 3,5K$.

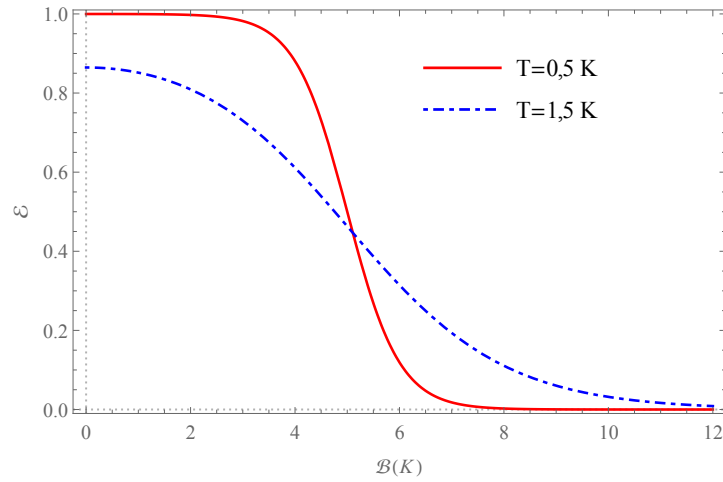


Figura 2.14: Emaranhamento térmico do modelo XX em função do campo magnético para $\mathcal{J} = \pm 10,0K$.

que estão em menores temperaturas terão maiores emaranhamentos que os sistemas que estão em menores temperaturas.

Na Figura 2.15, podemos observar que, em $T = 0$, o emaranhamento assume três valores distintos que dependem da comparação do valor do campo magnético com a constante de troca \mathcal{J} , dados por:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}(T, \mathcal{J}, \mathcal{B}) = \begin{cases} 1, & \text{se } |\mathcal{B}| < |\mathcal{J}|/2 \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{2}, & \text{se } |\mathcal{B}| = |\mathcal{J}|/2 \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > |\mathcal{J}|/2 \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases} . \quad (2.52)$$

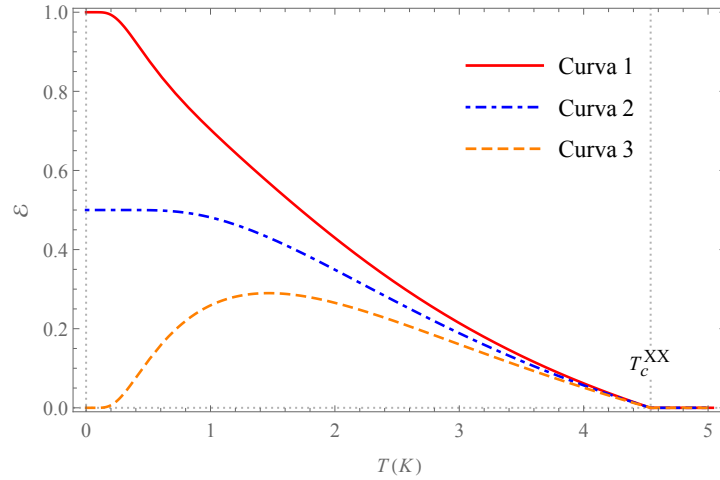


Figura 2.15: Emaranhamento térmico do modelo XX em função da temperatura para $\mathcal{J} = \pm 8K$. Curva 1 representa o campo fraco ($\mathcal{B} = \pm 3K$), curva 2 o campo médio ($\mathcal{B} = \pm 4K$) e curva 3 o campo forte ($\mathcal{B} = \pm 5K$).

Quando o módulo do campo magnético é inferior à metade do módulo da constante de troca, isto é, $|\mathcal{B}| < |\mathcal{J}|/2$, o emaranhamento em $T = 0$ é igual a um 1, maximamente emaranhado, e decai monotonicamente com o aumento da temperatura até atingir o valor zero (não emaranhado). Se o módulo do campo magnético é igual à metade do módulo da constante de troca, o emaranhamento em $T = 0$ é igual $1/2$, e depois decai monotonicamente com o aumento da temperatura até atingir zero. Para o módulo de campo magnético maior que a metade do módulo da constante de troca, o emaranhamento em $T = 0$ é igual 0, aumenta com o aumento da temperatura até atingir um valor máximo e depois decai até atingir o valor zero. A temperatura na qual o emaranhamento alcança zero é a mesma para todos os casos e é a temperatura crítica T_c^{XX} dada na equação (2.40). Essa mesma temperatura pode ser obtida considerando $\mathcal{J}_z = 0$ na equação (2.50) e igualando a equação a zero. A Figura 2.16 mostra o comportamento do emaranhamento no modelo XX : o gráfico (a) mostra que a temperatura crítica não depende do campo e que o emaranhamento é simétrico com relação ao mesmo; (b) mostra a simetria com relação a \mathcal{J} e linearidade da temperatura crítica com \mathcal{J} ; (c) mostra que \mathcal{J}_{min} e sua não dependência de \mathcal{B} . A linha branca dos gráficos 3D mostram onde o emaranhamento passa a valer zero.

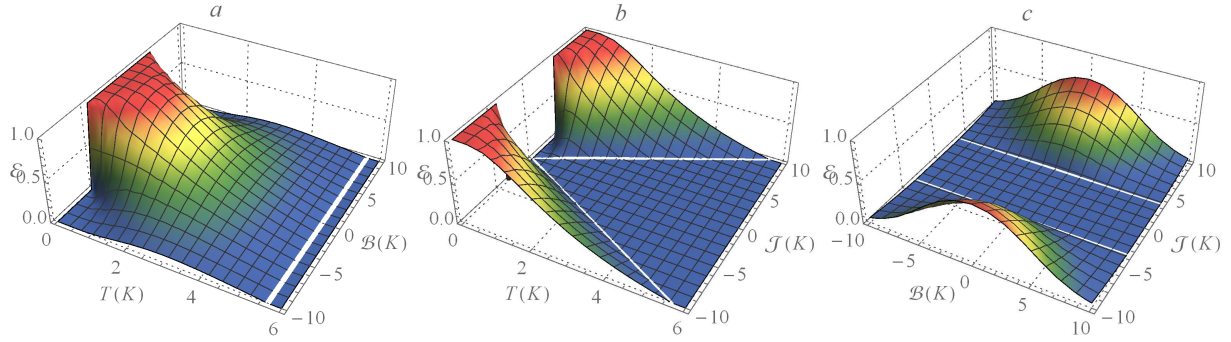


Figura 2.16: Emaranhamento do modelo XX : (a) $\mathcal{J} = 10K$, (b) $\mathcal{B} = 2K$ e (c) $T = 2K$.

2.3.5 Modelo XXZ

A medida de emaranhamento do modelo XXZ é obtida da equação (2.50) por substituição da função partição (2.39). Com algumas simplificações, obtemos

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{|\sinh(\frac{\mathcal{J}}{2T})| - e^{\frac{\mathcal{J}_z}{2T}}}{\cosh(\frac{\mathcal{B}}{T}) e^{\frac{\mathcal{J}_z}{2T}} + \cosh(\frac{\mathcal{J}}{2T})} \right]. \quad (2.53)$$

Como no modelo XX , o emaranhamento no modelo XXZ se comporta de 3 maneiras distintas de acordo com a relação entre $|\mathcal{B}|$ e \mathcal{J} . De fato, neste modelo, as três situações de campo mencionadas anteriormente dependem de como $|\mathcal{B}|$ é comparado a uma combinação das constantes de troca, \mathcal{J} e \mathcal{J}_z . A análise do autovalor λ_4 mostrou que este modelo, diferentemente do que ocorre no modelo XXX , apresenta emaranhamento na fase ferromagnética se e somente se $\mathcal{J}_z < \mathcal{J}$, como veremos mais adiante.

Antiferromagnético

Para o caso antiferromagnético, as situações de campo fraco, médio e forte se assemelham ao modelo XX , mas agora dependem da combinação de $|\mathcal{J}|$ e $|\mathcal{J}_z|$, conforme descrito abaixo:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}(T, \mathcal{J}, \mathcal{J}_z, \mathcal{B}) = \begin{cases} 1, & \text{se } |\mathcal{B}| < |\mathcal{J} + \mathcal{J}_z|/2 \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{2}, & \text{se } |\mathcal{B}| = |\mathcal{J} + \mathcal{J}_z|/2 \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > |\mathcal{J} + \mathcal{J}_z|/2 \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases}. \quad (2.54)$$

Com esta nomenclatura que estamos adotando, campo fraco, campo médio e campo forte (Figuras 2.17 e 2.18), o emaranhamento em $T = 0$ assume os valores 1, 1/2 e 0, respectivamente. Podemos comparar os resultados deste modelo com o modelo XX e

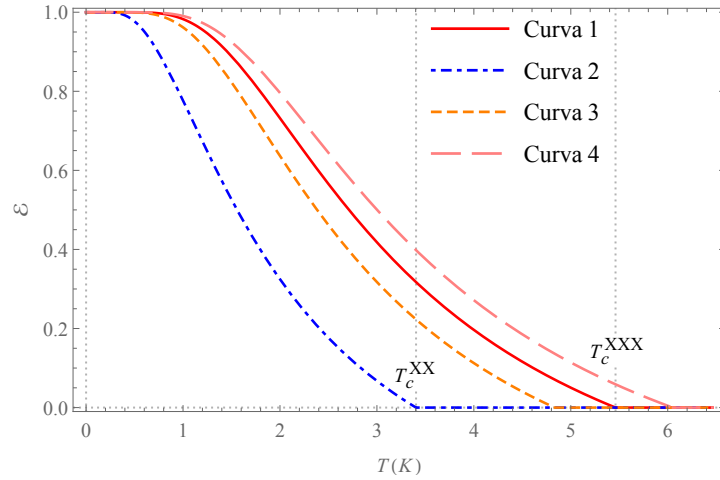


Figura 2.17: Emaranhamento térmico do modelo XXZ antiferromagnético. Todas as curvas são para $\mathcal{J} = -6K$ e $\mathcal{B} = 1K$. Curvas 1 e 2 correspondem aos modelos XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e XX ($\mathcal{J}_z = 0$). Curvas 3 e 4 correspondem ao modelo XXZ com \mathcal{J}_z igual a $-4K$ e $-8K$, respectivamente.

XXX , que também exibem emaranhamento na caso antiferromagnético. Primeiro vamos comparar este modelo XXZ com os modelos XX e XXX quando todos tiverem o mesmo \mathcal{J} , mas, para o modelo XXZ , veremos o que acontece quando \mathcal{J}_z é maior ou menor que \mathcal{J} . Essa comparação é mostrada na Figura 2.17 para o caso em que $\mathcal{B} = \pm 1K$. As linhas verticais representam as temperaturas críticas dos modelos XX e XXX respectivamente dados por $T_c^{XX} = -\mathcal{J}/[2 \ln(1 + \sqrt{2})]$ e $T_c^{XXX} = -\mathcal{J}/\ln(3)$. Quando ambos os modelos tiverem o mesmo \mathcal{J} em comum, se o modelo XXZ tiver $|\mathcal{J}_z| < |\mathcal{J}|$, a temperatura crítica do modelo XXZ é sempre menor que a temperatura crítica do modelo XXX e sempre maior que a temperatura crítica do modelo XX , ou seja, se prevalecer $|\mathcal{J}_z| < |\mathcal{J}| \Rightarrow T_c^{XX} < T_c^{XXZ} < T_c^{XXX}$ (Figura 2.17, curva 3). para $|\mathcal{J}_z| > |\mathcal{J}|$, sempre teremos $T_c^{XXZ} > T_c^{XXX} > T_c^{XX}$ (Curva 4). Observe que a Figura 2.17 é correspondente ao caso de campo fraco, mas tudo é repetido para os casos de campo médio e de campo forte (veja a Figura 2.18), já que, como vimos, a temperatura crítica não depende do campo (2.42).

Como vimos, no modelo XX , a existência de um \mathcal{J}_{min} para ter emaranhamento em uma determinada temperatura, no modelo XXZ também se apresenta esse mesmo comportamento. A diferença é que, no modelo XXZ , o \mathcal{J}_{min} depende tanto da temperatura quanto da constante de troca \mathcal{J}_z e é obtido da equação de emaranhamento (2.50), igualando a

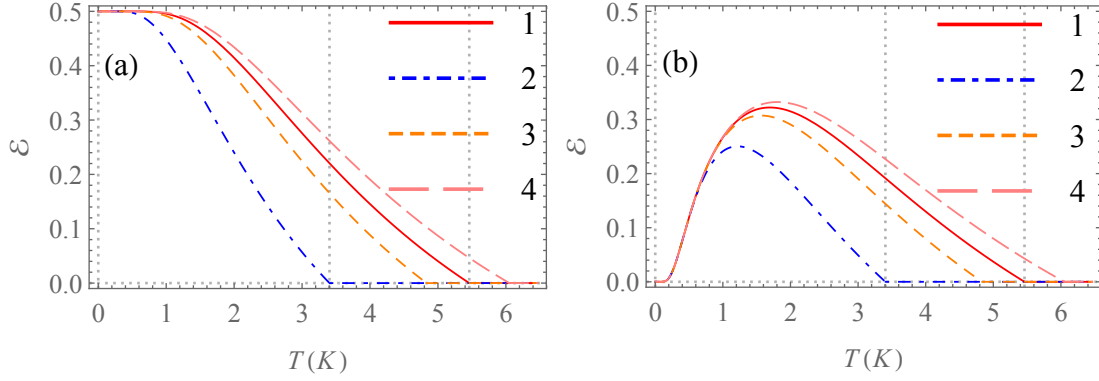


Figura 2.18: Emaranhamento térmico do modelo XXZ antiferromagnético com $\mathcal{J} = -6K$. As curvas 1 e 2 correspondem aos modelos XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e XX ($\mathcal{J}_z = 0$), respectivamente. As curvas 3 e 4 correspondem ao modelo XXZ com \mathcal{J}_z iguais a $-4K$ e $-8K$, respectivamente. (a) $\mathcal{B} = 6K$. (b) $\mathcal{B} = 7K$.

zero e resolvendo por \mathcal{J} . Desta forma, obtemos que o \mathcal{J}_{min} do modelo é

$$\mathcal{J}_{min} = -2T \operatorname{arcsinh} \left(e^{\frac{\mathcal{J}_z}{2T}} \right). \quad (2.55)$$

Esse mesmo resultado pode ser obtido como uma solução da equação (2.42). A equação (2.55) mostra que quanto maior o módulo \mathcal{J}_z menor o \mathcal{J}_{min} a uma dada temperatura T . Por outro lado, quanto maior a temperatura T , maior será o \mathcal{J}_{min} para um dado \mathcal{J}_z .

Na ausência de campo magnético, o sistema com temperatura mais baixa sempre exibe mais emaranhamento do que o sistema com temperatura mais alta, independente das constantes de troca, mas desde que o \mathcal{J}_{min} seja satisfeito, como vemos na Figura 2.19. Com o sistema submetido a um campo magnético, essa situação pode ser revertida para certos valores das constantes de troca. A Figura 2.20 mostra que, para certas constantes de troca, existe a possibilidade de que o emaranhamento seja maior em temperaturas mais altas do que em temperaturas mais baixas. Quanto maior o módulo \mathcal{J}_z , menor a chance de isso acontecer, ou seja, quanto maior o módulo de \mathcal{J}_z , maior o campo magnético para que possamos ter o emaranhamento a uma temperatura mais alta maior que o emaranhamento a uma temperatura mais baixa. Este efeito é mais relevante para baixas temperaturas. Em altas temperaturas, precisamos de campos mais intensos para que isso aconteça.

A Figura 2.21 apresenta alguns gráficos 3D da medida de emaranhamento (2.53) para o caso antiferromagnético. O gráfico (a) mostra como o emaranhamento aumenta com o aumento de \mathcal{J} e \mathcal{J}_z . Já o gráfico (b) mostra a não linearidade da temperatura crítica com

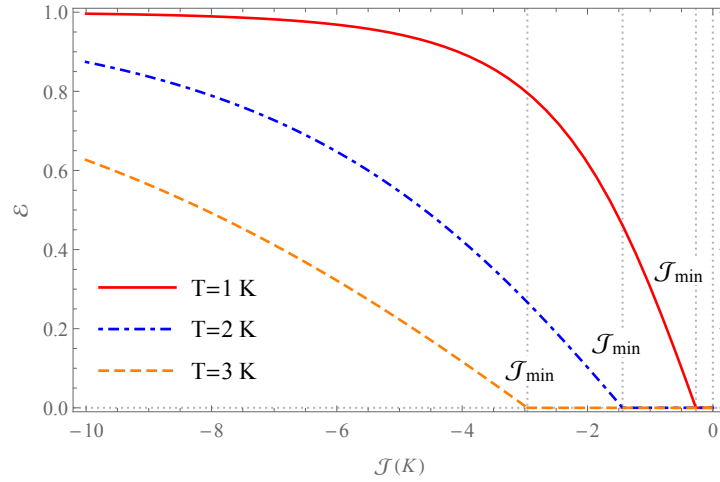


Figura 2.19: Emaranhamento térmico do modelo XXZ antiferromagnético em função da constante de troca \mathcal{J} para três temperaturas , $1K$, $2K$ e $3K$, na ausência de campo magnético e com $\mathcal{J}_z = -4K$.

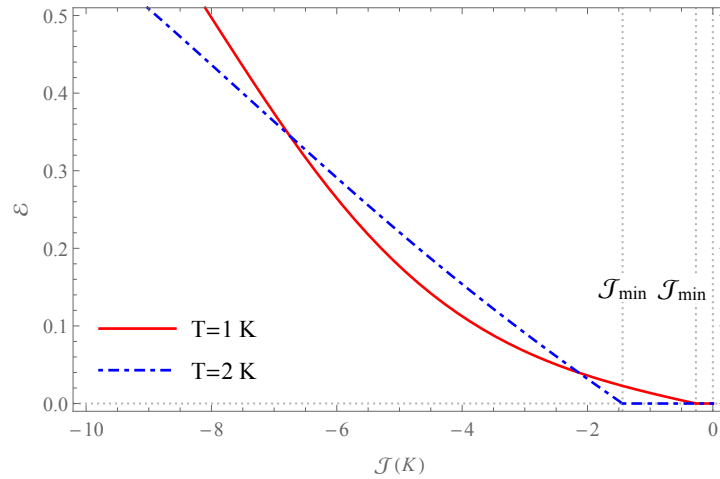


Figura 2.20: Emaranhamento térmico do modelo XXZ antiferromagnético em função da constante de troca \mathcal{J} para duas temperaturas, $1K$ e $2K$. As duas curvas são para $\mathcal{J}_z = -2K$ e $\mathcal{B} = \pm 6K$.

\mathcal{J} , enquanto (c) mostra relaciona o aumento do emaranhamento com o aumento de \mathcal{J}_z .

Ferromagnético

Para o modelo XXZ , ao contrário do modelo XXX , o sistema apresenta emaranhamento para algumas situações no caso ferromagnético. Da equação (2.53), teremos emaranhamento se $\mathcal{E} > 0$, o que, para o caso ferromagnético ($\mathcal{J} > 0$), implica que $\sinh(\mathcal{J}/2T) >$

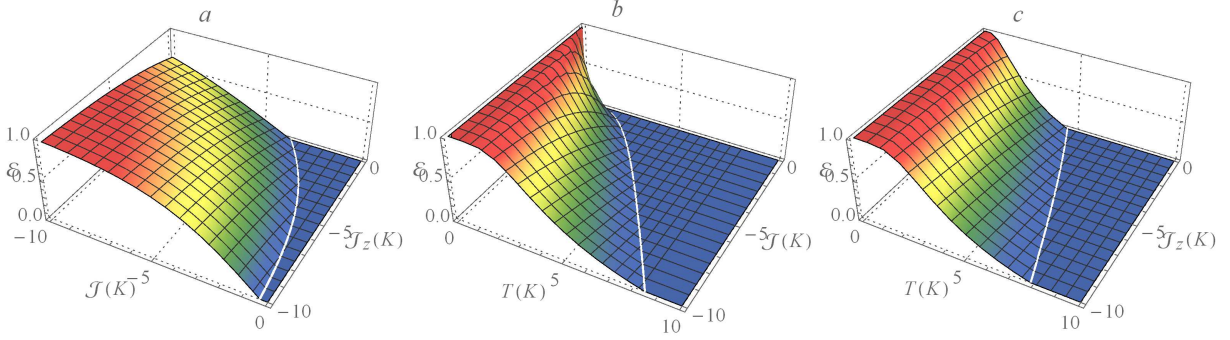


Figura 2.21: Emaranhamento térmico do modelo XXZ para $\mathcal{B} = 2K$ com (a) $T = 2K$, (b) $\mathcal{J}_z = -8K$ e (c) $\mathcal{J} = -8K$.

$e^{\mathcal{J}_z/2T}$. Assim, passando de exponencial para notação trigonométrica, temos

$$\sinh\left(\frac{\mathcal{J}}{2T}\right) - \sinh\left(\frac{\mathcal{J}_z}{2T}\right) > \cosh\left(\frac{\mathcal{J}_z}{2T}\right), \quad (2.56)$$

onde a equação acima nunca poderá ser satisfeita se $\mathcal{J}_z \geq \mathcal{J}$, já que o lado esquerdo ficaria negativo e $\cosh(\mathcal{J}_z/2T)$ é positivo. Essa situação foi analisada no gráfico do autovalor λ_4 (Figura 2.11). No caso ferromagnético, as situações de campo fraco, médio e forte são dadas por:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}(T, \mathcal{J} > \mathcal{J}_z, \mathcal{B}) = \begin{cases} 1, & \text{se } |\mathcal{B}| < (\mathcal{J} - \mathcal{J}_z)/2 \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{2}, & \text{se } |\mathcal{B}| = (\mathcal{J} - \mathcal{J}_z)/2 \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > (\mathcal{J} - \mathcal{J}_z)/2 \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases} \quad (2.57)$$

Neste modelo, quanto maior a diferença entre \mathcal{J} e \mathcal{J}_z , maior o emaranhamento, tal que, no limite de $\mathcal{J}_z \rightarrow 0$, temos o maior valor possível para o emaranhamento, que é quando o modelo XXZ tende ao modelo XX . Na contra-mão dessa situação, quanto maior \mathcal{J}_z , menor o emaranhamento, sendo que no limite de $\mathcal{J}_z \rightarrow \mathcal{J}$, o modelo XXZ tende ao modelo XXX , que é não emaranhado.

Como temos emaranhamento no dímero ferromagnético apenas para o caso em que $\mathcal{J}_z < \mathcal{J}$, a Figura 2.22 mostra que quanto maior \mathcal{J}_z , menor o emaranhamento que temos no sistema em qualquer uma das três situações de campo. O gráfico (a) da Figura 2.23 mostra o comportamento de emaranhamento em função de \mathcal{J} , onde \mathcal{J}_{min} que aumenta com a temperatura e, diferentemente do que aconteceu com o dímero antiferromagnético, aumenta com o aumento de \mathcal{J}_z . O gráfico (b) mostra que aumentando o campo \mathcal{B} de

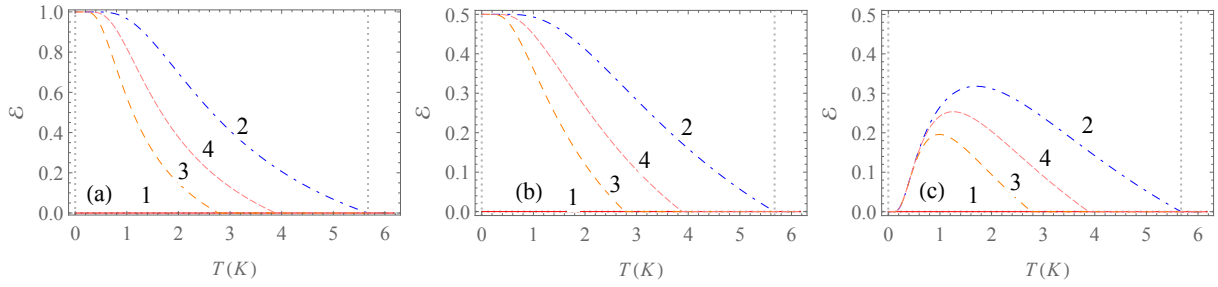


Figura 2.22: Emaranhamento térmico do modelo XXZ ferromagnético. Em todos os três gráficos temos: $\mathcal{J} = 10K$ e curva 1 com $\mathcal{J}_z = 11K$ para qualquer valor de campo. Curva 2 com $\mathcal{J}_z = 0K$ (modelo XX) e (a) $\mathcal{B} = 1K$, (b) $\mathcal{B} = 5K$, (c) $\mathcal{B} = 6K$. Curva 3 com $\mathcal{J}_z = 6K$ e (a) $\mathcal{B} = 1K$, (b) $\mathcal{B} = 2K$, (c) $\mathcal{B} = 3K$. Curva 4 com $\mathcal{J}_z = 4K$ e (a) $\mathcal{B} = 1K$, (b) $\mathcal{B} = 3K$, (c) $\mathcal{B} = 4K$.

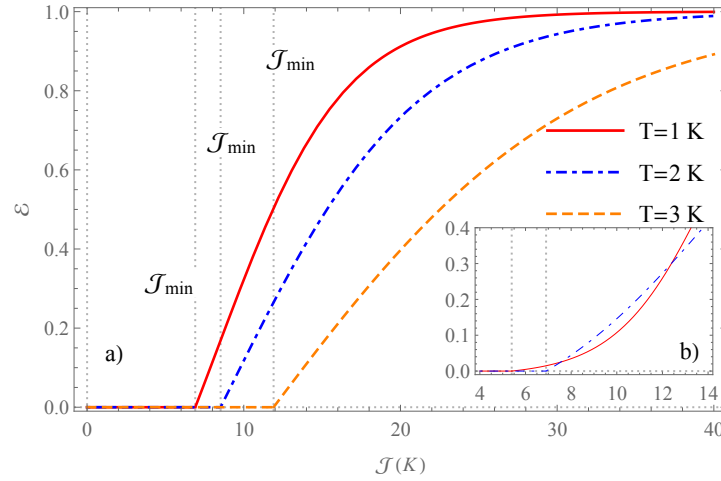


Figura 2.23: Emaranhamento térmico do modelo XXZ ferromagnético em função da constante de troca para três temperaturas, $1K$, $2K$ e $3K$, e $\mathcal{J}_z = 4K$. Os campos magnéticos são (a) $\mathcal{B} = 2K$ e (b) $\mathcal{B} = 5K$.

2 K para 5 K o emaranhamento com a temperatura mais alta torna-se maior que o emaranhamento com temperatura mais baixa em uma faixa específica de valores de \mathcal{J} . Os gráficos 3D da Figura 2.24 mostram o emaranhamento no modelo XXZ ferromagnético, tendo em (a) o emaranhamento em função das constantes de troca \mathcal{J} e \mathcal{J}_z , enquanto o gráfico (b) mostra o aumento da temperatura crítica e do emaranhamento com o aumento de \mathcal{J} , e, por sua vez, o gráfico (c) mostra que a temperatura crítica diminui com o aumento de \mathcal{J}_z .

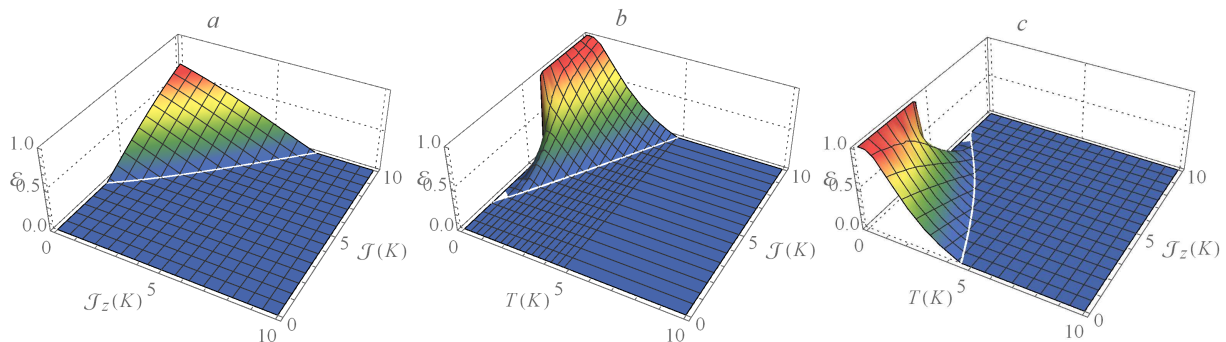


Figura 2.24: Emaranhamento térmico do modelo XXZ ferromagnético para $\mathcal{B} = 2K$ e com (a) $T = 2K$, (b) $J_z = 2K$ e (c) $J = 8K$

2.4 O efeito da inhomogeneidade do campo magnético no dímero de spin-1/2

Vimos nas seções anteriores que o modelo XXX não apresenta emaranhamento no caso ferromagnético, tanto na ausência de campo magnético como na presença de campo magnético homogêneo. Na sequência, vamos analisar a influência de um campo magnético não homogêneo, tal que \mathcal{H}_{mag} da equação (2.1) é dado por

$$\mathcal{H}_{mag} = \frac{1}{2}g\mu_B (B_{1z}\sigma_1^z + B_{2z}\sigma_2^z) \quad (2.58)$$

e o Hamiltoniano do dímero é agora dado por

$$\mathcal{H}_{XXZ} = -\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2\Delta B + J_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\delta B - J_z & 2J & 0 \\ 0 & 2J & -2\delta B - J_z & 0 \\ 0 & 0 & 0 & J_z - 2\Delta B \end{pmatrix}, \quad (2.59)$$

onde $\delta B = B_{1z} - B_{2z}$ e $\Delta B = B_{1z} + B_{2z}$. Os elementos da matriz densidade agora são dados por

$$\rho_{11} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{\mathcal{J}_z + 2\Delta B}{4T}} \quad (2.60a)$$

$$\rho_{22} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{e^{-\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \left[\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2} \cosh\left(\frac{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}}{2T}\right) + \delta B \sinh\left(\frac{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}}{2T}\right) \right]}{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}} \quad (2.60b)$$

$$\rho_{23} = \rho_{32} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\mathcal{J} e^{-\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \sinh\left(\frac{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}}{2T}\right)}{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}} \quad (2.60c)$$

$$\rho_{33} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{e^{-\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \left[\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2} \cosh\left(\frac{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}}{2T}\right) - \delta B \sinh\left(\frac{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}}{2T}\right) \right]}{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}} \quad (2.60d)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{\mathcal{J}_z - 2\Delta B}{4T}} \quad (2.60e)$$

com os demais elementos iguais a 0, isto é, $\rho_{12} = \rho_{21} = \rho_{13} = \rho_{31} = \rho_{24} = \rho_{42} = \rho_{34} = \rho_{43} = 0$. A função partição é dada por

$$\mathcal{Z} = 2e^{-\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \left[\cosh\left(\frac{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}}{2T}\right) + e^{\frac{\mathcal{J}_z}{2T}} \cosh\left(\frac{\Delta B}{2T}\right) \right]. \quad (2.61)$$

A transposta parcial e seus autovalores são dados nas equações (2.14) e (2.15), respectivamente. Da equação (2.49), obtemos a medida de emaranhamento do caso com inhomogeneidade do campo, dada por

$$\mathcal{E} = \max \left[0, \frac{\left| \frac{\mathcal{J} \sinh\left(\frac{\sqrt{\mathcal{J}^2 + \delta B^2}}{2T}\right)}{\sqrt{\mathcal{J}^2 + \delta B^2}} \right| - e^{\frac{\mathcal{J}_z}{2T}}}{\cosh\left(\frac{\sqrt{\delta B^2 + \mathcal{J}^2}}{2T}\right) + e^{\frac{\mathcal{J}_z}{2T}} \cosh\left(\frac{\Delta B}{2T}\right)} \right]. \quad (2.62)$$

Observe que este resultado é muito semelhante ao resultado de campo homogêneo da equação (2.53). É fácil verificar que quando $B_{1z} = B_{2z} = B$, temos $\delta B = 0$ e $\Delta B = 2B$, e consequentemente a equação (2.62) se reduz a equação (2.53). Observe que mesmo com a inhomogeneidade do campo magnético, o emaranhamento permanece inalterado diante de uma inversão dos campos magnéticos, já que a inhomogeneidade do campo, δB , aparece quadraticamente na equação.

2.4.1 Modelo XXX

No modelo XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$), igualando (2.62) a zero, obtemos

$$\left| \frac{\mathcal{J} \sinh\left(\frac{\sqrt{\mathcal{J}^2 + \delta\mathcal{B}^2}}{2T}\right)}{\sqrt{\mathcal{J}^2 + \delta\mathcal{B}^2}} \right| = e^{\frac{\mathcal{J}}{2T}}, \quad (2.63)$$

que não tem solução analítica mas mostra que a temperatura crítica desse modelo depende da diferença dos campos, δB . Os gráficos da Figura 2.25 ilustram o efeito da inhomogeneidade no modelo XXX . A Figura a) mostra que aumentar o grau da inhomogeneidade do campo, eleva a temperatura crítica, mas, ao mesmo tempo, reduz o valor máximo do emaranhamento, que nesse caso é em $T = 0$. A linha vertical pontilhada representa a temperatura crítica do modelo XXX com homogeneidade dos campos, $\delta\mathcal{B} = 0$. Em b) a inhomogeneidade do campo magnético é capaz de induzir emaranhamento no caso ferromagnético.

Na Figura 2.26, o gráfico a) mostra como T_c aumenta com o aumento de $\delta\mathcal{B}$, enquanto o gráfico b) mostra que o aumento de $\delta\mathcal{B}$ diminui o emaranhamento no caso antiferromagnético e aumenta no caso ferromagnético.

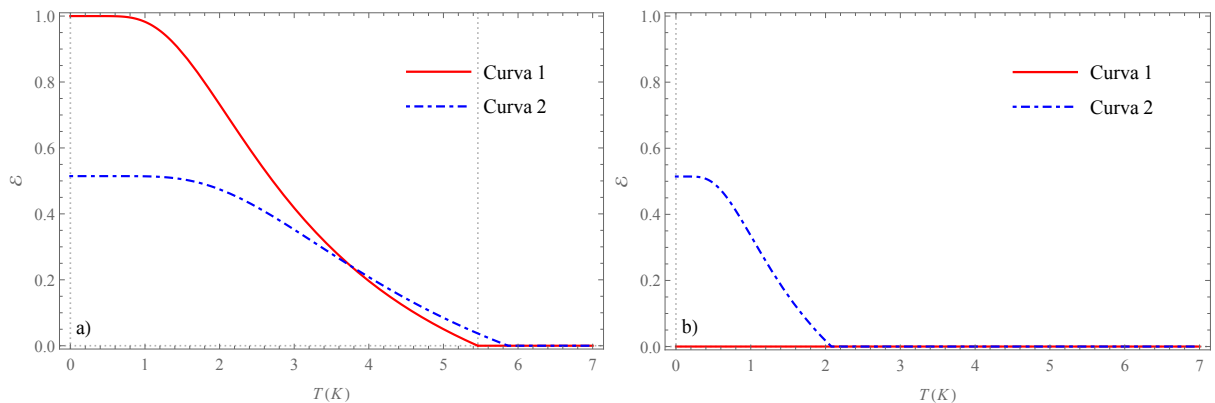


Figura 2.25: Emaranhamento térmico do modelo XXX : a) Caso antiferromagnético com $\Delta B = 2K$, $\mathcal{J} = -6K$ e as curvas 1 e 2 com $\delta\mathcal{B} = 0K$ e $\delta\mathcal{B} = 10K$, respectivamente. b) Caso ferromagnético com $\Delta B = 2K$, $\mathcal{J} = 6K$ e as curvas 1 e 2 com $\delta\mathcal{B} = 0K$ e $\delta\mathcal{B} = 10K$, respectivamente.

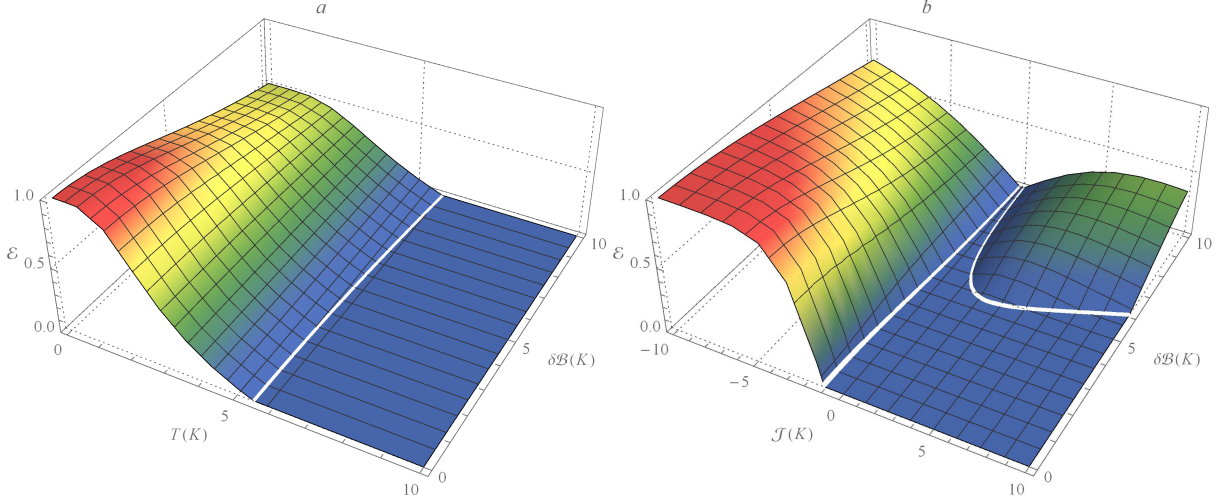


Figura 2.26: Emaranhamento térmico do modelo XXX : a) $\Delta\mathcal{B} = 4K$ com $\mathcal{J} = -6K$ e b) $\Delta\mathcal{B} = 0K$ com $T = 1K$.

2.4.2 Modelo XX

No modelo XX ($\mathcal{J}_z=0$), a temperatura crítica pode ser obtida analiticamente igualando a equação (2.62) a zero, resultando em

$$T_c^{XX} = \frac{\sqrt{\delta\mathcal{B}^2 + \mathcal{J}^2}}{2 \sinh^{-1} \left(\sqrt{\frac{\delta\mathcal{B}^2 + \mathcal{J}^2}{\mathcal{J}^2}} \right)}. \quad (2.64)$$

Isto significa que quanto maior for a diferença entre os campos, $|\delta\mathcal{B}|$, maior será a temperatura crítica. Isto pode ser visto na Figura 2.27, que compara o resultado com e sem campos iguais. No gráfico a), podemos ver que em certas situações o emaranhamento no caso de campo iguais ($\mathcal{E}_{XX}^{\delta\mathcal{B}=0}$) pode ser maior que o emaranhamento para campos distintos ($\mathcal{E}_{XX}^{\delta\mathcal{B}\neq 0}$), abaixo de certas temperaturas. Isso sempre ocorrerá quando o emaranhamento para campos iguais estiver na situação de campo fraco. No gráfico b), temos um caso em que o emaranhamento para campos iguais será, para qualquer temperatura, menor que o emaranhamento para campos distintos.

2.4.3 Modelo XXZ

Para campos iguais ($\delta\mathcal{B} = 0$) vimos que para o caso antiferromagnético, se $|\mathcal{J}| < |\mathcal{J}_z|$, temos $T_c^{XXX} > T_c^{XXZ} > T_c^{XX}$ (Figuras 2.17 e 2.18). Com a inhomogeneidade do campo ($\delta\mathcal{B} \neq 0$), mantém-se a condição $T_c^{XXX} > T_c^{XXZ} > T_c^{XX}$, mas acontece o mesmo efeito

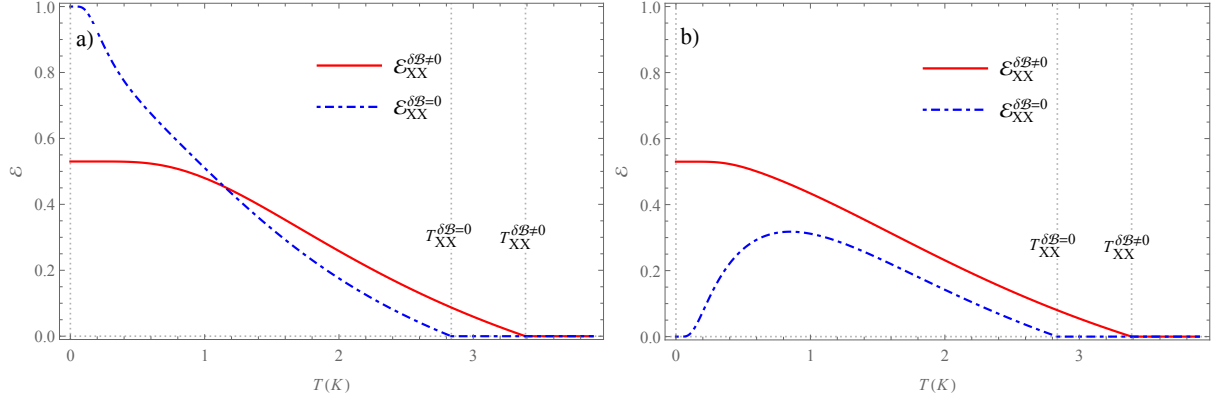


Figura 2.27: Emaranhamento térmico do modelo XX para $\mathcal{J} = 5K$ e $\delta\mathcal{B} = 8K$: a) $\Delta\mathcal{B} = 4K$ e b) $\Delta\mathcal{B} = 6K$.

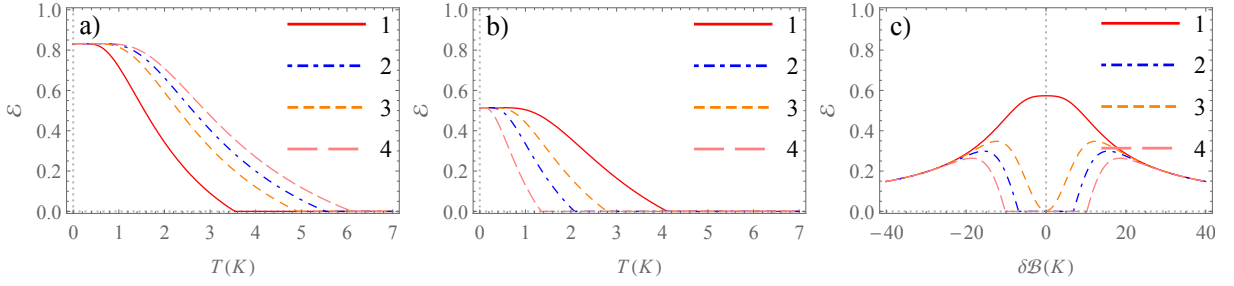


Figura 2.28: Emaranhamento térmico do modelo XXZ : a) Caso antiferromagnético com $\Delta\mathcal{B} = 2K$, $\mathcal{J} = -6K$ e $\delta\mathcal{B} = 4K$. As curvas 1 e 2 correspondem as modelos XX ($\mathcal{J}_z = 0K$) e XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$). As curvas 3 e 4 correspondem ao modelo XXZ com \mathcal{J}_z iguais a $-4K$ e $-8K$, respectivamente. b) e c) Caso ferromagnético com $\Delta\mathcal{B} = 2K$, $\mathcal{J} = 6K$. As curvas 1 e 2 correspondem as modelos XX ($\mathcal{J}_z = 0K$) e XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$), respectivamente. As curvas 3 e 4 correspondem ao modelo XXZ com \mathcal{J}_z iguais a $4K$ e $8K$, respectivamente. Foram usados em b) $\delta\mathcal{B} = 10K$ e c) $T = 1, 4K$.

do caso XXX , isto é, $\delta\mathcal{B}$ faz a temperatura crítica aumentar, diminuindo o valor máximo do emaranhamento em $T = 0$, conforme o gráfico a) da Figura 2.28. Vimos que, no caso ferromagnético com campo homogêneo, o modelo XXX não apresentava emaranhamento e que o modelo XXZ só apresentava emaranhamento se $\mathcal{J} > \mathcal{J}_z$ (Figura 2.22). Com inhomogeneidade do campo, tanto o modelo XXX quanto o modelo XXZ com $\mathcal{J}_z > \mathcal{J}$ podem apresentar emaranhamento, conforme o gráfico b) da Figura 2.28. Mas para que isso ocorra, não basta qualquer valor de $\delta\mathcal{B}$. O gráfico c) da Figura 2.28 mostra que existe um valor mínimo para que este efeito possa acontecer. Esse $\delta\mathcal{B}_{min}$ pode ser calculado igualando

\mathcal{E} a zero e resolvendo numericamente para $\delta\mathcal{B}$. Para os valores usados para construir o gráfico c) da Figura 2.28, e independentemente de qualquer valor $\Delta\mathcal{B}$, o valores mínimos de $\delta\mathcal{B}$ são $\delta\mathcal{B}_{min} = 6.8633K$ e $\delta\mathcal{B}_{min} = 10.2142K$ para as curvas 2 (XXX) e 4 (XXZ), respectivamente. Isto mostra que $\delta\mathcal{B}$ pode prolongar o emaranhamento para suportar temperaturas mais elevadas, tanto mais acima das temperaturas críticas na presença de campo magnético homogêneo quanto maior for $|\delta\mathcal{B}|$. Algo que chama muito a atenção é o fato de que para grandes $\delta\mathcal{B}$ todos os modelos convergem para uma só curva, como mostrado no gráfico c). Isso indica que a anisotropia perde o seu efeito na presença de grandes inhomogeneidades de campo magnético, tanto para o caso ferromagnético como para o antiferromagnético.

Capítulo 3

Dímeros de spin- $(\frac{1}{2}, 1)$

Estudaremos aqui as propriedades do emaranhamento de um dímero misto de spin-1 e spin-1/2 no modelo de Heisenberg [60]. Um modelo misto de spin-1/2 e spin-1 é o primeiro passo na análise de sistemas de spin misto, uma vez que envolve os possíveis valores mais baixos de spin e com menos estados [61–63]. Iniciaremos o estudo na ausência de campo magnético externo para ganhar familiaridade com o modelo. Determinamos analiticamente a temperatura crítica dos modelos XXX e XX e mostramos que quanto maior o termo de anisotropia, maior será a temperatura crítica e menor será o emaranhamento máximo. Na sequência, introduzimos um campo magnético uniforme e mostramos que este não altera a temperatura crítica do sistema, mas que para baixas intensidades de campo podemos potencializar o emaranhamento, tanto no modelo XXX quanto no XX . Concluímos o capítulo analisando os efeitos de um campo inhomogêneo em spins mistos, onde verificamos que tal campo induz emaranhamento no caso ferromagnético.

3.1 Modelo anisotrópico na presença de um campo magnético inhomogêneo

Nesta seção, vamos analisar o modelo de um dímero anisotrópico, o modelo XXZ , na presença de campo magnético inhomogêneo. O Hamiltoniano para o dímero anisotrópico de spin- $(\frac{1}{2}, 1)$ na presença de um campo magnético inhomogêneo é dado por:

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} (s_1^x S_2^x + s_1^y S_2^y) - \mathcal{J}_z s_1^z S_2^z - (\mathcal{B}_1 s_1^z + \mathcal{B}_2 S_2^z) , \quad (3.1)$$

onde s_1^α , $\alpha = x, y, z$, são os operadores associados ao spin-1/2, dados por $\vec{s}_1 = (s_1^x, s_1^y, s_1^z) = \frac{1}{2}(\sigma^x \otimes \mathbb{I}_3, \sigma^y \otimes \mathbb{I}_3, \sigma^z \otimes \mathbb{I}_3)$, sendo σ^α as matrizes de Pauli da equação (2.2). Já os operadores S_2^α são os operadores associados ao spin-1 dados por $S_2^\alpha = \mathbb{I}_2 \otimes S^\alpha$, onde

$$S^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

A forma matricial do Hamiltoniano (3.1) é dada por:

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} -\frac{\mathcal{B}_1}{2} - \mathcal{B}_2 - \frac{\mathcal{J}_z}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\mathcal{B}_1}{2} & 0 & -\frac{\mathcal{J}}{\sqrt{2}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\mathcal{B}_1}{2} + \mathcal{B}_2 + \frac{\mathcal{J}_z}{2} & 0 & -\frac{\mathcal{J}}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & -\frac{\mathcal{J}}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\mathcal{B}_1}{2} - \mathcal{B}_2 + \frac{\mathcal{J}_z}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\mathcal{J}}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{\mathcal{B}_1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\mathcal{B}_1}{2} + \mathcal{B}_2 - \frac{\mathcal{J}_z}{2} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Escolhendo a base $\{|-\frac{1}{2}, -1\rangle, |-\frac{1}{2}, 0\rangle, |-\frac{1}{2}, 1\rangle, |\frac{1}{2}, -1\rangle, |\frac{1}{2}, 0\rangle, |\frac{1}{2}, 1\rangle\}$, a matriz densidade e sua transposta parcial são dadas por

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & 0 & \rho_{24} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & \rho_{35} & 0 \\ 0 & \rho_{42} & 0 & \rho_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{53} & 0 & \rho_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{66} \end{pmatrix} \quad e \quad \rho^{T_p^{(2)}} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 & \rho_{24} & 0 \\ 0 & \rho_{22} & 0 & 0 & 0 & \rho_{35} \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{44} & 0 & 0 \\ \rho_{42} & 0 & 0 & 0 & \rho_{55} & 0 \\ 0 & \rho_{53} & 0 & 0 & 0 & \rho_{66} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

onde

$$\rho_{11} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{1}{2}\beta(3\mathcal{B}_1 - \gamma)} \quad (3.5a)$$

$$\rho_{22} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{1}{4}\beta(\omega + 2\mathcal{B}_1)} \frac{\Omega \cosh\left(\frac{\beta\Omega}{4}\right) - \omega \sinh\left(\frac{\beta\Omega}{4}\right)}{\Omega} \quad (3.5b)$$

$$\rho_{24} = \rho_{42} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{1}{4}\beta(\omega + 2\mathcal{B}_1)} \frac{2\sqrt{2}\mathcal{J} \sinh\left(\frac{\beta\Omega}{4}\right)}{\Omega} \quad (3.5c)$$

$$\rho_{33} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{1}{4}\beta(\gamma - 2\mathcal{B}_1)} \frac{\gamma \sinh\left(\frac{\beta\Gamma}{4}\right) + \Gamma \cosh\left(\frac{\beta\Gamma}{4}\right)}{\Gamma} \quad (3.5d)$$

$$\rho_{35} = \rho_{53} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{1}{4}\beta(\gamma - 2\mathcal{B}_1)} \frac{2\sqrt{2}\mathcal{J} \sinh\left(\frac{\beta\Gamma}{4}\right)}{\Gamma} \quad (3.5e)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{1}{4}\beta(\omega + 2\mathcal{B}_1)} \frac{\omega \sinh\left(\frac{\beta\Omega}{4}\right) + \Omega \cosh\left(\frac{\beta\Omega}{4}\right)}{\Omega} \quad (3.5f)$$

$$\rho_{55} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{\frac{1}{4}\beta(\gamma - 2\mathcal{B}_1)} \frac{\Gamma \cosh\left(\frac{\beta\Gamma}{4}\right) - \gamma \sinh\left(\frac{\beta\Gamma}{4}\right)}{\Gamma} \quad (3.5g)$$

$$\rho_{66} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\frac{1}{2}\beta(\omega + 3\mathcal{B}_1)} \quad (3.5h)$$

onde $\Omega = \sqrt{8\mathcal{J}^2 + \omega^2}$, $\omega = -\mathcal{J}_z - 2\mathcal{B}_1 + 2\mathcal{B}_2$, $\Gamma = \sqrt{8\mathcal{J}^2 + \gamma^2}$, $\gamma = -\mathcal{J}_z + 2\mathcal{B}_1 - 2\mathcal{B}_2$ e $\mathcal{Z} = e^{\frac{1}{4}\beta(\Gamma - \mathcal{J}_z - 2\mathcal{B}_2)} + e^{-\frac{1}{4}\beta(\Gamma + \mathcal{J}_z + 2\mathcal{B}_2)} + e^{\frac{1}{4}\beta(-\mathcal{J}_z + \Omega + 2\mathcal{B}_2)} + e^{-\frac{1}{4}\beta(\mathcal{J}_z + \Omega - 2\mathcal{B}_2)} + e^{-\frac{1}{2}\beta(-\mathcal{J}_z + \mathcal{B}_1 + 2\mathcal{B}_2)} + e^{\frac{1}{2}\beta(\mathcal{J}_z + \mathcal{B}_1 + 2\mathcal{B}_2)}$. Os autovalores da transposta parcial são dados por

$$\lambda_1 = \rho_{33} \quad (3.6a)$$

$$\lambda_2 = \rho_{44} \quad (3.6b)$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{2} \left(\rho_{22} + \rho_{66} + \sqrt{(\rho_{22} - \rho_{66})^2 + 4\rho_{35}\rho_{53}} \right) \quad (3.6c)$$

$$\lambda_4 = \frac{1}{2} \left(\rho_{11} + \rho_{55} + \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{55})^2 + 4\rho_{24}\rho_{42}} \right) \quad (3.6d)$$

$$\lambda_5 = \frac{1}{2} \left(\rho_{22} + \rho_{66} - \sqrt{(\rho_{22} - \rho_{66})^2 + 4\rho_{35}\rho_{53}} \right) \quad (3.6e)$$

$$\lambda_6 = \frac{1}{2} \left(\rho_{11} + \rho_{55} - \sqrt{(\rho_{11} - \rho_{55})^2 + 4\rho_{24}\rho_{42}} \right) \quad (3.6f)$$

Podemos fazer uma análise rápida das condições de emaranhamento usando o critério de Perez-Horodecki, que diz que se todos os autovalores da transposta parcial forem positivos, o sistema é não emaranhado. Os únicos autovalores com possibilidades de serem negativos são λ_5 e λ_6 . Dessa forma, se λ_5 e/ou λ_6 for negativo, implica que o sistema será emaranhado. Isto nos leva a seguinte condição:

$$(\rho_{24}^e)^2 > \rho_{11}\rho_{55} \quad (3.7a)$$

$$(\rho_{35}^e)^2 > \rho_{22}\rho_{66} \quad (3.7b)$$

Vamos agora calcular a distância entre os estados, e para isso devemos calcular

$$\rho_e - \rho_s = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & 0 & \rho_{24}^e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & \rho_{35}^e & 0 \\ 0 & \rho_{24}^e & 0 & \rho_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{35}^e & 0 & \rho_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{66} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & 0 & \rho_{24}^s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{33} & 0 & \rho_{35}^s & 0 \\ 0 & \rho_{24}^s & 0 & \rho_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \rho_{35}^s & 0 & \rho_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho_{66} \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

tal que

$$\begin{aligned} \mathcal{D}(\rho_e || \rho_s) &= \sqrt{\text{Tr}[(\rho_s - \rho_e)^2]} \\ &= \sqrt{2(\rho_{24}^e - \rho_{24}^s)^2 + 2(\rho_{35}^e - \rho_{35}^s)^2} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Colocando ρ_{35} em função de ρ_{24} , obtemos $\rho_{35} = \frac{\Omega \sinh(\frac{\beta\Gamma}{4}) \text{csch}(\frac{\beta\Omega}{4}) e^{\frac{1}{4}\beta(\gamma-\omega-4\mathcal{B}_1)}}{\Gamma} \rho_{24}$. Desta forma, a distância entre o estado emaranhado ρ_e e o estado separável ρ_s é dada por:

$$\mathcal{D}(\rho_e || \rho_s) = \sqrt{\frac{2 \left(\Gamma^2 + \Omega^2 \sinh^2 \left(\frac{\beta\Gamma}{4} \right) \text{csch}^2 \left(\frac{\beta\Omega}{4} \right) e^{\frac{1}{2}\beta(\gamma-\omega-4\mathcal{B}_1)} \right)}{\Gamma^2}} |\rho_{24}^e - \rho_{24}^s| \quad (3.10)$$

A medida de emaranhamento (2.17) é dada minimizando a distância (3.10). Para isso, observe o diagrama da Figura 3.1. Note que se $\rho_{24} < 0$, a distância será mínima se ρ_{24}^s for mínima, isto é, quando $\rho_{24}^s = -\sqrt{\rho_{11}\rho_{55}}$. Assim, a distância (3.9) torna-se $\mathcal{D}(\rho_e || \rho_s) = -\sqrt{\alpha} (\rho_{24}^e + \sqrt{\rho_{11}\rho_{55}})$, onde α é o argumento da raiz da equação (3.10). Se $\rho_{24} > 0$, a distância será mínima se ρ_{24}^s for máxima, isto é, quando $\rho_{24}^s = +\sqrt{\rho_{11}\rho_{55}}$. Assim, a distância (3.10) torna-se $\mathcal{D}(\rho_e || \rho_s) = \sqrt{\alpha} (\rho_{24}^e - \sqrt{\rho_{11}\rho_{55}})$. Essa distância pode ser generalizada para qualquer positividade ou negatividade de ρ_{24} , sendo dada por $\mathcal{D}(\rho_e || \rho_s) = \sqrt{\alpha} (|\rho_{24}^e| - \sqrt{\rho_{11}\rho_{55}})$. Assim, a medida de emaranhamento (2.17) é dada por $\mathcal{E}(\rho_e) = \mathcal{E}_0 \sqrt{\alpha} (|\rho_{24}^e| - \sqrt{\rho_{11}\rho_{55}})$, válida para um estado emaranhado ρ_e . Para um estado qualquer, a medida de emaranhamento é dada por

$$\mathcal{E}(\rho) = \max [0, \mathcal{E}_0 \sqrt{\alpha} (|\rho_{24}| - \sqrt{\rho_{11}\rho_{55}})] . \quad (3.11)$$

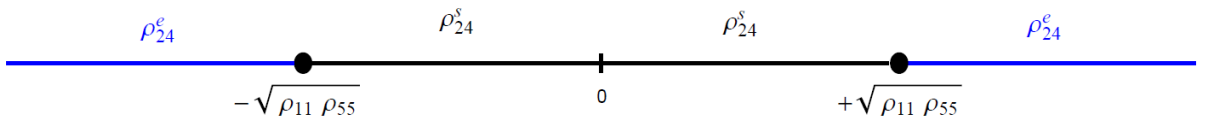


Figura 3.1: Diagrama da condição de emaranhamento.

Substituindo os elementos (3.5) e tomando $\mathcal{E}_0 = \sqrt{2}$, obtemos

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{2}{\mathcal{Z}} \sqrt{\frac{\left(\Gamma^2 + \Omega^2 \sinh^2 \left(\frac{\beta\Gamma}{4} \right) \operatorname{csch}^2 \left(\frac{\beta\Omega}{4} \right) e^{\frac{1}{2}\beta(\gamma-\omega-4\mathcal{B}_1)} \right)}{\Gamma^2}} \right. \\ \left. \times \left(2\sqrt{2}e^{\frac{1}{4}\beta(2\mathcal{B}_1+\omega)} \left| \frac{\mathcal{J} \sinh \left(\frac{\beta\gamma}{4} \right)}{\gamma} \right| \right. \right. \\ \left. \left. - \sqrt{\frac{e^{\frac{1}{4}\beta(4\mathcal{B}_1-\gamma)} \left(\Gamma \cosh \left(\frac{\beta\Gamma}{4} \right) - \gamma \sinh \left(\frac{\beta\Gamma}{4} \right) \right)}{\Gamma}} \right) \right]. \quad (3.12)$$

Na sequência, vamos analisar primeiramente alguns casos particulares e mais simples. Por fim, voltaremos a este caso mais geral.

3.2 Análise do emaranhamento na ausência de campo magnético

3.2.1 Modelo XXX

Fazendo $\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$ na equação (3.12), obtemos

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{2\sqrt{2}e^{\frac{3\mathcal{J}}{4T}} \left| \sinh \left(\frac{3\mathcal{J}}{4T} \right) \right| - \sqrt{3}e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} \sqrt{e^{-\frac{\mathcal{J}}{2T}} + 2e^{\frac{\mathcal{J}}{T}}}}{6e^{\frac{3\mathcal{J}}{2T}} + 3} \right]. \quad (3.13)$$

Para analisar a temperatura crítica deste modelo, devemos considerar a situação antiferromagnética e a ferromagnética separadamente. Igualando o numerador da equação (3.13) a zero e considerando $\mathcal{J} < 0$, obtemos $7e^{\frac{3\mathcal{J}}{2T}} + 4e^{\frac{3\mathcal{J}}{T}} = 2$. Fazendo $x = e^{\frac{3\mathcal{J}}{2T}}$, temos duas soluções para x : $x = -2$ e $x = 1/4$. A solução para $x < 0$ não resulta em solução real para a temperatura. Assim, com $x = 1/4$ obtemos a temperatura crítica do modelo XXX para um dímero de spin-(1/2, 1) na ausência de campo, dada por

$$T_c^{XXX} = -\frac{3\mathcal{J}}{4 \ln(2)}. \quad (3.14)$$

Observe que a temperatura crítica do dímero de spin-(1/2, 1) é sempre maior que a temperatura crítica do dímero de spin-1/2. Se tomarmos $\mathcal{J} = -1K$, recuperaremos o mesmo resultado obtido em [64, 65]. Se, agora, igualarmos o numerador da equação (3.13) a zero e considerarmos $\mathcal{J} > 0$, encontraremos a mesma equação para ser resolvida, mas que agora não terá solução real e nem positiva para T . Isto significa que este modelo XXX

não apresenta emaranhamento no caso ferromagnético, assim como o modelo XXX de spin-1/2.

3.2.2 Modelo XX

Tomando a equação (3.12) com $\mathcal{J}_z = 0K$, obtemos a medida de emaranhamento para o modelo XX , dada por

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \sqrt{2} \frac{\left| \sinh \left(\frac{\mathcal{J}}{\sqrt{2}T} \right) \right| - \sqrt{\cosh \left(\frac{\mathcal{J}}{\sqrt{2}T} \right)}}{1 + 2 \cosh \left(\frac{\mathcal{J}}{\sqrt{2}T} \right)} \right], \quad (3.15)$$

cuja temperatura crítica é

$$T_c^{XX} = \frac{\pm \mathcal{J}}{\sqrt{2} \cosh^{-1} \left(\frac{1}{2} (1 + \sqrt{5}) \right)} \begin{cases} - \text{ se } \mathcal{J} < 0 \\ + \text{ se } \mathcal{J} > 0 \end{cases}. \quad (3.16)$$

Isto significa que este modelo exibe emaranhamento tanto no caso ferromagnético quanto no caso antiferromagnético, sendo simétricos com relação a \mathcal{J} , isto é, $\mathcal{E}_{XX}(\mathcal{J}) = \mathcal{E}_{XX}(-\mathcal{J})$.

3.2.3 Modelo XXZ

O caso anisotrópico é obtido, na ausência de campo magnético, tomando-se $\mathcal{B} = 0$ na equação (3.12). Dessa forma, a medida de emaranhamento torna-se

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{4 \left| \frac{\mathcal{J} \sinh \left(\frac{\xi}{4T} \right)}{\xi} \right| - \sqrt{2} e^{\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \sqrt{e^{\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \left(\frac{\mathcal{J}_z \sinh \left(\frac{\xi}{4T} \right)}{\xi} + \cosh \left(\frac{\xi}{4T} \right) \right)}}{2 \cosh \left(\frac{\xi}{4T} \right) + e^{\frac{3\mathcal{J}_z}{4T}}} \right], \quad (3.17)$$

onde $\xi = \sqrt{8\mathcal{J}^2 + \mathcal{J}_z^2}$. No caso anisotrópico, a temperatura crítica não pode ser obtida analiticamente, mas podemos estudá-la numericamente e comparar com os outros modelos. O gráfico a) da Figura 3.2 mostra que, para o caso antiferromagnético na ausência de campo magnético, o modelo com menor temperatura crítica é o modelo XX (Curva 4), mas que por sua vez é o que apresenta o maior valor de emaranhamento em $T = 0$, diferentemente do que ocorre no dímero de spin-1/2 que mantém o mesmo valor máximo nos três modelos. No modelo XXZ (Curvas 1 e 2), sua temperatura crítica depende de \mathcal{J}_z . Se $|\mathcal{J}_z| < |\mathcal{J}|$, as temperaturas críticas obedecem à seguinte desigualdade: $T_c^{XX} < T_c^{XXZ} < T_c^{XXX}$. Ao

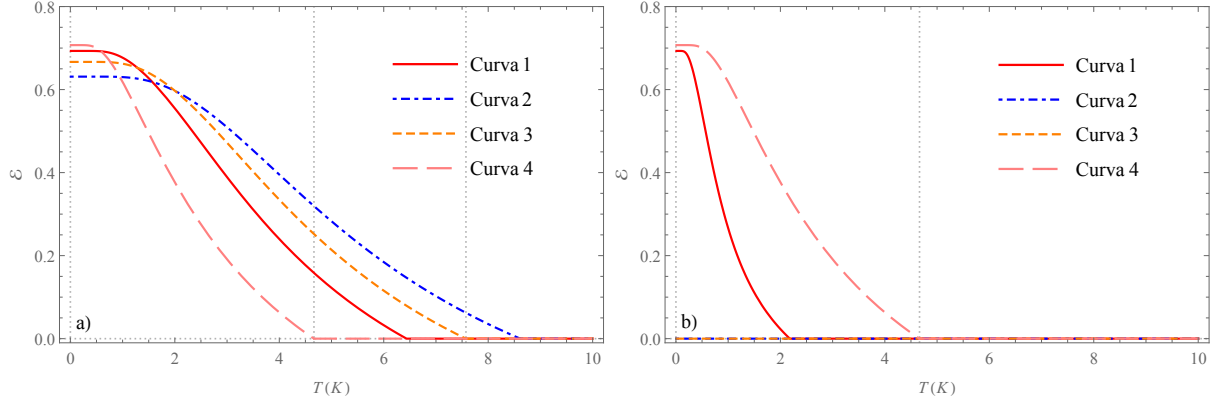


Figura 3.2: Comparação entre o emaranhamento térmico dos modelos XXX , XX e XXZ na ausência de campo. Em a) temos o caso antiferromagnético, com $\mathcal{J} = -7K$. As curvas 1 e 2 representam o modelo XXZ com $\mathcal{J}_z = -4K$ e $\mathcal{J}_z = -10K$, respectivamente. A curva 3 representa o modelo XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e a curva 4 representa o modelo XX ($\mathcal{J}_z = 0$). Em b) temos o caso ferromagnético, com $\mathcal{J} = 7K$. Curva 1 e 2 representam o modelo XXZ com $\mathcal{J}_z = 4K$ e $\mathcal{J}_z = 10K$, respectivamente. A curva 3 representa o modelo XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e a curva 4 representa o modelo XX ($\mathcal{J}_z = 0$).

mesmo tempo, o valor máximo do emaranhamento apresenta uma ordenamento inverso ao da temperatura crítica, isto é, $\mathcal{E}_{XX}^{T \rightarrow 0} > \mathcal{E}_{XXZ}^{T \rightarrow 0} > \mathcal{E}_{XXX}^{T \rightarrow 0}$, onde $\mathcal{E}_{XX}^{T \rightarrow 0} = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e $\mathcal{E}_{XXX}^{T \rightarrow 0} = \frac{2}{3}$. Para a situação em que $|\mathcal{J}_z| > |\mathcal{J}|$, a temperatura crítica aumenta, de modo que $T_c^{XXXZ} > T_c^{XXX}$, mas com $\mathcal{E}_{XXZ}^{T \rightarrow 0} < \mathcal{E}_{XXX}^{T \rightarrow 0}$. Podemos concluir que, no caso antiferromagnético, aumentar $|\mathcal{J}_z|$ faz aumentar T_c e ao mesmo tempo diminuir $\mathcal{E}_{XXZ}^{T \rightarrow 0}$. O gráfico b) da Figura 3.2 representa o caso ferromagnético ($\mathcal{J}^s > 0$). Nesse caso, o modelo XXZ só apresenta emaranhamento se $\mathcal{J}_z < \mathcal{J}$. Observe que o modelo XXX (Curva 3) e o modelo XXZ com $\mathcal{J}_z > \mathcal{J}$ (Curva 2) não apresentam emaranhamento. Diferentemente do caso antiferromagnético, diminuir \mathcal{J}_z faz aumentar T_c^{XXXZ} e também $\mathcal{E}_{XXZ}^{T \rightarrow 0}$, atingindo seu valor máximo quando $\mathcal{J}_z \rightarrow 0$.

3.3 Análise do emaranhamento na presença de campo magnético uniforme

3.3.1 Modelo XXX

Fazendo $\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$ na equação (3.12) e considerando $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = \mathcal{B}$, obtemos a medida de emaranhamento no modelo XXX na presença de um campo magnético uniforme:

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{2\sqrt{2}e^{\frac{8\mathcal{B}}{4T}} \sqrt{e^{-\frac{2\mathcal{B}}{T}} + 1} \left(2\sqrt{2}e^{\frac{3\mathcal{J}}{4T}} |\sinh\left(\frac{3\mathcal{J}}{4T}\right)| - \sqrt{3}e^{\mathcal{J}/T} \sqrt{e^{-\frac{\mathcal{J}}{2T}} + 2e^{\mathcal{J}/T}} \right)}{3 \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left(e^{\frac{3\mathcal{J}}{2T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}+4\mathcal{B}}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} \right)} \right] \quad (3.18)$$

Observe que o termo entre parênteses do numerador da equação (3.18) é idêntico ao numerador da equação (3.13), isto é, $T_c^{XXX} = -\frac{3\mathcal{J}}{4\ln(2)}$. Logo, se igualarmos a zero, obtemos a mesma temperatura crítica do modelo XXX na ausência de campo, dada na equação (3.14). Isto significa que a temperatura crítica, para o caso de campo uniforme, não depende do campo magnético. A equação (3.18) mostra que o campo magnético também não induz emaranhamento no caso ferromagnético, onde continuamos com emaranhamento apenas no caso antiferromagnético. Mais adiante faremos uma comparação com os outros modelos. Além disso, temos também:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}_{XXX}(T, \mathcal{J}, \mathcal{B}) = \begin{cases} \frac{2}{3}, & \text{se } \mathcal{B} = 0 \quad \rightarrow \text{Ausência de campo} \\ \frac{2\sqrt{2}}{3}, & \text{se } |\mathcal{B}| < \frac{3|\mathcal{J}|}{2} \quad \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{\sqrt{2}}{3}, & \text{se } |\mathcal{B}| = \frac{3|\mathcal{J}|}{2} \quad \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > \frac{3|\mathcal{J}|}{2} \quad \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases} \quad (3.19)$$

Observe que para campo fraco ($|\mathcal{B}| < \frac{|\mathcal{J}|}{\sqrt{2}}$) temos uma elevação do valor da medida de emaranhamento em $T = 0$ por um fator multiplicativo de $\sqrt{2}$ (ver gráfico a) da Figura 3.3), com relação à medida de emaranhamento na ausência de campo. Isso não é algo exclusivo do modelo XXX , e como veremos a seguir, também ocorre nos modelos XX e XXZ .

3.3.2 Modelo XX

Considerando $\mathcal{J}_z = 0K$ e $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = \mathcal{B}$ na equação (3.12), obtemos a medida de emaranhamento para o modelo XX na presença de campo magnético uniforme:

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{e^{\frac{\mathcal{B}}{2T}} \sqrt{e^{-\frac{2\mathcal{B}}{T}} + 1} \left(\left| \sinh \left(\frac{\sqrt{\mathcal{J}^2}}{\sqrt{2T}} \right) \right| - \sqrt{\cosh \left(\frac{\mathcal{J}}{\sqrt{2T}} \right)} \right)}{\cosh \left(\frac{\mathcal{B}}{2T} \right) \left(2 \cosh \left(\frac{\mathcal{J}}{\sqrt{2T}} \right) + 2 \cosh \left(\frac{\mathcal{B}}{T} \right) - 1 \right)} \right], \quad (3.20)$$

Novamente vemos que o numerador da equação (3.15) é igual aos termos entre parênteses do numerador da equação (3.20), mostrando que o campo magnético também não influencia na temperatura crítica deste modelo. O gráfico b) da Figura 3.3 mostra o comportamento da medida de emaranhamento na várias situações de campo, dadas por:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}_{XX}(T, \mathcal{J}, \mathcal{B}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}, & \text{se } \mathcal{B} = 0 \rightarrow \text{Ausência de campo} \\ 1, & \text{se } |\mathcal{B}| < \frac{|\mathcal{J}|}{\sqrt{2}} \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{2}, & \text{se } |\mathcal{B}| = \frac{|\mathcal{J}|}{\sqrt{2}} \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > \frac{|\mathcal{J}|}{\sqrt{2}} \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases}. \quad (3.21)$$

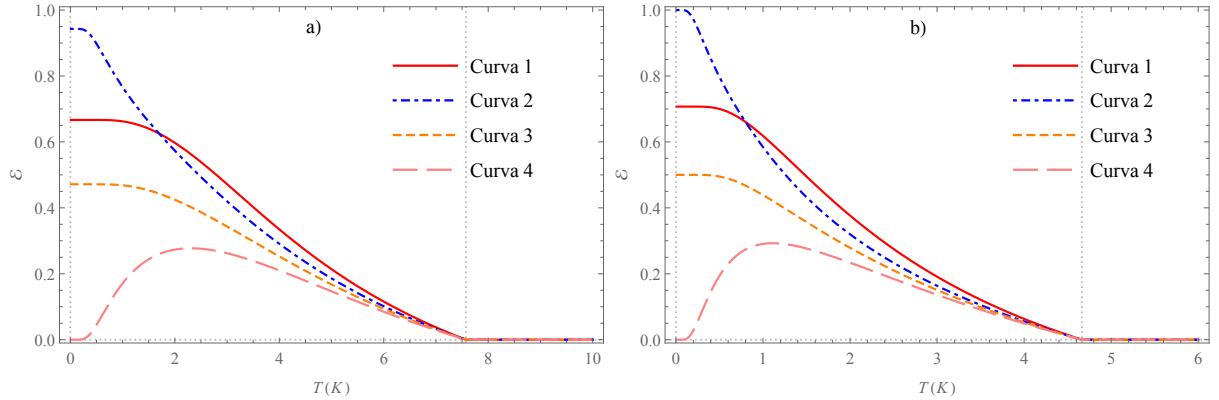


Figura 3.3: Modelos XXX e XX com $\mathcal{J} = -7K$ na presença de campo magnético uniforme. Em a) temos o modelo XXX com as curvas 1, 2, 3 e 4 com campos $\mathcal{B} = 0K$, $3 \times 6/2K$ (campo fraco), $3 \times 7/2K$ (campo médio) e $3 \times 8/2K$ (campo forte), respectivamente. Em b) temos o modelo XX com as curvas 1, 2, 3 e 4 com campos $\mathcal{B} = 0K$, $6/\sqrt{2}K$ (campo fraco), $7/\sqrt{2}K$ (campo médio) e $8/\sqrt{2}K$ (campo forte), respectivamente.

3.3.3 Modelo XXZ

Para o caso anisotrópico, basta tomar $\mathcal{B}_2 = \mathcal{B}_1 = \mathcal{B}$ na equação (3.12), obtendo

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{2\sqrt{e^{-\frac{2\mathcal{B}}{T}} + 1} \left(2\sqrt{2} \left| \frac{\mathcal{J} \sinh(\frac{\xi}{4T})}{\xi} \right| - e^{\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \sqrt{e^{\frac{\mathcal{J}_z}{4T}} \left(\frac{\mathcal{J}_z \sinh(\frac{\xi}{4T})}{\xi} + \cosh(\frac{\xi}{4T}) \right)} \right)}{e^{\frac{3\mathcal{J}_z}{4T}} \left(e^{-\frac{2\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} \right) + 2 \left(e^{-\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \cosh(\frac{\xi}{4T})} \right] \quad (3.22)$$

onde $\xi = \sqrt{\mathcal{J} + \mathcal{J}_z}$. Vemos que este modelo também não tem a temperatura crítica afetada pelo campo magnético uniforme, pois quando igualamos a equação (3.22) a zero ficamos com o termo entre parênteses do numerador sendo igual a zero, e este não depende do campo magnético.

Neste modelo de dímero de spin-(1/2, 1), o campo magnético na situação de campo fraco eleva o emaranhamento máximo de todos os modelos por um fator $\sqrt{2}$, diferentemente do dímero de spin-1/2, que não tem o valor máximo afetado pela presença de campo fraco. O gráfico a) da Figura 3.4 ilustra esta situação. Já o gráfico b) mostra como o campo magnético influencia o emaranhamento. Temos que, ao elevar o campo magnético a partir de zero, o emaranhamento aumenta com o aumento do campo, atinge um valor máximo e a partir de um certo valor de \mathcal{B} decai rapidamente. Quanto maior $|\mathcal{J} + \mathcal{J}_z|$, mais resistente

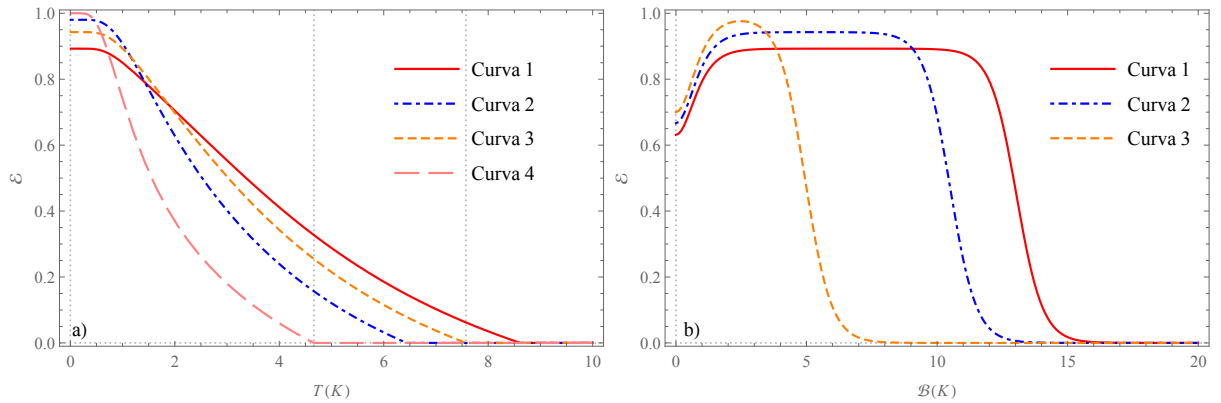


Figura 3.4: a) Comparação da medida de emaranhamento dos três modelos em função da temperatura para $\mathcal{J} = -7K$ e $\mathcal{B} = 3K$. As curvas 1 e 2 representam o modelo XXZ com \mathcal{J}_z igual a $-10K$ e $-4K$, respectivamente. As curvas 3 e 4 representam os modelos XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e XX ($\mathcal{J}_z = 0K$). b) Medida de emaranhamento em função do campo magnético para $\mathcal{J} = -7K$ e $T = 0,5K$. As curvas 1, 2 e 3 representam os modelos XXZ ($\mathcal{J}_z = -10K$), XXX ($\mathcal{J}_z = \mathcal{J}$) e XX ($\mathcal{J}_z = 0K$), respectivamente

ao aumento do campo será o emaranhamento, isto é, maior terá que ser o campo para termos uma diminuição abrupta do emaranhamento.

Nos três modelos tratados aqui, a inversão do sentido do campo magnético não altera o emaranhamento, ou seja, $\mathcal{E}(\mathcal{B}) = \mathcal{E}(-\mathcal{B})$ para as três equações da medida de emaranhamento, (3.18), (3.20) e (3.22). Vale lembrar que no final da Subseção 2.1.3 do Capítulo 2, pensávamos que o sentido do campo magnético, mesmo que uniforme, talvez pudesse influenciar no emaranhamento de dímeros de spins distintos, mas o que vemos até aqui é exatamente o contrário.

3.4 Análise dos efeitos do campo magnético inhomogêneo

Para dímeros de spin-1/2 vimos que nem mesmo a inversão de sentido de um campo magnético inhomogêneo alterava o emaranhamento. Aqui, para spin-(1/2, 1), veremos que a inversão de sentido de um campo magnético inhomogêneo altera o emaranhamento do sistema. O gráfico a) da Figura 3.5 mostra que a inhomogeneidade altera a temperatura crítica do sistema. Já o gráfico b) mostra que inverter o sentido do campo muda também a medida de emaranhamento. Observe que enquanto em um sentido aumentou a temperatura crítica, no outro já diminui. Apesar de a) e b) serem gráficos do modelo XXX , o mesmo acontece nos modelos XX e XXZ . O gráfico c) mostra que a inhomogeneidade do campo magnético induz um emaranhamento nos modelos ferromagnéticos, XXX e

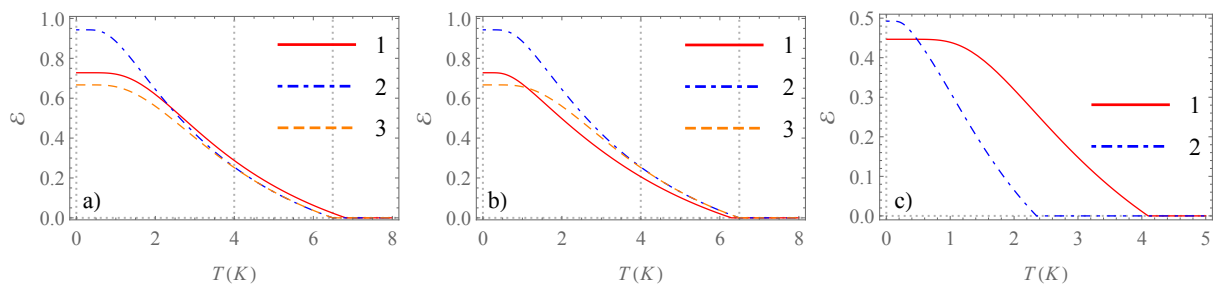


Figura 3.5: Efeito da inhomogeneidade do campo magnético. Em a) e b) temos o modelo XXX com $\mathcal{J} = -6K$. a) Curva 1: $\mathcal{B}_1 = -3K$ e $\mathcal{B}_2 = -8K$. Curva 2: $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = -3K$. Curva 3: $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = 0K$. b) Curva 1: $\mathcal{B}_1 = 3K$ e $\mathcal{B}_2 = 8K$. Curva 2: $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = 3K$. Curva 3: $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = 0K$. Em c), temos $\mathcal{B}_1 = -10K$ e $\mathcal{B}_2 = +10K$. Curva 1: Modelo XXX com $\mathcal{J} = 6K$. Curva 2: Modelo XXZ com $\mathcal{J} = 6K$ e $\mathcal{J}_z = 10K$.

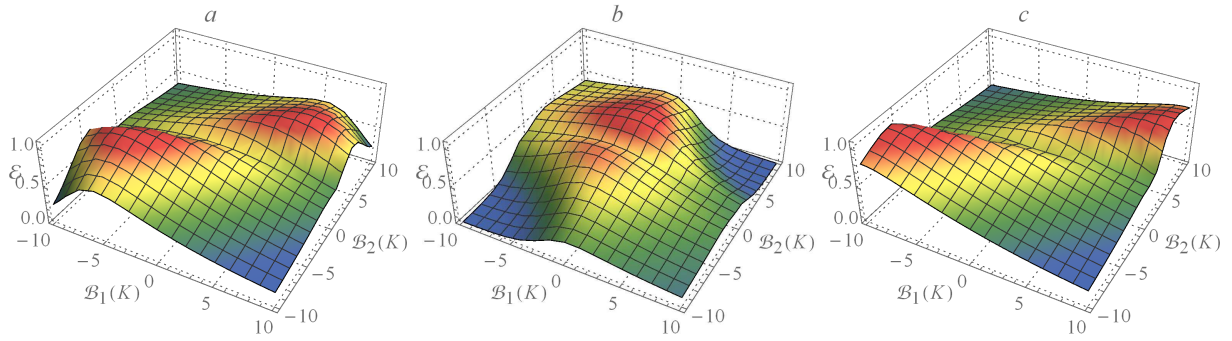


Figura 3.6: Efeito da inomogeneidade do campo magnético para $T = 1K$. a) Modelo XXX com $\mathcal{J} = -6K$, b) Modelo XX com $\mathcal{J} = -6K$ e c) Modelo XXZ com $\mathcal{J} = -6K$ e $\mathcal{J}_z = -10K$.

XXZ , mesmo se $\mathcal{J}_z > \mathcal{J}$. Esses efeitos serão maiores quanto maior for a inomogeneidade do campo.

Uma visão mais geral do efeito da inomogeneidade pode ser tomada na Figura 3.6, onde plotamos o gráfico da medida de emaranhamento \mathcal{E} em função dos campos \mathcal{B}_1 e \mathcal{B}_2 . Observe que o emaranhamento no modelo XXX , dado no gráfico a), atinge seu máximo quando os campos tem o mesmo sentido. Já o modelo XX , dado no gráfico b), apresenta neste quesito um comportamento oposto ao modelo XXX , isto é, tende a ter menor emaranhamento quando os campos estão no mesmo sentido. O modelo XXZ apresenta um comportamento semelhante ao do modelo XXX .

Capítulo 4

Trímero de spin- $\frac{1}{2}$

Neste capítulo, trataremos do emaranhamento, na presença de campo magnético externo, entre pares de um sistema de três spins- $1/2$ em duas configurações distintas. Inicialmente, investigaremos o emaranhamento entre pares vizinhos e analisaremos qual a influência de um terceiro spin neste par. Mostraremos que, em algumas situações especiais, seremos capazes de determinar a temperatura crítica analiticamente e em outras conseguiremos fazer uma análise gráfica que mostrará a influência do campo no emaranhamento desse par. A segunda parte deste capítulo é dedicada à análise e comparação do emaranhamento entre os pares que não são vizinhos e não interagem via constante de troca um com o outro. Por fim, vamos comparar nossos resultados com resultados experimentais das duas situações descritas anteriormente.

4.1 Trímero de spin- $1/2$ na presença de campo magnético

Recentemente, foi demonstrado que no anel de spin molecular, a célula de spin triangular ou outras configurações de rede de spin têm um importante potencial em computação e informação como um recurso de emaranhamento. Estados emaranhados de três spins mostraram possuir vantagens sobre os estados de dois spins em teletransporte quântico [66,67]. Neste trabalho, trataremos um sistema de três spins, na ausência de frustração [58], esquematizado na configuração a) e b) da Figura 4.1. Consideraremos que as constantes de troca entre os spins 1 e 2 e entre 2 e 3 são iguais e anisotrópicas do tipo XXZ , isto é,

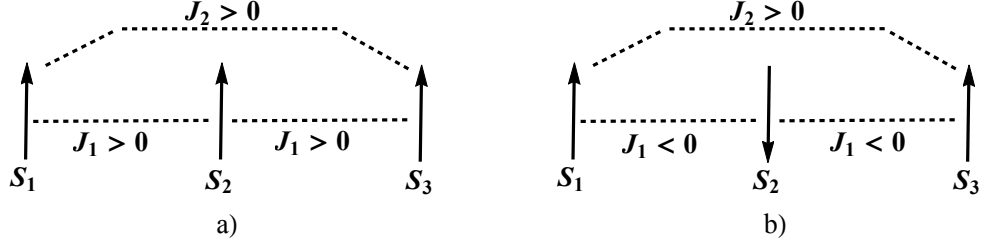


Figura 4.1: Esquema da configuração de spins do trímico.

a interação entre o par 1 e 2 é descrita por $-\mathcal{J}_1 (s_1^x s_2^x + s_1^y s_2^y) - \mathcal{J}_{z1} s_1^z s_2^z$.

O Hamiltoniano total destes três spins na presença de um campo magnético inhomogêneo é dado por

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\mathcal{J}_1 (s_1^x s_2^x + s_2^x s_3^x + s_1^y s_2^y + s_2^y s_3^y) - \mathcal{J}_{z1} (s_1^z s_2^z + s_2^z s_3^z) - \mathcal{J}_2 (s_1^x s_3^x + s_1^y s_3^y) - \mathcal{J}_{z2} s_1^z s_3^z \\ & - (\mathcal{B}_1 s_1^z + \mathcal{B}_2 s_2^z + \mathcal{B}_3 s_3^z) , \end{aligned} \quad (4.1)$$

onde $s_i^\alpha = \frac{1}{2} \sigma_i^\alpha$ ($\alpha = x, y, z$) e

$$\sigma_1 = (\sigma_1^x, \sigma_1^y, \sigma_1^z) = (\sigma^x \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2, \sigma^y \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2, \sigma^z \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2) \quad (4.2)$$

$$\sigma_2 = (\sigma_2^x, \sigma_2^y, \sigma_2^z) = (\mathbb{I}_2 \otimes \sigma^x \otimes \mathbb{I}_2, \mathbb{I}_2 \otimes \sigma^y \otimes \mathbb{I}_2, \mathbb{I}_2 \otimes \sigma^z \otimes \mathbb{I}_2)$$

$$\sigma_3 = (\sigma_3^x, \sigma_3^y, \sigma_3^z) = (\mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma^x, \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma^y, \mathbb{I}_2 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \sigma^z) \quad (4.3)$$

sendo $\mathbb{I}_2 = \mathbb{I}_{2 \times 2}$ a matriz identidade 2×2 . Consideraremos o caso de campo uniforme, com $\mathcal{B}_1 = \mathcal{B}_2 = \mathcal{B}_3 = \mathcal{B}$. O Hamiltoniano na forma matricial é dado por

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h_{11} - \frac{3\mathcal{B}}{2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\mathcal{J}_{z2}}{4} - \frac{\mathcal{B}}{2} & -\frac{\mathcal{J}_1}{2} & 0 & -\frac{\mathcal{J}_2}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\mathcal{J}_1}{2} & h_{33} - \frac{\mathcal{B}}{2} & 0 & -\frac{\mathcal{J}_1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\mathcal{B}}{2} + \frac{\mathcal{J}_{z2}}{4} & 0 & -\frac{\mathcal{J}_1}{2} & -\frac{\mathcal{J}_2}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\mathcal{J}_2}{2} & -\frac{\mathcal{J}_1}{2} & 0 & \frac{\mathcal{J}_{z2}}{4} - \frac{\mathcal{B}}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\mathcal{J}_1}{2} & 0 & h_{33} + \frac{\mathcal{B}}{2} & -\frac{\mathcal{J}_1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\mathcal{J}_2}{2} & 0 & -\frac{\mathcal{J}_1}{2} & \frac{\mathcal{B}}{2} + \frac{\mathcal{J}_{z2}}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & h_{11} + \frac{3\mathcal{B}}{2} \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

onde $h_{11} = -\frac{1}{4}(2\mathcal{J}_{z1} + \mathcal{J}_{z2})$ e $h_{33} = \frac{1}{4}(2\mathcal{J}_{z1} - \mathcal{J}_{z2})$. A base de vetores do Hamiltoniano (4.4) são $\{|---\rangle, |--+\rangle, | - + - \rangle, | - ++ \rangle, | + -- \rangle, | + - + \rangle, | + + - \rangle, | + ++ \rangle\}$, onde $|s_1 s_2 s_3\rangle$ é autoestado de s_1^z, s_2^z, s_3^z com correspondente autovalor da matriz (4.4).

Analisaremos aqui o emaranhamento entre pares, mais especificamente o emaranhamento nos pares 12 ($\mathcal{E}_{12} = \mathcal{E}_{23}$) e 13 (\mathcal{E}_{13}) das configurações a) e b) do esquema da Figura 4.1. O propósito é analisar como um terceiro spin influencia no emaranhamento do par e comparar com os resultados para pares isolados obtidos no Capítulo 2. Para estudar o emaranhamento térmico, primeiramente devemos obter os autovalores e autoestados do Hamiltoniano (4.4). Em seguida, vamos computar a densidade de estados do trímico e assim obter a matriz densidade reduzida dos referidos pares que queremos estudar. Após este procedimento, vamos calcular a medida de emaranhamento via distância entre estados. Para três spins-1/2, os autoestados são

$$\begin{aligned}
|\psi_1\rangle &= |---\rangle \\
|\psi_2\rangle &= |+++ \rangle \\
|\psi_3\rangle &= |+--\rangle - |- -+\rangle \\
|\psi_4\rangle &= |+-+\rangle - |- ++\rangle \\
|\psi_5\rangle &= |--+\rangle + (\omega + \theta)|-+-\rangle + |+-\rangle \\
|\psi_6\rangle &= |-++\rangle + (\omega + \theta)|+-+\rangle + |++-\rangle \\
|\psi_7\rangle &= |--+\rangle + (\omega - \theta)|-+-\rangle + |+-\rangle \\
|\psi_8\rangle &= |-++\rangle + (\omega - \theta)|+-+\rangle + |++-\rangle
\end{aligned} \tag{4.5}$$

e os correspondentes autovalores são dados por

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_1 &= \frac{1}{4}(-6\mathcal{B} - 2\mathcal{J}_{z1} - \mathcal{J}_{z2}) \\
\mathbb{E}_2 &= \frac{1}{4}(6\mathcal{B} - 2\mathcal{J}_{z1} - \mathcal{J}_{z2}) \\
\mathbb{E}_3 &= \frac{1}{4}(-2\mathcal{B} + 2\mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_{z2}) \\
\mathbb{E}_4 &= \frac{1}{4}(2(\mathcal{B} + \mathcal{J}_2) + \mathcal{J}_{z2}) \\
\mathbb{E}_5 &= \frac{1}{4}(-2\mathcal{B} - 2\theta\mathcal{J}_1 - \mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_{z1}) \\
\mathbb{E}_6 &= \frac{1}{4}(2\mathcal{B} - 2\theta\mathcal{J}_1 - \mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_{z1}) \\
\mathbb{E}_7 &= \frac{1}{4}(-2\mathcal{B} + 2\theta\mathcal{J}_1 - \mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_{z1}) \\
\mathbb{E}_8 &= \frac{1}{4}(2\mathcal{B} + 2\theta\mathcal{J}_1 - \mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_{z1})
\end{aligned} \tag{4.6}$$

onde $\theta = \frac{\sqrt{8\mathcal{J}_1^2 + (\mathcal{J}_2 + \mathcal{J}_{z1} - \mathcal{J}_{z2})^2}}{2\mathcal{J}_1}$ e $\omega = \frac{-\mathcal{J}_2 - \mathcal{J}_{z1} + \mathcal{J}_{z2}}{2\mathcal{J}_1}$. No equilíbrio térmico, a densidade de estados é descrita por

$$\rho(T) = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta\mathcal{H}}$$

$$= \mathcal{Z}^{-1} \sum_{k=1}^8 e^{-\beta \mathbb{E}_k} |\psi_k\rangle \langle \psi_k|, \quad (4.7)$$

cuja função partição é $\mathcal{Z} = \sum_{k=1}^8 e^{-\beta \mathbb{E}_k}$. Logo, dos autovetores (4.5), obtemos

$$\begin{aligned} \rho(T) &= \mathcal{Z}^{-1} (e^{-\beta \mathbb{E}_7} (| - + - \rangle (\omega - \theta) + | - - + \rangle + | + - - \rangle) (\langle - + - | (\omega - \theta) \\ &+ \langle - - + | + \langle + - - |) + e^{-\beta \mathbb{E}_5} (| - + - \rangle (\theta + \omega) + | - - + \rangle + | + - - \rangle) \\ &\times (\langle - + - | (\theta + \omega) + \langle - - + | + \langle + - - |) + e^{-\beta \mathbb{E}_8} (| + - + \rangle (\omega - \theta) + | - + + \rangle \\ &+ | + + - \rangle) (\langle + - + | (\omega - \theta) + \langle - + + | + \langle + + - |) + e^{-\beta \mathbb{E}_6} (| + - + \rangle (\theta + \omega) \\ &+ | - + + \rangle + | + + - \rangle) (\langle + - + | (\theta + \omega) + \langle - + + | + \langle + + - |) \\ &+ e^{-\beta \mathbb{E}_1} | - - - \rangle \langle - - - | + e^{-\beta \mathbb{E}_3} (| - - + \rangle - | + - - \rangle) (\langle - - + | - \langle + - - |) \\ &+ e^{-\beta \mathbb{E}_4} (| - + + \rangle - | + + - \rangle) (\langle - + + | - \langle + + - |) + e^{-\beta \mathbb{E}_2} | + + + \rangle \langle + + + |) \end{aligned} \quad (4.8)$$

Nas próximas seções, iremos calcular a medida de emaranhamento nos pares 12 (\mathcal{E}_{12}) e 13 (\mathcal{E}_{13}) em alguns casos especiais e em outros mais gerais.

4.2 Emaranhamento \mathcal{E}_{12}

Devemos agora calcular a matriz densidade reduzida, ρ_{12}^r tomando o traço parcial de ρ da equação (4.8) sobre o terceiro subespaço, isto é, $\rho_{12}^r = Tr_3(\rho) = \sum_{k_3=\{-,+\}} \langle k_3 | \rho | k_3 \rangle = \langle -_3 | \rho | -_3 \rangle + \langle +_3 | \rho | +_3 \rangle$. Com algumas simplificações, obtemos

$$\begin{aligned} \rho_{12}^r &= \mathcal{Z}^{-1} \left((e^{-\beta \mathbb{E}_1} + e^{-\beta \mathbb{E}_3} + e^{-\beta \mathbb{E}_5} + e^{-\beta \mathbb{E}_7}) |I\rangle \langle I| \right. \\ &+ (e^{-\beta \mathbb{E}_7} (\theta - \omega)^2 + e^{-\beta \mathbb{E}_5} (\theta + \omega)^2 + e^{-\beta \mathbb{E}_4} + e^{-\beta \mathbb{E}_6} + e^{-\beta \mathbb{E}_8}) |II\rangle \langle II| \\ &+ (e^{-\beta \mathbb{E}_7} (\omega - \theta) + e^{-\beta \mathbb{E}_8} (\omega - \theta) + e^{-\beta \mathbb{E}_5} (\theta + \omega) + e^{-\beta \mathbb{E}_6} (\theta + \omega)) |II\rangle \langle III| \\ &+ (e^{-\beta \mathbb{E}_7} (\omega - \theta) + e^{-\beta \mathbb{E}_8} (\omega - \theta) + e^{-\beta \mathbb{E}_5} (\theta + \omega) + e^{-\beta \mathbb{E}_6} (\theta + \omega)) |III\rangle \langle III| \\ &+ (e^{-\beta \mathbb{E}_8} (\theta - \omega)^2 + e^{-\beta \mathbb{E}_6} (\theta + \omega)^2 + e^{-\beta \mathbb{E}_3} + e^{-\beta \mathbb{E}_5} + e^{-\beta \mathbb{E}_7}) |III\rangle \langle III| \\ &+ (e^{-\beta \mathbb{E}_4} + e^{-\beta \mathbb{E}_6} + e^{-\beta \mathbb{E}_8} + e^{-\beta \mathbb{E}_2}) |IV\rangle \langle IV| \left. \right), \end{aligned} \quad (4.9)$$

sendo $|I\rangle = |-_1 -_2\rangle$, $|II\rangle = |-_1 +_2\rangle$, $|III\rangle = |+_1 -_2\rangle$ e $|IV\rangle = |+_1 +_2\rangle$. A matriz densidade reduzida do par 12 tem exatamente a forma da matriz densidade de dois spins-1/2 obtida

na equação (2.9), mas com os seguintes elementos não nulos:

$$\rho_{11} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(e^{-\beta\mathbb{E}_1} + e^{-\beta\mathbb{E}_3} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_7} \right) \quad (4.10a)$$

$$\rho_{22} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(e^{-\beta\mathbb{E}_7} (\theta - \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_5} (\theta + \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_8} \right) \quad (4.10b)$$

$$\rho_{23} = \rho_{32} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(e^{-\beta\mathbb{E}_7} (\omega - \theta) + e^{-\beta\mathbb{E}_8} (\omega - \theta) + e^{-\beta\mathbb{E}_5} (\theta + \omega) + e^{-\beta\mathbb{E}_6} (\theta + \omega) \right) \quad (4.10c)$$

$$\rho_{33} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(e^{-\beta\mathbb{E}_8} (\theta - \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_6} (\theta + \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_3} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_7} \right) \quad (4.10d)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_8} + e^{-\beta\mathbb{E}_2} \right) \quad (4.10e)$$

Devido à mesma forma da matriz densidade, teremos os mesmos tipos de autovalores da transposta parcial (2.15), cujo único com possibilidade de ser negativo é o autovalor λ_4 . Como vimos no Capítulo 2, equação (2.49), a medida de emaranhamento, é dada por $\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \mathcal{E}_0 \sqrt{2} \left(|\rho_{23}| - \sqrt{\rho_{11}\rho_{44}} \right) \right]$. O grande número de variáveis torna o estudo analítico bastante complicado. Por esse motivo, vamos fazer uma análise dos modelos XXX e XX , isto é, $\mathcal{J}_{zi} = \mathcal{J}_i$ e $\mathcal{J}_{zi} = 0$ ($i = 1, 2$), respectivamente. A constante de normalização é tomada igual a $\frac{1}{2\sqrt{2}}$ para assegurar que $1 \geq \mathcal{E} \geq 0$. Assim, a medida de emaranhamento é dada por

$$\mathcal{E}_{12} = \max \left[0, \frac{1}{2\mathcal{Z}} \left(\left| (e^{-\beta\mathbb{E}_7} + e^{-\beta\mathbb{E}_8}) (\omega - \theta) + (e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_6}) (\theta + \omega) \right| - \sqrt{(e^{-\beta\mathbb{E}_1} + e^{-\beta\mathbb{E}_3} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_7}) (e^{-\beta\mathbb{E}_2} + e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_8})} \right) \right] \quad (4.11)$$

4.2.1 Modelo XXX

Aqui vamos tomar $\mathcal{J}_{z1} = \mathcal{J}_1$, $\mathcal{J}_{z2} = \mathcal{J}_2$ e analisaremos cada uma das outras possibilidades separadamente.

Emaranhamento quando $\mathcal{J}_2 = 0$

Vamos analisar o sistema considerando um modelo XXX na ausência de interação por constante de troca no par 13, isto é, vamos considerar $\mathcal{J}_2 = 0$. Dessa forma, a equação (4.11) toma a forma

$$\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=0} = \max \left[0, \left(\left(e^{\frac{\beta}{T}} + 1 \right) \left| -2 + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} \right| \right) \right]$$

$$\begin{aligned}
& - \sqrt{\left(e^{\frac{2\mathcal{B}+3\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + 1 \right) \left(e^{\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{2\mathcal{B}+3\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} \right)} \\
& \div \left(2e^{-\frac{\mathcal{B}}{T}} \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left(e^{\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{4\mathcal{B}+3\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} \right) \right) \Bigg]. \quad (4.12)
\end{aligned}$$

Na ausência de campo magnético, a temperatura crítica é¹ $T_c \approx -2.72577\mathcal{J}_1$ para o caso antiferromagnético e não apresenta emaranhamento para o caso ferromagnético (Gráfico b) da Figura 4.2). Temos quatro comportamentos distintos para o emaranhamento conforme a intensidade do campo magnético, dados por

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=0}(T, \mathcal{J}_1, \mathcal{B}) = \begin{cases} \frac{3}{4}, & \text{se } \mathcal{B} = 0 \quad \rightarrow \text{Ausência de campo} \\ 1, & \text{se } |\mathcal{B}| < \frac{3|\mathcal{J}_1|}{2} \quad \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{2}, & \text{se } |\mathcal{B}| = \frac{3|\mathcal{J}_1|}{2} \quad \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > \frac{3|\mathcal{J}_1|}{2} \quad \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases} \quad (4.13)$$

e mostrados no gráfico a) da Figura 4.2. Diferentemente de dois spins-1/2 isolados, a temperatura crítica da equação (4.12) depende do campo, sendo tanto maior quanto maior for o campo magnético (subgráfico em a)). Outra característica deste emaranhamento é o fato da possibilidade do campo magnético aumentar o valor máximo da medida de emaranhamento máximo, o que também não ocorria nos dímeros de spin-1/2.

¹O resultado numérico exato é $T_c = \frac{\mathcal{J}_1}{2 \log\left(\frac{1}{12}\left(\sqrt[3]{647+36\sqrt{323}} + \sqrt[3]{647-36\sqrt{323}} - 1\right)\right)}$

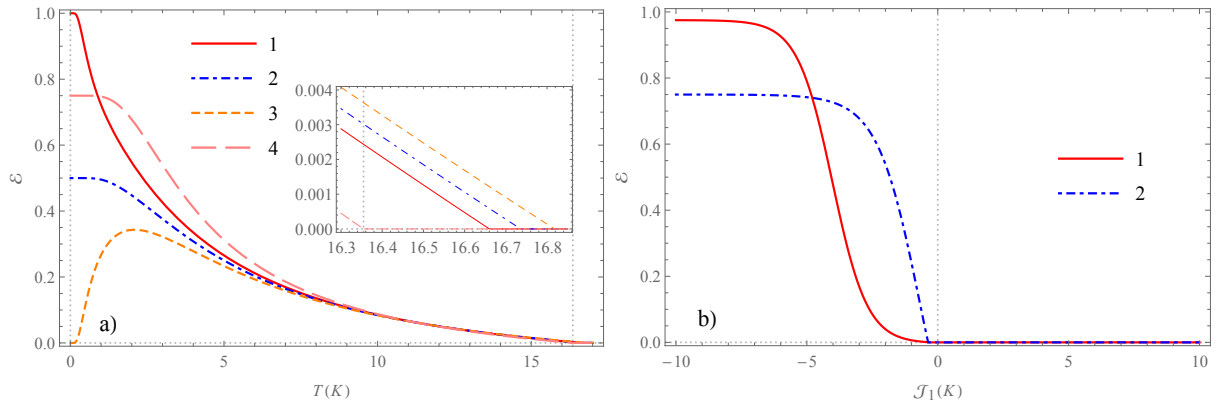


Figura 4.2: Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=0}$ com $\mathcal{J}_1 = -6K$. a) As curvas 1, 2, 3 e 4 são para $\mathcal{B} = 8K, 9K, 10K$ e $0K$. b) A temperatura é $T = 1K$ e as curvas 1 e 2 são para $\mathcal{B} = 6K$ e $0K$.

Emaranhamento quando $\mathcal{J}_2 = \mathcal{J}_1$

Essa situação é representada pela configuração a) da Figura 4.1, onde temos um caso puramente ferromagnético. Uma análise rápida pode ser feita tomando $\mathcal{J}_2 = \mathcal{J}_1 > 0$ e $\mathcal{B} = 0$ na equação (4.11). Desta forma, obtemos $2e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} = 1 \Rightarrow \frac{3\mathcal{J}_1}{2T} = \ln \frac{1}{2}$, mostrando que não temos solução para $\mathcal{J}_1 > 0$. Esta é uma consequência da impossibilidade de emaranhamento quando o sistema está nessa configuração, isto é, $\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=\mathcal{J}_1} = 0$.

Emaranhamento quando $\mathcal{J}_2 = -\mathcal{J}_1$

Agora estamos na situação representada pela configuração b) da Figura 4.1, onde apenas \mathcal{J}_2 é positivo.

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=-\mathcal{J}_1} = & \max \left[0, e^{\frac{6\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{4T}} \left(e^{-\frac{2\mathcal{B}+5\mathcal{J}_1}{4T}} \left(1 + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} \right) \left| \left(-2 + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} \right) \right| \right. \right. \\ & - \left. \left. \sqrt{e^{-\frac{\mathcal{B}}{T} - \frac{5\mathcal{J}_1}{2T}} \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T} + \frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{2\mathcal{J}_1}{T}} + 1 \right) \left(e^{\frac{\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T} + \frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} \right)} \right) \right. \\ & \left. \div \left(2 \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left(e^{\frac{\mathcal{B}-\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{4\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{2T}} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (4.14)$$

Novamente, não podemos determinar a temperatura crítica analiticamente, mas podemos observar que ela também depende do campo magnético, sendo elevada por este (gráfico a) da Figura 4.3). Na ausência de campo magnético, a temperatura crítica é dada por² $T_c \approx -3.12004\mathcal{J}_1$, que é maior do que a temperatura crítica quando $\mathcal{J}_2 = 0$. Aqui também temos quatro comportamentos distintos para o emaranhamento e são exatamente iguais aos da situação em que $\mathcal{J}_2 = 0$, mostrada na equação (4.13). Os resultados são muito semelhantes aos encontrados quando $\mathcal{J}_2 = 0$, mas com uma maior temperatura crítica e maior emaranhamento, conforme mostra a Figura 4.3.

Emaranhamento quando $\mathcal{J}_2 \neq 0$

Nesta parte, além de considerar que $\mathcal{J}_2 > 0$, estaremos analisando a configuração b), pois, como vimos, não temos emaranhamento na configuração a), o caso puramente ferro-

²O valor numérico exato da temperatura crítica é

$$T_c = \frac{\mathcal{J}_1}{\log \left(\frac{\sqrt{\sqrt[3]{19+6\sqrt{10}} + \sqrt[3]{19-6\sqrt{10}} + 17} - \frac{1}{2} \sqrt{-4\sqrt[3]{19+6\sqrt{10}} - 4\sqrt[3]{19-6\sqrt{10}} + \frac{560}{\sqrt{\sqrt[3]{19+6\sqrt{10}} + \sqrt[3]{19-6\sqrt{10}} + 17}} + 136 + 4}} \right)}.$$

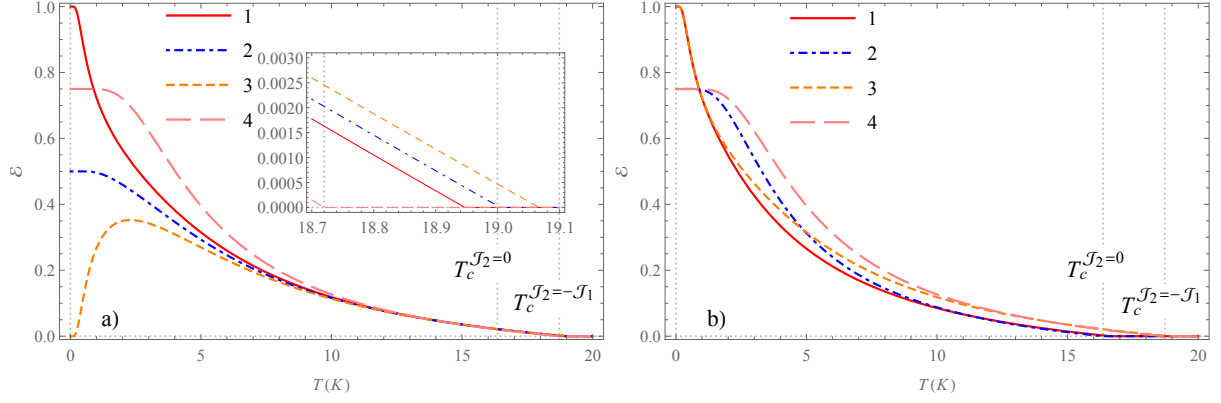


Figura 4.3: Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2 = -\mathcal{J}_1}$ com $\mathcal{J}_1 = -6K$. a) As curvas 1, 2, 3 e 4 são para $\mathcal{B} = 8K, 9K, 10K$ e $0K$. b) As curvas 2 e 4 são para $\mathcal{B} = 0$ e as curvas 1 e 3 são para $\mathcal{B} = 8K$.

magnético. Dessa forma, a equação para o emaranhamento é dada por

$$\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2 > 0} = \max \left[0, \left\{ - \left[\left(e^{\frac{2\mathcal{B}-3\mathcal{J}_2}{4T}} + e^{\frac{2\mathcal{B}-4\mathcal{J}_1+\mathcal{J}_2}{4T}} + e^{\frac{2\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1+\mathcal{J}_2}{4T}} + e^{\frac{6\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1+\mathcal{J}_2}{4T}} \right) \left(e^{\frac{-2\mathcal{B}-4\mathcal{J}_1+\mathcal{J}_2}{4T}} + e^{\frac{-6\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1+\mathcal{J}_2}{4T}} + e^{\frac{-2\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1+\mathcal{J}_2}{4T}} + e^{-\frac{2\mathcal{B}+3\mathcal{J}_2}{4T}} \right) \right]^{\frac{1}{2}} + e^{\frac{-2\mathcal{B}-4\mathcal{J}_1+\mathcal{J}_2}{4T}} \left| \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left(e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} - 2 \right) \right| \right] \div \left(e^{-\frac{6\mathcal{B}+4\mathcal{J}_1+3\mathcal{J}_2}{4T}} \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left(e^{\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}_2}{T}} + e^{\frac{4\mathcal{B}+3\mathcal{J}_1+2\mathcal{J}_2}{2T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}_1+2\mathcal{J}_2}{2T}} \right) \right) \quad (4.15)$$

Um primeiro ponto a se observar é que os regimes de campo não dependem de \mathcal{J}_2 , sendo dados pela mesma equação (4.13). Claro que \mathcal{J}_2 interfere na intensidade do emaranhamento, mas, sempre, no limite de $T \rightarrow 0$, o emaranhamento obedece (4.13).

O efeito de \mathcal{J}_2 no sistema é muito semelhante ao efeito que \mathcal{J}_z tem num dímero de spin-1/2 no modelo XXZ analisado no Capítulo 2 (Ver Figura 2.17 e 2.18). Temos que quando $0 < \mathcal{J}_2 < |\mathcal{J}_1|$, o emaranhamento e a temperatura crítica seguem a mesma ordem: $\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=0} < \mathcal{E}_{XXX}^{0 < \mathcal{J}_2 < |\mathcal{J}_1|} < \mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2 = -\mathcal{J}_1} < \mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2 > |\mathcal{J}_1|}$ e $T_c^{\mathcal{J}_2=0} < T_c^{0 < \mathcal{J}_2 < |\mathcal{J}_1|} < T_c^{\mathcal{J}_2 = -\mathcal{J}_1} < T_c^{\mathcal{J}_2 > |\mathcal{J}_1|}$. Em geral, qualquer que seja o valor da constante de troca entre os spins 1 e 3, representada por \mathcal{J}_2 , esta faz aumentar o emaranhamento e a temperatura crítica no par 12.

4.2.2 Modelo XX

Consideramos aqui \mathcal{J}_{z1} e \mathcal{J}_{z2} iguais a zero e analisaremos cada uma das outras possibilidades separadamente.

Emaranhamento quando $\mathcal{J}_2 = 0$

Na ausência de constante de troca no par 13, isto é, $\mathcal{J}_2 = 0$, temos

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=0} = & \max \left[0, \left(\sqrt{2} e^{-\frac{\mathcal{B}+\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{2T}} \left| \left(1 + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} \right) \left(-1 + e^{\frac{\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} \right) \right| \right. \right. \\ & - \left. \left. \sqrt{e^{-\frac{\mathcal{B}+\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T} + \frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} + e^{\frac{\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} + 1 \right) \left(e^{\frac{\mathcal{B}+\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T} + \frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} \right)} \right) \right. \\ & \left. \div \left(2 \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) e^{-\frac{3\mathcal{B}+\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{2T}} \left(e^{\frac{\mathcal{B}+\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{4\mathcal{B}+\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} \right) \right) \right] \end{aligned} \quad (4.16)$$

Na presença de campo, a temperatura crítica não pode ser calculada analiticamente, mas podemos calcular a temperatura crítica na ausência de campo. Assim, impondo $\mathcal{B} = 0$ na equação (4.16) e igualando o numerador a zero, obtemos a seguinte equação: $7e^{-\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} - 11e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} + 7e^{\frac{2\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} - 11 = 0$. Com um pouco de manipulação, obtemos $(x+1)(x(7x-18)+7) = 0$, onde $x = e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}}$. Tomando as soluções reais para T , obtemos a temperatura crítica na ausência de campo

$$T_c = \frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2} \ln \left(\frac{1}{7} (9 \pm 4\sqrt{2}) \right)} \begin{cases} - \text{ se } \mathcal{J}_1 < 0 \\ + \text{ se } \mathcal{J}_1 > 0 \end{cases}. \quad (4.17)$$

O modelo XX apresenta menor temperatura crítica que o modelo XXX nas mesmas condições, mas ao mesmo tempo apresenta emaranhamento no caso ferromagnético, como mostra o gráfico a) da Figura 4.5, tal que $E_{XX}^{\mathcal{J}_2=0}(T, \mathcal{B}, \mathcal{J}_1) = E_{XX}^{\mathcal{J}_2=0}(T, -\mathcal{B}, -\mathcal{J}_1)$. Os

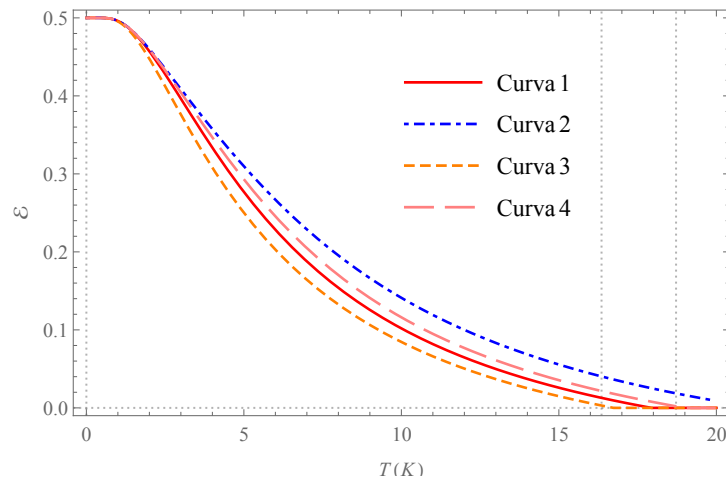


Figura 4.4: Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2>0}$ com $\mathcal{J}_1 = -6K$ e $\mathcal{B} = 9K$. As curvas 1, 2, 3 e 4 são para \mathcal{J}_2 iguais a $3K$, $12K$, $0K$ e $6K$, respectivamente

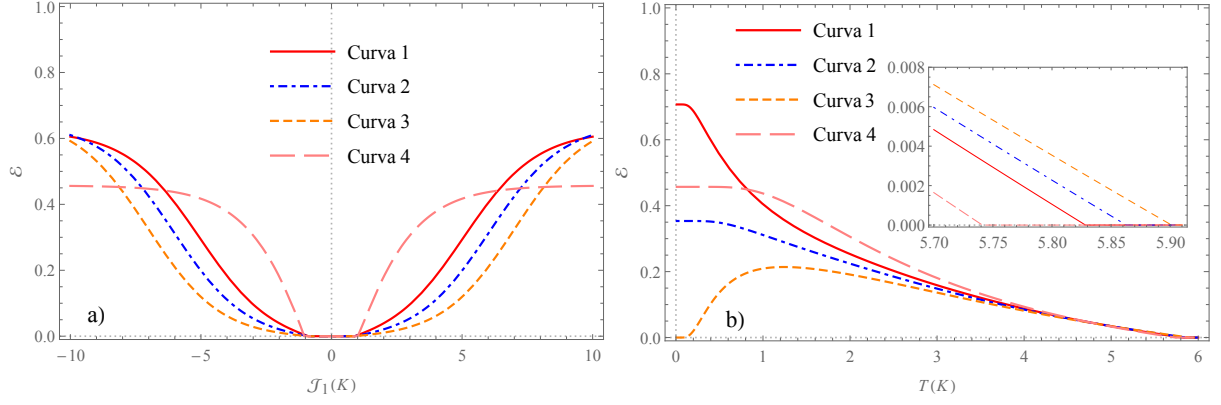


Figura 4.5: Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=0}$ onde as curvas 1, 2, 3 e 4 tem campos magnéticos \mathcal{B} iguais a $5/\sqrt{2}K$, $6/\sqrt{2}K$, $7/\sqrt{2}K$ e $0K$, respectivamente. a) $T = 1K$ e b) $\mathcal{J}_1 = -6K$.

regimes de campo nesse caso do modelo XX são dados por

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=0}(T, \mathcal{J}_1, \mathcal{B}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{1}{4}, & \text{se } \mathcal{B} = 0 \rightarrow \text{Ausência de campo} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}, & \text{se } |\mathcal{B}| < \frac{|\mathcal{J}_1|}{\sqrt{2}} \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}}, & \text{se } |\mathcal{B}| = \frac{|\mathcal{J}_1|}{\sqrt{2}} \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > \frac{|\mathcal{J}_1|}{\sqrt{2}} \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases}, \quad (4.18)$$

O emaranhamento nos regimes de campo descrito acima são representados no gráfico b) da Figura 4.5. Assim como no modelo XXX deste capítulo, a temperatura crítica depende do campo magnético e aumenta com o aumento do campo, conforme mostra o subgráfico em b).

Emaranhamento quando $\mathcal{J}_2 = \mathcal{J}_1$

Tomando $\mathcal{J}_2 = \mathcal{J}_1 > 0$, configuração a) da Figura 4.1. Nessa situação, a medida de emaranhamento é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=\mathcal{J}_1} &= \max \left[0, \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} \left(\left| \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left(e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} - 2 \right) \right| \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. - e^{\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{2T}} \sqrt{e^{-\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{T}} \left(e^{\frac{2\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + 2 \right) \left(e^{\frac{2\mathcal{B}+3\mathcal{J}_1}{2T}} + 2e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{2T}} \right)} \right) \right) \right) \\ &\quad \left. \div 2 \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left(-e^{\frac{2\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{4\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{2\mathcal{B}+3\mathcal{J}_1}{2T}} + 2e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{2T}} \right) \right] . \end{aligned} \quad (4.19)$$

Com o intuito de calcular a temperatura crítica tomamos $\mathcal{B} = 0$ na equação (4.19) e igualamos o numerador a zero. Dessa forma, pode-se obter a seguinte equação: $4e^{\frac{\mathcal{J}_1}{2T}} +$

$e^{\frac{\mathcal{J}_1}{T}} + 20e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + 2e^{\frac{2\mathcal{J}_1}{T}} - 3e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{T}} - 12 = 0$. Com um pouco de manipulação algébrica, chega-se a $(2-x)(3x^3+x-2)(x(x+2)+3) = 0$, onde $x = e^{\frac{\mathcal{J}_1}{2T}}$. A temperatura crítica na ausência de campo magnético é obtida tomando-se a única solução real e positiva para T , dada por

$$T_c = \frac{\mathcal{J}_1}{\ln(4)}. \quad (4.20)$$

Neste modelo, os regimes de campo são dados por

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=\mathcal{J}_1}(T, \mathcal{J}_1, \mathcal{B}) = \begin{cases} \frac{1}{4}, & \text{se } \mathcal{B} = 0 \rightarrow \text{Ausência de campo} \\ \frac{1}{2}, & \text{se } |\mathcal{B}| < \mathcal{J}_1 \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{4}, & \text{se } |\mathcal{B}| = \mathcal{J}_1 \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > \mathcal{J}_1 \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases}. \quad (4.21)$$

Na Figura 4.6, temos o emaranhamento nos regimes de campo citados acima e vemos, assim como nos casos anteriores, que a temperatura crítica aumenta com o aumento do campo. Mas, diferentemente do modelo XXX deste capítulo, a existência de uma constante de troca entre os spins 1 e 3 ($\mathcal{J}_2 \neq 0$) faz o emaranhamento e a temperatura crítica diminuírem.

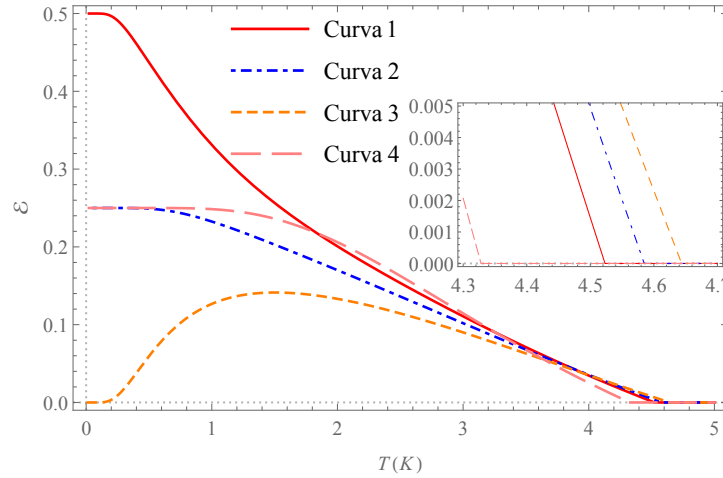


Figura 4.6: Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=\mathcal{J}_1}$ com $\mathcal{J}_1 = 6K$ onde as curvas 1, 2, 3 e 4 tem campo magnético \mathcal{B} iguais a $5K$, $6K$, $7K$ e $0K$, respectivamente.

Emaranhamento quando $\mathcal{J}_2 = -\mathcal{J}_1$

Para $\mathcal{J}_2 = -\mathcal{J}_1$, onde $\mathcal{J}_1 < 0$ (Representado na configuração b) da Figura 4.1), temos que a medida de emaranhamento é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=-\mathcal{J}_1} &= \max \left[0, \left(\left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left| 2 - e^{-\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} \right| e^{\frac{2\mathcal{B}+3\mathcal{J}_1}{2T}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - e^{\frac{3\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1}{2T}} \sqrt{e^{-\frac{\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1}{T}} \left(e^{\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{T}} + 2e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + 1 \right) \left(2e^{\frac{2\mathcal{B}+3\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{T}} \right)} \right) \right. \\ &\quad \left. \div \left(4 \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) e^{\frac{2\mathcal{B}+3\mathcal{J}_1}{2T}} + 2 \left(e^{\frac{3\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) e^{\frac{\mathcal{J}_1}{T}} + 2e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \right) \right). \end{aligned} \quad (4.22)$$

A equação (4.22) e a equação (4.19) foram obtidas para $\mathcal{J}_1 < 0$ e $\mathcal{J}_1 > 0$, respectivamente. Pode-se verificar que de uma das equações chega-se na outra apenas trocando \mathcal{J}_1 por $-\mathcal{J}_1$. Desta forma, obtemos os mesmos resultados da equação (4.19) com a equação (4.22), desde que ambas tenham o mesmo $|\mathcal{J}_1|$, isto é, $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=-\mathcal{J}_1}(T, \mathcal{B}, |\mathcal{J}_1|) = \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=\mathcal{J}_1}(T, \mathcal{B}, |\mathcal{J}_1|)$. Com isso, a temperatura crítica nesse caso é dada por $T_c = -\frac{\mathcal{J}_1}{\ln(4)}$. Assim obteríamos o mesmo gráfico da Figura 4.6 se usarmos $\mathcal{J}_1 = -6K$ e todas as conclusões anteriores se repetem.

Emaranhamento quando $\mathcal{J}_2 \neq 0$

Para $0 < \mathcal{J}_2 < |\mathcal{J}_1|$, vale o emaranhamento $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2>0}$, equação (4.11) com \mathcal{J}_{z1} e \mathcal{J}_{z2} iguais a zero, e temos $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=0} > \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2<\mathcal{J}_1} > \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=|\mathcal{J}_1|}$, juntamente com a temperatura crítica. Quando $\mathcal{J}_2 > |\mathcal{J}_1|$, o emaranhamento diminui e a temperatura crítica também. Enquanto no

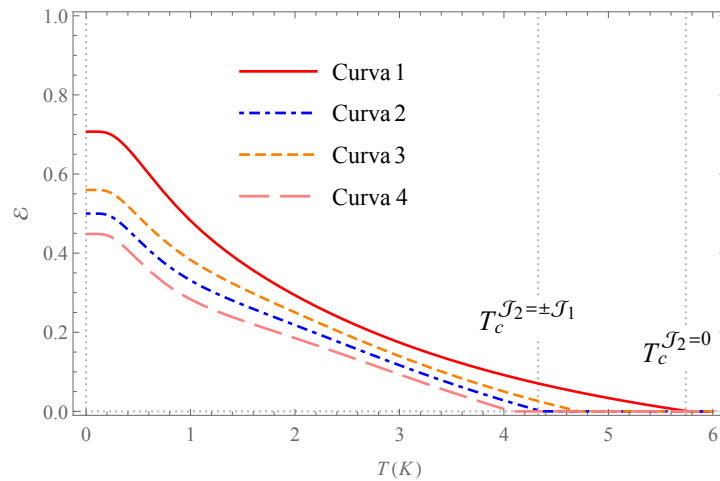


Figura 4.7: Medida de emaranhamento $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2 \neq 0}$ com $\mathcal{J}_1 = -6K$ e $\mathcal{B} = 2K$. As curva 1, 2, 3 e 4 são para \mathcal{J}_2 iguais a $0K$, $6K$, $4K$ e $8K$, respectivamente

modelo XXX o efeito de \mathcal{J}_2 é semelhante ao efeito que \mathcal{J}_z tem num dímero de spin-1/2 do modelo XXZ , aqui no modelo XX a constante de troca tem um efeito oposto, diminuindo a temperatura crítica e o emaranhamento conforme vemos no gráfico da Figura 4.7.

4.3 Emaranhamento \mathcal{E}_{13}

Para obter a matriz densidade reduzida, ρ_{13}^r , devemos tomar o traço parcial sobre o segundo subespaço, isto é, $\rho_{13}^r = Tr_2(\rho) = \sum_{k_2=\{-,+\}} \langle k_2 | \rho | k_2 \rangle = \langle -_2 | \rho | -_2 \rangle + \langle +_2 | \rho | +_2 \rangle$. Assim, a matriz densidade reduzida, para o par 13, é

$$\begin{aligned} \rho_{13}^r &= \mathcal{Z}^{-1} \left((e^{-\beta\mathbb{E}_7}(\theta - \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_5}(\theta + \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_1}) |I\rangle\langle I| \right. \\ &+ (e^{-\beta\mathbb{E}_3} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_7} + e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_8}) |II\rangle\langle II| \\ &+ (-e^{-\beta\mathbb{E}_3} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_7} - e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_8}) |II\rangle\langle III| \\ &+ (-e^{-\beta\mathbb{E}_3} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_7} - e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_8}) |III\rangle\langle II| \\ &+ (e^{-\beta\mathbb{E}_3} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_7} + e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_8}) |III\rangle\langle III| \\ &\left. + (e^{-\beta\mathbb{E}_8}(\theta - \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_6}(\theta + \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_2}) |IV\rangle\langle IV| \right), \end{aligned} \quad (4.23)$$

sendo $|I\rangle = |-_1 -_3\rangle$, $|II\rangle = |-_1 +_3\rangle$, $|III\rangle = |+_1 -_3\rangle$ e $|IV\rangle = |+_1 +_3\rangle$. Os elementos de matriz são então dados por

$$\rho_{11} = \frac{1}{\mathcal{Z}} (e^{-\beta\mathbb{E}_7}(\theta - \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_5}(\theta + \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_1}) \quad (4.24a)$$

$$\rho_{22} = \rho_{33} = \frac{1}{\mathcal{Z}} (e^{-\beta\mathbb{E}_3} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_7} + e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_8}) \quad (4.24b)$$

$$\rho_{23} = \rho_{32} = \frac{1}{\mathcal{Z}} (-e^{-\beta\mathbb{E}_3} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_7} - e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_8}) \quad (4.24c)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{\mathcal{Z}} (e^{-\beta\mathbb{E}_8}(\theta - \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_6}(\theta + \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_2}) \quad (4.24d)$$

tal que a medida de emaranhamento via distância entre estados (2.49) é dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{13} &= \max \left[0, \frac{1}{\mathcal{Z}} \left(|-e^{-\beta\mathbb{E}_3} - e^{-\beta\mathbb{E}_4} + e^{-\beta\mathbb{E}_5} + e^{-\beta\mathbb{E}_6} + e^{-\beta\mathbb{E}_7} + e^{-\beta\mathbb{E}_8}| \right. \right. \\ &- \left((e^{-\beta\mathbb{E}_7}(\theta - \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_5}(\theta + \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_1}) \right. \\ &\left. \left. \times (e^{-\beta\mathbb{E}_8}(\theta - \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_6}(\theta + \omega)^2 + e^{-\beta\mathbb{E}_2}) \right)^{\frac{1}{2}} \right). \end{aligned} \quad (4.25)$$

Nesta seção, vamos analisar apenas a situação com ausência de interação por constante de troca entre os spins 1 e 3 ($\mathcal{J}_2 = 0$) para compararmos com alguns resultados experimentais.

Modelos com interação por constante de troca entre os spins 1 e 3 estão em fase de desenvolvimento.

4.3.1 Modelo XXX

Consideraremos $\mathcal{J}_{z1} = \mathcal{J}_1$ e $\mathcal{J}_{z2} = \mathcal{J}_2 = 0$. Assim, a medida de emaranhamento toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=0} &= \max \left[0, \left(\left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left| 1 - e^{\frac{\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} \right| e^{-\frac{\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1}{2T}} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \sqrt{e^{-\frac{\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1}{T}} \left(\left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + 4 \right) \left(\left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + 4e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} \right)} \right) \right. \\ &\quad \left. \div \left(\left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) e^{-\frac{3\mathcal{B}+2\mathcal{J}_1}{2T}} \left(\left(e^{\frac{2\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{B}+\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Primeiramente, vamos analisar o emaranhamento na ausência de campo magnético. Tomando $\mathcal{B} = 0$ na equação (4.26), temos

$$\mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2, \mathcal{B}=0} = \max \left[0, \frac{\left| 1 - e^{\frac{\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} \right| - \left(e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + 2 \right)}{e^{\frac{\mathcal{J}_1}{T}} + 2e^{\frac{3\mathcal{J}_1}{2T}} + 1} \right] = 0. \quad (4.27)$$

para qualquer \mathcal{J}_1 e T real. Isto significa que quando $\mathcal{J}_2 = 0$ na ausência de campo magnético, não existe emaranhamento no par 13 no modelo XXX , conforme é mostrado no gráfico a) e c) da Figura 4.8. Este resultado está de acordo com os resultados experimentais [68]. Ao aplicar um campo magnético, este induz emaranhamento, no caso antiferromagnético, no par 13. Para cada valor de T e \mathcal{J}_1 existe uma intensidade mínima de \mathcal{B} (\mathcal{B}_{min}) que induz emaranhamento no par (Ver gráfico b) da Figura 4.8). Igualando (4.26) a zero e resolvendo para \mathcal{B} , obtemos

$$\mathcal{B}_{min} = T \ln \left(-\frac{\eta + 7 \pm 4\sqrt{\eta + 3}}{\eta - 1} \right), \quad (4.28)$$

onde $\eta = 2e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} + 2e^{\frac{3\mathcal{J}}{2T}} - e^{\frac{2\mathcal{J}}{T}} + 2e^{\frac{5\mathcal{J}}{2T}}$. Esse mesmo \mathcal{B}_{min} pode ser obtido por análise do autovalor negativo da transposta parcial, tal como foi feito no Capítulo 2. Uma análise dos regimes de campo mostra que

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}_{XXX}^{\mathcal{J}_2=0}(T, \mathcal{J}_1, \mathcal{B}) = \begin{cases} 1, & \text{se } |\mathcal{B}| < \frac{3|\mathcal{J}_1|}{2} \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{2}, & \text{se } |\mathcal{B}| = \frac{3|\mathcal{J}_1|}{2} \rightarrow \text{Campo médio} . \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > \frac{3|\mathcal{J}_1|}{2} \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases} \quad (4.29)$$

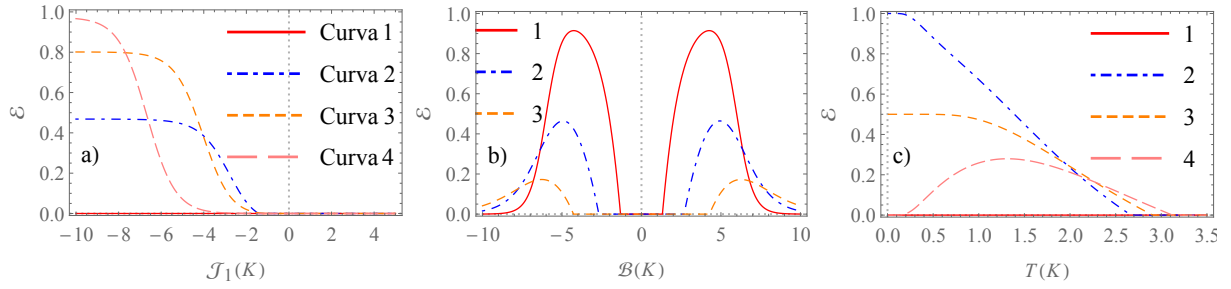


Figura 4.8: Medida de emaranhamento entre o par 1 e 3 para $\mathcal{J}_2 = 0$, $\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=0}$. Em a) $T = 1K$ e as curvas 1, 2, 3 e 4 com \mathcal{B} iguais a $0K$, $4K$, $6K$ e $8K$, respectivamente. Em b) $\mathcal{J}_1 = -6K$ e as curvas 1, 2 e 3 com T iguais a $0,5K$, $1,0K$ e $1,5K$, respectivamente. c) $\mathcal{J}_1 = -6K$ e as curvas 1, 2, 3 e 4 com \mathcal{B} iguais a $0K$, $8K$, $9K$ e $10K$, respectivamente.

Observe que o par 13 ($\mathcal{J}_2 = 0$) tem o mesmo regime de campo que o par 12 ($\mathcal{J}_2 = 0$), dado na equação (4.13), com exceção para $\mathcal{B} = 0$ onde o emaranhamento em $T \rightarrow 0$ é zero. Outro fato parecido é devido à temperatura crítica aumentar com o campo magnético, mas com um aumento maior do que no emaranhamento do par 12, conforme gráfico c) da Figura 4.8.

4.3.2 Modelo XX

Tomando $\mathcal{J}_{z1} = \mathcal{J}_{z2} = \mathcal{J}_2 = 0$, obtemos a medida de emaranhamento para o modelo XX , dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=0} = & \max \left[0, \left(\left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) \left| 1 - e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} + e^{\frac{\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} \right| \right. \right. \\ & - \left. \sqrt{\left(2e^{\frac{\mathcal{B}+\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} + 2e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} \right) \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T} + \frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} + 2e^{\frac{\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} + 2 \right)} \right) \\ & \left. \div \left(\sqrt{2} \left(e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + 1 \right) e^{-\frac{\mathcal{B}}{T}} \left(e^{\frac{\mathcal{B}+\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{4\mathcal{B}+\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{2T}} + e^{\frac{\mathcal{B}}{T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Assim como na seção anterior, temos que na ausência de campo magnético o emaranhamento é

$$\mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2, \mathcal{B}=0} = \max \left[0, -\frac{-2 \left| 1 - e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} + e^{\frac{\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} \right| + 2e^{\frac{\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}} + e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} + 2}{2\sqrt{2} \left(e^{\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}} + 1 \right)^2} \right] = 0 \quad (4.31)$$

para qualquer valor de \mathcal{J}_1 . Isto significa que na ausência de campo e quando $\mathcal{J}_2 = 0$, o par 13 é não emaranhado (ver gráfico a) e b) da Figura 4.9). O modelo XX ao

receber uma intensidade mínima de campo magnético torna-se emaranhado tanto no caso antiferromagnético quanto no caso ferromagnético ($\mathcal{E}(\mathcal{J}_1) = \mathcal{E}(-\mathcal{J}_1)$), conforme mostra o gráfico a) da Figura 4.9, diferentemente do modelo XXX que apresenta emaranhamento apenas no caso antiferromagnético. Igualando a equação (4.30) a zero e resolvendo para \mathcal{B} , obtemos o valor mínimo do campo magnético capaz de induzir emaranhamento no modelo XX , dado por

$$\mathcal{B}_{min} = \pm T \text{ArcCosh} \left[\frac{4 \cosh\left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}\right) + 8 \cosh\left(\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}\right) + 3}{2 \left(2 \cosh\left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{J}_1}{T}\right) - 8 \cosh\left(\frac{\mathcal{J}_1}{\sqrt{2}T}\right) + 3\right)} \right] \quad (4.32)$$

O regime de campo para o emaranhamento no par 13 quando $\mathcal{J}_2 = 0$ é dada por:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{E}_{XX}^{\mathcal{J}_2=0}(T, \mathcal{J}_1, \mathcal{B}) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}, & \text{se } |\mathcal{B}| < \frac{|\mathcal{J}_1|}{\sqrt{2}} \rightarrow \text{Campo fraco} \\ \frac{1}{2\sqrt{2}}, & \text{se } |\mathcal{B}| = \frac{|\mathcal{J}_1|}{\sqrt{2}} \rightarrow \text{Campo médio} \\ 0, & \text{se } |\mathcal{B}| > \frac{|\mathcal{J}_1|}{\sqrt{2}} \rightarrow \text{Campo forte} \end{cases} \quad (4.33)$$

Observe que o regime de campo no par 13 é o mesmo que no par 12 ($\mathcal{J}_2 = 0$), dado na equação (4.33), com a mesma exceção do modelo XXX anterior, isto é, quando $\mathcal{B} = 0$ o emaranhamento em $T \rightarrow 0$ é zero. O gráfico c) da Figura 4.9 mostra que a temperatura crítica também aumenta com o aumento do campo.

Para ilustrar o efeito do campo magnético nos pares do trímero comparamos nossos resultados com o resultado obtido no material $\text{Na}_2\text{Cu}_5\text{Si}_4\text{O}_{14}$ [68]. Mais detalhes sobre o material podem ser encontrados em [69, 70]. Esse material em questão é tratado pelos autores [68] como um dímero-trímero, isto é, um dímero que tem uma interação via

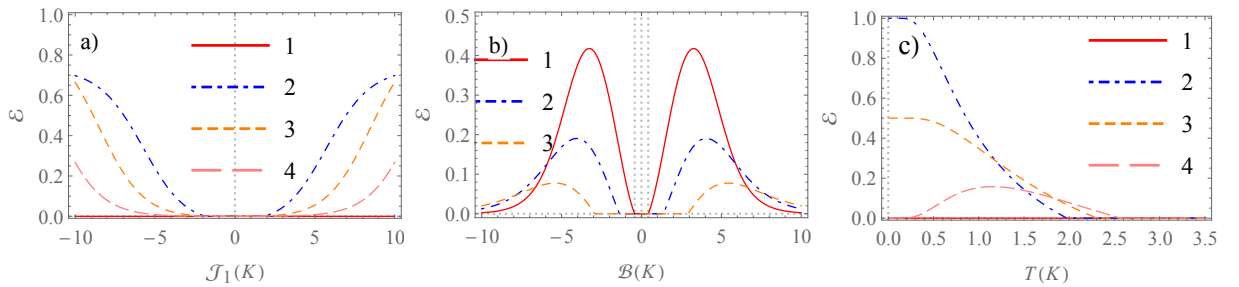


Figura 4.9: Medida de emaranhamento no par 13 para $\mathcal{J}_2 = 0$. Em a) $T = 1K$ e as curvas 1, 2, 3 e 4 com \mathcal{B} iguais a $0K$, $4K$, $6K$ e $8K$, respectivamente. Em b) $\mathcal{J}_1 = -6K$ e as curvas 1, 2 e 3 com T iguais a $1,0K$, $1,5K$ e $2,0K$, respectivamente. Em c) $\mathcal{J}_1 = -6K$ e as curvas 1, 2, 3 e 4 com \mathcal{B} iguais a $0K$, $2\sqrt{2}K$, $3\sqrt{2}K$, $4\sqrt{2}K$, respectivamente.

constante troca com um trímero. Os valores das constantes de troca desse material foram obtidos experimentalmente e valem [70]: $\mathcal{J}_D = 40,22K$ (constante de troca intra-dímero), $J_T = -224,9K$ (constante de troca intra-trímero) e $J_{DT} = -8,01K$ (constante de troca entre o dímero e o trímero). Vamos comparar nossos resultados do emaranhamento entre pares do trímero, dados nas equações (4.12) e (4.26), com os resultados do emaranhamento nos pares 12 e 13 do trímero do dímero-trímero. Achamos que podemos fazer essa comparação devido ao valor da constante de troca intra-trímero (\mathcal{J}_T) ser “muito maior” do que a contante de troca entre o dímero e o trímero (\mathcal{J}_{DT}). Nesse material não existe interação via constante de troca no par 13 ($\mathcal{J}_2 = 0$) do trímero. Eles investigaram o emaranhamento entre os pares 12 e 13 no modelo XXX . O experimento mostrou que na ausência de campo magnético, não existe emaranhamento no par 13, apenas no par 12, como mostramos (4.27) e ilustramos na Figura 4.8. Eles verificaram que o campo magnético aumenta a temperatura crítica e para campos menos intensos eleva o emaranhamento, assim como os nossos resultados (Ver Figuras 4.2 e 4.8). Para comparar o nosso modelo com o resultado do trabalho [68], usamos a constante de troca do trímero, $\mathcal{J}_T = -224,9K$, e plotamos o emaranhamento dos pares 12 e 13, dados no gráfico a) e c) da Figura 4.10, respectivamente. Os gráficos b) e d) são os resultados obtidos em [68]. Observe que o comportamento dos nossos resultados são muito similares aos resultados obtidos por eles. Como o nosso modelo é um modelo trímero e o deles é um modelo dímero-trímero, achamos que esta diferença é devido ao dímero, que apesar da interação entre o dímero e o trímero ser fraca, interfere no emaranhamento, mesmo o dímero ferromagnético não apresentando emaranhamento, como vimos, na Seção 2.1.1.

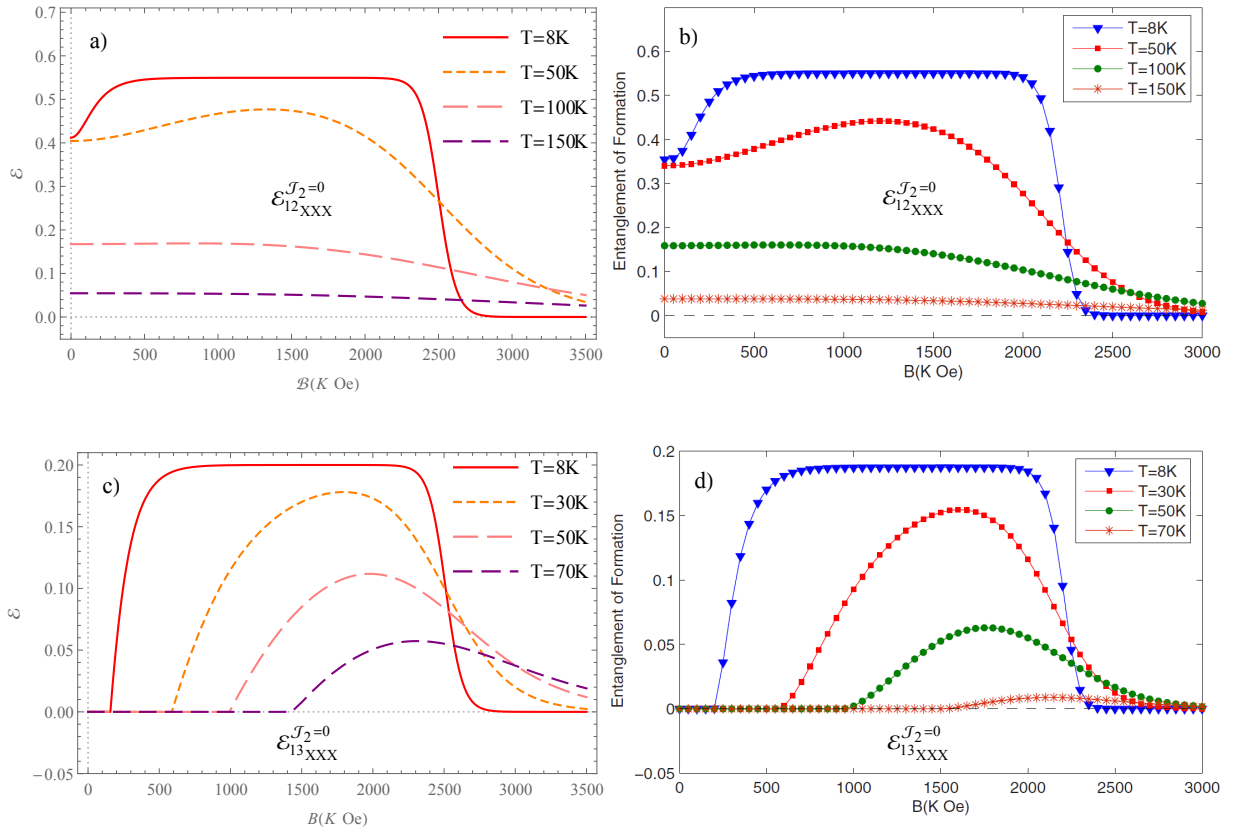


Figura 4.10: Emaranhamento nos pares 12 e 13 do modelo XXX em função do campo magnético para $\mathcal{J}_1 = \mathcal{J}_T = -224, 9K$. a) Curvas 1, 2, 3 e 4 são para T igual a $8K$, $50K$, $100K$ e $150K$. c) Curvas 1, 2, 3 e 4 são para T iguais a $8K$, $30K$, $50K$ e $70K$. b) e d) são os resultados do trabalho [68].

Conclusões e perspectivas

Conclusões

Tratamos o problema do emaranhamento térmico em um modelo de Heisenberg usando a distância entre estados como quantificador do grau de emaranhamento. Tal escolha deveu-se ao fato de ser uma ferramenta pouco explorada na literatura. Usamos como medida de distância a norma de Hilbert-Schmidt, que nos permitiu obter expressões analíticas para as medidas de emaranhamento e, em alguns, casos a sua temperatura crítica. Tal método apresenta uma vantagem com relação ao quantificador de emaranhamento mais amplamente usado na comunidade, a concorrência, já que a concorrência só é aplicável a sistemas de dimensão $2 \otimes 2$, enquanto a distância entre estados não apresenta limitação quanto à dimensão do sistema, tal como foi mostrado no cálculo do emaranhamento no sistema dímero de spin- $(\frac{1}{2}, 1)$, que possui dimensão $2 \otimes 3$.

Analisamos o emaranhamento térmico em dímero de spin-1/2 em modelos com e sem anisotropia. Apresentamos, no Capítulo 2, como a distância entre estados está relacionada com o critério de Peres-Horodecki. Encontramos que a temperatura crítica não depende do campo magnético desde que este seja uniforme. Isto significa que, em tais sistemas, a aplicação de campo magnético não destrói o emaranhamento, sendo o estado magneticamente blindado com relação ao campo. Mostramos que o emaranhamento para campos magnéticos orientados tanto na direção z quanto na direção x apresentam a mesma temperatura crítica. Obtivemos, para a maioria dos casos, o regime de campo que governa o emaranhamento, mostrando que em todos os casos quando o campo atinge o valor de campo médio, o emaranhamento máximo reduz-se para a metade e quando o campo ultrapassa o campo médio, o emaranhamento tende a zero quando a temperatura tende a zero. No modelo anisotrópico, encontramos uma condição para que ocorra emaranhamento no caso ferromagnético, sendo que tal fato só ocorre quando $\mathcal{J}_z < \mathcal{J}$. Quando temos um

campo magnético inhomogêneo, obtivemos que as temperaturas críticas dos modelos XXX e XX dependem somente das diferenças entre os campos e nunca da sua soma, sendo tanto maior quanto maior for este grau de inhomogeneidade.

Em dímeros de spin- $(1/2,1)$, conseguimos calcular analiticamente a medida de emaranhamento e a temperatura crítica na ausência de campo magnético externo nos modelos XXX e XX . O modelo XXZ , diferentemente do que ocorre com o dímero de spin- $1/2$, tem o seu valor máximo de emaranhamento alterado por \mathcal{J}_z , sendo que quanto maior J_z maior será a temperatura crítica e menor será o emaranhamento máximo. Mostramos que, ao aplicar um campo magnético, a temperatura crítica permanece inalterada. Ao analisar o efeito do grau de inhomogeneidade do campo magnético, observamos que para altos valores de inhomogeneidade ($\delta\mathcal{B}$) os três modelos, XXX , XX e XXZ , tendem a ter um único comportamento de emaranhamento.

No Capítulo 4, propomos um modelo bastante geral para um trímero, já que na grande maioria dos casos ele é sempre abordado no modelo XXX . Nesse modelo, consideramos que os spins 1 e 3 podem ter interação via constante de troca. Obtivemos resultados analíticos para o emaranhamento e mostramos que a temperatura crítica entre pares, mas agora na presença de um terceiro spin, é alterada pelo campo magnético. Mostramos que se o par 13 tiver interação via constante de troca, o emaranhamento e a temperatura crítica no par 12, modelo XX , serão tanto menor quanto maior for a interação entre 1 e 3, revelando comportar-se de forma totalmente oposta ao que ocorre no modelo XXX . Para o emaranhamento no par 13, mostramos que este não é emaranhado na ausência de campo magnético. Além disso, obtivemos uma expressão analítica que fornece a intensidade mínima de campo magnético que se deve aplicar ao sistema para que o emaranhamento no par 13 seja diferente de zero. Por fim, comparamos numericamente os nossos resultados para o emaranhamento entre pares de um trímero com os resultados experimentais do emaranhamento entre pares realizado num dímero-trímero, valendo-se do fato da constante de troca entre o dímero e o trímero ser muito pequena quando comparada com a constante de troca do trímero. A nosso ver, os resultados mostraram-se satisfatórios, ainda mais devido a serem duas técnicas de quantificações diferentes.

Perspectivas

Uma das nossas perspectivas é abordar o emaranhamento em sistemas de dimensões maiores, onde não é mais possível aplicar o critério de Peres-Horodecki. Para tal situação, uma das possibilidades é usar a entropia de Nielsen-Kempe (ou critério da entropia condicional) [71], que fornece um critério para dizer se um estado é separável em sistemas bipartites de dimensões arbitrárias. Outro problema que queremos tratar é o sistema dímero- trímero de uma forma geral, já que no Capítulo 4 mostramos que o emaranhamento no sistema trímero se aproximou do emaranhamento do dímero quando o acoplamento entre o dímero e o trímero era pequeno quando comparado ao acoplamento do trímero. Nesse sentido, pensamos em trabalhar em duas frentes. A primeira é obter o Hamiltoniano do modelo dímero-trímero e calcular o emaranhamento com o auxílio das matrizes densidades reduzidas. A segunda é explorar o emaranhamento no par trímero e dímero, considerando que o spin total do trímero (antiferromagnético) é $\frac{1}{2}$ e o spin total do dímero (ferromagnético) é 1. Depois dessa aproximação, abordar de forma semelhante ao que foi feito no Capítulo 3.

Algo que temos muito interesse é em dar sequência aos cálculos de emaranhamento em função de quantidades facilmente mensuráveis no laboratório, tais como a susceptibilidade magnética e a energia, já que tais medidas podem ser realizadas aqui nos laboratórios do nosso departamento. Na realidade tal trabalho em função da susceptibilidade magnética já encontra-se em fase bem avançada e só não entrou nesta tese devido a algumas correções que terão que ser feitas.

Bibliografia

- [1] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, “Can Quantum Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?,” *Phys. Rev.*, vol. 47, pp. 777–780, 1935.
- [2] N. Bohr, “Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be Considered Complete?,” *Phys. Rev.*, vol. 48, pp. 696–702, 1935.
- [3] J. S. Bell, “On the Einstein Podolsky Rosen paradox,” *Physics (College. Park. Md.)*, vol. 1, no. 3, pp. 195–200, 1964.
- [4] A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, “Experimental Realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm: A New Violation of Bell’s Inequalities Gedankenexperiment,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, no. 2, pp. 91–94, 1982.
- [5] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crepeau, R. Jozsa, A. Peres, and W. K. Wootters, “Teleporting an Unknown Quantum State via Dual Classical and Einstein-Podolsky-Rosen Channels,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 70, no. 13, pp. 1895–1899, 1993.
- [6] C. H. Bennett and D. P. Divincenzo, “Quantum information and computation,” *Nature*, vol. 404, pp. 247–255, 2000.
- [7] T. J. Osborne and M. A. Nielsen, “Entanglement in a simple quantum phase transition,” *Phys. Rev. A*, vol. 66, no. 032110, pp. 1–14, 2002.
- [8] X. Wang and S.-j. Gu, “Negativity , entanglement witness and quantum phase transition in spin-1 Heisenberg chains,” *J. Phys. A Math. Theor.*, vol. 40, pp. 10759–10767, 2007.
- [9] V. Vedral, *Introduction to Quantum Information Science (Oxford Graduate Texts)*. New York: Oxford University Press, Inc., 2006.

- [10] P. Ball, “The dawn of quantum biology,” *Nature*, vol. 474, no. 272, pp. 6–8, 2011.
- [11] E. M. Gauger, E. Rieper, J. J. L. Morton, S. C. Benjamin, and V. Vedral, “Sustained Quantum Coherence and Entanglement in the Avian Compass,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, no. 040503, pp. 1–4, 2011.
- [12] H. Lee, Y.-C. Cheng, and G. R. Fleming, “Coherence Dynamics in Photosynthesis: Protein Protection of Excitonic Coherence,” *Science*, vol. 316, pp. 1462–1465, 2007.
- [13] K. M. O’Connor and W. K. Wootters, “Entangled Rings,” *Phys. Rev. A*, vol. 63, no. 052302, pp. 1–9, 2000.
- [14] X. G. Wang and P. Zanardi, “Quantum entanglement and Bell inequalities in Heisenberg spin chains,” *Phys. Lett. A*, vol. 301, pp. 1–6, 2002.
- [15] W. Marciniak, V. Vedral, and C. Brukner, “Magnetic susceptibility as a macroscopic entanglement witness,” *New J. Phys.*, vol. 7, no. 258, pp. 1–8, 2005.
- [16] M. A. Aldoshin, S. M. Feldman, E. B. Yurishchev, “Quantum entanglement in nitrosyl iron complexes,” *J. Exp. Theor. Phys.*, vol. 107, no. 5, pp. 804–811, 2008.
- [17] M. R. Dowling, A. C. Doherty, and S. D. Bartlett, “Energy as an entanglement witness for quantum many-body systems,” *Phys. Rev. A*, vol. 70, no. 062113, pp. 1–15, 2004.
- [18] S. Sahling, G. Remenyi, C. Paulsen, P. Monceau, V. Saligrama, C. Marin, A. Revcolevschi, L. P. Regnault, S. Raymond, and J. E. Lorenzo, “Experimental realization of long-distance entanglement between spins in antiferromagnetic quantum spin chains,” *Nat. Phys.*, vol. 11, pp. 255–260, 2015.
- [19] V. Vedral, M. B. Plenio, M. A. Rippin, and P. L. Knight, “Quantifying Entanglement,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, no. 12, pp. 2275–2279, 1997.
- [20] V. Vedral and M. B. Plenio, “Entanglement measures and purification procedures,” *Phys. Rev. A*, vol. 57, no. 3, pp. 1619–1633, 1998.
- [21] C. Witte and M. Trucks, “A new entanglement measure induced by the Hilbert-Schmidt norm,” *Phys. Lett. A*, vol. 257, pp. 14–20, 1999.

- [22] G. Dahl, J. M. Leinaas, J. Myrheim, and E. Ovrum, “A tensor product matrix approximation problem in quantum physics,” *Linear Algebra Appl.*, vol. 420, pp. 711–725, 2007.
- [23] D. Pérez-garcía, M. M. Wolf, D. Petz, M. B. Ruskai, and M. M. Wolf, “Contractivity of positive and trace-preserving maps under L_p norms,” *J. Math. Phys.*, vol. 47, no. 083506, pp. 1–5, 2006.
- [24] W. Isaacson, *Einstein: Sua vida, Seu universo*. São Paulo: Companhia das letras, 1 ed., 2007.
- [25] E. Schrödinger, “Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik,” *Die gegenwärtige Situat. der Quantenmechanik*, vol. 23, no. 50, pp. 844–849, 1935.
- [26] M. Zukowski, A. Zeilinger, M. A. Horne, and A. K. Ekert, ““Event-Ready-Detectors” Bell Experiment via Entanglement Swapping,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 71, no. 26, pp. 4287–4290, 1993.
- [27] W. Tittel, J. Brendel, H. Zbinden, and N. Gisin, “Violation of Bell Inequalities by Photons More Than 10 km Apart,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 81, no. 17, pp. 3563–3566, 1998.
- [28] Z. Zhao, T. Yang, Y.-a. Chen, A.-n. Zhang, and J.-w. Pan, “Experimental Realization of Entanglement Concentration and a Quantum Repeater,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, no. 20, pp. 1–4, 2003.
- [29] A. S. Villar, L. S. Cruz, K. N. Cassemiro, M. Martinelli, and P. Nussenzweig, “Generation of Bright Two-Color Continuous Variable Entanglement,” *Phys. Rev. E*, vol. 95, no. 243603, pp. 1–4, 2005.
- [30] C. Clausen, I. Usmani, F. Bussières, N. Sangouard, M. Afzelius, H. de Riedmatten, and N. Gisin, “Quantum storage of photonic entanglement in a crystal,” *Nature*, vol. 469, pp. 508–512, 2011.
- [31] R. Horodecki and K. Horodecki, “Quantum entanglement,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 81, no. 2, pp. 865–942, 2009.

- [32] A. Peres, “Separability Criterion for Density Matrices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 77, no. 8, pp. 1413–1415, 1996.
- [33] A. Peres, *Quantum Theory: Concepts and Method*. Dordrecht: Kluwe, Academic, 1 ed., 1995.
- [34] M. Horodecki, P. Horodecki, and R. Horodecki, “Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions,” *Phys. Lett. A*, vol. 223, pp. 1–8, 1996.
- [35] P. Horodecki, “Separability criterion and inseparable mixed states with positive partial transposition,” *Phys. Lett. A*, vol. 232, pp. 333–339, 1997.
- [36] B. M. Terhal, “Bell inequalities and the separability criterion,” *Phys. Lett. A*, vol. 271, pp. 319–326, 2000.
- [37] P. Taylor, D. Bruß, J. I. Cirac, P. Horodecki, F. Hulpke, M. Lewenstein, and A. Sanpera, “Reflections upon separability and distillability,” *Journal Mod. Opt.*, vol. 49, no. 8, pp. 1399–1418, 2002.
- [38] M. A. Nielsen and J. Kempe, “Separable States Are More Disordered Globally than Locally,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, no. 22, pp. 5184–5187, 2001.
- [39] M. Lewenstein and O. Guhne, “Entropic uncertainty relations and entanglement,” *Phys. Rev. A*, vol. 70, no. 022316, pp. 1–8, 2004.
- [40] F. A. Bovino, G. Castagnoli, A. Ekert, P. Horodecki, C. M. Alves, and A. V. Sergienko, “Direct Measurement of Nonlinear Properties of Bipartite Quantum States,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, no. 240407, pp. 1–4, 2005.
- [41] N. J. Cerf and C. Adami, “Negative Entropy and Information in Quantum Mechanics,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 79, no. 26, pp. 5194–5197, 1997.
- [42] M. Horodecki, “Entanglement measures,” *Quantum Info. Comput.*, vol. 1, no. 1, pp. 3–26, 2001.
- [43] M. B. Plenio and S. Virmani, “An introduction to entanglement measures,” *Quantum Info. Comput.*, vol. 7, no. 1, pp. 1–51, 2007.

- [44] C. H. Bennett, D. P. Divincenzo, J. A. Smolin, and W. K. Wootters, “Mixed-state entanglement and quantum error correction,” *Phys. Rev. A*, vol. 54, no. 5, pp. 3824–3851, 1996.
- [45] S. Hill and W. K. Wootters, “Entanglement of a Pair of Quantum Bits,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, no. 26, pp. 5022–5025, 1997.
- [46] W. K. Wootters, “Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 80, no. 10, pp. 2245–2248, 1998.
- [47] G. Vidal and R. F. Werner, “Computable measure of entanglement,” *Phys. Rev. A*, vol. 65, no. 032314, pp. 1–11, 2002.
- [48] K. Zyczkowski, P. Horodecki, A. Sanpera, and M. Lewenstein, “Volume of the set of separable states,” *Phys. Rev. A*, vol. 58, no. 2, pp. 883–892, 1998.
- [49] I. Bengtsson and K. Zyczkowski, *Geometry of quantum states*. New York: Cambridge University Press, 1 ed., 2006.
- [50] M. Reed and B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics: Functional analysis*. Methods of Modern Mathematical Physics, Academic Press, 1980.
- [51] H. H. Bauschke and P. L. Combettes, *Convex Analysis and Monotone Operator Theory in Hilbert Spaces*. New York: Springer, 2010.
- [52] F. Verstraete and J. Dehaene, “On the geometry of entangled states,” *Journal Mod. Opt.*, vol. 49, no. 8, pp. 1277–1287, 2002.
- [53] O. M. D. Cima, D. H. T. Franco, and M. M. Silva, “Magnetic shielding of quantum entanglement states,” *Quantum Stud. Math. Found.*, (DOI10.1007/s40509-018-0172-z), pp. 1–10, 2018.
- [54] K. Bartkiewicz, J. Beran, K. Lemr, Michał Norek, and A. Miranowicz, “Quantifying entanglement of a two-qubit system via measurable and invariant moments of its partially transposed density matrix,” *Phys. Rev. A*, vol. 91, no. 022323, pp. 1–10, 2015.

- [55] T. Yu and J. H. Eberly, “Evolution from entanglement to decoherence of bipartite mixed ”x” states,” *Quantum Info. Comput.*, vol. 7, no. 5, pp. 459–468, 2007.
- [56] M. C. Arnesen, S. Bose, and V. Vedral, “Natural Thermal and Magnetic Entanglement in the 1D Heisenberg Model,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 87, no. 1, p. 017901, 2001.
- [57] M. A. Aldoshin, S. M., Feldman, E. B., Yurishchev, “Quantum entanglement and quantum discord in magnetoactive materials (Review Article),” *Low Temp. Phys.*, vol. 40, no. 1, pp. 3–16, 2014.
- [58] M. Reis, *Fundamentals of Magnetism*. Rio de Janeiro: Press, Academic, 1 ed., 2013.
- [59] F. R. S. B. Bleaney and K. D. Bowers, “Anomalous paramagnetism of copper acetate,” *Proc. R. Soc. A*, vol. 214, pp. 451–465, 1952.
- [60] S. Han, T. Tufekci, T. Spiller, and E. Aydiner, “Entanglement in (1/2,1) mixed-spin xy model with long-range interaction,” *International Journal of Theoretical Physics*, pp. 1–10, 2011.
- [61] E. Albayrak, “The Mixed Spin-1/2 and Spin-1 Ising-Heisenberg Model in the Mean-Field Approximation : a New Approach,” *Chinese Phys. Lett.*, vol. 35, no. 3, pp. 1–6, 2018.
- [62] Y. Belmamoun and M. Kerouad, “Phase transition and magnetic properties of a bond-diluted mixed spin-1 and spin- 1/2 Ising model with the uniaxial and biaxial single-ion anisotropy,” *Phys. Scr.*, vol. 77, no. 025706, pp. 1–7, 2008.
- [63] A. Dakhama, M. Azhari, and N. Benayad, “Exact phase diagram for the mixed spin-1/2 and spin-S Ising models on the square lattice Exact phase diagram for the mixed spin-1/2 and spin-S Ising models on the square lattice,” *J. Physics Commun.*, vol. 2, no. 065011, pp. 1–8, 2018.
- [64] J.-L. Guo, X.-L. Huang, and H.-S. Song, “Effects of anisotropy and external magnetic field on the thermal entanglement in a (1/2,1) mixed-spin Heisenberg model,” *Phys. Scr.*, vol. 76, pp. 327–331, 2007.

- [65] W. Fei, J. Honghui, Z. Hailiang, Z. Xueao, and C. Shengli, “Thermal entanglement in a mixed-spin Heisenberg XXZ model under a nonuniform external magnetic field,” *Sci. China Ser. G Physics, Mech. Astron.*, vol. 52, no. 12, pp. 1919–1924, 2009.
- [66] A. Karlsson and M. Bourennane, “Quantum teleportation using three-particle entanglement,” *Phys. Rev. A*, vol. 58, no. 6, pp. 4394–4400, 1998.
- [67] V. N. Gorbachev and A. I. Trubilko, “Quantum Teleportation of an Einstein-Podolsky-Rosen Pair Using an Entangled Three-Particle State,” *J. Exp. Theor. Phys.*, vol. 91, no. 5, pp. 1036–1040, 2000.
- [68] 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*, vol. 77, no. 104402, pp. 1–10, 2008.
- [69] A. M. dos Santos, P. Brandão, A. Fitch, M. S. Reis, V. S. Amaral, and J. Rocha, “Synthesis, crystal structure and magnetic characterization of $Na_2Cu_5(Si_2O_7)_2$: An inorganic ferrimagnetic chain,” *J. Solid State Chem.*, vol. 180, pp. 16–21, 2007.
- [70] M. S. Reis, A. M. Dos Santos, V. S. Amaral, P. Brandão, and J. Rocha, “Homometallic ferrimagnetism in the zig-zag chain compound $Na_2Cu_5Si_4O_{14}$,” *Phys. Rev. B*, vol. 73, no. 214415, pp. 1–6, 2006.
- [71] M. A. Nielsen and J. Kempe, “Separable States Are More Disordered Globally than Locally,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, no. 22, pp. 5184–5187, 2001.

Apêndice A

Modelo XXX na presença de campo magnético $\vec{B} = B\hat{x}$

No modelo com campo magnético na direção x , o Hamiltoniano de interação com o campo magnético é $\mathcal{H}_{mag} = -\frac{1}{2}g\mu_B B_x(\sigma_1^x + \sigma_2^x)$, onde

$$\sigma_1^x + \sigma_2^x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

O Hamiltoniano do modelo é dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{4} \begin{pmatrix} J & 2B_x g\mu_B & 2B_x g\mu_B & 0 \\ 2B_x g\mu_B & -J & 2J & 2B_x g\mu_B \\ 2B_x g\mu_B & 2J & -J & 2B_x g\mu_B \\ 0 & 2B_x g\mu_B & 2B_x g\mu_B & J \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

e os elementos da matriz densidade desse caso são:

$$\begin{aligned} \rho_{11} = \rho_{44} &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \cosh^2 \left(\frac{\mathcal{B}_x}{2T} \right) \left[\sinh \left(\frac{\mathcal{J}}{4T} \right) + \cosh \left(\frac{\mathcal{J}}{4T} \right) \right] \\ \rho_{12} = \rho_{21} &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{1}{2} \sinh \left(\frac{\mathcal{B}_x}{T} \right) \left[\sinh \left(\frac{\mathcal{J}}{4T} \right) + \cosh \left(\frac{\mathcal{J}}{4T} \right) \right] \\ \rho_{22} = \rho_{33} &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{1}{2} e^{-\frac{3\mathcal{J}}{4T}} \left[e^{\mathcal{J}/T} \cosh \left(\frac{\mathcal{B}_x}{T} \right) + 1 \right] \\ \rho_{23} = \rho_{32} &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{1}{2} e^{-\frac{3\mathcal{J}}{4T}} \left[e^{\mathcal{J}/T} \cosh \left(\frac{\mathcal{B}_x}{T} \right) - 1 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\rho_{14} = \rho_{41} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{1}{4} e^{\frac{\mathcal{J}-4\mathcal{B}_x}{4T}} (e^{\mathcal{B}_x/T} - 1)^2$$

sendo os demais elementos iguais à ρ_{12} , isto é, $\rho_{12} = \rho_{21} = \rho_{13} = \rho_{31} = \rho_{24} = \rho_{42} = \rho_{34} = \rho_{43}$. O cálculo de $\mathcal{Z} \equiv \mathcal{Z}(\mathcal{J}, \mathcal{B}_x, T)$ fornece o mesmo resultado da equação (2.11), com a diferença que agora $\mathcal{B}_x = B_x g \mu_B / \kappa_B$.

Devemos calcular a transposta parcial para obter a condição de emaranhamento. Fazendo uso da matriz transposta parcial da equação (2.14) e como não temos nenhum elemento de matriz nulo, obtemos

$$\rho^{T_p^{(2)}} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{21} & \rho_{13} & \rho_{23} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{14} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{41} & \rho_{33} & \rho_{43} \\ \rho_{32} & \rho_{42} & \rho_{34} & \rho_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{12} & \rho_{23} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{14} & \rho_{12} \\ \rho_{12} & \rho_{14} & \rho_{22} & \rho_{12} \\ \rho_{23} & \rho_{12} & \rho_{12} & \rho_{11} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

cujos autovalores são dados por:

$$\lambda_1 = \rho_{22} - \rho_{14} \quad (\text{A.5a})$$

$$\lambda_2 = \rho_{11} - \rho_{23} \quad (\text{A.5b})$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{2} \left(\rho_{11} + \rho_{14} + \rho_{22} + \rho_{23} + \sqrt{16\rho_{12}^2 + (\rho_{11} - \rho_{14} - \rho_{22} + \rho_{23})^2} \right) \quad (\text{A.5c})$$

$$\lambda_4 = \frac{1}{2} \left(\rho_{11} + \rho_{14} + \rho_{22} + \rho_{23} - \sqrt{16\rho_{12}^2 + (\rho_{11} - \rho_{14} - \rho_{22} + \rho_{23})^2} \right) \quad (\text{A.5d})$$

A partir dos elementos de matriz (A.3), verifica-se que os três primeiros autovalores da transposta parcial (A.4) são positivos ($\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3 > 0$) para qualquer valor da constante de troca e do campo magnético. O autovalor λ_4 é positivo para $\mathcal{J} > 0$. Assim, da mesma forma que no modelo com campo na direção z , o sistema também não é emaranhado para o caso ferromagnético se o campo magnético tiver direção x . Se $\mathcal{J} < 0$, o autovalor λ_4 é positivo se a temperatura for maior ou igual à temperatura crítica, o que significa que o estado é não emaranhado. Se $T < T_c$, o autovalor o autovalor λ_4 é negativo e o estado é emaranhado. Como a negatividade λ_4 estabelece a condição de emaranhamento, tomando $\lambda_4(\mathcal{J}, \mathcal{B}_x, T_c) = 0$ obtemos a mesma temperatura crítica que obtivemos quando o campo era na direção z , dada na equação (2.16). Isso significa que mesmo que o campo magnético seja na direção x , o sistema não deixará de ser emaranhado por aplicação desse campo. O sistema será emaranhado se $\lambda_4 < 0$. Logo, impondo esta condição para λ_4 (A.5d), obtemos

a seguinte condição de emaranhamento:

$$\rho_{23}^e < \frac{4\rho_{12}^2}{\rho_{14} + \rho_{22}} - \rho_{11} \quad (\text{A.6a})$$

$$\rho_{23}^s \geq \frac{4\rho_{12}^2}{\rho_{14} + \rho_{22}} - \rho_{11} \quad (\text{A.6b})$$

Como colocamos a condição de emaranhamento novamente em função do elemento ρ_{23} , obtemos a mesma distância entre estados da equação (2.21). Para a distância entre estados ser uma medida de emaranhamento, ela deve ser mínima, o que ocorre quando ρ_{23}^s for mínimo, isto é, quando

$$\rho_{23}^s = \frac{4\rho_{12}^2}{\rho_{14} + \rho_{22}} - \rho_{11} . \quad (\text{A.7})$$

Dessa forma, a medida de emaranhamento para um estado emaranhado ρ_e é dada por

$$\mathcal{E}(\rho_e) = -\mathcal{E}_0\sqrt{2} \left[\rho_{23}^e - \left(\frac{4\rho_{12}^2}{\rho_{14} + \rho_{22}} - \rho_{11} \right) \right] , \quad (\text{A.8})$$

que é generalizada para um estado qualquer:

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, -\mathcal{E}_0\sqrt{2} \left(\rho_{23} - \frac{4\rho_{12}^2}{\rho_{14} + \rho_{22}} + \rho_{11} \right) \right] , \quad (\text{A.9})$$

Com o auxílio dos elementos de matriz (A.5), podemos escrever a medida de emaranhamento

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{e^{-\frac{3\mathcal{J}}{2T}} \left(-2e^{\mathcal{J}/T} - 3e^{\frac{2\mathcal{J}}{T}} + 1 \right)}{\mathcal{Z} \left(\mathcal{Z} - 2e^{\frac{\mathcal{J}}{4T}} \right)} \right] . \quad (\text{A.10})$$

Observe que podemos expressar a medida de emaranhamento de forma que a dependência com o campo magnético externo (B_x) apareça apareça somente em \mathcal{Z} . Na equação (A.10), já adotamos que $\mathcal{E}_0 = \sqrt{2}$ pelo mesmo argumento usado no Capítulo 2. Na forma mais geral, substituindo a função \mathcal{Z} , temos:

$$\mathcal{E}(\rho) = \max \left[0, \frac{-2e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} - 3e^{\frac{2\mathcal{J}}{T}} + 1}{4e^{\frac{\mathcal{J}}{T}} \cosh\left(\frac{\mathcal{B}_x}{T}\right) + 2e^{\frac{2\mathcal{J}}{T}} \cosh\left(\frac{2\mathcal{B}_x}{T}\right) + e^{\frac{2\mathcal{J}}{T}} + 1} \right] . \quad (\text{A.11})$$

Observe pela Figura A.1 como a medida de emaranhamento (A.11) está diretamente relacionada com o critério de Peres-Horodecki pelo fato de que só há emaranhamento se o autovalor λ_4 (A.5d) for negativo, como discutimos anteriormente. A Figura A.1 ilustra muito bem a condição de emaranhamento obtida (A.6), onde a linha vertical pontilhada é a temperatura crítica.

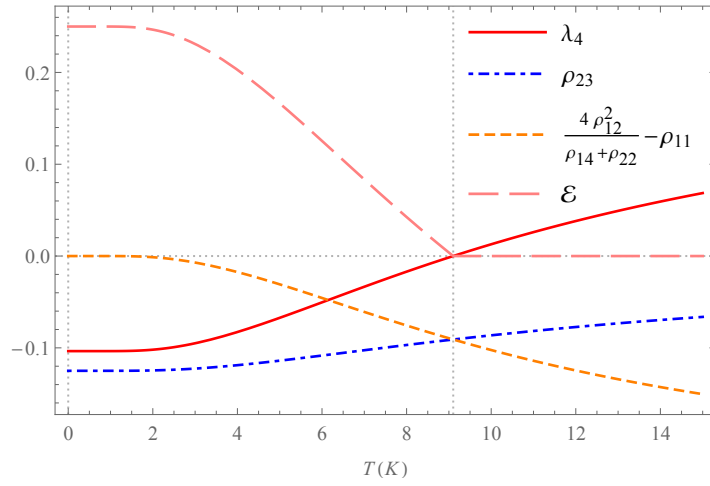


Figura A.1: Medida de emaranhamento (A.11), autovalor λ_4 (A.5d) e a condição de emaranhamento (A.6) para $\mathcal{B}_x = 10\text{K}$ e $\mathcal{J} = -10\text{K}$.

Apêndice B

Modelo XXX na presença de campo magnético $\vec{B} = B\hat{x} + B\hat{z}$

O Hamiltoniano de interação com o campo magnético é $\mathcal{H}_{mag} = -\frac{1}{2}\vec{\mathcal{B}} \cdot \vec{\sigma} = -\frac{1}{2}\mathcal{B}(\sigma_1^x + \sigma_2^x + \sigma_1^z + \sigma_2^z)$. Assim, o Hamiltoniano do modelo, na forma matricial, é dado por

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{4} \begin{pmatrix} 4\mathcal{B} + \mathcal{J} & 2\mathcal{B} & 2\mathcal{B} & 0 \\ 2\mathcal{B} & -\mathcal{J} & 2\mathcal{J} & 2\mathcal{B} \\ 2\mathcal{B} & 2\mathcal{J} & -\mathcal{J} & 2\mathcal{B} \\ 0 & 2\mathcal{B} & 2\mathcal{B} & \mathcal{J} - 4\mathcal{B} \end{pmatrix} \quad (\text{B.1})$$

e os elementos da matriz densidade são

$$\rho_{11} = \frac{1}{4\mathcal{Z}} e^{\frac{\mathcal{J}}{4T}} \left[1 + 2\sqrt{2} \sinh\left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}\right) + 3 \cosh\left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}\right) \right] \quad (\text{B.2a})$$

$$\rho_{22} = \rho_{33} = \frac{1}{4\mathcal{Z}} e^{-\frac{3\mathcal{J}}{4T}} \left[e^{\mathcal{J}/T} \left(\cosh\left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}\right) + 1 \right) + 2 \right] \quad (\text{B.2b})$$

$$\rho_{12} = \rho_{13} = \frac{1}{2\mathcal{Z}} e^{\frac{\mathcal{J}}{4T}} \sinh^2\left(\frac{\mathcal{B}}{\sqrt{2}T}\right) \quad (\text{B.2c})$$

$$\rho_{23} = \frac{1}{4\mathcal{Z}} e^{-\frac{3\mathcal{J}}{4T}} \left[e^{\mathcal{J}/T} \left(\cosh\left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}\right) + 1 \right) - 2 \right] \quad (\text{B.2d})$$

$$\rho_{24} = \rho_{34} = \frac{1}{8\mathcal{Z}} e^{\frac{\mathcal{J}-4\sqrt{2}\mathcal{B}}{4T}} \left(e^{\frac{\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}} - 1 \right) \left[(\sqrt{2}-1) e^{\frac{\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}} + \sqrt{2} + 1 \right] \quad (\text{B.2e})$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{4\mathcal{Z}} e^{\frac{\mathcal{J}}{4T}} \left[1 - 2\sqrt{2} \sinh\left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}\right) + 3 \cosh\left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}\right) \right] \quad (\text{B.2f})$$

com $\rho_{ij} = \rho_{ji}$, os demais elementos nulos e $\mathcal{Z} = e^{-\frac{3\mathcal{J}}{4T}} \left[e^{\mathcal{J}/T} \left(2 \cosh\left(\frac{\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}\right) + 1 \right) + 1 \right]$.

A transposta parcial é dada por

$$\rho^{T_p^{(2)}} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{12} & \rho_{23} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{14} & \rho_{24} \\ \rho_{12} & \rho_{14} & \rho_{22} & \rho_{24} \\ \rho_{23} & \rho_{24} & \rho_{24} & \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

cujos autovalores são

$$\lambda_1 = \frac{1}{2\mathcal{Z}} x^{-\frac{3}{4}} (x + 1) \quad (\text{B.4a})$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2\mathcal{Z}} x^{-\frac{3}{4}} (x + 1) \quad (\text{B.4b})$$

$$\lambda_3 = \frac{1}{2\mathcal{Z}} x^{-\frac{3}{4}} y^{-\frac{1}{2}} \left[x(y + 1) + \sqrt{x^2 (y^2 - y + 1) - 2xy + y} \right] \quad (\text{B.4c})$$

$$\lambda_4 = \frac{1}{2\mathcal{Z}} x^{-\frac{3}{4}} y^{-\frac{1}{2}} \left[x(y + 1) - \sqrt{x^2 (y^2 - y + 1) - 2xy + y} \right] \quad (\text{B.4d})$$

onde $x = e^{\frac{\mathcal{J}}{T}}$ e $y = e^{\frac{2\sqrt{2}\mathcal{B}}{T}}$.