



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – CCEN
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

TESE DE DOUTORADO

PADRÕES DE EMARANHAMENTO E EFEITOS DE TOPOLOGIA EM AGLOMERADOS DE SPIN QUÂNTICOS

por

Fredson Braz Matos dos Santos

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco como parte dos requisitos para obtenção do título de Doutor em Física.

Banca Examinadora:

Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo (Orientador-UFPE)
Prof. Daniel Felinto Pires Barbosa (DF - UFPE)
Prof. José Wellington Rocha Tabosa (DF - UFPE)
Prof. Carlile Campos Lavor (IMECC – Unicamp)
Prof. Francisco Castilho Alcaraz (IFSC-USP)

Recife - PE, Brasil
Dezembro - 2009

Universidade Federal de Pernambuco
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Departamento de Física

Fredson Braz Matos dos Santos

**PADRÕES DE EMARANHAMENTO E EFEITOS DE TOPOLOGIA
EM AGLOMERADOS DE SPIN QUÂNTICOS**

*Trabalho apresentado ao Programa de Pós-graduação em
Física do Departamento de Física da Universidade Federal
de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do
grau de Doutor em Física.*

Orientador: *Antônio Murilo Santos Macêdo*

Recife

17 de Dezembro de 2009

Santos, Fredson Braz Matos dos.

Padrões de emaranhamento e efeitos de topologia
em aglomerados de spin quânticos / Fredson Braz
Matos dos Santos. - Recife : O Autor, 2009.

xvi, 124 folhas: il. fig.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de
Pernambuco. CCEN. Física, 2009.

Inclui bibliografia e apêndice.

1. Física do estado sólido. 2. Spin. 3. Topologia.
I. Título.

530.4 CDD (22.ed.) FQ 2010-004



Universidade Federal de Pernambuco
Departamento de Física – CCEN
Programa de Pós-Graduação em Física
Cidade Universitária - 50670-901 Recife PE Brasil
Fone (+55 81) 2126-8449/2126-8450 - Fax (+55 81) 3271-0359
<http://www.df.ufpe.br/pg> e-mail: posgrad@df.ufpe.br

Parecer da Banca Examinadora de Defesa de Tese de Doutorado

Fredson Braz Matos dos Santos

PADRÕES DE EMARANHAMENTO E EFEITOS DE TOPOLOGIA EM AGLOMERADOS DE SPIN QUÂNTICOS

A Banca Examinadora composta pelos Professores Antônio Murilo Santos Macêdo (Presidente e Orientador), Daniel Felinto Pires Barbosa, José Wellington Rocha Tabosa, todos do Departamento de Física da Universidade Federal de Pernambuco, Carlile Campos Lavor, do Instituto de Matemática Estatística e Ciência da Computação da Universidade Estadual de Campinas e Francisco Castilho Alcaraz, do Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, consideram o candidato:

☒ Aprovado

☐ Reprovado

☐ Em exigência

Secretaria do Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física do Centro de Ciências Exatas e da Natureza da Universidade Federal de Pernambuco aos dezessete dias do mês de dezembro de 2009.

Prof. Antônio Murilo Santos Macêdo
Presidente e Orientador

Prof. Daniel Felinto Pires Barbosa

Prof. José Wellington Rocha Tabosa

Prof. Carlile Campos Lavor

Prof. Francisco Castilho Alcaraz

A minha Família

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente a Deus por tudo o que Ele tem feito em minha vida. Nada disso teria sido possível sem a sua ajuda.

A minha esposa Helena, por ter sempre estado ao meu lado e me apoiado.

A minha família que tem me apoiado incondicionalmente em tudo. Obrigado: Chiquinho (pai), Ângela (mãe), Júnior, Pretinha e Jaqueline (irmãos).

Ao professor Antônio Murilo que, com muito profissionalismo, me orientou neste trabalho.

Aos colegas de trabalho: Anderson, Francisco, Gabriel, Gerson e Sérgio, pelas discussões estimulantes.

Aos meus ex-orientadores: Delson (Iniciação Científica) e Tabosa (Mestrado), os quais contribuíram diretamente para a minha carreira.

A todos os professores, funcionários e estudantes do Departamento de Física da UFPE que, direta ou indiretamente, colaboraram para a realização deste trabalho.

Ao CNPq pela oportunidade que me concedeu de realizar este trabalho concedendo uma bolsa de doutorado.

Não há sabedoria, nem inteligência, nem conselho contra o Senhor. O cavalo prepara-se para o dia da batalha, mas do Senhor vem a vitória

—SALOMÃO (Pv 21:30,31)

RESUMO

Nesta tese fizemos uma análise detalhada do comportamento dos emaranhamentos térmico e do estado fundamental de aglomerados de spin quânticos. Para o caso de dois spins, encontramos e caracterizamos uma rica estrutura de padrões de emaranhamento térmico em função dos parâmetros do hamiltoniano do modelo XY. Propusemos um procedimento para se extrair a componente quântica das funções de correlação de spin, cujo comportamento é afetado por variações nos padrões de emaranhamento. Aglomerados de três e quatro spins foram considerados numa análise do efeito de modificações na topologia da rede de acoplamentos, pela variação da interação entre spins não vizinhos, sobre o emaranhamento entre spins e também sobre o emaranhamento global. Os resultados demonstram que a presença de acoplamentos adicionais não apenas cria emaranhamento multipartite mas também modifica sua natureza.

Palavras-chave: padrões de emaranhamento, aglomerados de spin, topologia

ABSTRACT

In this thesis we performed a detailed analysis of the behavior of thermal and ground-state entanglement of quantum spin clusters. For the case of two spins, we discovered and characterized a rich structure of thermal entanglement patterns as functions of the hamiltonian parameters of XY model. We proposed a procedure to extract the quantum component of spin correlation functions, whose behavior is affected by variations on the entanglement patterns. Clusters of three and four spins were considered for an analysis of the effect of modifications in the topology of the network of couplings, by the variation of the interaction among non-neighboring spins, on both the pairwise entanglement and the global entanglement. The results demonstrated that the presence of additional couplings not only create multipartite entanglement but also can modify its nature.

Keywords: entanglement patterns, spin clusters, topology

SUMÁRIO

Capítulo 1—Introdução	1
Capítulo 2—Emaranhamento: Propriedades e quantificadores	6
2.1 Emaranhamento e não-localidade: Evolução das ideias	7
2.2 Emaranhamento de estados puros	9
2.2.1 A Decomposição de Schmidt	10
2.2.2 Entropia de von Neumann	11
2.2.3 Concorrência	12
2.3 Emaranhamento de estados mistos	15
2.3.1 Operações Locais e Comunicação Clássica - OLCC	15
2.3.2 Requisitos de um quantificador de emaranhamento	17
2.3.3 Emaranhamento de Formação	18
2.3.4 A fórmula de Wootters	20
2.3.5 A Negatividade	23
2.3.6 Emaranhamento Global	24
2.4 Aplicações em Física da Matéria Condensada	25
2.4.1 Redes de spin em computação quântica	25
2.4.2 Emaranhamento em cadeias de spin quânticas	28
2.4.3 Emaranhamento na cadeia XY no limite termodinâmico	30
2.4.4 Entropia de Blocos	34
2.4.5 O emaranhamento como classificador de ordem quântica	35
Capítulo 3—Emaranhamento no modelo XY de dois spins	38
3.1 Emaranhamento no Estado fundamental	39
3.2 Emaranhamento no Estado Térmico	42
3.3 Padrões de emaranhamento térmico	47
3.4 Funções de correlação de spin puramente quânticas	52

3.4.1	Decomposições ótimas	52
3.4.2	Caso 1: $\Lambda_1 = \lambda_4$ e $C = C''$	54
3.4.3	Caso 2: $\Lambda_1 = \lambda_2$ e $C = C'$	54
3.5	Funções de correlação de spin	55
3.5.1	Caso $\Lambda_1 = \lambda_4$	56
3.5.2	Caso $\Lambda_1 = \lambda_2$	57
Capítulo 4—Efeitos de topologia em sistemas com três e quatro qubits		64
4.1	Emaranhamento em sistemas de 3 spins	65
4.1.1	Emaranhamento na configuração triângulo	65
4.1.2	Emaranhamento na configuração trímero	68
4.1.3	Modelo interpolador com acoplamento de segundos vizinhos ajustável	72
4.1.3.1	Caso isotrópico $\gamma = 0$	73
4.1.3.2	Caso anisotrópico $\gamma \in (0, 1]$	75
4.1.3.3	Emaranhamento global e armazenado em pares	77
4.2	Emaranhamento em sistemas de 4 spins	80
4.2.1	Cadeia XY com interação de primeiros vizinhos	80
4.2.2	Sistema LMG com interação de primeiros vizinhos	85
4.2.3	Análise das concorrências no modelo interpolador	90
4.2.3.1	Caso Isotrópico $\gamma = 0$	90
4.2.3.2	Caso anisotrópico $\gamma \in (0, 1)$	92
4.2.4	Emaranhamento global e armazenado em pares	97
Capítulo 5—Conclusões e Perspectivas		100
Apêndice A—Emaranhamento térmico para aglomerados de 3 spins		102
Apêndice B—Emaranhamento em sistemas de 4 spins em temperatura finita		105
Apêndice C—Emaranhamento em integrais de trajetória de estados coerentes		109
C.1	Estados coerentes de momentum angular	109
C.2	Integrais de trajetória de estados coerentes de spin	112
C.3	Aproximação semiclássica	114
C.4	Emaranhamento em integrais de trajetória de estados coerentes de spin .	116

LISTA DE FIGURAS

2.1	Diferentes níveis de classicalidade. As setas cheias indicam implicações existentes entre diferentes níveis enquanto que as setas como ponto de interrogação indicam possíveis implicações ainda não estabelecidas. [Figura retirada da ref. [58]]	8
2.2	Representação de ambiente das operações quânticas $\rho \rightarrow \Phi(\rho)$. À esquerda, o sistema inicial está no estado ρ_s separável do ambiente que está no estado ρ_a . Uma operação unitária U atua sobre o conjunto <i>sistema+ambiente</i> levando ao estado $\rho' = U^\dagger \rho_s \otimes \rho_a U$. O estado final do sistema principal é obtido através do traço parcial sobre o ambiente $\sigma = \text{Tr}_a$.	16
2.3	Diagrama ilustrativo dos processos de formação e destilação de emaranhamento	19
2.4	Disposição geométrica dos números complexos $\lambda_i e^{-2i\theta_i}$ para os casos de estados separáveis à esquerda e estados emaranhados à direita. Em ambos casos, é possível visualizar que a quantidade $\lambda_1 - \sum_{j=2}^4 \lambda_j e^{-2i\theta_j} \lambda_j = 0$ assume o menor valor possível resultando também na minimização da correlância média.	21
2.5	Realização física de sistemas de qubits. Em (a) os qubits correspondem aos spins de elétrons aprisionados em pontos quânticos. Em (b), temos uma rede de íons aprisionados em micro-armadilhas. Na parte (c), os qubits correspondem a spins nucleares cujo acoplamento indireto é mediado por elétrons através de interação hiperfina.[Figuras extraídas de: (a)C. Veronica, W. A. Coish, O. Gywat e D. Loss, Nanotechnology 16 , R27 (2005)(b)J. I. Cirac e P. Zoller, Nature 404 , 579 (2000);(c)B. E. Kane, Nature 393 , 133]	27
2.6	Mapeamento de uma caminhada quântica sobre um hipercubo em cadeia de spins. À esquerda, o grafo com os nós $\{ i\rangle\}$ e à direita a representação dos nós do grafo como estados no espaço de Hilbert da rede de 3 qubits. [Figura retirada da ref. [66]]	28

2.7	Concorrência entre pares do modelo XY no limite termodinâmico.	32
2.8	Divergência do alcance R da concorrência entre pares no modelo XY para $\gamma = 0.5$	33
2.9	Comportamento da derivada das concorrências $C(1)$ e $C(2)$ em relação a λ . As derivadas divergem no ponto crítico $\lambda_c = 1$ e são descontínuas no campo fatorizante λ_f	33
2.10	Representação de uma cadeia XY com o bloco de L spins contíguos. Calculando a matriz reduzida do bloco, pode-se determinar a entropia de emaranhamento S_L	34
2.11	Classificação de Wen [52] dos diversos tipos de ordens com ou sem quebra de simetria. As caixas em cinza correspondem às ordens que podem ser descritas pelas teorias de Landau.	36
3.1	Concorrência do estado fundamental em função do campo magnético b para os modelos XX ($\gamma = 0$), modelo Ising ($\gamma = 0$) e um modelo com anisotropia intermediária $\gamma = 0.5$. Os pequenos círculos preenchidos correspondem ao valor da concorrência em $ b = \sqrt{1 - \gamma^2}$	41
3.2	Gráficos da concorrência em função dos parâmetros b e γ para diferentes temperaturas.	45
3.3	Temperatura crítica T_c em função dos parâmetros b e γ . Na parte superior está o gráfico $T_c(b, \gamma)$ e na parte inferior, um gráfico da curva de descontinuidade $b_t(\gamma)$ que tende a zero para $\gamma = 1$ e diverge em $\gamma = 0$	46
3.4	Padrões de comportamento da concorrência em função da temperatura. A parte a) mostra no diagrama $b \times \gamma$ as três regiões distintas (I), (II) e (III) delimitadas pelas curvas $b_c = \sqrt{1 - \gamma^2}$ e pela curva $b_t(\gamma)$. Os gráficos apresentados em b-d) contém amostras de $C \times T$ em cada uma dessas regiões. O gráfico em e) mostra o comportamento de $C \times T$ para $\gamma = 0$ na região (II), o qual é ligeiramente diferente do comportamento para $\gamma \neq 0$	49

3.5	Padrões de emaranhamento $C \times b$ com γ e T fixos. O diagrama em a) apresenta os dois padrões distintos (I) e (II) e com uma linha hachurada sobre o eixo $\gamma = 0$, indicando que o comportamento na região (II) para $\gamma = 0$ é diferente do caso $\gamma \in (0, 1]$. Em b) e c), são apresentados gráficos representativos dos padrões (I) e (II) respectivamente, enquanto que em d), os gráficos correspondem ao comportamento de $C \times b$ sobre a linha hachurada.	50
3.6	Padrões de emaranhamento $C \times \gamma$ com b e T fixos. O diagrama em a) apresenta os quatro padrões distintos (I) – (IV). Em b-d), são apresentados gráficos representativos para cada um dos padrões.	51
3.7	Comportamento das funções de correlação de spin como função da temperatura para as regiões (I), (II) e (III) do diagrama $b \times \gamma$ da figura 3.4. As linhas cheias representam a componente puramente quântica Γ_{xx}^Q da função de correlação completa Γ_{xx} apresentada através de linhas pontilhadas. . .	58
3.8	Comportamento da funções de correlação de spin como função da temperatura para as regiões (I), (II) e (III) do diagrama $b \times \gamma$ da figura 3.4. As linhas cheias representam a componente puramente quântica Γ_{yy}^Q da função de correlação completa Γ_{yy} apresentada através de linhas pontilhadas. . .	60
3.9	Comportamento das funções de correlação de spin como função da temperatura para as regiões (I), (II) e (III) do diagrama $b \times \gamma$ da figura 3.4. As linhas cheias representam a componente puramente quântica Γ_{zz}^Q da função de correlação completa Γ_{zz} apresentada através de linhas pontilhadas. . .	61
3.10	Verificação de um campo fatorizante b_F para $\gamma = 0.5$. Na parte (a), gráficos das funções de correlação de spin quânticas $\Gamma_{\alpha\alpha}^Q$ mostram que todas se anulam em um "ponto" comum b_F . Na parte (b), o comportamento de b_F em função da temperatura. A linha pontilhada corresponde ao campo crítico $b_c = \sqrt{1 - \gamma^2} \simeq 0.866$	63
4.1	Cadeias de 3 spins nas topologias trímero e triângulo. A interação entre os spins 1 e 3 diferencia as duas configurações.	65
4.2	Concorrências entre spins vizinhos $C(1)$ e entre segundos vizinhos $C(2)$ em função do campo magnético b . As linhas pontilhadas referem-se à configuração trímero e as linhas cheias à configuração triângulo. Os círculos cheios e semi-cheios são pontos de descontinuidade nas concorrências para o triângulo e o trímero respectivamente.	71

4.3	Configuração do modelo interpolador com interação entre os spins extremos 1 e 3 controlada pelo parâmetro m que varia de $m = 0$ (trímero) até $m = 1$ (triângulo)	73
4.4	Comportamento das concorrências $C(1)$ e $C(2)$ em função do parâmetro de interação m para o caso isotrópico.	74
4.5	Padrões de comportamento de $C \times m$ no espaço dos parâmetros $b \times \gamma$. Em (a), são apresentadas as regiões correspondentes a esses padrões e em (b-d), amostras destes comportamentos.	76
4.6	Comportamento do emaranhamento global em função do campo magnético b . As linhas pontilhadas referem-se ao trímero e as linhas cheias à configuração triângulo. Nos pontos $b = 0$ e $b = b_c$, a função Q não é definida. Isto é caracterizado no gráfico pela descontinuidade de Q em b_c e pela círculo vazio em $b = 0$	78
4.7	Padrões de comportamento do emaranhamento global Q e da parte armazenada em pares Q_p em função do parâmetro de interação m . A parte (a) da figura mostra no diagrama $b \times \gamma$ regiões referentes a diferentes padrões. A linha pontilhada na transição entre (II) e (III) significa que não ocorre uma mudança de comportamento de Q, Q_p no cruzamento desta linha, o que ocorre com $C(1)$ como visto na figura 4.5. As figuras (b-d) são amostras do comportamento de Q, Q_p em função de m em cada região.	79
4.8	Configuração dos sistemas de 4 spins analisadas neste trabalho. À esquerda, a configuração XY onde apenas spins vizinhos interagem. À direita, o sistema LMG onde todos os spins interagem entre si com a mesma constante de acoplamento.	80
4.9	curvas de estados fundamentais degenerados na cadeia XY de 4 spins. . .	84
4.10	Curvas de degenerescência $E_6 = E_{15}$ para a cadeia LMG . As curvas se ajustam bem a setores de elipses, $b_c \approx (3/2)\sqrt{1 - \gamma^2}$ e $b_0 \approx (1/2)\sqrt{1 - \gamma^2}$	87
4.11	Concorrência entre primeiros vizinhos $C(1)$ e entre segundos vizinhos $C(2)$ em função do campo magnético b . Em (a-b), resultados para o caso isotrópico $\gamma = 0$. Em (c-d), o modelo anisotrópico $\gamma = 0.5$ e, finalmente, o modelo Ising $\gamma = 1$ é apresentado em (e-f). As linhas pontilhadas referem-se às cadeias XY enquanto as linhas cheias às cadeias LMG . Os círculos cheios e semi-cheios especificam os valores das concorrências nos pontos de degenerescência do estado fundamental dos modelos LMG e XY respectivamente.	89

- 4.12 Cadeia de 4 spins com acoplamento entre segundos vizinhos controlado por uma parâmetro de interação m que varia de 0 (Cadeia XY) a 1 (cadeia LMG). 90
- 4.13 Concorrências entre pares de spins em função do parâmetro m no modelo interpolador isotrópico $\gamma = 0$. As linhas pontilhadas referem-se a $C(2)$ e as linhas cheias para $C(1)$. Na parte (a), temos $b < b_0$ e na parte (b) $b_0 < b < b'_0$ 92
- 4.14 Padrões de $C(1) \times m$ no espaço dos parâmetros $b \times \gamma$. Na parte (a), vemos as regiões correspondentes a diferentes padrões de emaranhamento. As curvas cheias correspondem às curvas b_c, b'_c, b_0 e b'_0 enquanto que as linhas pontilhadas não correspondem à degenerescências do estado fundamental, mas definem transições entre padrões de emaranhamento. As figuras (b-d) são amostras de gráficos de $C(1) \times m$ em cada região mostrada na parte (a). 94
- 4.15 Padrões de $C(1) \times m$ no espaço dos parâmetros $b \times \gamma$. Na parte (a), vemos as regiões correspondentes a diferentes padrões de emaranhamento. As curvas cheias correspondem às curvas b_c, b'_c, b_0 e b'_0 enquanto que as linhas pontilhadas não correspondem à degenerescências do estado fundamental, mas definem transições entre padrões de emaranhamento. As figuras (b-d) são amostras de gráficos de $C(1) \times m$ em cada região mostrada na parte (a). 96
- 4.16 Comportamento do emaranhamento global em função do campo magnético b . As linhas pontilhadas referem-se ao modelo XY e as linhas cheias ao modelo LMG . Nos pontos $\pm b_0$ e $\pm b = b_c$, a função Q não é definida, o que pode ser visto através das descontinuidades de Q nestes pontos. O círculo cheio em $Q = 0$ para $\gamma = 1$ indica que o valor Q é conhecido nesse ponto, pois o estado fundamental é um estado completamente separável. 98
- 4.17 Padrões de $Q_p \times m$ representados no diagrama $b \times \gamma$ da figura (a) como 3 regiões distintas. As linhas pontilhadas correspondem as linhas que separam padrões de $C(1) \times m$ e $C(2) \times m$ e as linhas cheias aos pontos críticos das cadeias XY e LMG . Temos um crescimento de Q_p com m na região $(I)_{AC}$, um decaimento em $(II)_{A,B}$ e uma região especial $(III)_{A,B}$, onde Q_p apresenta um máximo local para um valor intermediário de m . As figuras (b-d) fornecem amostras de gráficos para cada um desses padrões. 99
- A.1 Concorrência no estado térmico para o modelo XY na configuração triângulo. 103

A.2	Concorrência no estado térmico para o modelo XY na configuração trímero. À esquerda, os resultados para a concorrência entre vizinhos $C(1)$ e à direita entre os spins extremos $C(2)$	104
B.1	Concorrências entre dois spins no modelo XY em temperatura finita. À esquerda são mostrados os resultados para a concorrência entre primeiros vizinhos $C(1)$ enquanto que à direita os resultados para segundos vizinhos $C(2)$	106
B.2	Concorrências entre dois spins arbitrários no modelo LMG em temperatura finita em função dos parâmetros b e γ do hamiltoniano.	107
B.3	Temperatura limite T_c em função do campo magnético para a concorrência entre primeiros vizinhos (linha pontilhada) e segundos vizinhos (linha tracejada) no modelo XY e a concorrência entre dois spins quaisquer no modelo LMG (linha cheia). Todos os gráficos foram obtidos utilizando $\gamma = 0.5$	108
C.1	Estado coerente $ z\rangle$ obtido da rotação de $ j, -j\rangle$ de um ângulo θ em torno de uma direção $\hat{n} = \sin\phi\hat{e}_1 - \cos\phi\hat{e}_2$	111
C.2	Alguns possíveis caminhos seguidos pelo sistema para ir de $ z_0\rangle$ a $ z\rangle$. As linhas pontilhadas correspondem às sucessivas integrações no plano complexo dos z'_i s intermediários.	114

LISTA DE TABELAS

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Questões controversas sobre a interpretação da mecânica quântica marcaram a teoria desde os seus primórdios [1], o que de certa forma é natural tendo em vista a forma como suas consequências contrastavam com noções amplamente aceitas pela comunidade científica como o conceito de realismo local. O emaranhamento figura como a mais marcante característica da teoria quântica que a distingue da teoria clássica. Trata-se de correlações que podem existir mesmo entre sistemas completamente isolados entre si, sem interação direta nem comunicação clássica entre eles, o que contraria diretamente a idéia de realismo local. Estas correlações foram primeiramente discutidas por Einstein em seu famoso artigo EPR [2] onde ele as apresentava como uma evidência da incompletude da teoria quântica. Schrödinger[3] discutiu também o assunto e utilizou pela primeira vez o termo emaranhamento. A questão reapareceu com os trabalhos de Bell [4] onde um conjunto de desigualdades que podiam testar a existência destas correlações não-locais na natureza foi estabelecido. Com estes resultados, experimentos envolvendo desigualdades de Bell[5] puderam ser realizados em laboratório e evidenciaram a existência de emaranhamento na natureza.

Com o surgimento da teoria da informação quântica e da computação quântica [6], o emaranhamento acabou ganhando um importante papel como recurso físico para o processamento e transmissão de informação quântica[7]. Como exemplo, podemos citar o *teleporte quântico*[8], onde emaranhamento é consumido na transferência de um estado quântico desconhecido entre dois observadores separados utilizando apenas operações locais e comunicação clássica (OLCC). Em criptografia quântica, o compartilhamento de um par EPR possibilita a transmissão de informação criptografada de maneira mais segura do que os protocolos clássicos. Algoritmos quânticos, como o algoritmo de Shor[9] para fatoração e o de Grover[10] para busca, apresentam ganhos de desempenho em relação a algoritmos clássicos na realização das mesmas tarefas. Apesar de ainda não ter sido provado, acredita-se que o emaranhamento tem um papel fundamental no ganho de

desempenho em algoritmos quânticos. Por estes e outros motivos, deu-se início a uma intensa atividade de pesquisa que pode ser denominada *teoria do emaranhamento*[11, 12] que trata da quantificação, classificação e utilização do emaranhamento em aplicações práticas.

Sem dúvida, o primeiro grande desafio para a teoria do emaranhamento é quantificar o emaranhamento existente em um estado quântico arbitrário. Para o caso de emaranhamento bipartite (entre dois subsistemas), existem quantificadores como a entropia de emaranhamento[13] e a concorrência[14] válidos para estados quânticos puros. Entretanto, em sistemas mais realistas o estado quântico é misto devido à perda de informação resultante do contato com o ambiente externo. Nesses casos, o problema é bem mais complicado e, muitas vezes, não é possível nem mesmo afirmar se um estado é emaranhado ou não. Emaranhamento de formação[13], concorrência e negatividade[15] são os quantificadores mais comuns neste caso, mas só existe solução exata para o caso do emaranhamento de formação e concorrência entre dois sistemas de dois níveis (qubits)[14]. Para sistemas de dimensão arbitrária, é possível utilizar a negatividade ou uma outra versão da concorrência[16] para encontrar limitantes inferiores e superiores para a concorrência em estados mistos[17, 18].

Mais recentemente, o estudo do emaranhamento ganhou uma motivação adicional com as aplicações em sistemas de interesse em física da matéria condensada[19] como os sistemas de spin e pseudo-spin, que são candidatos à realização física de computadores quânticos[20, 21, 22, 23]. É necessário, portanto, conhecer o grau de emaranhamento presente e como ele se comporta com a variação de parâmetros do hamiltoniano de tal forma que seja possível, por exemplo, gerar de forma controlada estados quânticos com quantidades especificadas de emaranhamento para aplicações em computação quântica. Com esta e outras motivações, estudos de emaranhamento em aglomerados de spin [24, 25, 26, 27, 28, 29] tem sido frequentemente realizados. Para estes sistemas, é possível obter soluções analíticas fechadas para o emaranhamento tanto no estado fundamental quanto no estado térmico. Com respeito ao emaranhamento térmico, podem existir regiões no espaço dos parâmetros onde o emaranhamento aumenta com a temperatura[24, 25, 26, 27, 30, 31]. Outra característica peculiar é que o emaranhamento não decai assintoticamente com a temperatura mas colapsa após uma certa temperatura limite[32]. Outro efeito notável da presença de ambientes externos é a criação de emaranhamento por ambiente onde dois subsistemas desacoplados em um estado inicial separável evoluem para um estado emaranhado devido ao contato com um ambiente comum [33, 34, 35, 36].

Estudos de emaranhamento em redes de spin quânticas envolvem transições de fase

quânticas[37], onde se tem verificado que o emaranhamento apresenta comportamento de escala bem definido nas proximidades de pontos críticos quânticos. Este comportamento foi inicialmente constatado no modelo XY através da divergência da derivada da concorrência entre dois spins em relação ao campo magnético externo[38, 39, 40] e, também, através do emaranhamento entre um bloco de spins contíguos e o restante da cadeia[41, 42, 43, 44], medido pela entropia de von Neumann da matriz densidade reduzida. Estes resultados indicam que o emaranhamento pode ser o responsável pela diferença no comportamento das funções de correlações nas proximidades do ponto crítico em relação ao seu comportamento longe do ponto crítico. Outro importante resultado é a existência de campos fatorizantes ou intervalos de separabilidade, os quais separam tipos distintos de emaranhamento denominados de paralelo e antiparalelo[45, 46, 47]. Em sistemas com interação de curto alcance, o emaranhamento entre dois spins se restringe aos primeiros vizinhos enquanto que nas proximidades do campo fatorizante, o alcance se estende por toda a cadeia. Já em sistemas com interação de alcance infinito, como o modelo LMG [48], o emaranhamento entre dois spins é o mesmo, independentemente da distância entre eles. Estudos da entropia de blocos[49, 50, 51] mostram um comportamento semelhante ao obtido para o modelo XY , mas nos pontos críticos ocorre divergência na concorrência entre dois spins arbitrários[51].

O conceito de transições de fase quânticas como singularidades na energia livre do estado fundamental no limite termodinâmico[37] não se aplica em aglomerados com poucos spins. Da mesma forma, ordens quânticas como ordenamentos no estado fundamental separadas por transições de fase quânticas também não parecem fazer sentido. Entretanto, se considerarmos que a ordem quântica também caracteriza diferentes padrões de emaranhamento[52], é possível estender esse conceito para sistemas com poucos spins pela caracterização de diferentes padrões de emaranhamento como funções dos parâmetros do hamiltoniano e de parâmetros externos como a temperatura do banho térmico. Nesta tese, trabalhamos na caracterização destes padrões de emaranhamento em sistemas descritos por modelos com interação XY inicialmente com apenas dois spins e, em seguida, com 3 e 4 spins onde analisamos o comportamento do emaranhamento em relação às diferentes topologias da rede de acoplamentos.

Esta tese está organizada da seguinte maneira: No capítulo 2, apresentamos inicialmente as propriedades gerais e os principais quantificadores de emaranhamento. Em seguida, apresentamos as motivações para o estudo de aglomerados de spin quânticos no contexto de informação quântica. A motivação nesse caso é que tais sistemas são candidatos à implementação de algoritmos quânticos através de um mapeamento dos mesmos

em caminhadas quânticas sobre grafos, que são utilizadas para descrever realizações de diversas portas quânticas. Em seguida, analisamos a aplicação do emaranhamento no estudo de transições de fase quânticas e na caracterização de ordens quânticas. O capítulo 3 é dedicado ao estudo do modelo XY com dois spins na presença de um campo magnético uniforme, onde estudamos o emaranhamento tanto no estado fundamental quanto no estado térmico em função de parâmetros do hamiltoniano e da temperatura do banho térmico. Foi realizada uma caracterização dos diversos padrões de emaranhamento definidos pelo comportamento da concorrência em relação aos parâmetros do hamiltoniano e da temperatura. Em seguida, passamos ao estudo das funções de correlação de spin, onde apresentamos um procedimento para extrair a componente puramente quântica, utilizando para isso as decomposições ótimas da matriz densidade que definem o emaranhamento de formação. A componente puramente quântica é sensível aos padrões de emaranhamento, o que não acontece com as funções de correlação estatísticas, que quantificam conjuntamente correlações clássicas e quânticas.

No capítulo 4, passamos ao estudo de aglomerados com 3 e 4 spins onde o objetivo foi o de analisar o efeito de mudanças de topologia devidas à inserção de interação entre spins não vizinhos. Esta análise é motivada pela necessidade de buscar otimizações de topologias para a criação e distribuição de emaranhamento. No caso de 3 spins, estudamos sistemas nas configurações trímero (cadeia aberta) e triângulo, que se diferenciam pela presença de interação entre os spins extremos na configuração triângulo. Os resultados mostram que a presença desta interação adicional gera emaranhamento entre os spins extremos ao passo que o emaranhamento entre spins vizinhos apresenta distintos padrões de comportamento conforme a interação entre os extremos é variada. Analisamos ainda o comportamento do emaranhamento global, que quantifica o emaranhamento multipartite, e da parte armazenada em concorrências entre pares, o que mostra que a interação adicional gera emaranhamento multipartite mas pode tanto criar quanto destruir emaranhamento entre pares. No caso de aglomerados de 4 spins analisamos a cadeia XY e o sistema LMG onde todos os spins interagem mutuamente com a mesma constante de acoplamento. Estes sistemas se diferenciam, portanto, pela presença de interação de segundos vizinhos no sistema LMG . Nesse caso, tanto a concorrência entre spins vizinhos quanto entre segundos vizinhos podem apresentar diferentes comportamentos em relação à adição de interação em dois novos pares de spins. A identificação dos padrões de emaranhamento de pares foi realizada através do comportamento do emaranhamento global e da parte armazenada em pares. Um comportamento comum aos casos de 3 e 4 qubits é que as interações adicionais modificam a quantidade de certos tipos de emaranhamento,

além de, em certas regiões, modificar a natureza deste emaranhamento conforme evidenciado pela transferência de emaranhamento em pares para a parte indisponível para concorrência de pares. Apresentamos, ainda, nos apêndices A e B, resultados para a concorrência no estado térmico para os modelos de 3 e 4 spins nas diferentes topologias analisadas.

Apresentamos no apêndice C, perspectivas sobre a utilização do formalismo de integrais de trajetória de estados coerentes de spin[53, 54, 55] no cálculo de emaranhamento em sistemas de spin. A construção dos estados coerentes de spin através do método geral apresentado em [54] é realizada e os resultados são utilizados para o cálculo da entropia de emaranhamento de um bloco de spin de uma cadeia em relação aos demais spins no ponto crítico quântico, sendo recuperada a dependência logarítmica com o tamanho do bloco[55]. Apesar de não apresentarmos nenhum resultado original, os resultados apresentados e o método empregado se mostram promissores para aplicações em pesquisas futuras. O capítulo 5 é reservado para as conclusões e principais perspectivas do trabalho apresentado nesta tese.

CAPÍTULO 2

EMARANHAMENTO: PROPRIEDADES E QUANTIFICADORES

Emaranhamento é um dos mais importantes conceitos na distinção entre a mecânica quântica e a clássica, pois descreve de um tipo particular de correlação que não pode ser criada por nenhum sistema clássico. A natureza, muitas vezes contra-intuitiva, destas correlações se tornou alvo de intensas discussões desde os primórdios da teoria quântica [2, 4]. No entanto, apenas recentemente com o advento da computação quântica e da informação quântica [6], o conceito de estados emaranhados migrou do campo das discussões filosóficas para os laboratórios como uma fonte valiosa para o processamento e transmissão de informação quântica [7] com velocidades surpreendentemente superiores às obtidas usando algoritmos que não utilizam estas correlações. Não é exagero afirmar que o emaranhamento é tão relevante para a teoria da informação quântica atualmente como a energia é para a termodinâmica. Mas não para por aí, o estudo do emaranhamento em sistemas físicos de interesse como as cadeias de spin quânticas têm sido alvo de intensa pesquisa nos últimos anos [19], principalmente devido às aplicações no estudo de transições de fase quânticas [38, 39] e, também, por esse tipo de sistema estar entre os candidatos à implementação de algoritmos quânticos [20, 21, 22, 23]. Com essa motivação, muitos esforços têm sido feitos com o intuito de gerar e controlar estados quânticos com quantidades especificadas de emaranhamento. É necessário, antes de mais nada, saber o grau de emaranhamento contido em um estado quântico arbitrário, o que não é uma tarefa fácil[11]. Em muitos casos, não é possível nem ao menos identificar se um estado arbitrário é ou não emaranhado. Entretanto, tem sido possível encontrar alguns procedimentos para realizar, ainda que de forma limitada, tal tarefa.

Este capítulo está dividido em duas seções. Inicialmente, fazemos uma revisão dos conceitos fundamentais e da quantificação de emaranhamento em estados quânticos arbitrários. Primeiramente, tratamos apenas de estados puros, para os quais é possível

quantificar o emaranhamento bipartite. Em seguida, discutimos a quantificação de emaranhamento em estados mistos arbitrários, onde temos uma solução completa apenas para o caso de emaranhamento bipartite entre dois subsistemas de dois níveis (qubits). A última seção é destinada às aplicações do emaranhamento no estudo de sistemas de interesse em matéria condensada.

2.1 EMARANHAMENTO E NÃO-LOCALIDADE: EVOLUÇÃO DAS IDEIAS

A presença da não-localidade na teoria quântica foi durante muito tempo um controverso tema de discussão sobre a completeza da teoria. O pivô de todas as discussões foi o famoso artigo EPR[2] onde as consequências deste comportamento foram evidenciadas por experimentos mentais propostos no artigo. Para vermos claramente como este comportamento surge, suponha que dois spins interagem entre si de forma a produzir o estado

$$|\psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|01\rangle + |10\rangle], \quad (2.1)$$

onde $|0\rangle$ representa o spin orientado para cima e $|1\rangle$, o spin orientado para baixo. Suponha agora que os dois spins são separados de forma a ficarem completamente desacoplados entre si e sem qualquer canal de comunicação entre eles. Se um observador com acesso a um dos spins realizar uma medição da componente z e encontrar o resultado 0, o estado do sistema é projetado para $|01\rangle$, o que significa que se imediatamente após essa medição o outro observador realizar a mesma medição sobre o seu qubit só poderá encontrar o valor 1. Isto significa que existe uma correlação entre os resultados das medições realizadas sobre os dois sistemas mesmo estando desacoplados e sem comunicação entre si. Como isso seria possível? Schrödinger [3] foi o primeiro a discutir essa questão após Einstein. Em seu trabalho ele utilizou o termo *verschränkter*, traduzido posteriormente como *emaranhamento*. Após uma série de debates envolvendo principalmente Niels Bohr e Einstein, o tema acabou adormecendo. Em 1964, Bell encontrou um conjunto de desigualdades [4], as *desigualdades de Bell*, que deveriam ser satisfeitas por qualquer teoria que não admitisse correlações não-locais. Esse resultado foi crucial para a verificação experimental de que este caráter não-local da teoria quântica é observado na natureza [5]. A partir daí, já com versões diferentes como as desigualdades CHSH [56], as desigualdades de Bell passaram a ser utilizadas como testes de separabilidade. No entanto, trabalhos posteri-

ores mostraram que as desigualdades de Bell, apesar de evidenciarem as correlações não locais, não capturam todas as formas de emaranhamento. Particularmente, foi construído um conjunto de estados [57] que apesar de satisfazerem todas as hipóteses que levavam às desigualdades de Bell, não podiam ser gerados classicamente. Posteriormente, foi demonstrado que alguns estados com esta propriedade poderiam violar as desigualdades de Bell após um procedimento denominado *destilação*, onde por intermédio de operações locais e comunicação clássica (OLCC), seria possível converter estes estados em estados puros que violariam as desigualdades de Bell. Exemplos deste tipo levantam a questão de se estados não-destiláveis satisfazem as desigualdades de Bell.

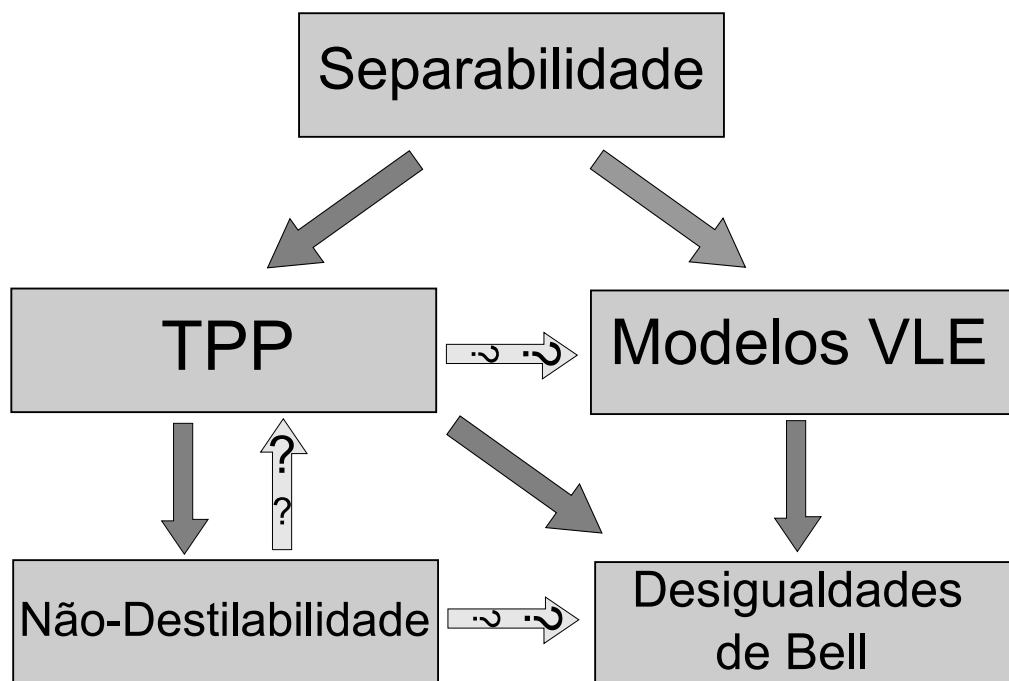


Figura 2.1 Diferentes níveis de classicalidade. As setas cheias indicam implicações existentes entre diferentes níveis enquanto que as setas como ponto de interrogação indicam possíveis implicações ainda não estabelecidas. [Figura retirada da ref. [58]]

Na figura 2.1, um diagrama demonstra os diferentes níveis de classicalidade [58] com as implicações já existentes entre eles, assim como as possíveis implicações ainda não estabelecidas satisfatoriamente. Vemos que os estados separáveis satisfazem o critério da transposta parcial positiva (TPP), admitem um modelo de variáveis locais escondidas (VLE) e satisfazem as desigualdades de Bell. Sabe-se, também, que estados emaranhados

que satisfazem o critério TPP não são destiláveis, entretanto ainda não se sabe se a validade do critério TPP é condição necessária para a não-destilabilidade. Como não existem contra-exemplos, conjectura-se que a validade de TPP também implica na existência de modelos VLE, o que ainda não está comprovado. Outra questão em aberto diz respeito à conexão entre não-destilabilidade e as desigualdades de Bell. Como podemos ver, ainda há um longo caminho a ser percorrido até entendermos a estrutura do espaço de estados da mecânica quântica.

Paralelamente a este importante desenvolvimento da classificação de estados emaranhados, surge a teoria da computação quântica e da informação quântica[6] na qual o emaranhamento encontra sua mais importante aplicação prática como uma valiosa fonte para o processamento e transmissão de informação quântica. Como exemplos de algumas aplicações, podemos citar a criptografia quântica, o teleporte, o código denso entre outras. Embora ainda não exista um consenso entre os pesquisadores, o emaranhamento pode ser o principal ingrediente responsável pelo ganho de eficiência dos algoritmos quânticos em relação aos clássicos. Nas próximas seções, passamos aos aspectos mais formais da teoria do emaranhamento, discutindo sucintamente os principais quantificadores, tanto para estados puros quanto para estados mistos.

2.2 EMARANHAMENTO DE ESTADOS PUROS

Dizemos que um estado puro arbitrário $|\psi\rangle$ é emaranhado quando ele não pode ser escrito como um produto direto entre os estados puros de cada um dos seus subsistemas, ou seja:

$$|\psi\rangle \neq |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle. \quad (2.2)$$

Fisicamente, o lado direito da (2.2) significa que operações arbitrárias realizadas sobre um dos subsistemas não afetam os demais. Em outras palavras, não existem correlações entre eles. Note que o enunciado acima define o que um estado emaranhado não é: separável. Suponha que tenhamos um estado arbitrário $|\psi\rangle$ que sabemos não ser separável, mas quão emaranhado é este estado? Ou quão distinto este estado é do conjunto de estados separáveis? Nas seções seguintes, apresentamos alguns quantificadores de emaranhamento, os quais respondem a essas questões.

2.2.1 A Decomposição de Schmidt

Considere dois subsistemas S_1 e S_2 , cujos estados pertencem aos espaços de Hilbert $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$ com bases de estados normalizados $\mathbb{B}_1 = \{|f_i\rangle\}$ e $\mathbb{B}_2 = \{|g_j\rangle\}$ respectivamente. O estado puro mais geral $|\psi\rangle$ pertencente ao espaço de Hilbert $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ é escrito como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} C_{ij} |f_i\rangle \otimes |g_j\rangle, \quad (2.3)$$

onde $C_{ij} = \langle f_i | \otimes \langle g_j | \psi \rangle$. Definindo agora o estado $|\chi_i\rangle = \sum_{j=1}^{N_2} C_{ij} |g_j\rangle$, obtemos

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{N_1} |f_i\rangle |\chi_i\rangle.$$

A matriz reduzida do primeiro subsistema ρ_1 é obtida através do traço parcial sobre os graus de liberdade do segundo subsistema, o que leva a

$$\rho_1 = \text{Tr}_2 (|\psi\rangle \langle \psi|) = \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_1} \langle \chi_j | \chi_i \rangle |f_i\rangle \langle f_j|.$$

Utilizando a definição de $|\chi_i\rangle$ obtemos que $\langle \chi_j | \chi_i \rangle = (CC^\dagger)_{ij}$, onde C é a matriz $N_1 \times N_2$ formada pelos coeficientes C_{ij} . O operador $CC^\dagger$ corresponde a uma matriz quadrada de dimensão N_1 além de ser completamente positiva, ou seja, tem todos os seus autovalores positivos. É sempre possível obter uma forma diagonal para esses coeficientes através de transformações unitárias U e V sobre as bases de $\mathcal{H}_1$ e $\mathcal{H}_2$ respectivamente. Sendo λ_i os autovalores de $CC^\dagger$, os coeficientes C_{ij} podem ser escritos como:

$$C_{ij} = \sum_{kl} U_{ik} \sqrt{\lambda_k} \delta_{kl} V_{lj}.$$

Substituindo esta expressão na expansão de $|\psi\rangle$ na base $|f_i\rangle \otimes |g_j\rangle$, obtemos a seguinte forma final:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \sqrt{\lambda_i} |u_i\rangle \otimes |v_i\rangle, \quad (2.4)$$

onde $N = \min(N_1, N_2)$, $|u_i\rangle$ e $|v_i\rangle$ são os vetores das novas bases obtidas pela atuação das transformações unitárias U e V sobre as bases iniciais. Esta decomposição é denominada *Decomposição de Schmidt* e os coeficientes λ_i os *coeficientes de Schmidt*. Observe que as correlações entre os subsistemas são explícitas nesta forma, se o primeiro subsistema

for encontrado no estado $|u_i\rangle$, então o segundo está no estado $|v_i\rangle$. O número r de λ_i 's não-nulos determinam se os dois subsistemas estão emaranhados. Se $r = 1$, o estado $|\psi\rangle$ é separável enquanto que para qualquer $r > 1$, o estado é emaranhado. Para encontramos um quantificador de emaranhamento baseado nos coeficientes de Schmidt, é necessário definirmos uma nova quantidade que satisfaça os requisitos de um quantificador de emaranhamento [13]. Uma alternativa é utilizar a *Entropia de Shannon*[59] $H = -\sum_i p_i \log p_i$, onde $\{p_i\}$ é uma distribuição de probabilidade clássica. Aqui, utilizam-se os coeficientes de Schmidt no lugar das probabilidades clássicas.

$$\mathcal{E}(|\psi\rangle) = -\sum_{i=1}^N \lambda_i \log \lambda_i, \quad (2.5)$$

onde o logaritmo é calculado na base 2.

Como a entropia de Shannon é geralmente calculada sobre as probabilidades em uma distribuição de probabilidades clássica, ela é usualmente tratada como clássica. Aqui, como ela está sendo aplicada sobre os coeficientes de uma superposição coerente de estados quânticos, a quantidade obtida é de natureza quântica.

2.2.2 Entropia de von Neumann

A entropia de von Neumann [6] é a versão quântica da entropia de Shannon. Na mecânica quântica, as distribuições de probabilidades clássicas correspondem a misturas estatísticas de estados puros expressa pela matriz densidade

$$\rho = \sum_{i=1}^r p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (2.6)$$

A matriz densidade assume a forma de uma distribuição clássica quando existe apenas elementos na diagonal. A entropia de von Neumann $S(\rho)$ é dada por:

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho). \quad (2.7)$$

Note que a definição da entropia de von Neumann não depende da decomposição particular $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$, mas apenas da matriz densidade ρ . Esta é uma propriedade importante porque existem infinitas decomposições válidas para a matriz densidade, conforme veremos adiante no contexto da quantificação de emaranhamento em estados mistos. Quando a matriz densidade é proporcional à identidade, a entropia de von Neumann é máxima

enquanto que no caso em que ρ corresponde a um estado puro, a entropia é nula.

Considere que um sistema S isolado, composto de dois subsistemas 1 e 2, está num estado puro $|\psi\rangle_{12}$. A matriz densidade associada a este estado tem, portanto, entropia nula, o que significa que existe informação máxima sobre o estado quântico do sistema. O estado de cada subsistema individualmente é obtido através da operação de traço parcial sobre o subsistema restante. Se o estado ρ_1 do subsistema 1, por exemplo, for um estado puro, então podemos afirmar que o estado inicial é separável $\rho = |\psi\rangle\langle\psi| = \rho_1 \otimes \rho_2$. Assim, o grau de emaranhamento contido em $|\psi\rangle$ pode ser medido pela entropia de von Neumann associado à matriz densidade reduzida[13]:

$$E(\rho) = S(\rho_1) = -\text{Tr}[\rho_1 \log \rho_1], \quad \rho_1 = \text{Tr}_2 \rho. \quad (2.8)$$

Fisicamente, isto significa que se tivermos dois observadores com acesso apenas ao seu subsistema, eles não podem ter acesso à informação completa presente no estado quântico global. A entropia da matriz reduzida mede o grau de informação inacessível ao se observar o sistema localmente.

Para exemplificar, vamos aplicar esta definição ao estado EPR $|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|01\rangle + |10\rangle]$. A matriz densidade ρ e as matrizes reduzidas ρ_A são dadas por:

$$\rho = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \rho_A = \rho_B = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (2.9)$$

onde usamos a base canônica $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. O estado reduzido de cada subsistema é um estado de ignorância máxima sobre o estado, ou seja, os estados $|0\rangle$ e $|1\rangle$ são igualmente prováveis. O grau de emaranhamento no estado EPR é, como esperado:

$$E(\rho_{EPR}) = 1. \quad (2.10)$$

2.2.3 Concorrência

Para o caso particular onde os subsistemas são sistemas de dois níveis, é possível expressar o emaranhamento de uma forma que facilita a manipulação algébrica. Para começar, utilizamos ao invés da base canônica, uma base ortogonal constituída dos 4 estados maximamente emaranhados:

$$|u_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|01\rangle + |10\rangle] \quad (2.11)$$

$$|u_2\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} [|01\rangle - |10\rangle] \quad (2.12)$$

$$|u_3\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} [|00\rangle + |11\rangle] \quad (2.13)$$

$$|u_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|00\rangle - |11\rangle] \quad (2.14)$$

Nesta base, um estado puro arbitrário $|\psi\rangle$ pode ser escrito como:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^4 c_i |u_i\rangle, \quad (2.15)$$

onde $c_i = \langle u_i | \psi \rangle$. A matriz densidade reduzida ρ_1 pode ser expandida na base de matrizes de Pauli $\{\mathbb{I}, \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z\}$:

$$\rho_1 = \frac{1}{2} [\mathbb{I} + i\alpha_1 \sigma^x + i\alpha_2 \sigma^y + i\alpha_3 \sigma^z] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + i\alpha_3 & \alpha_2 + i\alpha_1 \\ -\alpha_2 + i\alpha_1 & 1 - i\alpha_3 \end{bmatrix}, \quad (2.16)$$

onde

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= c_3 c_1^* - c_1 c_3^* + c_4 c_2^* - c_2 c_4^* \\ \alpha_2 &= c_2 c_3^* - c_3 c_2^* - c_1 c_4^* + c_4 c_1^* \\ \alpha_3 &= c_2 c_1^* - c_1 c_2^* + c_3 c_4^* - c_4 c_3^*. \end{aligned}$$

Agora basta encontrar os autovalores desta matriz e calcular a entropia de von Neumann utilizando a matriz reduzida em sua forma diagonal. Os autovalores são

$$\lambda_{\pm} = (1/2) \left[1 \pm \sqrt{1 - C^2} \right],$$

onde

$$C = \left| \sum_{i=1}^4 c_i^2 \right|. \quad (2.17)$$

A entropia de von Neumann pode ser escrita, então, na forma:

$$S(\rho_1) = H \left[\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \right], \quad (2.18)$$

onde $H(x) = -x \log x - (1-x) \log (1-x)$ é a *Entropia de Shannon*. Assim, o emaranhamento se anula quando $C = 0$ e é máximo quando $C = 1$. Além disso, a função $S(C)$ é monotônica crescente. Assim, a própria função C é um quantificador de emaranhamento, o qual é denominado de *Concorrência* [14]. A forma mais comum de expressar a concorrência C de um estado puro arbitrário $|\psi\rangle$ é:

$$C = |\langle \psi | \sigma^y \otimes \sigma^y | \psi^* \rangle|, \quad (2.19)$$

onde o estado $\sigma^y \otimes \sigma^y |\psi^*\rangle$ é a reversão temporal do estado $|\psi\rangle$. A concorrência tem a vantagem de fornecer um método mais operacional de determinar o emaranhamento entre dois qubits. Não é necessário, por exemplo, obter a matriz densidade reduzida de 1 qubit. No entanto, este quantificador de emaranhamento se limita ao caso de 2 qubits apenas, o que é uma limitação muito grande dada a necessidade de usar quantificadores de emaranhamento na análise de sistemas com vários qubits para aplicações em computação quântica. Na forma como foi definida, não é possível generalizar a concorrência para tratar sistemas com dimensões maiores que 2. Entretanto, outras versões da concorrência tem surgido na literatura, que podem ser estendidas para dimensão arbitrária. Uma delas é a Θ -Concorrência [60] definida como:

$$C_\Theta = |\langle \psi | \Theta | \psi \rangle|, \quad (2.20)$$

onde Θ é um operador anti-linear, ou seja $\Theta(c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle) = c_1^*\Theta|\psi_1\rangle + c_2^*\Theta|\psi_2\rangle$, que é unitário $\Theta^\dagger = \Theta^{-1}$ além de satisfazer $\Theta^2 = \mathbb{I}$. Claramente, esta definição depende do operador Θ o que significa que não se trata de uma quantidade univocamente definida. Além disso, para dimensões maiores que 2, nenhum operador Θ é conhecido tal que $C_\Theta = 0$ se e somente se o estado for separável.

Outra opção é conhecida como I -Concorrência [16] definida como

$$IC = \sqrt{2[1 - \text{Tr} \rho_r^2]}, \quad (2.21)$$

onde ρ_r é a matriz densidade reduzida de um dos subsistemas. Ao contrário da Θ -Concorrência, IC é única para um dado estado $|\psi\rangle$ além de coincidir com a concorrência para o caso de 2 qubits.

2.3 EMARANHAMENTO DE ESTADOS MISTOS

Estados quânticos puros ocorrem apenas em sistemas quânticos isolados e, por esse motivo, não descrevem de maneira completa o comportamento de sistemas físicos realísticos, onde a interação com o ambiente externo resulta em efeitos de descoerência e dissipação fazendo com que o estado do sistema não possa ser descrito por um estado puro. Nesses casos, o estado quântico corresponde a uma mistura estatística de estados puros.

Dada uma decomposição $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$, onde p_i é a probabilidade de ocorrência do estado puro $|\psi_i\rangle$, o estado misto ρ pode ser escrito como:

$$\rho = \sum_{i=1} p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|. \quad (2.22)$$

Uma dificuldade é que esta decomposição da matriz ρ em matrizes de estados puros não é única. Na verdade existem infinitas decomposições diferentes $\{q_i, |\phi_i\rangle\}$ que levam à mesma matriz densidade ρ . Usando estados sub-normalizados $|u_i\rangle$ com $\langle u_i | u_i \rangle = p_i$, é possível mostrar que as decomposições são relacionadas entre si por uma transformação unitária, ou seja:

$$\rho = \sum_i |u_i\rangle \langle u_i| = \sum_j |v_j\rangle \langle v_j| \rightarrow |u_i\rangle = \sum_j U_{ij} |v_j\rangle \quad (2.23)$$

Para estados mistos, a quantificação do emaranhamento se torna bem mais complicada, já que nesse caso existem também correlações clássicas presentes. É necessário, portanto, estabelecer claramente a distinção entre as correlações quânticas e as clássicas. É neste ponto que entra o importante conceito de *Operações Locais e Comunicação Clássica* (OLCC) que trataremos a seguir.

2.3.1 Operações Locais e Comunicação Clássica - OLCC

Para entendermos melhor o conceito de estados emaranhados com respeito à preparação dos estados, o conceito de Operações Locais e Comunicação Clássica (OLCC)[13] é fundamental, pois trata-se da operação mais geral que não pode gerar estados emaranhados. Este tipo de operação está inserido no conceito mais geral de mapas ou operações quânticas [6], as quais incluem operações unitárias, ruído e dissipação devido ao acoplamento com ambiente externo e acoplamento a um sistema de medição.

A figura 2.2 ilustra a chamada *representação de ambiente* das operações quânticas. O

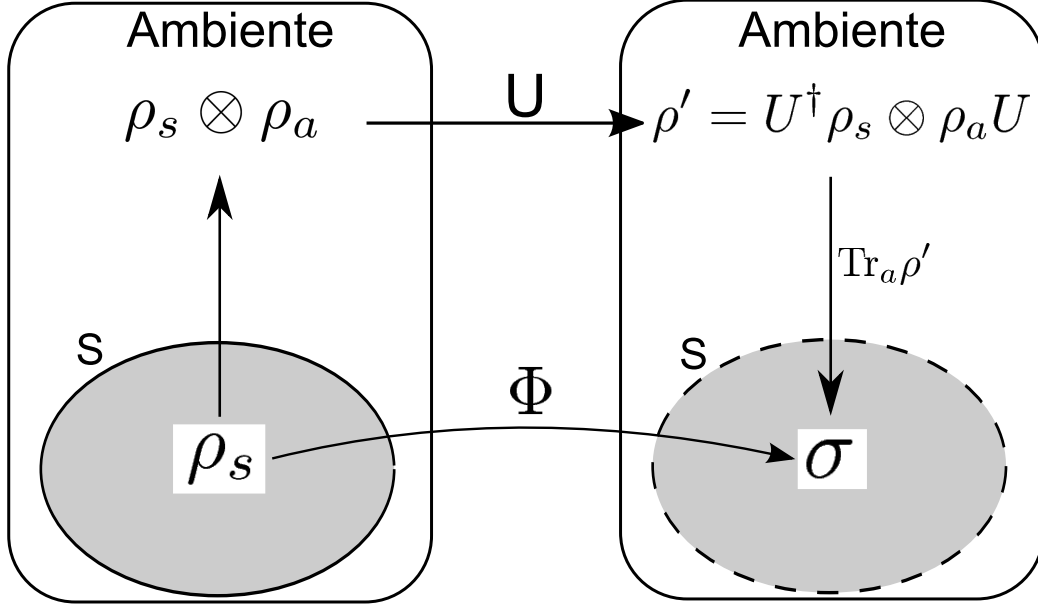


Figura 2.2 Representação de ambiente das operações quânticas $\rho \rightarrow \Phi(\rho)$. À esquerda, o sistema inicial está no estado ρ_s separável do ambiente que está no estado ρ_a . Uma operação unitária U atua sobre o conjunto *sistema+ambiente* levando ao estado $\rho' = U^\dagger \rho_s \otimes \rho_a U$. O estado final do sistema principal é obtido através do traço parcial sobre o ambiente $\sigma = \text{Tr}_a$.

sistema principal está no estado inicial ρ_s e um ambiente externo inicialmente desacoplado do sistema está no estado inicial ρ_a . O sistema principal adicionado do ambiente externo formam um sistema isolado. Uma operação unitária U atua sobre o estado $\rho = \rho_s \otimes \rho_a$ do conjunto *sistema + ambiente*. O estado final é $\rho' = U(\rho_s \otimes \rho_a)U^\dagger$ que, em geral não é separável. O estado final do sistema σ é obtido através do traço parcial sobre os graus de liberdade do ambiente, ou seja:

$$\sigma = \text{Tr}_a [U(\rho_s \otimes \rho_a)U^\dagger] \quad (2.24)$$

Uma maneira alternativa e mais elegante de expressar as operações quânticas é através dos *Operadores Soma*. Trata-se de um conjunto de operadores $\{E_k\}$ que atuam apenas sobre as variáveis do sistema principal. A única condição sobre estes operadores é que $\sum_k E_k^\dagger E_k = 1$, o que assegura que o estado final σ também é descrito por um operador positivo. O estado final σ do sistema nesta representação é:

$$\sigma = \sum_k E_k^\dagger \rho_s E_k \quad (2.25)$$

Suponhamos, agora, que o sistema principal é composto por dois subsistemas A e B . Nesse caso, as operações realizadas podem ser operações locais, ou seja, atuar sobre os subsistemas separadamente. A representação destas operações na representação de Operador Soma é:

$$\Phi_L(\rho) = \sum_i E_1^\dagger \otimes E_2^\dagger \rho E_1 \otimes E_2. \quad (2.26)$$

Estas operações locais podem envolver operações unitárias bem como medições. A combinação destas operações com a presença de comunicação clássica entre os subsistemas forma o conjunto mais geral de operações OLCC que tem a importante propriedade de não produzir emaranhamento, levando a um dos requisitos essenciais para os quantificadores de emaranhamento que veremos adiante. A presença de comunicação clássica possibilita a geração de correlações clássicas entre os subsistemas, o que também evidencia a diferença entre as correlações clássicas e as quânticas (emaranhamento).

2.3.2 Requisitos de um quantificador de emaranhamento

Os requisitos que um quantificador de emaranhamento $E(\rho)$ deve satisfazer são os seguintes:

- O estado é separável $\rho = \sum_i p_i \rho_1^i \otimes \rho_2^i$ se e somente se $E(\rho) = 0$
- O quantificador deve ser invariante sob operações locais unitárias, ou seja, operações unitárias do tipo $U_{12} = U_1 \otimes U_2$.
- O quantificador deve ser uma função monotônica e não crescente por operações locais e comunicação clássica OLCC.

A primeira exigência advém da própria definição de emaranhamento como estados não separáveis. A validade da recíproca dessa afirmação, ou seja $E(\rho) = 0$ implica que ρ é separável, apesar de desejável, nem sempre é satisfeita na prática. Quando a quantidade $E(\rho)$ pode se anular para estados não-separáveis, mas satisfaz todas as outras exigências, ela pode ser denominada como um *monótono de emaranhamento*. Um exemplo é a chamada negatividade, a qual discutiremos mais adiante.

Uma operação unitária local equivale a uma rotação do sistema de coordenadas da base local, ou seja, a uma operação reversível. Por esse motivo, o segundo item exige que este tipo de operação não deve afetar o emaranhamento entre os subsistemas. A última exigência é a mais restritiva e difícil de provar na maioria dos casos. Ela estende o segundo item para operações locais mais gerais como medições, acréscimo ou decréscimo de partículas, além de permitir a comunicação clássica entre os subsistemas. Estas operações locais não unitárias podem deteriorar o emaranhamento entre os subsistemas, mas não podem criá-lo. A existência de um canal de comunicação clássico permite a geração de correlações clássicas, mas não podem produzir emaranhamento.

2.3.3 Emaranhamento de Formação

Como já temos um quantificador de emaranhamento para estados puros, é perfeitamente natural que se tente definir o emaranhamento em um estado misto como uma média dos emaranhamentos de estados puros em um ensemble particular $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$. O problema é que tal média depende do ensemble escolhido, ou seja:

$$\sum_i p_i S(|\psi_i\rangle) \neq \sum_j q_j S(|\phi_j\rangle), \quad (2.27)$$

onde $\{q_i, |\phi_i\rangle\}$ é outra decomposição válida da matriz densidade. Um exemplo disso é o emaranhamento de uma mistura estatística balanceada de dois estados Bell $|\psi^\pm\rangle = (1/\sqrt{2})[|01\rangle \pm |10\rangle]$ que pode igualmente se escrita como uma mistura de estados separáveis,

$$\frac{1}{2}|\psi^+\rangle\langle\psi^+| + \frac{1}{2}|\psi^-\rangle\langle\psi^-| = \frac{1}{2}|01\rangle\langle 01| + \frac{1}{2}|10\rangle\langle 10|.$$

A média no ensemble do emaranhamento na decomposição da direita é nula, enquanto que na decomposição da direita em estados EPR, a média é igual a 1. Da definição de estado misto separável, obviamente o estado é separável. Assim, o emaranhamento de um estado misto arbitrário ρ sempre satisfaz a desigualdade

$$E(\rho) \leq \sum_i p_i S(|\psi_i\rangle),$$

onde $S(|\psi\rangle)$ mede o emaranhamento presente no estado $|\psi\rangle$.

O *Emaranhamento de formação*[13] é definido como o mínimo emaranhamento médio sobre todas as possíveis decomposições da matriz densidade, ou seja:

$$E_F \equiv \inf_{\{p_i, |\psi_i\rangle\}} \sum_i p_i S(|\psi_i\rangle). \quad (2.28)$$

Basicamente, o emaranhamento de formação é definido de forma que, se existe uma decomposição que fornece um emaranhamento médio menor, tal emaranhamento médio está mais “próximo” do correto. Se encontrarmos uma decomposição tal que não exista nenhuma outra com emaranhamento médio menor, então encontramos a *Decomposição Ótima* que quantifica o emaranhamento contido em ρ .

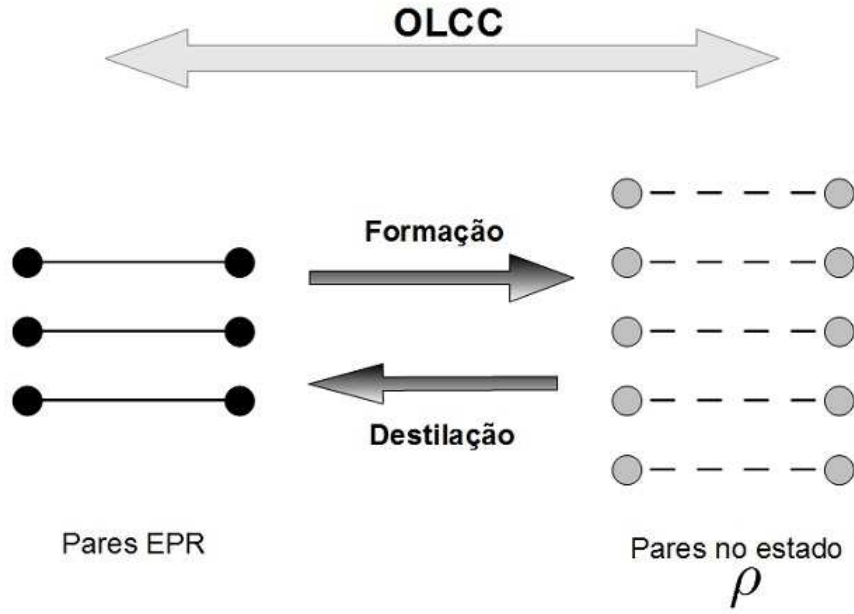


Figura 2.3 Diagrama ilustrativo dos processos de formação e destilação de emaranhamento

O termo emaranhamento de formação advém da seguinte interpretação: Suponha que exista um certo número m de cópias de pares de qubits em estados maximamente emaranhados e que uma sequência de operações do tipo OLCC seja realizada sobre o conjunto de pares a fim de convertê-los em um certo número n de novos pares no estado ρ conforme mostrado na figura 2.3. Como não é possível gerar emaranhamento neste processo, devemos ter sempre $n > m$. O emaranhamento de formação pode ser interpretado como a taxa de conversão assintótica m/n no limite de infinitas cópias, ou seja:

$$E_F = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{m}{n}. \quad (2.29)$$

Este processo é inverso ao que é conhecido como *destilação de emaranhamento* também

mostrado na figura 2.3, onde o ponto de partida é um conjunto de n' pares no estado ρ que se deseja converter em um certo número m' de pares maximamente emaranhados. A taxa de conversão assintótica, neste processo, é denominada *Emaranhamento Destilável* E_D .

$$E_D = \lim_{m' \rightarrow \infty} \frac{m'}{n'}. \quad (2.30)$$

Esta quantidade deixa de satisfazer um dos requisitos dos quantificadores, pois ela pode se anular para alguns estados emaranhados. O motivo é a existência de um certa categoria de emaranhamento conhecida como *emaranhamento ligado* que não pode ser destilado em pares maximamente emaranhados. Em geral, temos portanto que $E_D \leq E_F$, o que significa que a conversão de pares maximamente emaranhados em pares não maximamente emaranhados pode ser um processo irreversível.

2.3.4 A fórmula de Wootters

O cálculo do emaranhamento de formação para estados mistos arbitrários só é possível para o caso particular no qual os dois subsistemas correspondem a sistemas de dois níveis. Para isso, utiliza-se o conceito de concorrência apresentado na seção anterior como quantificador de emaranhamento para estados puros.

A obtenção da decomposição ótima que minimiza a concorrência média pode ser obtida em duas etapas:

- Constrói-se uma decomposição inicial $\{|x_i\rangle\}$ com estados subnormalizados com a propriedade $\langle x_i | x_j \rangle = \lambda_i \delta_{ij}$. Estes estados são autoestados à direita do operador não hermiteano $R = \rho \sigma^y \otimes \sigma^y \rho^* \sigma^y \otimes \sigma^y$ com autovalores $\{\lambda_i^2\}$. No caso de estados puros, temos apenas um autovalor não-nulo de R , cuja raiz quadrada fornece a concorrência.
- O maior entre os λ_i 's é identificado e, em seguida, realiza-se uma transformação unitária U sobre os estados $\{|x_i\rangle\}$ a fim de minimizar a concorrência média.

Considere λ_1 como o maior entre os λ_i 's e $|x_1\rangle$ como o estado correspondente. A seguinte transformação pode ser utilizada para minimizar a concorrência:

$$|z_1\rangle = \frac{1}{2} [|x_1\rangle + e^{i\theta_2}|x_2\rangle + e^{i\theta_3}|x_3\rangle + e^{i\theta_4}|x_4\rangle] \quad (2.31)$$

$$|z_2\rangle = \frac{1}{2} [|x_1\rangle + e^{i\theta_2}|x_2\rangle - e^{i\theta_3}|x_3\rangle - e^{i\theta_4}|x_4\rangle] \quad (2.32)$$

$$|z_3\rangle = \frac{1}{2} [|x_1\rangle - e^{i\theta_2}|x_2\rangle + e^{i\theta_3}|x_3\rangle - e^{i\theta_4}|x_4\rangle] \quad (2.33)$$

$$|z_4\rangle = \frac{1}{2} [|x_1\rangle - e^{i\theta_2}|x_2\rangle - e^{i\theta_3}|x_3\rangle + e^{i\theta_4}|x_4\rangle]. \quad (2.34)$$

Esta decomposição tem a propriedade de que $\langle z_i | \tilde{z}_i \rangle = \frac{1}{4} [\lambda_1 + \sum_{j=2}^4 \lambda_j e^{-2i\theta_j}]$. Temos dois casos a considerar:

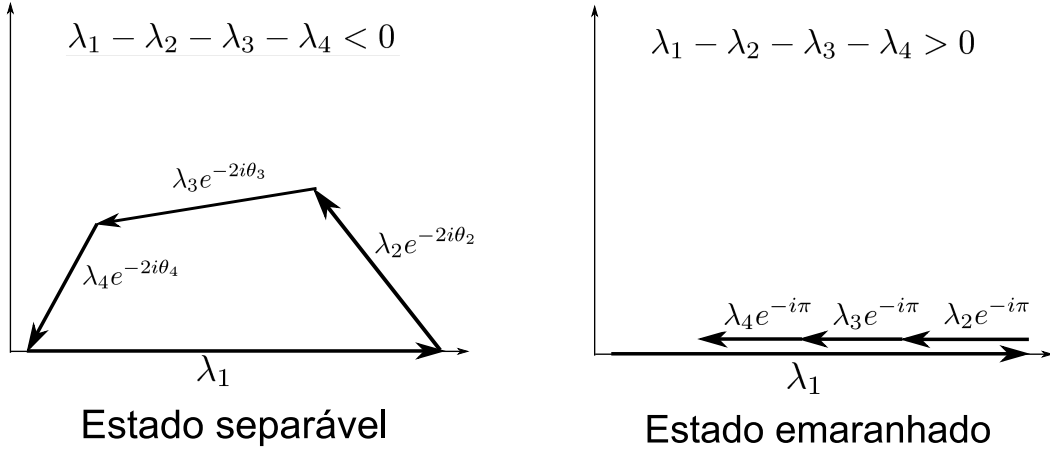


Figura 2.4 Disposição geométrica dos números complexos $\lambda_i e^{-2i\theta_i}$ para os casos de estados separáveis à esquerda e estados emaranhados à direita. Em ambos casos, é possível visualizar que a quantidade $\lambda_1 - \sum_{j=2}^4 \lambda_j e^{-2i\theta_j} \lambda_j = 0$ assume o menor valor possível resultando também na minimização da concorrência média.

1) $\lambda_1 < \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4$. Nesse caso, é sempre possível escolher apropriadamente as fases θ_j de forma que $\lambda_1 + \sum_{j=2}^4 \lambda_j e^{-2i\theta_j} \lambda_j = 0$, conforme mostra a figura 2.4. Assim, a concorrência em cada estado se anula e, portanto, esta é uma decomposição de estados separáveis.

2) $\lambda_1 > \lambda_2 + \lambda_3 + \lambda_4$. Nesse caso não é possível anular $\langle z_i | \tilde{z}_i \rangle$ pela escolha de θ_i . Devemos, portanto, buscar o menor valor possível dessa quantidade, a qual é obtida fazendo $\theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = \pi/2$. Assim, obtemos $\langle z_i | \tilde{z}_i \rangle = \frac{1}{4} [\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4] > 0$ para

todos os estados. A concorrência média nesta decomposição é:

$$\langle C \rangle = \sum_{i=1}^4 \langle z_i | z_i \rangle \frac{|\langle z_i | \tilde{z}_i \rangle|}{\langle z_i | z_i \rangle} = \sum_{i=1}^4 \langle z_i | \tilde{z}_i \rangle = \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4 \quad (2.35)$$

Para finalizar, é necessário mostrar que não existe nenhuma outra decomposição da matriz densidade capaz de fornecer uma concorrência média menor que $C = \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4$ na região de $C > 0$. A demonstração é feita utilizando o fato de que qualquer outra decomposição pode ser obtida de $\{|z_i\rangle\}$ através de uma transformação unitária U arbitrária. Os detalhes da prova podem ser encontrados em [14]. Com isso, obtemos a expressão final para a concorrência num estado misto arbitrário de 2 qubits conhecida como *Fórmula de Wootters*.

$$C = \max[0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4], \quad (2.36)$$

onde λ_i são as raízes quadradas dos autovalores da matriz não hermiteana $R \equiv \rho \tilde{\rho}$.

E quanto ao emaranhamento de formação E_F ? Será que esta decomposição também o minimiza? Para responder a essa pergunta, utilizamos a expressão que relaciona a concorrência ao emaranhamento de formação. Obtemos a seguinte expressão para a média da entropia de von Neumann:

$$\langle S \rangle = \sum_{i=1}^4 p_i H \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - C_i^2} \right) \right], \quad (2.37)$$

onde $C_i = \langle z_i | \tilde{z}_i \rangle / p_i$. Observe que as concorrências C_i não são iguais devido à presença da probabilidade $p_i = \langle z_i | z_i \rangle$. Apenas no caso em que os 4 estados forem equiprováveis, todas as concorrências e entropias se igualam nos levando a uma minimização da entropia média, ou seja:

$$E_F = \langle S \rangle = H \left[\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \right]. \quad (2.38)$$

Dessa forma, a decomposição $\{|z_i\rangle\}$ nos fornece apenas um limitante superior para o emaranhamento de formação nas regiões de concorrência não nula. Entretanto, conforme demonstrado em [14], é sempre possível construir uma decomposição onde todas as concorrências sejam iguais a $C = \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4$, o que significa que a fórmula para o emaranhamento de formação acima é válida para qualquer estado arbitrário ρ de 2 qubits.

2.3.5 A Negatividade

Uma maneira de testar a separabilidade de um estado misto arbitrário é através do chamado *critério da transposta parcial positiva* (TPP)[61, 62], que diz que se uma matriz densidade ρ_{12} é separável então a matriz obtida através da operação de transposição parcial sobre o segundo subsistema $\rho_{12}^{T_2}$ continua sendo um operador completamente positivo e, portanto, é uma matriz densidade. A operação de transposição parcial é realizada simplesmente transpondo os índices correspondentes ao segundo subsistema, ou seja:

$$\langle i|\langle j|\rho_{12}^{T_2}|k\rangle|l\rangle \equiv \langle i|\langle l|\rho_{12}|k\rangle|j\rangle. \quad (2.39)$$

Sejam $\{\mu_i\}$ os autovalores de $\rho_{12}^{T_2}$, então a condição necessária para a separabilidade de ρ_{12} é que todos esses autovalores sejam positivos. É possível, ainda, construir um quantificador de emaranhamento chamado *Negatividade* baseado neste critério, que tem a seguinte forma:

$$\mathcal{N}_{12} \equiv \sum_i \frac{|\mu_i| - \mu_i}{2}. \quad (2.40)$$

Como já mencionamos anteriormente, a negatividade não satisfaz todos os requisitos de um quantificador de emaranhamento, pois se anula para alguns estados emaranhados, os chamados *estados TPP*. Assim, com exceção dos estados puros e de sistemas bipartite 2×2 e 2×3 , o critério TPP é uma condição apenas necessária mas não suficiente para a separabilidade.

O critério TPP é um caso particular de um critério mais geral baseado no conceito de mapas positivos mas não completamente positivos Λ . Estes mapas são chamados positivos porque transformam operador positivo em positivo, quando atuam injetivamente sobre um dos subsistemas. A atuação desses mapas sobre o sistema completo pode fornecer informações sobre o emaranhamento. O critério de separabilidade baseado nesses mapas [62] diz o seguinte: *Um estado ρ_{12} é emaranhado se e somente se existe um mapa positivo mas não completamente positivo Λ tal que $(\mathbb{I}_1 \otimes \Lambda)\rho_{12} < 0$* . A dificuldade no uso desse critério é que se faz necessário fazer uma busca sobre todo o conjunto de mapas Λ a fim de encontrar pelo menos um mapa que satisfaça o critério. Se o critério for satisfeito para um mapa específico, então pode-se afirmar que o estado é emaranhado.

2.3.6 Emaranhamento Global

Até aqui estudamos o emaranhamento bipartite que descreve as correlações quânticas entre dois subsistemas. Uma caracterização mais completa do emaranhamento em sistemas de matéria condensada requer em muitos casos a caracterização do emaranhamento multipartite presente no sistema. Uma diferença notável em relação ao caso bipartite é que podem existir classes diferentes de emaranhamento. A distinção ocorre porque certos estados distintos considerados maximamente emaranhados não podem ser convertidos um no outro por OLCC como ocorre com os estados EPR de dois qubits. Como exemplo, no caso de 3 qubits temos os estados $|GHZ\rangle$ e $|W\rangle$ definidos como

$$|GHZ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|000\rangle + |111\rangle] \quad (2.41)$$

$$|W\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle]. \quad (2.42)$$

Não existe emaranhamento entre dois qubits quaisquer no estado $|GHZ\rangle$, mas no estado $|W\rangle$ temos $C = 2/3$ independentemente do par de qubits escolhido. Além disso, se o sistema está no estado $|GHZ\rangle$ e uma medição for realizada sobre um dos qubits o estado final dos dois qubits restantes será sempre um estado separável, enquanto que no estado $|W\rangle$ temos um estado separável se o resultado da medição for 1 e um estado EPR se for 0.

Com respeito à quantificação de emaranhamento multipartite, existem as chamadas medidas seletivas que distinguem entre tipos distintos de emaranhamento e as medidas coletivas que não fazem essa distinção. Como exemplo de medida coletiva para um sistema de N qubits, temos o *Emaranhamento Global*[63] definido como

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 2 [1 - \text{Tr} \rho_i^2], \quad (2.43)$$

onde ρ_i é a matriz reduzida de um qubit. O emaranhamento global equivale à média das I-concorrências entre um spin e o restante da cadeia. A parte do emaranhamento global que é armazenada em concorrências entre dois spins pode ser calculada usando o conceito de *emaranhamento distribuído* ou *monogamia de emaranhamento*[64, 65] que estabelece o emaranhamento entre cada spin e o restante da cadeia como limitador para o emaranhamento entre tal spin e os demais. Assim, o emaranhamento armazenado em pares Q_p pode ser definido pela média destas somas sobre todos os spins da cadeia, ou

seja

$$Q_p \equiv \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i} C_{ij}^2. \quad (2.44)$$

Portanto, a diferença entre $Q - Q_p$ corresponde à parte do emaranhamento global indisponível para o emaranhamento entre dois spins.

2.4 APLICAÇÕES EM FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

O estudo do emaranhamento se intensificou devido principalmente às aplicações em informação quântica. Entretanto, uma outra importante aplicação que tem sido bastante explorada nos últimos anos é sua utilização no estudo de sistemas de interesse em física da matéria condensada[19]. Os trabalhos se concentram principalmente nas redes quânticas de spin, por pelo menos duas razões. Em primeiro lugar, os modelos de sistemas de spin aparecem naturalmente em sistemas físicos diferentes de redes de spins propriamente ditas [20, 21, 22, 23]. Existe ainda uma conexão interessante com métodos para a sistematização da criação de novos algoritmos quânticos[66, 67], como veremos adiante. Outra aplicação está relacionada a uma questão mais conceitual, que trata do estudo de transições de fase quânticas [37]. Em pontos críticos quânticos, as correlações de spin entre pares decaem polinomialmente com a separação

$$\langle \sigma_i^\alpha \sigma_{i+r}^\beta \rangle - \langle \sigma_i^\alpha \rangle \langle \sigma_{i+r}^\beta \rangle \sim r^{-q}$$

com $q > 0$ contrastando com o decaimento exponencial $e^{-r/\xi}$ que ocorre distante do ponto crítico. Fisicamente, isto significa que no ponto crítico quântico o sistema se torna fortemente correlacionado, o que é marcado pela extensão espacial do emaranhamento que alcança toda a cadeia. Uma série de resultados preliminares sobre o emaranhamento nestes sistemas indicam que o emaranhamento pode ser a origem física do comportamento peculiar das funções de correlação nos pontos críticos.

2.4.1 Redes de spin em computação quântica

Temas de interesse em computação quântica têm se concentrado basicamente em duas linhas principais. A busca de sistemas físicos adequados para a implementação dos algoritmos quânticos, entre os quais podemos citar os estudos com RMN e cavidades eletrodinâmicas QED. Outra linha, mais teórica, trata da elaboração de algoritmos quânticos

para resolver problemas computacionais específicos. Os *qubits*, que são sistemas quânticos de dois níveis, compõem a arquitetura fundamental de todos esses sistemas. Assim, um computador quântico pode ser pensado como uma rede de qubits onde os parâmetros do hamiltoniano podem ser controlados externamente. A informação é inicializada no sistema através de um estado inicial e os acoplamentos entre os qubits, combinados a campos externos controlados, executam as operações de processamento da informação quântica. A informação de saída desejada é acessada através da medição.

Sistemas de spin são candidatos naturais para implementação da computação quântica, o que pode ser mostrado através da realização de portas quânticas em sistemas físicos cujo hamiltoniano de interação corresponde ao encontrado em sistemas de spins [20, 21, 22, 23]. Na figura 2.5, apresentamos alguns exemplos destes sistemas. Em 2.5a, vemos um esquema para realização de uma porta de qubits utilizando pontos quânticos onde o qubit corresponde ao spin do elétron aprisionado no ponto quântico. A interação entre os qubits é controlada por voltagens aplicadas sobre o ponto de contato. Na figura 2.5b, vemos a realização de portas de 2 qubits utilizando íons aprisionados em micro-armadilhas. A realização de portas de 2 qubits é feita utilizando um íon aprisionado (cabeça) que pode ser movido ao longo da rede. Após aproximá-lo de um íon da rede (alvo), um laser que incide perpendicularmente ao plano da rede é utilizado na realização de uma porta quântica de 2 qubits. Finalmente, na figura 2.5c, vemos a utilização de spin nuclear como qubits. O acoplamento entre os qubits é mediado por elétrons através da interação hiperfina, a qual é controlada pelas portas J mostradas na figura.

Paralelamente à busca por sistemas físicos ideais para a implementação do computador quântico, existe o desafio da elaboração de novos algoritmos quânticos. Existem, pelo menos, duas dificuldades: Primeiramente, não basta resolver um problema computacional específico com um algoritmo quântico, é desejável que ele realize esta tarefa com uma eficiência superior à obtida pelo melhor algoritmo clássico existente e, em segundo lugar, é necessário especificar como a informação será acessada após o processamento, já que no caso quântico a medição afeta a evolução dinâmica dos estados. Os dois algoritmos quânticos mais bem sucedidos são o algoritmo de Shor para fatoração e o algoritmo de Grover para busca, os quais foram obtidos com métodos distintos de elaboração. A necessidade de um método sistemático para a elaboração de novos algoritmos quânticos motivou a proposta de utilizar as *caminhadas quânticas sobre grafos*[67], como acontece com os algoritmos clássicos baseados em caminhadas aleatórias.

Nas caminhadas quânticas, os nós do grafo são estados do espaço de Hilbert e o caminhante executa os passos segundo uma direção definida por um grau de liberdade interno

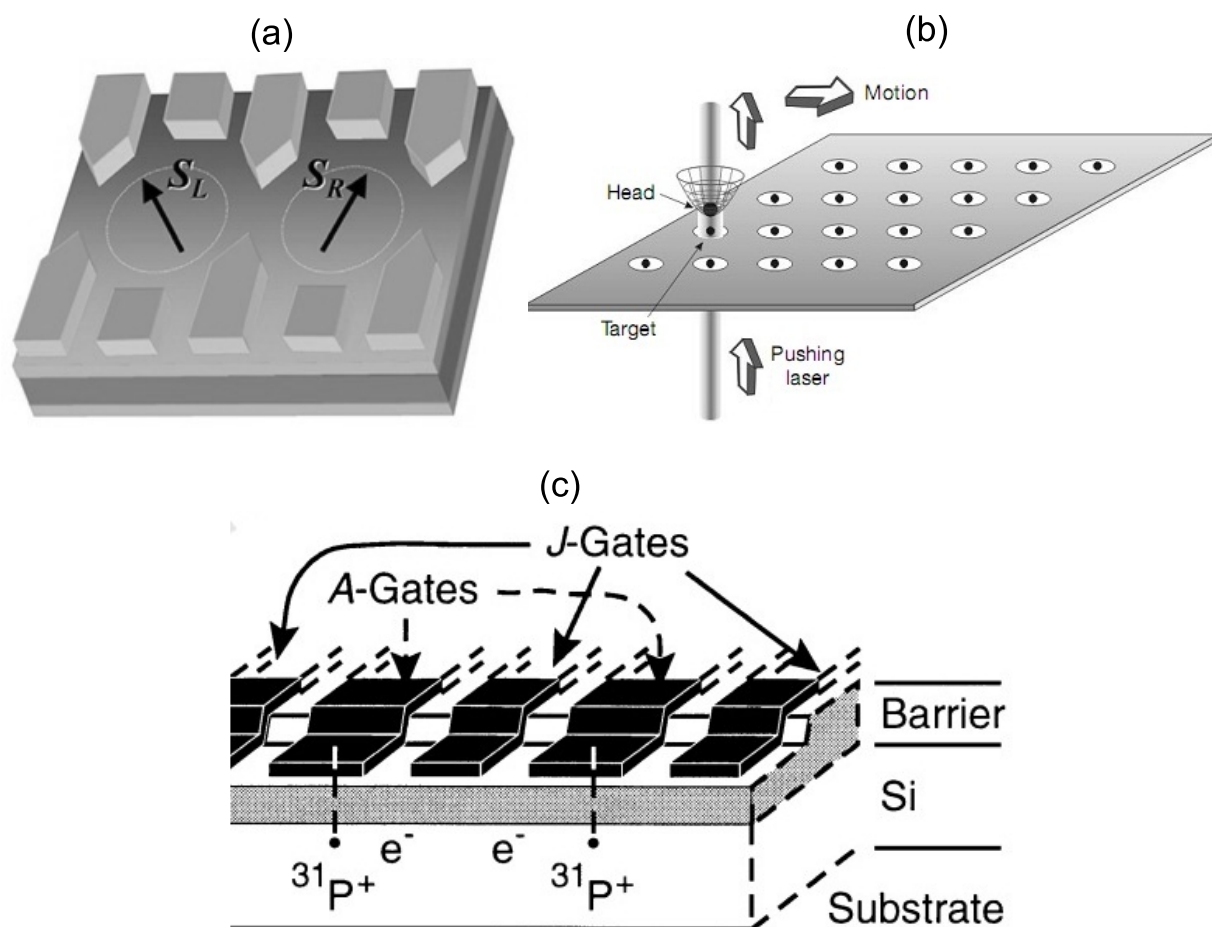


Figura 2.5 Realização física de sistemas de qubits. Em (a) os qubits correspondem aos spins de elétrons aprisionados em pontos quânticos. Em (b), temos uma rede de íons aprisionados em micro-armadilhas. Na parte (c), os qubits correspondem a spins nucleares cujo acoplamento indireto é mediado por elétrons através de interação hiperfina. [Figuras extraídas de: (a) C. Veronica, W. A. Coish, O. Gywat e D. Loss, *Nanotechnology* **16**, R27 (2005) (b) J. I. Cirac e P. Zoller, *Nature* **404**, 579 (2000); (c) B. E. Kane, *Nature* **393**, 133]

(caminhada em tempo discreto) ou por probabilidades que variam continuamente segundo uma dinâmica markoviana (caminhada em tempo contínuo). A principal aplicação das caminhadas discretas é a construção de um algoritmo de busca com eficiência comparável à do algoritmo de Grover [6] mas que é baseado unicamente em uma caminhada quântica sobre um hipercubo [68]. Para a caminhada em tempo contínuo, destacamos a caminhada através de uma árvore de decisão [69]. Um passo importante na descrição e aplicação das caminhadas quânticas foi a formulação hamiltoniana do problema [66], onde é feita um mapa entre hamiltonianos de spin e as caminhadas quânticas¹. Neste mapeamento,

¹Este mapeamento é realizado somente para caminhadas quânticas sem grau de liberdade interno,

os nós do grafo correspondem a estados do espaço de Hilbert da rede de spins e o caminhante salta entre os nós de acordo com os acoplamentos entre os qubits expressos no hamiltoniano. A figura 2.6 ilustra este mapeamento para o caso de uma caminhada sobre

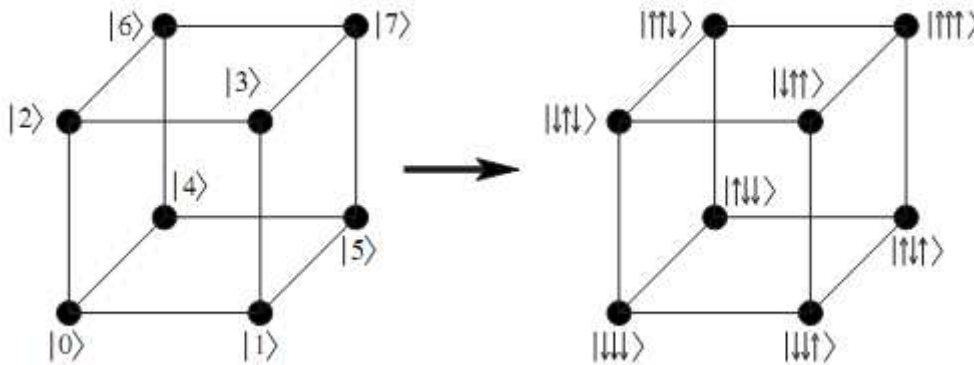


Figura 2.6 Mapeamento de uma caminhada quântica sobre um hipercubo em cadeia de spins. À esquerda, o grafo com os nós $\{|i\rangle\}$ e à direita a representação dos nós do grafo como estados no espaço de Hilbert da rede de 3 qubits. [Figura retirada da ref. [66]]

um cubo, onde os nós do grafo correspondem a todos os possíveis estados de 3 qubits e as transições entre nós só ocorrem via inversão de um único qubit. Para um hipercubo com dimensão arbitrária D , o hamiltoniano de qubits correspondente pode ser escrito na forma [66]:

$$H = -2\Delta_0 \sum_{i=1}^D \sigma_i^x. \quad (2.45)$$

É necessário, portanto, entender como o emaranhamento se comporta nestas redes de qubits, tendo em vista o seu papel na eficiência dos algoritmos quânticos. Esta motivação justifica cálculos de emaranhamento mesmo em redes com poucos qubits [24, 25, 26, 27, 28, 29].

2.4.2 Emaranhamento em cadeias de spin quânticas

Cálculos de emaranhamento em redes com muitos spins gerais são complicados, em princípio, devido à dimensão que cresce exponencialmente com o tamanho da rede. Além

enquanto que a caminhada no hipercubo utilizada para o algoritmo de busca contém grau de liberdade interno.

disso, os quantificadores de emaranhamento possibilitam o cálculo exato do emaranhamento em estados mistos apenas no caso de emaranhamento entre pares (dois qubits)[14].

Em alguns modelos de sistemas de spin como o modelo Ising e o modelo de Heisenberg, existem propriedades do hamiltoniano que facilitam o cálculo. O hamiltoniano é real e, portanto, todos os elementos da matriz densidade são reais. Além disso, o hamiltoniano de interação é composto de termos do tipo $\sigma_i^\alpha \sigma_j^\alpha$ que apenas conectam estados com o mesmo número de spins para cima ou que diferem por 2 (simetria de paridade). Com isso, a matriz reduzida de dois spins arbitrários assume a seguinte forma:

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & w \\ 0 & x & z & 0 \\ 0 & z & y & 0 \\ w & 0 & 0 & v \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

onde todos os elementos são reais devido à realidade do hamiltoniano e os elementos nulos são consequência da simetria de paridade. Além disso, no caso do sistema ter invariância translacional, temos $x = y$ e $\rho_{i,j} = \rho_r$ onde $r = |i - j|$ é a separação entre os spins. É conveniente expressar os elementos da matriz densidade em termos de valores esperados de spin $g_{ij}^{\alpha\alpha} \equiv \text{Tr}(\rho S_i^\alpha S_j^\alpha)$ e $M_i^\alpha = \text{Tr}(\rho S_i^\alpha)$, onde $S^\alpha = \frac{1}{2}\sigma^\alpha$. Calculando tais valores esperados obtemos

$$M_i^z = \frac{1}{4}(u + x - y - v) \quad (2.47)$$

$$M_j^z = \frac{1}{4}(u - x + y - v) \quad (2.48)$$

$$g_{ij}^{xx} = \frac{w + z}{2} \quad (2.49)$$

$$g_{ij}^{yy} = \frac{-w + z}{2} \quad (2.50)$$

$$g_{ij}^{zz} = \frac{u + v}{2} - \frac{1}{4}. \quad (2.51)$$

No caso em que o sistema tem invariância translacional, temos $M_i^z = M_j^z$ o que implica $x = y$. Utilizando esta hipótese e invertendo as expressões acima para os elementos de ρ , obtemos

$$u, v = \frac{1}{4} + g_r^{zz} \pm M_z \quad (2.52)$$

$$z, w = g_r^{xx} \pm g_r^{yy} \quad (2.53)$$

$$x = y = \frac{1}{4} - g_r^{zz}. \quad (2.54)$$

Utilizando a fórmula de Wothers, podemos calcular a concorrência entre os dois spins. O resultado é

$$C = 2\max(0, C', C''), \quad (2.55)$$

onde

$$C' = |g_r^{xx} - g_r^{yy}| - \frac{1}{4} + g_r^{zz} \quad (2.56)$$

$$C'' = |g_r^{xx} + g_r^{yy}| - \sqrt{\left(\frac{1}{4} + g_r^{zz}\right)^2 - M_z^2} \quad (2.57)$$

É possível calcular o emaranhamento para alguns sistemas no limite termodinâmico. Um deles é a cadeia XY , conforme veremos a seguir.

2.4.3 Emaranhamento na cadeia XY no limite termodinâmico

A cadeia XY de Heisenberg na presença de um campo magnético uniforme é um exemplo de modelo que admite solução analítica[70, 71] no limite termodinâmico tanto no estado fundamental quanto no estado térmico $\rho_T = e^{-\beta H}/Z$, onde $\beta = 1/(k_B T)$, H é o hamiltoniano da cadeia e $Z = \text{Tre}^{-\beta H}$ é a função de partição associada. O hamiltoniano é dado por:

$$H = -\frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^N [(1 + \gamma)\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + (1 - \gamma)\sigma_i^y \sigma_{i+1}^y] - \sum_{i=1}^N \sigma_i^z, \quad (2.58)$$

onde λ é a constante de acoplamento entre spins vizinhos, γ controla a anisotropia. O campo magnético é feito igual a 1. Os operadores σ_i^α ; $\alpha \in (x, y, z)$ são os operadores de Pauli para o i -ésimo spin. O modelo já é bem conhecido na literatura e soluções exatas para ele também podem ser encontradas [71]. Os valores esperados são obtidos através dos *determinantes de Toeplitz* e são dados por:

$$\langle \sigma^z \rangle = -\frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\phi (1 + \lambda \cos \phi) \frac{\tanh \frac{\beta \omega_\phi}{2}}{\omega_\phi} \quad (2.59)$$

$$g_r^{xx} = \frac{1}{4} \begin{vmatrix} G_{-1} & G_{-2} & \dots & G_{-r} \\ G_0 & G_{-1} & \dots & G_{-r+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{r-2} & G_{r-3} & \dots & G_{-1} \end{vmatrix}, \quad (2.60)$$

$$g_r^{yy} = \frac{1}{4} \begin{vmatrix} G_1 & G_0 & \dots & G_{-r+2} \\ G_2 & G_1 & \dots & G_{-r+3} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_r & G_{r-1} & \dots & G_1 \end{vmatrix}, \quad (2.61)$$

$$g_r^{zz} = \langle \sigma^z \rangle^2 - \frac{1}{4} G_r G_{-r}, \quad (2.62)$$

onde

$$G_r = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi d\phi \cos(\phi r) (1 + \lambda \cos \phi) \frac{\tanh \frac{\beta \omega_\phi}{2}}{\omega_\phi} - \frac{\gamma \lambda}{\pi} \int_0^\pi d\phi \sin(\phi r) \sin \phi \frac{\tanh \frac{\beta \omega_\phi}{2}}{\omega_\phi} \quad (2.63)$$

e

$$\omega_\phi = \sqrt{(\gamma \lambda \sin \phi)^2 + (1 + \lambda \cos \phi)^2} \quad (2.64)$$

Na figura 2.7, apresentamos alguns resultados do emaranhamento entre pares como função dos parâmetros λ e γ para diferentes distanciamentos entre os spins. Primeiramente, podemos notar na figura 2.7(a) que existem dois regimes distintos da concorrência entre primeiros vizinhos $C(1)$ separadas por uma região de concorrência nula. A região com campos fracos corresponde a $C = C'$ e a segunda região em campos intensos a $C = C''$. A existência deste intervalo de separabilidade resulta do fato de as duas funções C' e C'' nunca se igualarem em regiões de concorrência não nula. Como a região de separabilidade é muito estreita, pode-se aproximá-la como uma curva onde $C' = C''$, a qual é denominada como *curva fatorizante* [46, 40]. Uma análise detalhada do comportamento da concorrência nas proximidades desta região pode ser encontrada em [40]. Uma característica importante é o grande alcance da concorrência entre pares. Em regiões

distantes do campo fatorizante λ_f , a concorrência praticamente só alcança os dois primeiros vizinhos. Nas proximidades de λ_f , o emaranhamento se estende por toda a cadeia. Este comportamento é ilustrado nas figura 2.7b e 2.7c. Observe que a concorrência entre segundos vizinhos $C(2)$ já começa a se anular para pontos mais distantes de λ_f , enquanto que $C(3) \neq 0$ praticamente só existe nesta região. Note que não é o emaranhamento entre pares que é maximizado no ponto crítico, mas o seu alcance ao longo da cadeia. O fato de o emaranhamento entre pares não ser grande nas proximidades de λ_f resulta da seguinte desigualdade conhecida como monogamia de emaranhamento[64, 65]:

$$C_{1,2}^2 + C_{1,3}^2 + \dots C_{1,n}^2 \leq C_{1,(2,3,\dots,n)}^2. \quad (2.65)$$

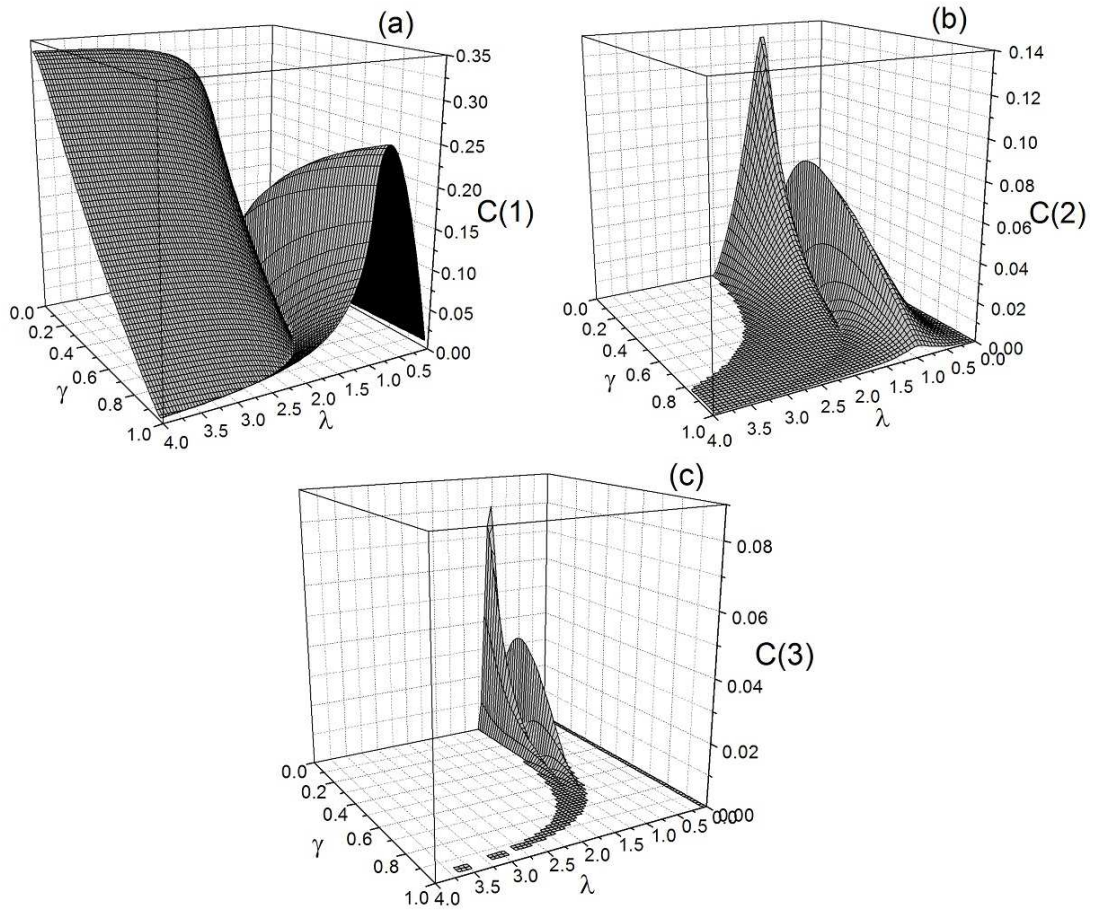


Figura 2.7 Concorrência entre pares do modelo XY no limite termodinâmico.

O lado direito da desigualdade contém o emaranhamento entre um qubit e uma cadeia de $n - 1$ qubits, enquanto que do lado esquerdo temos a soma dos quadrados de todas as concorrências entre pares envolvendo o qubit 1 escolhido. Se n for grande, o emaranha-

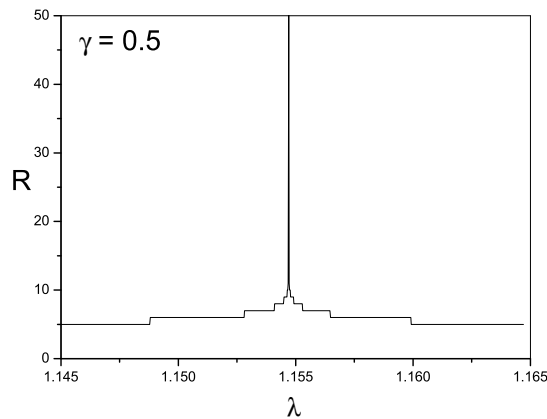


Figura 2.8 Divergência do alcance R da concorrência entre pares no modelo XY para $\gamma = 0.5$

mento entre cada qubit e o qubit 1 fica bastante reduzido para que a desigualdade seja satisfeita, o que não acontece se n for pequeno. Assim, a desigualdade de monogamia estabelece uma limitação para o compartilhamento de emaranhamento entre qubits. O alcance do emaranhamento R é definido como a maior separação entre dois qubits para a qual a concorrência é não nula. Uma análise mais detalhada do comportamento do alcance da concorrência mostra que ela diverge logaritmicamente [40].

$$R \sim \log |\lambda^{-1} - \lambda_f^{-1}|. \quad (2.66)$$

A figura 2.8 ilustra a divergência de R para o caso $\gamma = 0.5$, para o qual o campo fatorizante é aproximadamente $\lambda_f \approx 1.1547$.

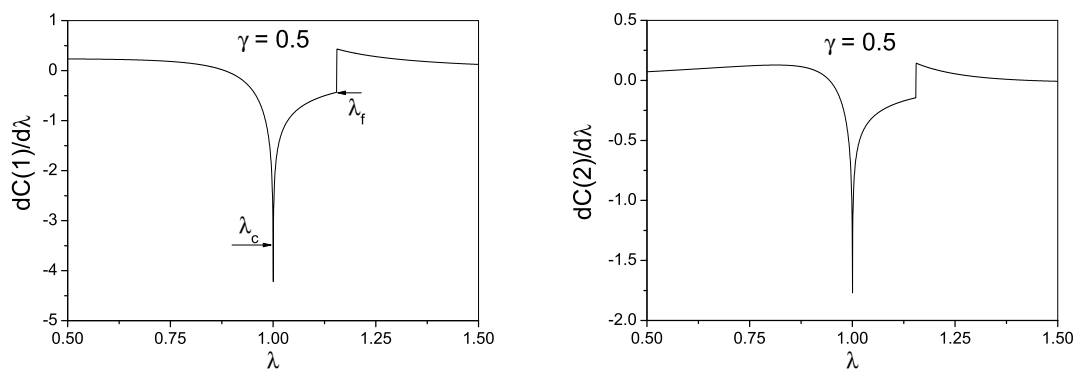


Figura 2.9 Comportamento da derivada das concorrências $C(1)$ e $C(2)$ em relação a λ . As derivadas divergem no ponto crítico $\lambda_c = 1$ e são descontínuas no campo fatorizante λ_f .

É importante mencionar que o campo fatorizante λ_f não é um ponto crítico quântico no intervalo $\gamma \in (0, 1]$, que corresponde à classe de universalidade Ising, onde o campo crítico é $\lambda_c = 1$. No ponto crítico, a concorrência também tem um curto alcance conforme pode ser verificado na figura 2.7c. Entretanto, a análise da derivada da concorrência em relação a λ revela que a concorrência apresenta um comportamento de escala bem definido ao passar pelo ponto crítico $\lambda_c = 1$ [38], conforme é mostrado na figura 2.9.

2.4.4 Entropia de Blocos

No caso do estado fundamental $T = 0$, é possível obter resultados analíticos para a entropia de emaranhamento entre um bloco de L spins contíguos e o restante da cadeia[41, 42], o que é uma avanço considerável em relação aos resultados envolvendo apenas emaranhamento entre pares. Para calculá-lo, é necessário obter a matriz reduzida S_L , conforme mostrado na figura 2.10.

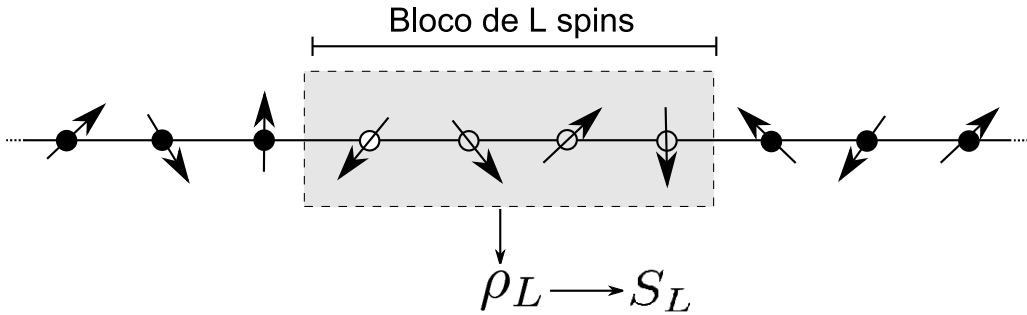


Figura 2.10 Representação de uma cadeia XY com o bloco de L spins contíguos. Calculando a matriz reduzida do bloco, pode-se determinar a entropia de emaranhamento S_L .

Os detalhes dos cálculos podem ser encontrados nas referências [42, 43]. Apresentaremos aqui apenas uma breve descrição dos principais resultados. Primeiramente é realizada uma *transformação de Jordan-Wigner* mapeando o problema de spins inteiros num problema de férmions livres. Com isso, o problema passa a ser tratado segundo o formalismo de segunda quantização. Tanto o procedimento de diagonalização do hamiltoniano quanto o da obtenção das funções de correlação podem ser obtidos com esse formalismo[70, 71]. Após uma transformação canônica nos operadores fermiônicos, o hamiltoniano é colocado na forma manifestamente de férmions livres e a matriz reduzida

de L spins ρ_L pode ser escrita na forma fatorizada:

$$\rho_L = \varrho_1 \otimes \dots \otimes \varrho_L, \quad (2.67)$$

onde as matrizes ϱ_l são matrizes 2×2 associadas ao l -ésimo modo fermiônico. Note que não se trata de uma matriz densidade espacialmente separável já que os modos fermiônicos são objetos não locais, mas significa que os modos fermiônicos não são correlacionados. As matrizes ϱ_l tem os autovalores

$$\lambda_l^\pm = \frac{1 \pm \nu_l}{2}, \quad (2.68)$$

o que leva à seguinte expressão para a entropia S_L da matriz reduzida:

$$S_L = \sum_{i=1}^L H\left(\frac{1 + \nu_l}{2}\right), \quad (2.69)$$

onde $H(x) = -x \log x - (1 - x) \log (1 - x)$ é a entropia de Shannon. O resultado final depende, portanto, da obtenção dos parâmetros ν_l , os quais são calculados numericamente através da diagonalização da matriz de correlação dos operadores fermiônicos iniciais. Um resultado notável encontrado através deste método é que a entropia de von Neumann S_L , que mede o emaranhamento do bloco com o restante da cadeia, escala com o logaritmo de L no limite de $L \gg 1$, no ponto crítico. Mais especificamente, temos:

$$S_L^{XY} = \frac{1}{3} \log_2 L. \quad (2.70)$$

Distante do ponto crítico, o emaranhamento tende a saturar com o aumento do bloco. Os resultados obtidos em [42] indicam que esta saturação ocorre quando o tamanho do bloco supera o comprimento de correlação ξ , o qual caracteriza o decaimento exponencial das correlações entre spins em função da separação no regime não crítico.

2.4.5 O emaranhamento como classificador de ordem quântica

Uma das teorias mais bem sucedidas na descrição de transições de fase foi, durante muito tempo, a teoria de Landau posteriormente estendida pelo método de grupo de renormalização[72, 73]. Ela descreve de maneira satisfatória o comportamento de sistemas físicos distintos utilizando basicamente os mesmos princípios. As fases ou ordens são caracterizadas pelas simetrias presentes no sistema e são identificadas transições de fase

quando, ao variar certos parâmetros, o sistema passa por uma singularidade na energia livre[37] indicando uma quebra espontânea de simetria. A impossibilidade de se passar de uma determinada região do espaço dos parâmetros para outra sem passar por uma singularidade indica que tais regiões correspondem a fases ou ordens distintas. O efeito Hall quântico fracionário (FQH)[74] foi um dos primeiros sistemas em que se percebeu a existência de uma transição de fase sem quebra espontânea de simetria, ou seja, uma transição que não podia ser descrita pela teoria de Landau. Podemos ver na figura 2.11 um diagrama proposto por Wen [52] mostrando uma classificação de ordens. Temos as ordens descritas por quebras de simetria, as quais podem ser descritas pela teoria de Landau. Nesse caso, a caracterização das ordens é realizada por intermédio dos grupos de simetria. As ordens sem quebra de simetria são essencialmente de natureza quântica e temos basicamente, dois tipos: A ordem topológica que é uma ordem quântica com gap, onde o efeito Hall quântico fracionário está incluído e a ordem quântica sem gap [75]. Dentro do conceito de ordem quântica (não topológica), temos os líquidos de Fermi, que podem ser caracterizadas pela topologia da superfície de Fermi, e líquidos de spin sem gap, que podem ser descritos como condensados de objetos estendidos [75, 52].

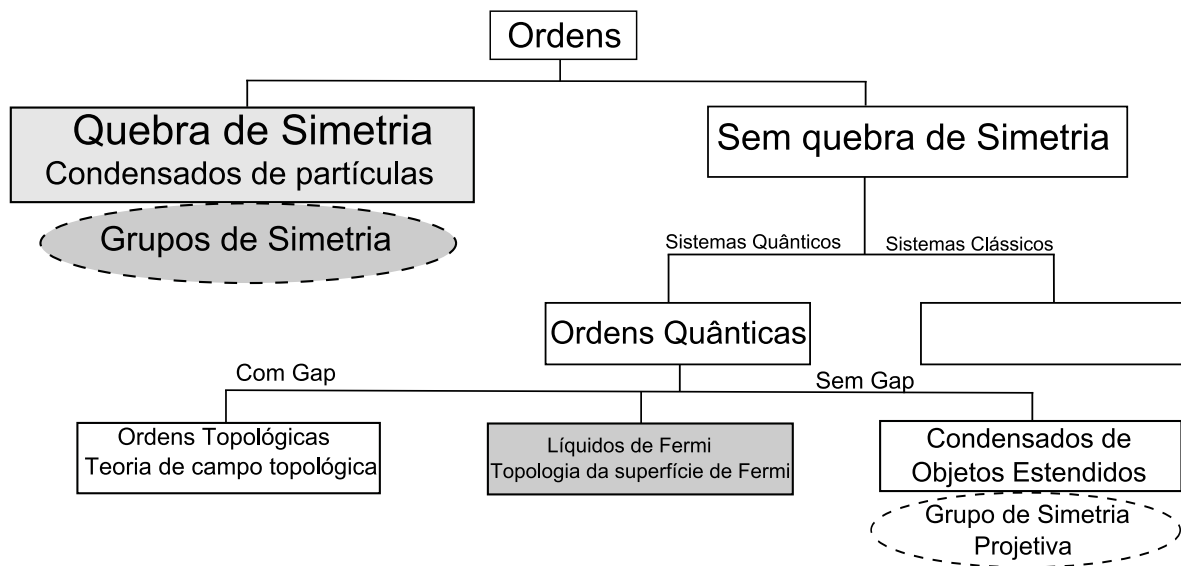


Figura 2.11 Classificação de Wen [52] dos diversos tipos de ordens com ou sem quebra de simetria. As caixas em cinza correspondem às ordens que podem ser descritas pelas teorias de Landau.

Como o conceito de quebra espontânea de simetria não se aplica ao caso de ordens

quânticas, que propriedade do estado fundamental caracteriza as diferentes ordens? O comportamento do emaranhamento nas transições de fase quânticas sugerem que as ordens quânticas são uma descrição dos diferentes padrões de emaranhamento que podem surgir nestes estados. Apesar dos indícios, esta hipótese só poderá ser de fato confirmada quando formos capazes de determinar o grau de emaranhamento presente nestes sistemas e como este emaranhamento se comporta nas diversas regiões do espaço dos parâmetros. Em um trabalho recente[27], apresentamos um estudo detalhado da caracterização do emaranhamento térmico e do estado fundamental em uma cadeia XY de dois spins, a qual possibilita a obtenção de resultados fechados para a concorrência em função dos parâmetros do hamiltoniano e da temperatura de um banho térmico. Com os resultados, foi possível determinar os diversos padrões de emaranhamento, ou seja, dos diferentes tipos de comportamento quando os parâmetros variam. Conforme veremos nos próximos capítulos, a descrição de diferentes padrões de emaranhamento nestes sistemas com poucos qubits revela uma série de propriedades que não aparecem explicitamente no limite termodinâmico mas que podem ser de grande valia no processamento de informação quântica em redes finitas de spins.

CAPÍTULO 3

EMARANHAMENTO NO MODELO XY DE DOIS SPINS

O estudo do emaranhamento em cadeias de spin quânticas [19, 39, 41, 42, 38] tem sido motivado, principalmente, pela conexão com as transições de fase quânticas[37] e o conceito de ordem quântica[52, 75]. Embora tais conceitos não se apliquem a cadeias finitas, existem bons motivos para justificar o grande número de trabalhos que tem tratado da análise do emaranhamento em cadeias com alguns poucos qubits[24, 25, 26, 27]. Primeiramente, nesses sistemas é possível quantificar o emaranhamento[14] tanto no estado fundamental quando no estado térmico encontrando relações precisas com parâmetros que controlam o hamiltoniano, além de analisar de forma acurada o efeito de ambientes externos, como um banho térmico, sobre o emaranhamento[30]. Com respeito às cadeias de spin quânticas, o emaranhamento entre spins vizinhos em cadeias com muitos spins [76] apresenta muitas vezes comportamento semelhante ao caso do emaranhamento de uma cadeia com apenas dois spins[26, 27], como é o caso da existência de uma temperatura limite para o emaranhamento térmico [32] e o aparecimento de intervalos de separabilidade em temperaturas abaixo da temperatura limite.

Neste capítulo, apresentamos um estudo detalhado das propriedades dos padrões de emaranhamento térmico e do estado fundamental de dois spins no modelo XY de Heisenberg. Um artigo com os principais resultados apresentados neste capítulo foi recentemente publicado [27]. Inicialmente, na seção 1, apresentamos os resultados para a concorrência no estado fundamental. Na seção 2, estudamos o emaranhamento térmico e caracterizamos no espaço dos parâmetros do hamiltoniano e temperatura, os diferentes padrões de emaranhamento que podem ser formados discutindo em detalhes as características e peculiaridades de cada um deles. E na seção 3, estudamos as funções de correlação de spin, onde definimos um procedimento operacional para extrair a componente quântica pura de cada função de correlação de spin utilizando para isso, as decomposições ótimas

que minimizam a concorrência.

3.1 EMARANHAMENTO NO ESTADO FUNDAMENTAL

Nesta seção, estudamos o comportamento do emaranhamento do estado fundamental do modelo XY de Heisenberg com dois spins na presença de um campo magnético uniforme h ao longo da direção z . O hamiltoniano é dado por:

$$H = -\frac{J}{2} [(1 + \gamma)\sigma_1^x \sigma_2^x + (1 - \gamma)\sigma_1^y \sigma_2^y] - h(\sigma_1^z + \sigma_2^z), \quad (3.1)$$

onde J é a constante de acoplamento ou constante de troca, sendo que $J > 0$ corresponde ao caso ferromagnético e $J < 0$ ao caso anti-ferromagnético. O parâmetro γ parametriza a anisotropia e varia entre $\gamma = 0$ (Modelo XX) e $\gamma = 1$ (Modelo Ising). Os operadores σ_i^α ($i = 1, 2; \alpha = x, y, z$) são os operadores de Pauli. Definindo $b \equiv 2h/J$, obtemos a seguinte representação matricial de H na base canônica $\mathbb{B} = \{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$:

$$H = -J \begin{pmatrix} b & 0 & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \gamma & 0 & 0 & -b \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

A matriz é diagonal em blocos que podemos denominar como setores paralelo e antiparalelo do hamiltoniano, gerados respectivamente pelas bases $\mathbb{B}_1 = \{|01\rangle, |10\rangle\}$ e $\mathbb{B}_2 = \{|00\rangle, |11\rangle\}$. Estes dois blocos não se conectam devido à simetria de paridade do hamiltoniano. Uma diferença importante é que apenas o bloco paralelo é afetado pelo campo magnético. Assim, se o estado fundamental estiver contido no setor antiparalelo, o emaranhamento não é sensível ao campo.

Através de diagonalização direta, obtemos os autovalores:

$$\begin{aligned} E_1 &= -J \\ E_2 &= J \\ E_3 &= -J\sqrt{b^2 + \gamma^2} \\ E_4 &= J\sqrt{b^2 + \gamma^2}, \end{aligned} \quad (3.3)$$

com os respectivos autovetores

$$\begin{aligned}
|1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle) \\
|2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle) \\
|3\rangle &= \cos(\theta/2)|00\rangle + \sin(\theta/2)|11\rangle \\
|4\rangle &= \sin(\theta/2)|00\rangle - \cos(\theta/2)|11\rangle.
\end{aligned} \tag{3.4}$$

onde $\sin \theta = \gamma/\sqrt{b^2 + \gamma^2}$ e $\cos \theta = b/\sqrt{b^2 + \gamma^2}$. O estado fundamental do sistema $|\Psi_g\rangle$ pode ser $|1\rangle$ ou $|3\rangle$ para $J > 0$ (O caso $J < 0$ leva aos estados $|2\rangle$ e $|4\rangle$ que possuem o mesmo grau de emaranhamento que $|1\rangle$ e $|3\rangle$ respectivamente). O estado fundamental é degenerado nos campos críticos¹ $b_c = \pm\sqrt{1 - \gamma^2}$. Para $|b| < b_c$, o estado fundamental é o estado de Bell $|1\rangle$ e para $|b| > |b_c|$, é $|3\rangle$. Nestes dois casos ($|b| \neq |b_c|$), como o estado é puro, podemos calcular a concorrência [14] dada por $C \equiv |\langle \Psi_g | \tilde{\Psi}_g \rangle|$ onde $|\tilde{\Psi}_g\rangle \equiv \sigma^y \otimes \sigma^y |\Psi_g^*\rangle$. O resultado é que para $b < b_c$, $C = 1$ e para $b > b_c$, temos $C = \sin \theta = \gamma/\sqrt{b^2 + \gamma^2}$. Esta relação direta entre o ângulo θ e o emaranhamento justifica a denominação de tal ângulo de *ângulo de emaranhamento*.

No caso degenerado $|b| = |b_c|$, precisamos escolher qual o estado fundamental do sistema. Tal estado pode ser uma mistura coerente do tipo $|\Psi_G\rangle = c_1|1\rangle + c_2|3\rangle$ ou uma mistura incoerente descrita por uma matriz densidade do tipo $\rho = p_1|1\rangle\langle 1| + p_2|3\rangle\langle 3|$. A escolha depende da maneira como o sistema é preparado no laboratório. Considerando o caso em que o sistema está em contato com um banho térmico, o estado do sistema é descrito por uma mistura estatística de todos os auto-estados do hamiltoniano com probabilidades dadas pelos fatores de Boltzman $p_i = e^{-\beta E_i}/Z$, onde Z é a função de partição. No limite em que a temperatura do banho tende para zero, todos os fatores de Boltzmann tendem a zero exceto os fatores correspondentes aos estados $|1\rangle$ e $|3\rangle$, onde $e^{-\beta E_1}/Z = e^{-\beta E_3}/Z = 1/2$. Para $b \neq b_c$, todos os fatores de Boltzmann se anulam exceto um e, portanto, a matriz densidade corresponde a um estado puro. Para calcularmos a concorrência no ponto crítico, precisamos utilizar a fórmula de Wootters para estados mistos $C = \max[0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4]$, onde λ_i ($i = 1, 2, 3, 4$) são as raízes quadradas dos autovalores da matriz não hermiteana $R \equiv \rho \sigma^y \otimes \sigma^y \rho^* \sigma^y \otimes \sigma^y$, sendo $\lambda_1 > \lambda_{2,3,4}$. Neste caso, apenas dois autovalores são não-nulos: $\lambda_1 = 1/2$ e $\lambda_2 = \gamma/2$, onde já utilizamos que $b = \sqrt{1 - \gamma^2}$. Resumindo, a concorrência do estado fundamental do modelo XY de

¹Neste capítulo, ao nos referirmos aos campos críticos estamos tratando de campos onde existe um cruzamento entre níveis de energia (degenerescência), e não pontos críticos associados a transições de fase quânticas, que só ocorrem no limite termodinâmico.

Heisenberg com dois spins pode ser expressa como:

$$\begin{aligned} C &= 1 && \text{se } |b| < b_c \\ C &= \frac{1}{2}(1 - \gamma) && \text{se } |b| = b_c \\ C &= \sin \theta = \frac{\gamma}{\sqrt{b^2 + \gamma^2}} && \text{se } |b| > b_c. \end{aligned} \quad (3.5)$$

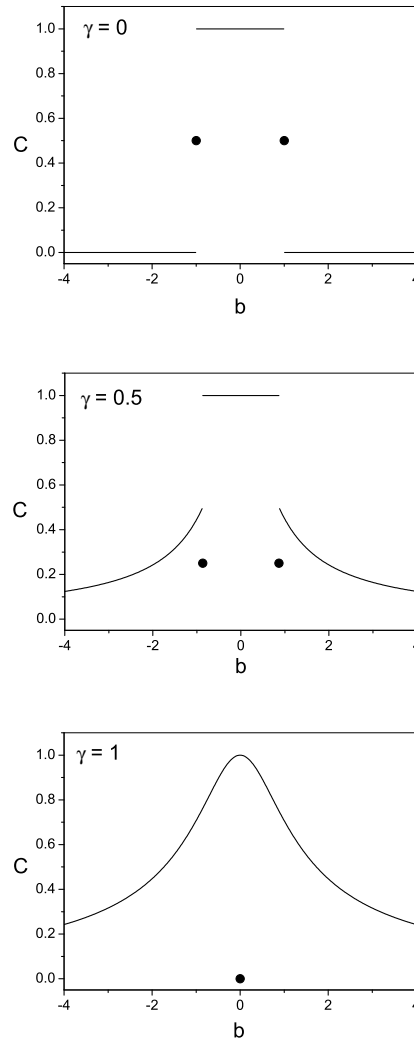


Figura 3.1 Concorrência do estado fundamental em função do campo magnético b para os modelos XX ($\gamma = 0$), modelo Ising ($\gamma = 0$) e um modelo com anisotropia intermediária $\gamma = 0.5$. Os pequenos círculos preenchidos correspondem ao valor da concorrência em $|b| = \sqrt{1 - \gamma^2}$

Na figura 3.1 apresentamos os resultados para a concorrência em função do campo magnético b com parâmetros de anisotropia fixos $\gamma = 0$, $\gamma = 0.5$ e $\gamma = 1$. Em $\gamma = 0$, a concorrência é não nula apenas para campos menores que o campo crítico $|b| = 1$

onde o estado fundamental tem emaranhamento máximo $C = 1$. Em $\gamma = 0.5$ o máximo emaranhamento ocorre para $|b| < b_c = \sqrt{3}/2$ e decai assintoticamente para campos mais intensos. Em $\gamma = 1$, a concorrência sofre uma forte queda de $C \approx 1$ em $|b| = 0^+$ para $C = 0$ em $b = 0$. Isto se deve ao fato de que em $b = 0$, o estado fundamental é uma mistura dos estados separáveis $|\psi_1\rangle = |0\rangle_x|0\rangle_x$ e $|\psi_2\rangle = |1\rangle_x|1\rangle_x$. Se utilizarmos os autovetores que obtivemos, vemos que com $\gamma = 1$ e $b = 0$, temos $\sin\theta = 1$ e $\cos\theta = 0$ e, portanto, $|3\rangle = (1/\sqrt{2}) [|00\rangle + |11\rangle]$. O estado fundamental, nesse caso, é descrito então como uma mistura de dois estados EPR que, como já vimos, tem emaranhamento nulo. Qualquer campo magnético aplicado quebra a degenerescência transformando o estado fundamental em um estado puro EPR.

Todos estes resultados correspondem ao caso em que a temperatura é nula, o que obviamente não é realizável experimentalmente. As descontinuidades na concorrência apresentadas na figura 3.1 não representam adequadamente, portanto, aquilo que seria observado no laboratório. Um tratamento mais realista corresponde ao caso de temperatura finita, onde o comportamento em temperaturas suficientemente baixas, como veremos a seguir, reproduz os resultados para o estado fundamental mas com uma passagem mais suave pelos pontos críticos.

3.2 EMARANHAMENTO NO ESTADO TÉRMICO

Generalizando o estudo feito na seção anterior, passamos à análise das propriedades do emaranhamento do sistema de dois spins no modelo XY em contato com um reservatório térmico. Analisamos, portanto, o emaranhamento em termos dos parâmetros que definem o hamiltoniano e da temperatura do reservatório. O estado térmico do sistema de dois spins é descrito pela matriz densidade $\rho_T = \frac{1}{Z}e^{-\beta H} = \frac{1}{Z}\sum_{i=1}^4 e^{-\beta E_i}|i\rangle\langle i|$, onde $Z = \sum_{i=1}^4 e^{-\beta E_i}$. Escrevendo ρ_T na base canônica e definindo $T \equiv (J\beta)^{-1}$, obtemos a seguinte representação matricial:

$$\rho_T = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} p & 0 & 0 & q \\ 0 & \cosh \Delta & \sinh \Delta & 0 \\ 0 & \sinh \Delta & \cosh \Delta & 0 \\ q & 0 & 0 & r \end{pmatrix} \quad (3.6)$$

onde

$$\begin{aligned}
p &= \cosh \Delta_c + \cos \theta \sinh \Delta_c \\
q &= \sin \theta \sinh \Delta_c \\
r &= \cosh \Delta_c - \cos \theta \sinh \Delta_c \\
Z &= 2 (\cosh \Delta + \cosh \Delta_c), \\
\Delta_c &= \frac{\sqrt{b^2 + \gamma^2}}{T} \\
\Delta &= \frac{1}{T}
\end{aligned} \tag{3.7}$$

Com esse resultado, podemos calcular diretamente a concorrência entre os spins através da fórmula de Wooters [14]. Para isso, precisamos determinar os autovalores do operador $R \equiv \rho \tilde{\rho}$, onde $\tilde{\rho} \equiv \sigma^y \otimes \sigma^y \rho^* \sigma^y \otimes \sigma^y$. A concorrência é obtida a partir das raízes quadradas destes autovalores que são:

$$\lambda_1 = \frac{\sqrt{1+q^2} - q}{Z} \tag{3.8}$$

$$\lambda_2 = \frac{\sqrt{1+q^2} + q}{Z} \tag{3.9}$$

$$\lambda_3 = \frac{e^{-\Delta}}{Z} \tag{3.10}$$

$$\lambda_4 = \frac{e^{\Delta}}{Z}. \tag{3.11}$$

A concorrência é dada por $C = \max [0, 2\lambda^{\max} - \sum_{i=1}^4 \lambda_i]$. Como $\lambda^{\max}$ pode ser tanto λ_2 quanto λ_4 . A concorrência pode então ser escrita na seguinte forma:

$$C = \max [0, C', C''], \tag{3.12}$$

onde:

$$C' = \lambda_2 - \lambda_1 - \lambda_3 - \lambda_4 = \frac{2}{Z} [q - \cosh(\Delta)] \tag{3.13}$$

$$C'' = \lambda_4 - \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 = \frac{2}{Z} [\sinh(\Delta) - \sqrt{1+q^2}]. \tag{3.14}$$

Esta é uma expressão geral para a concorrência em sistemas cujo hamiltoniano é descrito por parâmetros reais e possui a simetria de paridade. As funções C' e C'' não podem ser positivas simultaneamente e, portanto, nunca se cruzam em regiões de concorrência não

nula. Assim, a concorrência pode apresentar pelo menos três diferentes comportamentos no espaço dos parâmetros: $C = C'$, $C = C''$ ou com ambas as funções aparecendo separadas por uma região de separabilidade onde a concorrência se anula.

Diante da relevância das funções $C = C'$ e $C = C''$ para a nossa análise posterior, é útil buscar uma possível interpretação para essas funções. Uma interpretação encontrada em alguns trabalhos usa os termos *emaranhamento paralelo e antiparalelo*[45, 46], o qual se baseia na expressão destas funções em termos das probabilidades de ocorrência de estados de Bell paralelo ou antiparalelo no ensemble[45]. Se a probabilidade de ocorrência no ensemble de um estado de Bell paralelo $|\psi_{\pm}\rangle = (|00\rangle \pm |11\rangle)$ for maior que $1/2$, então temos $C = C'$ e o emaranhamento é dito paralelo. Entretanto, para que tenhamos $C = C''$, chamado de *emaranhamento anti-paralelo*, não é necessário que exista predominância de estados de Bell anti-paralelos no ensemble, a menos que o campo magnético seja nulo. Esta interpretação funciona bem para o estado fundamental, pois C' tende para $C = \sin \theta$ que é a concorrência de um estado pertencente ao setor paralelo da matriz densidade, enquanto C'' tende para $C = 1$ que é o emaranhamento de um estado EPR antiparalelo. Vale ressaltar que não se trata de emaranhamentos de naturezas distintas, já que os estados de Bell são equivalentes localmente, ou seja, podem ser transformados um no outro através de operações unitárias locais.

Fazendo $T \rightarrow 0^+$, temos $\lambda_1 \rightarrow 0$ e $\lambda_3 \rightarrow 0$. Assim, ficamos com $C = \lim_{T \rightarrow 0} |\lambda_2 - \lambda_4|$. No caso de $|b| > b_c$, temos $\Delta_c > \Delta$ fazendo com que $\lambda_4 \rightarrow 0$ e $\lambda_2 \rightarrow \sin \theta$, assim $C = \sin \theta$ para $|b| > b_c$. Para $|b| < b_c$, é λ_2 que vai a zero e ficamos com $\lambda_4 \rightarrow 1$. No caso $|b| = b_c$, temos $\Delta = \Delta_c$ e ambos λ_2 e λ_4 ficam não nulos em $T = 0^+$, com $\lambda_4 \rightarrow 1/2$ e $\lambda_2 \rightarrow \gamma/2$ levando ao resultado $C = (1 - \gamma)/2$. Dessa forma, mostramos que nosso resultado está consistente com o resultado obtido na seção anterior para a concorrência do estado fundamental.

Na figura 3.2, apresentamos gráficos 3D da concorrência em função dos parâmetros b e γ do hamiltoniano para diferentes temperaturas. Para baixas temperaturas, como em $T = 0.02$, a concorrência se aproxima do seu comportamento no estado fundamental. A depressão na concorrência ocorre nas proximidades de $|b| = b_c$, mas nesse caso não temos descontinuidade, apenas uma queda pronunciada no emaranhamento levando-o a zero. Esse intervalo de separabilidade está entre duas regiões distintas correspondentes a $C = C'$ e $C = C''$. À medida que a temperatura cresce, a transição entre as duas regiões se torna mais suave e a concorrência começa a se anular em regiões cada vez maiores. Para cada ponto (α, γ) , existe uma temperatura crítica T_c acima da qual não existe mais emaranhamento. Existem argumentos [32] defendendo que esta transição

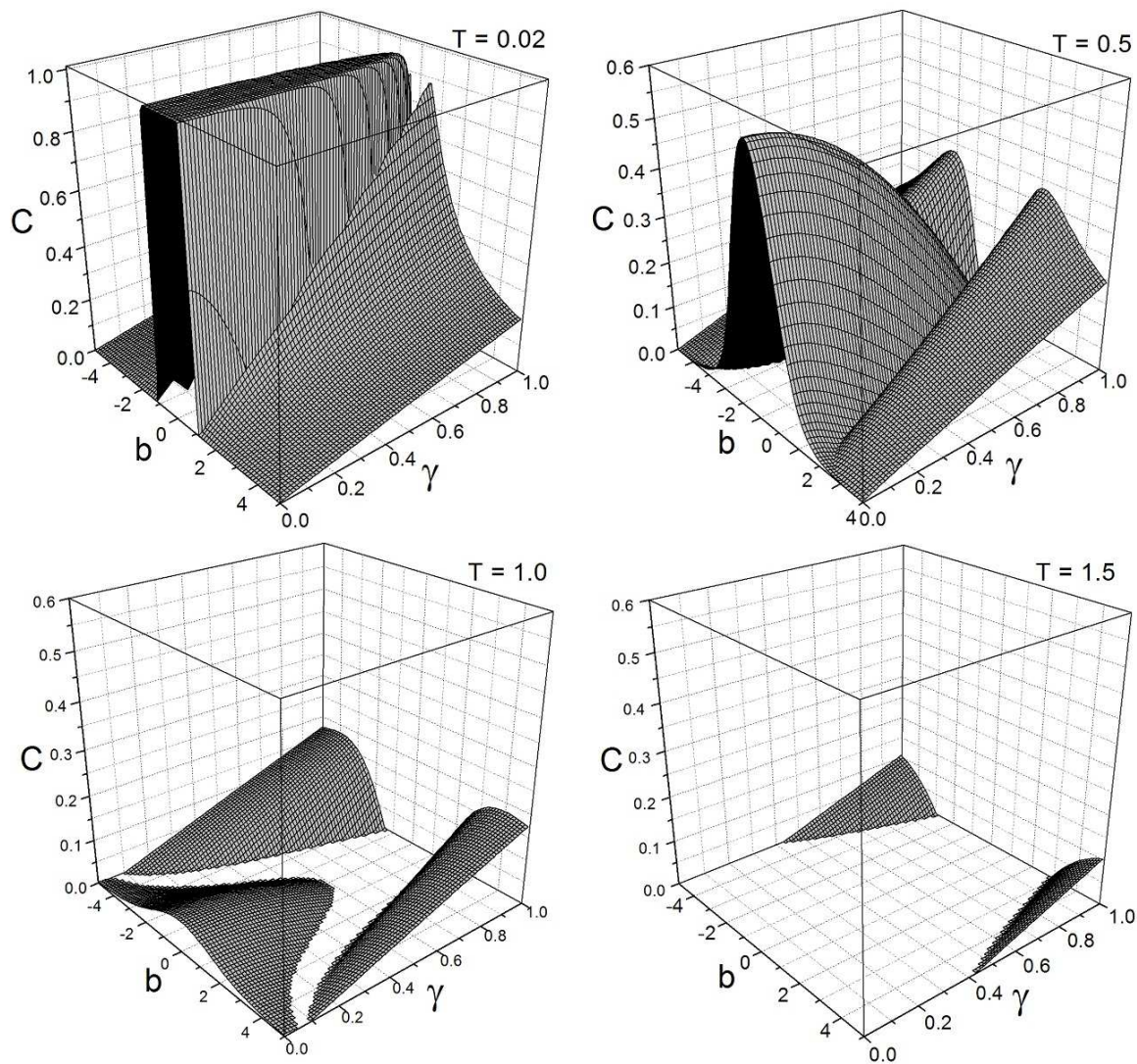


Figura 3.2 Gráficos da concorrência em função dos parâmetros b e γ para diferentes temperaturas.

para concorrência nula em temperatura finita, já detectada em outros trabalhos [24, 30], é uma propriedade geral do emaranhamento bipartite de sistemas em contato com o banho térmico.

O estudo do efeito da temperatura sobre o emaranhamento faz parte de uma série de esforços com o objetivo de entender os efeitos de ambientes externos sobre o emaranhamento, os quais podem não apenas deteriorar, mas também induzir emaranhamento no sistema [33, 34, 35, 36]. Um exemplo é o modelo XX com campos maiores que o valor crítico $b = 1$ onde o estado fundamental é separável. Com a temperatura, o estado passa a ser misto, envolvendo na mistura o primeiro estado excitado que é um estado EPR

que, o que resulta num estado misto emaranhado. Outra maneira de entender o emaranhamento induzido por ambiente é ver que o reservatório atua como um terceiro sistema que está emaranhado com cada spin individualmente, mediando um acoplamento indireto entre eles. Tal acoplamento pode atuar tanto inibindo quando induzindo a formação de emaranhamento.

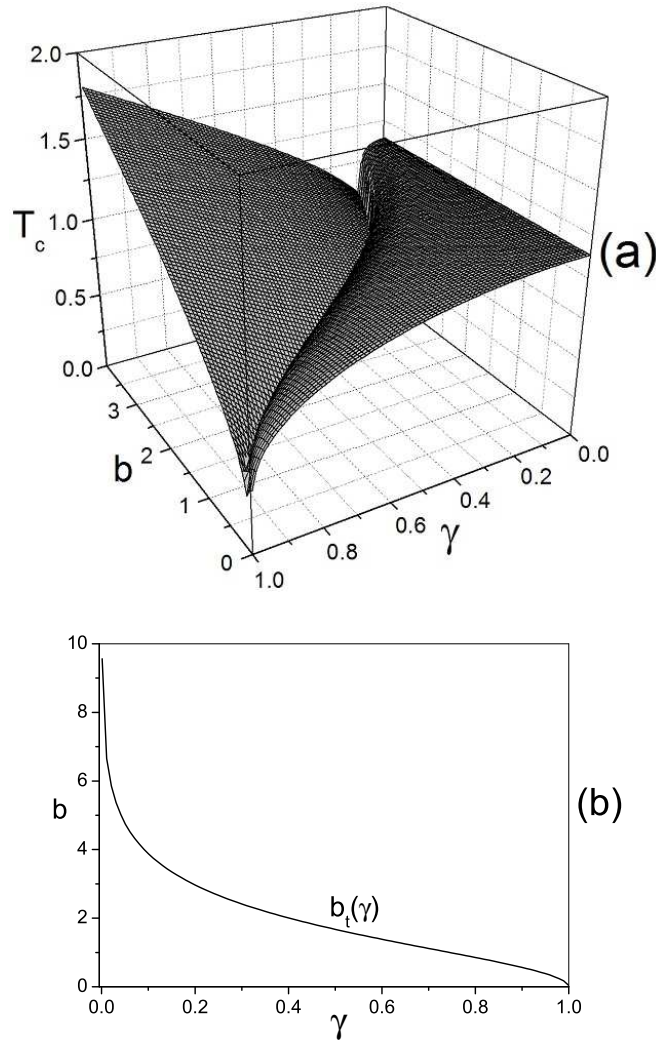


Figura 3.3 Temperatura crítica T_c em função dos parâmetros b e γ . Na parte superior está o gráfico $T_c(b, \gamma)$ e na parte inferior, um gráfico da curva de descontinuidade $b_t(\gamma)$ que tende a zero para $\gamma = 1$ e diverge em $\gamma = 0$.

É interessante analisarmos o comportamento da temperatura crítica T_c em termos dos parâmetros do problema. A única situação em que é possível encontrar uma solução exata para T_c é o caso isotrópico $\gamma = 0$, onde $C = C'' = \frac{2}{Z} [\sinh \Delta - 1]$. Fazendo $C''' = 0$

e resolvendo para $\Delta = 1/T$, obtemos:

$$T_c(\gamma = 0) = \frac{1}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 1.1346. \quad (3.15)$$

Para os outros pontos, precisamos resolver a equação transcendental $q = \cosh \Delta$, se $C = C'$ em $T = T_c^-$, ou $\sinh \Delta = \sqrt{1 + q^2}$, se $C = C''$ em $T = T_c^-$, as quais só podem ser resolvidas numericamente. A figura 3.3 contém o gráfico de T_c em função dos parâmetros b e γ , onde nota-se a existência de duas regiões distintas separadas por uma curva $b_t(\gamma)$ onde existe uma descontinuidade. Para $b > b_t$, encontramos que a concorrência em T_c^- é $C = C''$ enquanto que para $b < b_t$, temos $C = C'$. A curva $b_t(\gamma)$ é mostrada na figura 3.3b, onde vemos que existe uma divergência em $\gamma = 0$, confirmando o fato de que a temperatura crítica para $\gamma = 0$ independe do parâmetro b e não sofre qualquer descontinuidade. Na próxima seção, passamos a discutir os padrões de comportamento da concorrência em função da temperatura, onde a curva $b_t(\gamma)$ também tem um papel relevante.

3.3 PADRÕES DE EMARANHAMENTO TÉRMICO

Na figura 3.4, vemos os diferentes padrões de emaranhamento com respeito à dependência com a temperatura. O diagrama $b \times \gamma$ mostrado em 3.4a mostra que existem três regiões distintas. Na região (I), que é limitada inferiormente pela curva $b_c(\gamma)$, temos $C = C'$ que em $T = 0$ tem o valor $C = \sin \theta$ e decai monotonicamente até a temperatura crítica T_c acima da qual $C = 0$. O comportamento em (III) é parecido com (I) mas com a diferença de que a concorrência é $C = C''$, que é máxima no estado fundamental onde temos um estado EPR. Também a temperatura crítica, como vimos na seção anterior, apresenta comportamentos bastante diferentes nestas duas regiões. A região (II) é caracterizada pela presença das funções C' para temperaturas mais baixas e $C = C''$ para temperaturas mais altas, as quais são separadas por um intervalo de separabilidade. A presença destes intervalos de separabilidade é um resultado já encontrado em outros trabalhos [76, 26, 25]. A contribuição de nosso trabalho [27], neste caso, foi o de especificar no espaço dos parâmetros a região onde este comportamento ocorre. A figura 3.4e mostra o comportamento de $C \times T$ para $\gamma = 0$ na região (II), isto porque o comportamento em $\gamma = 0$ é diferente dos outros pontos na região devido ao desaparecimento da parte referente a $C = C'$. Uma característica notável do emaranhamento em $\gamma = 0$ em (II) é que ele é nulo no estado fundamental ($T = 0$). Com o aumento da temperatura, a

energia térmica pode excitar elementos do ensemble para o primeiro estado excitado, que é um estado EPR. Como resultado, emaranhamento surge no sistema, o qual é também denominado *emaranhamento induzido por ambiente*.

Passamos agora ao estudo dos padrões da concorrência como função do campo magnético b com a temperatura T e o parâmetro de anisotropia fixos, o que corresponde a realizar cortes em superfícies como as da figura 3.2 para diferentes valores de γ . Apresentamos na figura 3.5a o diagrama $T \times \gamma$ que exibe uma curva que separa dois padrões diferentes: (I) e (II). Nas figuras 3.5b e 3.5c, apresentamos amostras de gráficos $C \times b$ para estes dois padrões, além de gráficos para o comportamento sobre a linha $\gamma = 0$ em 3.5d. O padrão de $C \times b$ na região (I) é caracterizado por duas regiões distintas separadas por um intervalo de separabilidade, uma região com campos fracos onde $C = C''$ e uma segunda região para campos mais intensos onde $C = C'$. Na região (II) não temos emaranhamento na região de campos fracos $C = C'$. O caso isotrópico é especial, pois nesse caso o emaranhamento é máximo em $b = 0$ e decai monotonicamente até o desaparecimento súbito do emaranhamento sem passar por qualquer intervalo de separabilidade.

Para concluir, analisamos a dependência da concorrência como função da anisotropia γ mantendo o campo b e a temperatura fixados, o que também equivale a cortes nos gráficos da figura 3.2, mas agora perpendicularmente ao eixo relativo ao campo b . A figura 3.6a mostra num diagrama $T \times b$ os quatro regimes que podem aparecer com relação à dependência com γ , sendo que na região (IV) temos concorrência nula para todo γ . Nas figuras 3.6b-d, são apresentados gráficos ilustrativos do comportamento da concorrência em função de γ em cada uma destas regiões. Na região (II), como pode ser visto no gráfico da figura 3.6c não existe emaranhamento nas proximidades da máxima anisotropia $\gamma = 1$, o emaranhamento nesta região é do tipo antiparalelo $C = C''$ e só aparece para temperaturas abaixo da temperatura crítica $T_c = 1.1346$, que é a temperatura crítica do modelo isotrópico $\gamma = 0$. Na região (III), não existe emaranhamento nas proximidades de $\gamma = 0$, o emaranhamento é do tipo paralelo $C = C'$ e pode existir em qualquer temperatura dependendo do campo magnético aplicado. Na região (I), ambos os tipos de emaranhamento aparecem e são separados por um intervalo de separabilidade. Um fato peculiar dos padrões de emaranhamento $C \times \gamma$ é a existência de uma região “escura”, onde não existe emaranhamento qualquer que seja γ , isto porque estamos acima de $T = 1.1346$ e o campo magnético aplicado não é suficiente para a produção de emaranhamento paralelo.

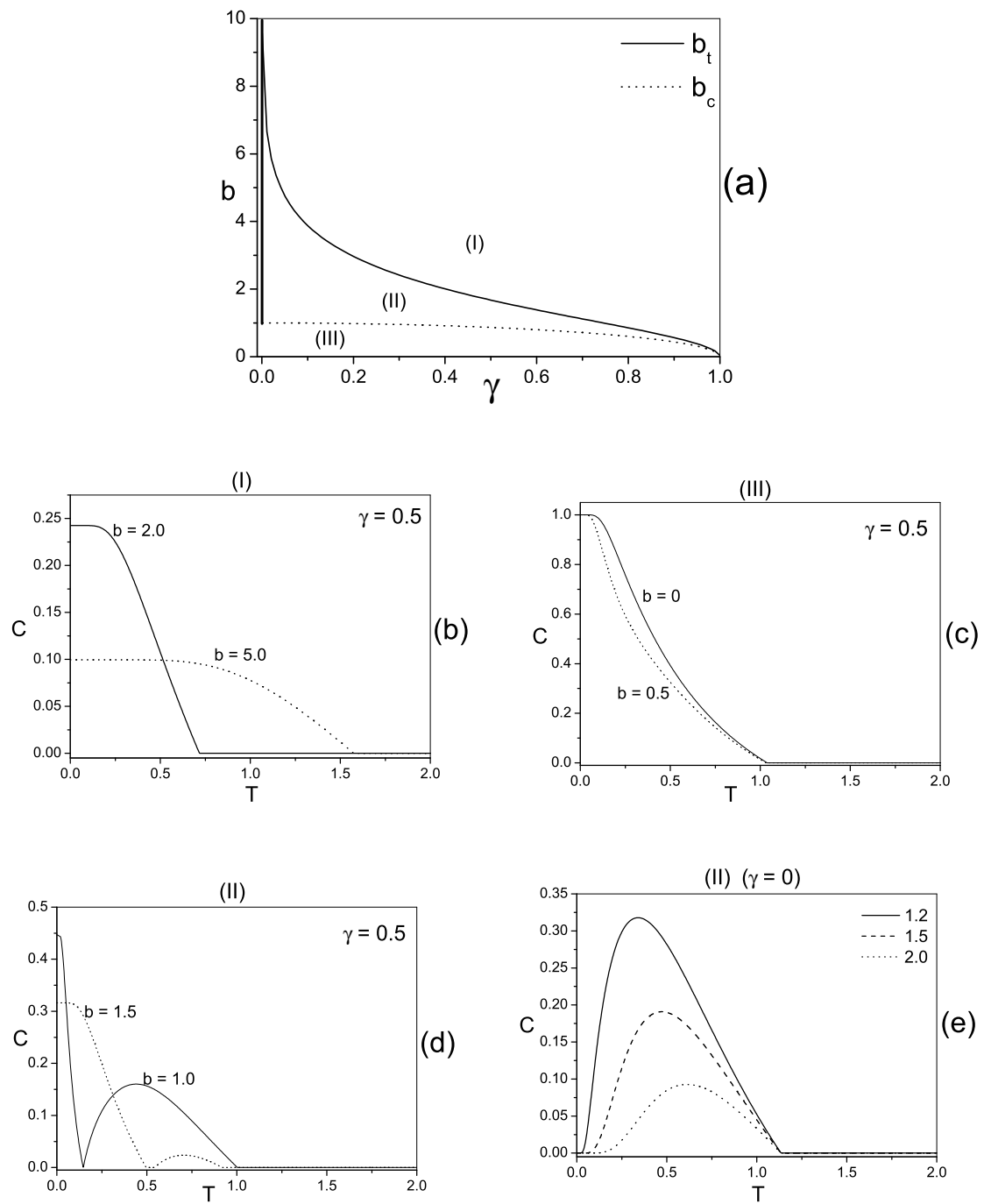


Figura 3.4 Padrões de comportamento da concorrência em função da temperatura. A parte a) mostra no diagrama $b \times \gamma$ as três regiões distintas (I), (II) e (III) delimitadas pelas curvas $b_c = \sqrt{1 - \gamma^2}$ e pela curva $b_t(\gamma)$. Os gráficos apresentados em b-d) contém amostras de $C \times T$ em cada uma dessas regiões. O gráfico em e) mostra o comportamento de $C \times T$ para $\gamma = 0$ na região (II), o qual é ligeiramente diferente do comportamento para $\gamma \neq 0$.

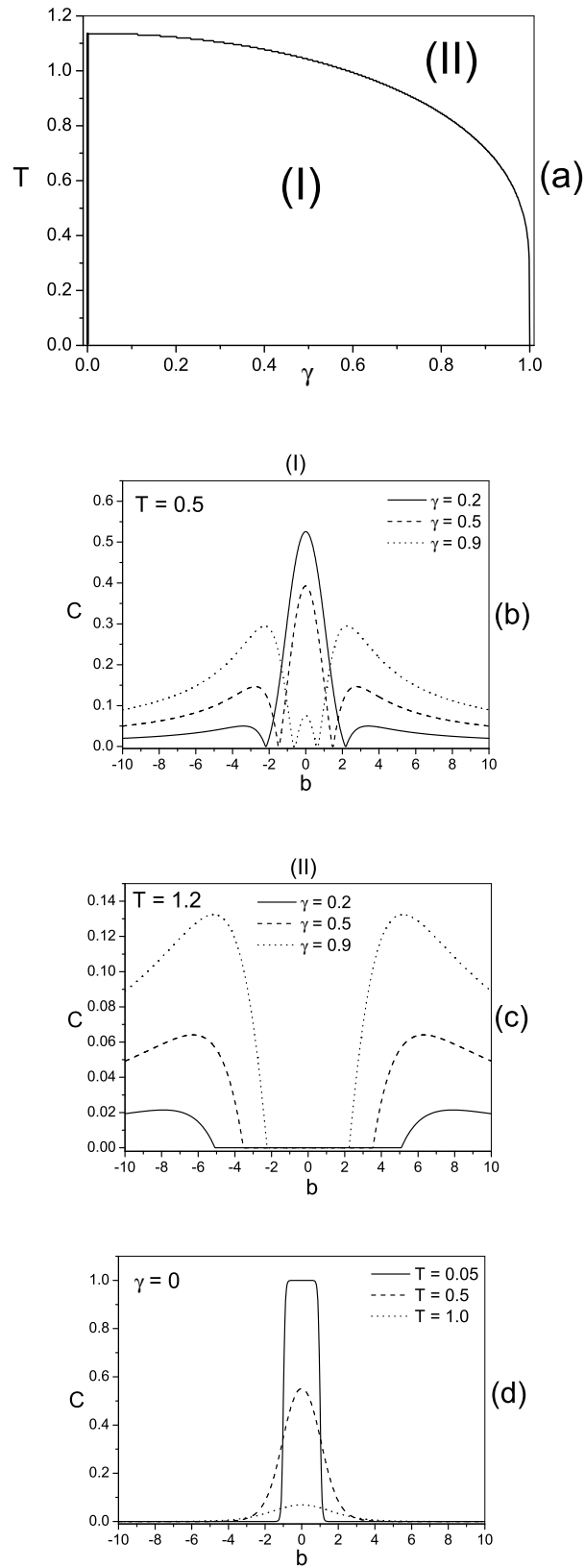


Figura 3.5 Padrões de emaranhamento $C \times b$ com γ e T fixos. O diagrama em a) apresenta os dois padrões distintos (I) e (II) e com uma linha hachurada sobre o eixo $\gamma = 0$, indicando que o comportamento na região (II) para $\gamma = 0$ é diferente do caso $\gamma \in (0, 1]$. Em b) e c), são apresentados gráficos representativos dos padrões (I) e (II) respectivamente, enquanto que em d), os gráficos correspondem ao comportamento de $C \times b$ sobre a linha hachurada.

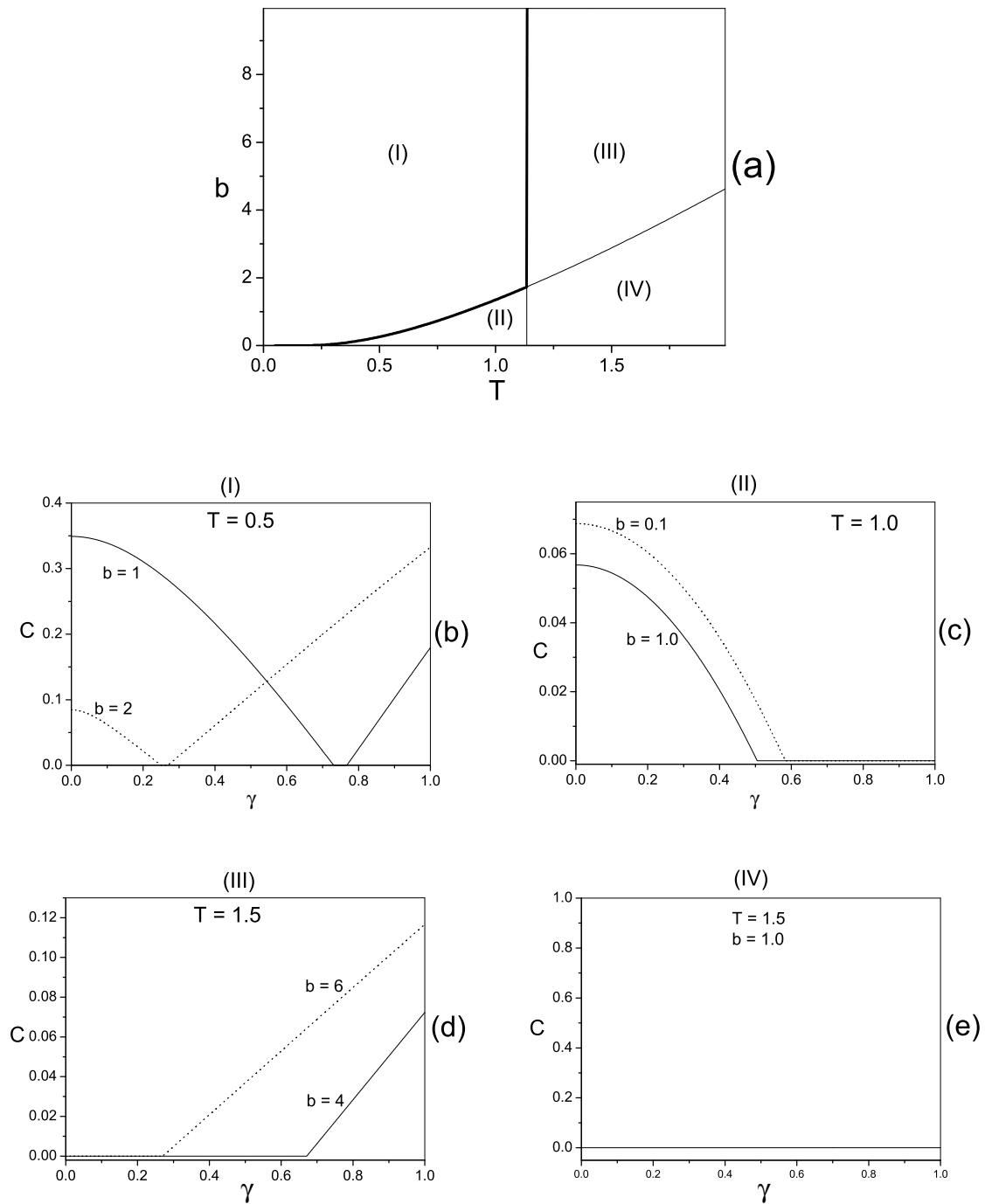


Figura 3.6 Padrões de emaranhamento $C \times \gamma$ com b e T fixos. O diagrama em a) apresenta os quatro padrões distintos (I) – (IV). Em b-d), são apresentados gráficos representativos para cada um dos padrões.

3.4 FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO DE SPIN PURAMENTE QUÂNTICAS

Como vimos nas seções anteriores, o comportamento da concorrência do modelo XY em função dos parâmetros γ , b e T apresenta uma rica estrutura de padrões de emaranhamento. Nesta seção, voltamos a analisar estes padrões usando as funções de correlação de spin, onde consideramos dois tipos de correlação: Primeiramente, as funções de correlação usuais obtidas por meio de médias no ensemble térmico e, em seguida, definimos a função de correlação quântica pura através da média das funções de correlação dos estados puros pertencentes a uma decomposição ótima da matriz densidade que minimiza a concorrência enquanto média no ensemble. O uso das funções de correlação usuais não revela, como veremos, os diferentes padrões de emaranhamento devido ao fato dela conter correlações clássicas e quânticas em sua composição. As correlações puramente quânticas, por outro lado, são sensíveis aos padrões de emaranhamento que ocorrem no sistema. Nesta seção, obtemos explicitamente decomposições de concorrência mínima e utilizamos tais decomposições para calcular as funções de correlação de spin quânticas puras. Apresentamos diversos gráficos destas correlações e comparamos com os resultados obtidos via média no ensemble.

3.4.1 Decomposições ótimas

Uma importante propriedade da matriz densidade de um estado misto arbitrário é que ela pode ser decomposta em uma combinação convexa de matrizes densidade para estados puros de infinitas maneiras diferentes, o que não afeta o cálculo do valor esperado de observáveis físicos, pois estes independem da decomposição utilizada. No entanto, existem importantes quantidades físicas que não podem ser obtidas do valor esperado de um operador simples, um exemplo disto é a função de correlação de spin definida como:

$$\Gamma^{\alpha\beta} \equiv \langle \sigma^\alpha \sigma^\beta \rangle - \langle \sigma^\alpha \rangle \langle \sigma^\beta \rangle, \quad (3.16)$$

onde $\alpha, \beta \in (x, y, z)$, a qual é escrita como uma combinação de valores esperados. Apenas em casos especiais onde $\langle \sigma^\alpha \rangle$ ou $\langle \sigma^\beta \rangle$ são nulos, temos a correspondência com o valor esperado do operador $\sigma^\alpha \sigma^\beta$.

O emaranhamento de estados mistos também depende da decomposição, o que leva a dificuldades na sua quantificação para um número arbitrário de qubits[18]. Para o caso de dois qubits, no entanto, é possível não apenas quantificar o emaranhamento para um estado misto arbitrário, mas também especificar decomposições ótimas da matriz

densidade que levam a tal quantidade [14]. O procedimento de Wootters para encontrar a decomposição ótima segue o seguinte procedimento:

- Encontra-se uma decomposição da matriz densidade ρ , $\{|x_i\rangle\}$, com a propriedade especial $\langle x_i|\tilde{x}_j\rangle = \lambda_i\delta_{ij}$. É possível obter esta decomposição realizando uma transformação unitária sobre uma decomposição conhecida como $\left\{\frac{e^{-\beta E_i}}{Z}, |i\rangle\right\}$. Entretanto uma maneira mais direta é utilizar que $\{|x_i\rangle\}$ corresponde aos auto-estados à direita do operador não-hermiteano $R \equiv \rho\tilde{\rho}$, onde $\tilde{\rho} \equiv \sigma^y \otimes \sigma^y \rho^* \sigma^y \otimes \sigma^y$.
- Uma transformação unitária é utilizada para transformar a decomposição $\{|x_i\rangle\}$ em uma nova decomposição $\{|z_i\rangle\}$ que minimiza a concorrência média.

A decomposição $\{|x_i\rangle\}$ corresponde aos autoestados à direita do operador não-hermiteano $R \equiv \rho\tilde{\rho}$ com respectivos autovalores à direita $\{\lambda_i^2\}$. O resultado é dado por:

$$|x_1\rangle = \sqrt{\frac{\lambda_1}{2}} \left[\left(\frac{p}{r}\right)^{\frac{1}{4}} |00\rangle - \left(\frac{r}{p}\right)^{\frac{1}{4}} |11\rangle \right], \quad (3.17)$$

$$|x_2\rangle = -i\sqrt{\frac{\lambda_2}{2}} \left[\left(\frac{p}{r}\right)^{\frac{1}{4}} |00\rangle + \left(\frac{r}{p}\right)^{\frac{1}{4}} |11\rangle \right], \quad (3.18)$$

$$|x_3\rangle = -i\sqrt{\frac{\lambda_3}{2}} [|01\rangle - |10\rangle], \quad (3.19)$$

$$|x_4\rangle = \sqrt{\frac{\lambda_4}{2}} [|01\rangle + |10\rangle]. \quad (3.20)$$

A próxima etapa é encontrar uma transformação unitária que leva à decomposição de concorrência mínima. Considere a seguinte decomposição:

$$|z_1\rangle = \frac{1}{2} [|y_1\rangle + e^{i\theta_2}|y_2\rangle + e^{i\theta_3}|y_3\rangle + e^{i\theta_4}|y_4\rangle], \quad (3.21)$$

$$|z_2\rangle = \frac{1}{2} [|y_1\rangle + e^{i\theta_2}|y_2\rangle - e^{i\theta_3}|y_3\rangle - e^{i\theta_4}|y_4\rangle], \quad (3.22)$$

$$|z_3\rangle = \frac{1}{2} [|y_1\rangle - e^{i\theta_2}|y_2\rangle + e^{i\theta_3}|y_3\rangle - e^{i\theta_4}|y_4\rangle], \quad (3.23)$$

$$|z_4\rangle = \frac{1}{2} [|y_1\rangle - e^{i\theta_2}|y_2\rangle - e^{i\theta_3}|y_3\rangle + e^{i\theta_4}|y_4\rangle], \quad (3.24)$$

onde os estados $\{|y_i\rangle\}$ corresponde aos estados $\{|x_j\rangle\}$ rearranjados de tal forma que o estado $|y_1\rangle$ corresponda ao estado $|x_i\rangle$ para o qual $\lambda_i = \lambda^{\max}$. A concorrência média de tal decomposição é dada por $\langle C \rangle = \Lambda_1 + \sum_{j>1} \Lambda_j e^{-2i\theta_j}$, onde os Λ_j 's correspondem ao conjunto $\{\lambda_i\}$ agrupados em ordem decrescente. Nas regiões onde $2\Lambda_1 - \sum \Lambda_i > 0$, as

decomposições ótimas são obtidas com a escolha $\theta_2 = \theta_3 = \theta_4 = \pi/2$. Assim, nas regiões de concorrência não nula, temos dois tipos diferentes de decomposições, uma para o caso em $\Lambda_1 = \lambda_2$ e outra para o caso $\Lambda_1 = \lambda_4$. Estas duas decomposições têm características bastante diferentes como foi mostrado na seção anterior através do comportamento das funções C' e C'' . Vamos analisar separadamente os dois casos.

3.4.2 Caso 1: $\Lambda_1 = \lambda_4$ e $C = C''$.

Neste caso, temos $|y_1\rangle = |x_4\rangle$ e a decomposição ótima é dada por:

$$|w_1\rangle = \frac{1}{2} [|x_4\rangle + i|x_1\rangle + i|x_2\rangle + i|x_3\rangle], \quad (3.25)$$

$$|w_2\rangle = \frac{1}{2} [|x_4\rangle + i|x_1\rangle - i|x_2\rangle - i|x_3\rangle], \quad (3.26)$$

$$|w_3\rangle = \frac{1}{2} [|x_4\rangle - i|x_1\rangle + i|x_2\rangle - i|x_3\rangle], \quad (3.27)$$

$$|w_4\rangle = \frac{1}{2} [|x_4\rangle - i|x_1\rangle - i|x_2\rangle + i|x_3\rangle]. \quad (3.28)$$

A probabilidade de ocorrência de cada um destes estados no ensemble é a mesma e igual a $p = 1/4$. A concorrência calculada em cada um deles também é a mesma e, portanto, esta decomposição também minimiza o emaranhamento de formação.

3.4.3 Caso 2: $\Lambda_1 = \lambda_2$ e $C = C'$.

Neste caso, temos $|y_1\rangle = |x_2\rangle$ e a decomposição ótima é dada por:

$$|z_1\rangle = \frac{1}{2} [|x_2\rangle + i|x_1\rangle + i|x_3\rangle + i|x_4\rangle], \quad (3.29)$$

$$|z_2\rangle = \frac{1}{2} [|x_2\rangle + i|x_1\rangle - i|x_3\rangle - i|x_4\rangle], \quad (3.30)$$

$$|z_3\rangle = \frac{1}{2} [|x_2\rangle - i|x_1\rangle + i|x_3\rangle - i|x_4\rangle], \quad (3.31)$$

$$|z_4\rangle = \frac{1}{2} [|x_2\rangle - i|x_1\rangle - i|x_3\rangle + i|x_4\rangle]. \quad (3.32)$$

Ao contrário do caso anterior, neste caso os estados da decomposição não são igualmente prováveis no ensemble e, também, a concorrência de cada um deles não é a mesma. Assim, apesar desta decomposição minimizar a concorrência ela não minimiza o emara-

nhamento de formação. Entretanto, verificamos numericamente que a discrepância entre o emaranhamento de formação médio nesse ensemble e o seu valor exato é muito pequena.

As probabilidades de ocorrência dos estados do ensemble $\{|z_i\rangle\}$ são dadas por:

$$p_1 = p_2 = \frac{1}{4} \left[1 - \frac{\mathcal{Q}}{Z} \right] \quad (3.33)$$

$$p_3 = p_4 = \frac{1}{4} \left[1 + \frac{\mathcal{Q}}{Z} \right], \quad (3.34)$$

onde Z é a função de partição do sistema e $\mathcal{Q} = 2 \cos \theta \cosh \Delta_c$.

Nas regiões onde a concorrência é nula, as fases θ_2 , θ_3 e θ_4 podem ser escolhidas de tal forma que $C = \Lambda_1 + \sum_{j>1} \Lambda_j e^{-2i\theta_j} = 0$, o que é possível já que nesta região temos $\Lambda_1 > \Lambda_2 + \Lambda_3 + \Lambda_4$. Fazendo esta escolha, obtemos uma decomposição de estados puros separáveis $\rho = \sum_{i=1}^4 p_i \rho_1^i \otimes \rho_2^i$, onde as correlações de spin são puramente clássicas no sentido de que podem ser geradas utilizando apenas operações locais e comunicação clássica.

3.5 FUNÇÕES DE CORRELAÇÃO DE SPIN

A matriz densidade do problema de dois qubits pode ser utilizada diretamente para obter as funções de correlação de spin $\Gamma_{\alpha\beta} \equiv \langle \sigma_1^\alpha \sigma_2^\beta \rangle - \langle \sigma_1^\alpha \rangle \langle \sigma_2^\beta \rangle$, a qual pode ainda ser escrita na forma de média numa decomposição arbitrária $\{|\Psi_j\rangle\}$:

$$\Gamma_{\alpha\beta} = \sum_{j=1}^4 \langle \Psi_j | \sigma_1^\alpha \sigma_2^\beta | \Psi_j \rangle - \sum_{j=1}^4 \langle \Psi_j | \sigma_1^\alpha | \Psi_j \rangle \sum_{k=1}^4 \langle \Psi_k | \sigma_2^\beta | \Psi_k \rangle. \quad (3.35)$$

Para o nosso problema analisamos somente os casos em que $\alpha = \beta$, os resultados são:

$$\Gamma_{xx} = \frac{2(q + \sinh \Delta)}{Z} \quad (3.36)$$

$$\Gamma_{yy} = \frac{2(-q + \sinh \Delta)}{Z} \quad (3.37)$$

$$\Gamma_{zz} = \frac{2(\cosh \Delta_c - \cosh \Delta)}{Z} - (1 + q^2) \left(\frac{\mathcal{Q}}{Z} \right)^2. \quad (3.38)$$

Estas funções de correlação quantificam juntamente correlações clássicas e quânticas e, por isso, não são sensíveis aos padrões de emaranhamento apresentados na seção anterior. É nesse ponto que propomos a extração da componente puramente quântica $\Gamma_{\alpha\beta}^Q$ das

correlações expressas nestas funções, que é a média das correlações de spin presentes em cada estado das decomposições que minimizam a concorrência, ou seja:

$$\Gamma_{\alpha\beta}^Q \equiv \sum_{i=1}^4 p_i \Gamma_{\alpha\beta}(|z_i\rangle), \quad (3.39)$$

onde

$$\Gamma_{\alpha\beta}(|z_i\rangle) = \frac{\langle z_i | \sigma_1^\alpha \sigma_2^\beta | z_i \rangle}{\langle z_i | z_i \rangle} - \frac{\langle z_i | \sigma_1^\alpha | z_i \rangle \langle z_i | \sigma_2^\beta | z_i \rangle}{\langle z_i | z_i \rangle^2}$$

e $|z_i\rangle$ são os estados da decomposição ótima subnormalizados de forma que $p_i = \langle z_i | z_i \rangle$.

Apesar de não provarmos matematicamente que a função de correlação definida dessa forma é de fato puramente quântica, tal definição pode ser justificada pelo fato de que as funções de correlação de spin calculadas em estados puros descrevem correlações puramente quânticas e se anulam se tais estados forem separáveis. Correlações clássicas surgem quando o estado não é puro, mas sim uma mistura estatística de tais estados. Se os estados envolvidos na mistura forem separáveis, não existe emaranhamento. A nossa componente puramente quântica se anula e as funções de correlação descrevem correlações puramente clássicas.

Como temos dois tipos diferentes de decomposições ótimas nas regiões de concorrência não nula, precisamos analisar separadamente os casos $\Lambda_1 = \lambda_4$ e $\Lambda_1 = \lambda_2$.

3.5.1 Caso $\Lambda_1 = \lambda_4$

Nas regiões onde $\Lambda_1 = \lambda_4$, todos os estados da decomposição ótima são equiprováveis, consequentemente a concorrência e as funções de correlação associadas a cada estado do conjunto $\{|w_i\rangle\}$ são iguais, o que nos leva a $\Gamma_{\alpha\beta}^Q \equiv \langle \Gamma_{\alpha\beta}(|w_{1-4}\rangle) \rangle$.

As funções de correlação puramente quânticas são, portanto:

$$\Gamma_{xx}^Q = \frac{2(q + \sinh \Delta)}{Z} - \frac{4(\sqrt{1+q^2} + q)[\mathcal{P} \sinh \Delta + \cosh \Delta]}{Z^2} \quad (3.40)$$

$$\Gamma_{yy}^Q = \frac{2(-q + \sinh \Delta)}{Z} - \frac{4(\sqrt{1+q^2} - q)[\mathcal{P} \sinh \Delta + \cosh \Delta]}{Z^2} \quad (3.41)$$

$$\Gamma_{zz}^Q = \frac{2(\cosh \Delta_c - \cosh \Delta)}{Z} - \frac{[Q^2(1+q^2) - 4]}{Z^2}, \quad (3.42)$$

onde $\mathcal{P} = \cosh \Delta_c / \sqrt{1 + q^2}$ e $\mathcal{Q} = 2 \cos \theta \cosh \Delta_c$.

3.5.2 Caso $\Lambda_1 = \lambda_2$

Para a decomposição $\{|z_i\rangle\}$, as funções de correlação para os estados puros $|z_1\rangle$ e $|z_2\rangle$ são iguais, o mesmo acontecendo para $|z_3\rangle$ e $|z_4\rangle$. Denotamos tais funções como $\Gamma_{\alpha\beta}(z_{1,2})$ e $\Gamma_{\alpha\beta}(z_{3,4})$ respectivamente. Temos, portanto, a seguinte expressão para $\Gamma_{\alpha\beta}^Q$:

$$\Gamma_{\alpha\beta}^Q = 2p_1\Gamma_{\alpha\beta}(z_{1,2}) + 2p_2\Gamma_{\alpha\beta}(z_{3,4}), \quad (3.43)$$

onde:

$$\Gamma_{xx}(z_{1,2}) = \frac{2(q + \sinh \Delta)}{Z - \mathcal{Q}} - \frac{e^\Delta (4 \cosh \Delta_c - 2\mathcal{Q} + 4q)}{(Z - \mathcal{Q})^2} \quad (3.44)$$

$$\Gamma_{yy}(z_{1,2}) = \frac{2(-q + \sinh \Delta)}{Z - \mathcal{Q}} + \frac{e^{-\Delta} (4 \cosh \Delta_c - 2\mathcal{Q} + 4q)}{(Z - \mathcal{Q})^2} \quad (3.45)$$

$$\Gamma_{zz}(z_{1,2}) = \frac{2 \cosh \Delta_c - \mathcal{Q} - 2 \cosh \Delta}{Z - \mathcal{Q}} - \frac{[(1 + q^2) \mathcal{Q} - 2 \cosh \Delta_c]^2}{(Z - \mathcal{Q})^2 (1 + q^2)} \quad (3.46)$$

e

$$\Gamma_{xx}(z_{3,4}) = \frac{2(q + \sinh \Delta)}{Z + \mathcal{Q}} - \frac{e^\Delta (4 \cosh \Delta_c + 2\mathcal{Q} + 4q)}{(Z + \mathcal{Q})^2} \quad (3.47)$$

$$\Gamma_{yy}(z_{3,4}) = \frac{2(-q + \sinh \Delta)}{Z + \mathcal{Q}} + \frac{e^{-\Delta} (4 \cosh \Delta_c + 2\mathcal{Q} + 4q)}{(Z + \mathcal{Q})^2} \quad (3.48)$$

$$\Gamma_{zz}(z_{3,4}) = \frac{2 \cosh \Delta_c + \mathcal{Q} - 2 \cosh \Delta}{Z + \mathcal{Q}} - \frac{[(1 + q^2) \mathcal{Q} + 2 \cosh \Delta_c]^2}{(Z + \mathcal{Q})^2 (1 + q^2)}. \quad (3.49)$$

As funções de correlação de spin puramente quânticas se anulam, por construção, para estados separáveis. No entanto, a matriz densidade do sistema descreve uma mistura estatística destes estados o que possibilita a existência de correlações clássicas. Nos intervalos de separabilidade ou em temperaturas acima da temperatura limite, as correlações presentes no sistema são puramente clássicas. No estado fundamental, com exceção do ponto $b = b_c$, temos um estado puro. Neste caso, as correlações são puramente quânticas.

A seguir, apresentamos gráficos das funções de correlação puramente quânticas $\Gamma_{\alpha\alpha}^Q$ e das funções de correlação completas $\Gamma_{\alpha\alpha}$ em função da temperatura para valores selec-

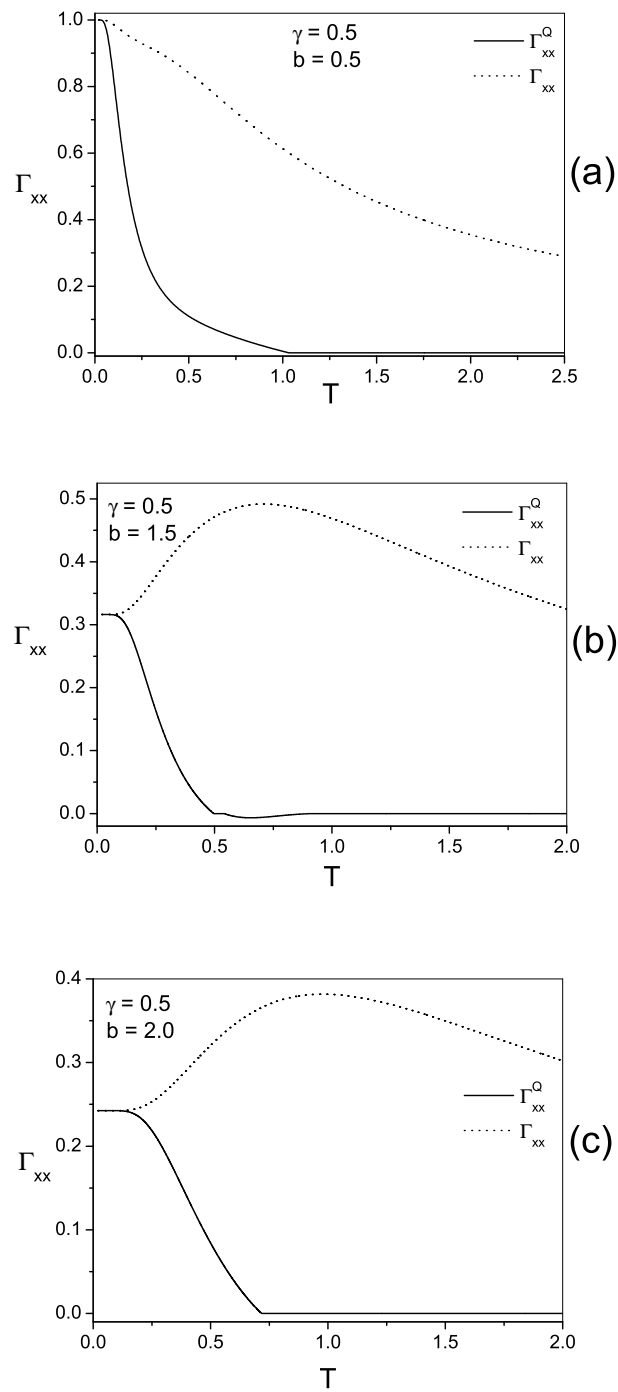


Figura 3.7 Comportamento das funções de correlação de spin como função da temperatura para as regiões (I), (II) e (III) do diagrama $b \times \gamma$ da figura 3.4. As linhas cheias representam a componente puramente quântica Γ_{xx}^Q da função de correlação completa Γ_{xx} apresentada através de linhas pontilhadas.

onados de b e γ correspondentes aos padrões de emaranhamento apresentados na figura 3.4. A figura 3.7 mostra o resultado para Γ_{xx} e Γ_{xx}^Q . Os padrões correspondentes às figuras 3.7a e 3.7b são separados pela curva crítica $b = b_c(\gamma)$ e a função de correlação completa Γ_{xx} também sofre uma mudança de comportamento nesta transição, mas na transição pelo ponto $b = b_t$ relativa à mudança entre os padrões das figuras 3.7b e 3.7c, vemos que apenas a componente quântica é afetada. Note que em $b = 0.5$ $\Gamma_{xx}^Q > 0$, enquanto que para $b = 1.5$, após o intervalo de separabilidade, temos $\Gamma_{xx}^Q \leq 0$. Uma característica importante de Γ_{xx} é a grande diferença entre as duas funções em grande parte do intervalo de temperatura analisado, o que indica um alto grau de correlação clássica.

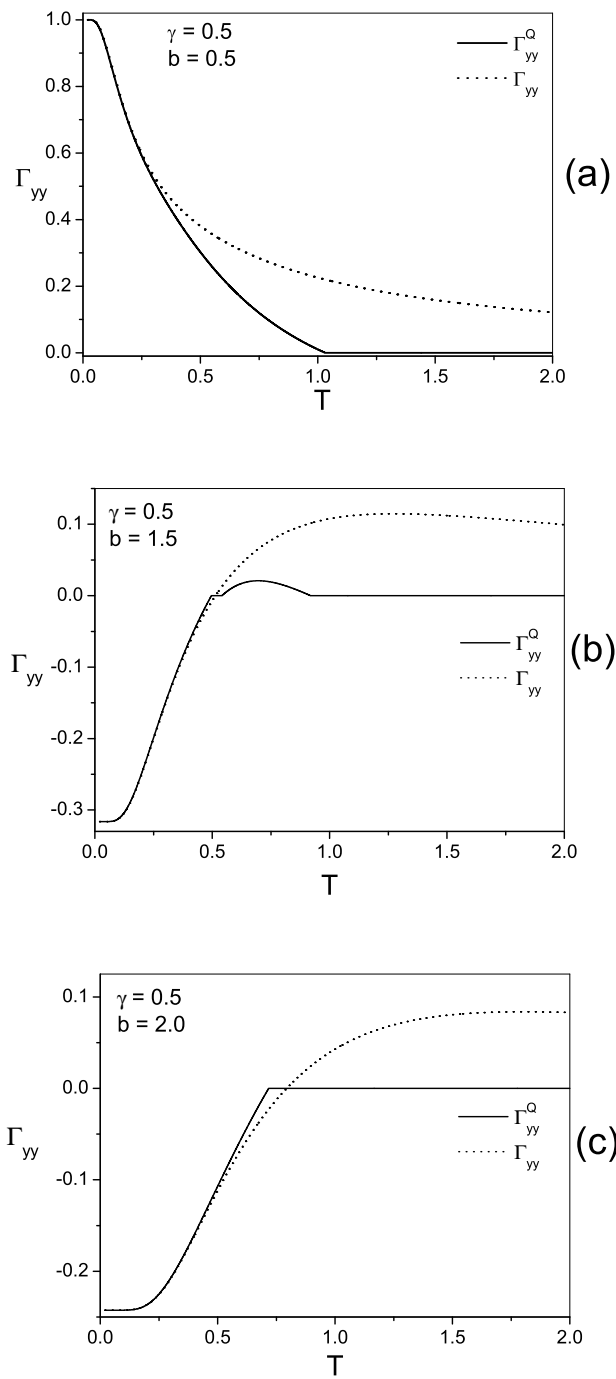


Figura 3.8 Comportamento das funções de correlação de spin como função da temperatura para as regiões (I), (II) e (III) do diagrama $b \times \gamma$ da figura 3.4. As linhas cheias representam a componente puramente quântica Γ_{yy}^Q da função de correlação completa Γ_{yy} apresentada através de linhas pontilhadas.

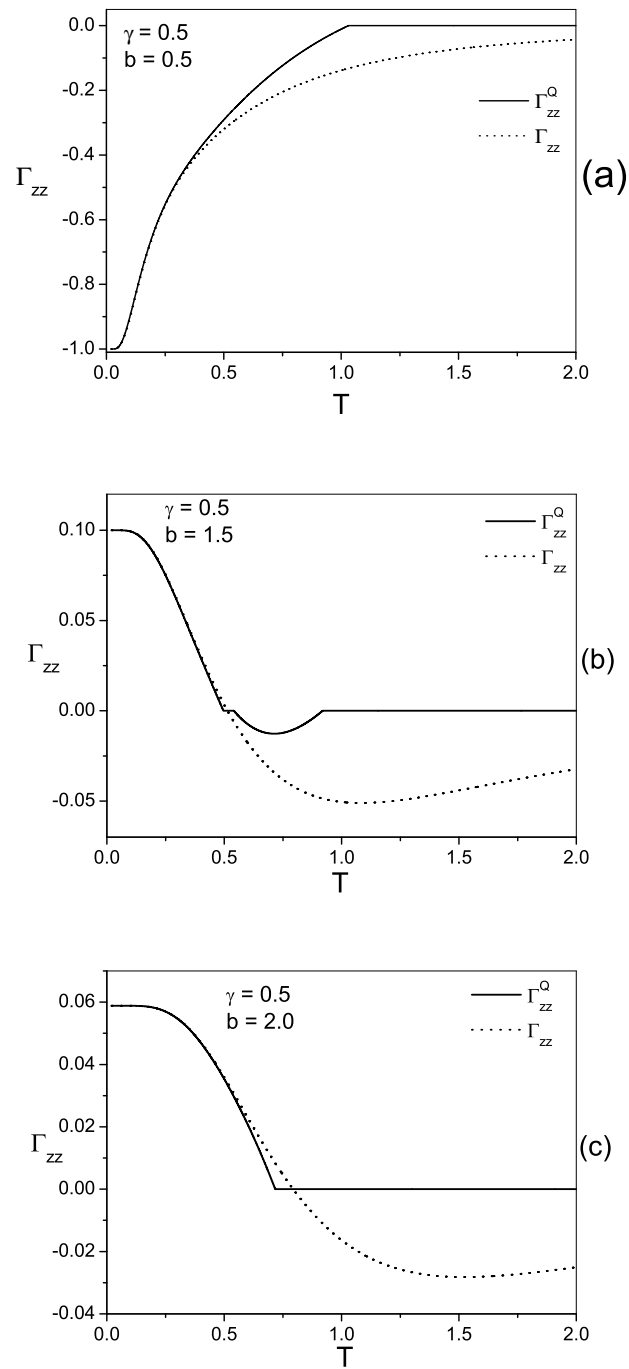


Figura 3.9 Comportamento das funções de correlação de spin como função da temperatura para as regiões (I), (II) e (III) do diagrama $b \times \gamma$ da figura 3.4. As linhas cheias representam a componente puramente quântica Γ_{zz}^Q da função de correlação completa Γ_{zz} apresentada através de linhas pontilhadas.

Vamos encerrar este capítulo com uma interessante conexão com o conceito de *Estados Fatorizados* ou CGS (do inglês Classical-like Ground States) [77, 47], que estabelece que em um ponto crítico o estado fundamental do sistema se comporta classicamente. Considerando o estado térmico do sistema que analisamos, verificamos a existência de um intervalo de separabilidade nas proximidades do ponto crítico $b = b_c$, conforme mostrado na região de baixas temperaturas do diagrama mostrado na figura 3.5. Na figura 3.10a, mostramos o comportamento de nossas correlações de spin quânticas puras ao passar por esse intervalo a uma temperatura baixa $T = 0.02$. Podemos ver que as correlações se anulam no intervalo que praticamente se reduz um ponto $b = b_f$. Na parte 3.10b, mostramos o comportamento deste “campo fatorizante” em função da temperatura, onde vemos que b_F se aproxima gradativamente de b_c à medida que a temperatura é reduzida. Vale ressaltar que, no caso de nossa cadeia finita de apenas dois spins, não temos estado separável no campo crítico b_c . Como vimos, nesse ponto $C = (1 - \gamma)/2$. A fatorização só ocorre de fato em temperatura finita. No caso de cadeias com muitos spins, que é o caso tratado em outros trabalhos, a presença do restante da cadeia atua como um ambiente externo, reduzindo o emaranhamento no ponto crítico e fazendo com que este campo realmente se torne um campo fatorizante.

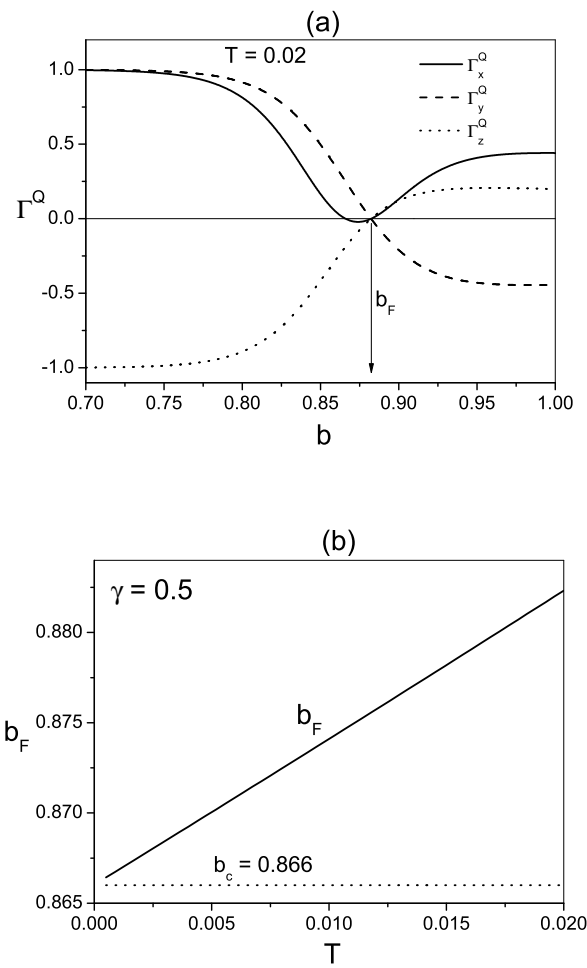


Figura 3.10 Verificação de um campo fatorizante b_F para $\gamma = 0.5$. Na parte (a), gráficos das funções de correlação de spin quânticas $\Gamma_{\alpha\alpha}^Q$ mostram que todas se anulam em um "ponto" comum b_F . Na parte (b), o comportamento de b_F em função da temperatura. A linha pontilhada corresponde ao campo crítico $b_c = \sqrt{1 - \gamma^2} \simeq 0.866$.

CAPÍTULO 4

EFEITOS DE TOPOLOGIA EM SISTEMAS COM TRÊS E QUATRO QUBITS

Relativo ao estudo do emaranhamento em cadeias com poucos qubits, uma questão importante diz respeito às condições em que o emaranhamento pode surgir e qual a natureza de tal emaranhamento. Sabe-se que algum acoplamento entre dois subsistemas é necessário para a existência de emaranhamento bipartite [11, 6]. Tal acoplamento pode ocorrer via interação direta, mas também indiretamente [64] via acoplamento com um terceiro sistema que acopla com os dois subsistemas individualmente. O efeito do acoplamento indireto é o responsável, por exemplo, pela deterioração [32] ou mesmo criação de emaranhamento[33, 35, 36] entre dois subsistemas devido ao contato com um banho térmico, a um campo magnético externo[30] ou mesmo devido ao acoplamento com um sistema de medição[78].

Em cadeias finitas com mais de dois qubits, existe a possibilidade de criar diferentes topologias da rede de acoplamentos entre pares de spins. Cálculos do emaranhamento em cadeias com três [28] e quatro qubits [79, 29] são encontrados na literatura. No entanto, são poucos os trabalhos que comparam diretamente as propriedades do emaranhamento em diferentes topologias [80]. Um dos principais interesses neste tipo de estudo está na otimização do emaranhamento através do controle das topologias [81].

Neste capítulo, analisamos as propriedades do emaranhamento em sistemas com 3 e 4 spins, comparando diferentes topologias. Para três spins, analisamos as cadeias XY na configuração triângulo (cadeia fechada) e na configuração trímero (cadeia aberta), as quais se diferenciam pelo acoplamento entre um par de spins. Para o caso de 4 spins, comparamos a cadeia XY fechada com interação de primeiros vizinhos e o modelo LMG onde todos os spins interagem entre si. Basicamente, os dois modelos de 4 spins se diferenciam pela presença de acoplamento de segundos vizinhos no modelo LMG .

4.1 EMARANHAMENTO EM SISTEMAS DE 3 SPINS

Nesta seção, analisamos as propriedades do emaranhamento em cadeias de 3 spins nas topologias *trímero* e *triângulo*, que se diferenciam basicamente pela presença de uma condição de contorno de fechamento da cadeia no triângulo o que introduz uma interação adicional inexistente na configuração trímero, conforme mostrado na figura 4.1. Com respeito à concorrência entre pares, temos dois tipos diferentes no trímero devido à inexistência de invariância translacional, o que não ocorre no triângulo. Analisamos inicialmente o comportamento da concorrência do estado fundamental em cada topologia separadamente. Em seguida, a fim de analisar mais diretamente o efeito da mudança na topologia, utilizamos um modelo interpolador, onde a interação entre os spins extremos é ajustável através de um parâmetro. O comportamento da concorrência entre pares e do emaranhamento global é então analisado em termos deste parâmetro de interação.

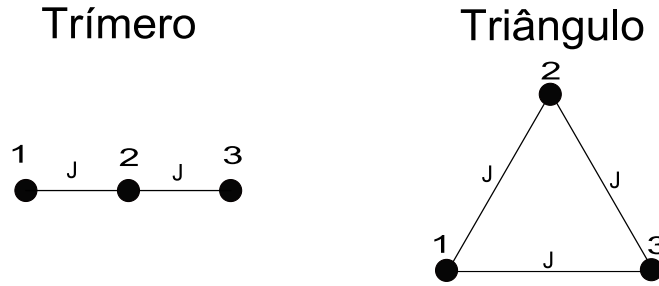


Figura 4.1 Cadeias de 3 spins nas topologias trímero e triângulo. A interação entre os spins 1 e 3 diferencia as duas configurações.

4.1.1 Emaranhamento na configuração triângulo

O hamiltoniano do modelo XY de Heisenberg com três spins na configuração triângulo submetidos a um campo magnético uniforme h ao longo da direção z é dado por:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^3 [(1 + \gamma)\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + (1 - \gamma)\sigma_i^y \sigma_{i+1}^y] - h \sum_{i=1}^3 \sigma_i^z, \quad (4.1)$$

onde utilizamos a condição de contorno $\sigma_{3+1} = \sigma_1$. Definindo $b \equiv h/J$ e utilizando a representação na base canônica, temos uma matriz bloco-diagonal na forma $H = -J[H_1, H_2]$, onde os dois blocos são escritos respectivamente nas bases $B_1 = \{|000\rangle, |101\rangle, |110\rangle, |011\rangle\}$ e $B_2 = \{|111\rangle, |010\rangle, |001\rangle, |100\rangle\}$. Temos a relação $H_2(b) = H_1(-b)$, o que significa que precisamos diagonalizar apenas o bloco H_1 que tem a seguinte representação matricial:

$$H_1 = \begin{pmatrix} 3b & \gamma & \gamma & \gamma \\ \gamma & -b & 1 & 1 \\ \gamma & 1 & -b & 1 \\ \gamma & 1 & 1 & -b \end{pmatrix}, \quad (4.2)$$

Os autovalores de energia associados a este bloco são:

$$E_1 = -J \left[1 + b + \sqrt{(2b-1)^2 + 3\gamma^2} \right], \quad (4.3)$$

$$E_2 = -J \left[1 + b - \sqrt{(2b-1)^2 + 3\gamma^2} \right], \quad (4.4)$$

$$E_3 = J(1+b), \quad (4.5)$$

$$E_4 = J(1+b), \quad (4.6)$$

com os respectivos auto-estados:

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{f_1^2 + 3}} [f_1|000\rangle + |110\rangle + |101\rangle + |011\rangle], \quad (4.7)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{f_2^2 + 3}} [f_2|000\rangle + |110\rangle + |101\rangle + |011\rangle], \quad (4.8)$$

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|101\rangle - |011\rangle], \quad (4.9)$$

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [|101\rangle - 2|110\rangle + |011\rangle], \quad (4.10)$$

onde:

$$f_1(b, \gamma) = \frac{2b-1 + \sqrt{(2b-1)^2 + 3\gamma^2}}{\gamma}$$

e

$$f_2(b, \gamma) = \frac{2b-1 - \sqrt{(2b-1)^2 + 3\gamma^2}}{\gamma}.$$

Os autovalores E_{5-8} e autovetores $|5-8\rangle$ do segundo bloco podem ser obtidos a partir dos resultados para H_1 fazendo $b \rightarrow -b$ levando a novas funções $\tilde{f}_1(b, \gamma) = f_1(-b, \gamma)$ e $\tilde{f}_2(b, \gamma) = f_2(-b, \gamma)$. A transformação $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$ leva aos novos autovetores.

Com esse resultado, podemos determinar o estado fundamental $|\Psi_G\rangle$ e o emaranhamento. Existem dois possíveis auto-estados candidatos a estado fundamental, um para cada bloco do hamiltoniano. Temos, portanto, uma degenerescência em $b = 0$ e uma outra degenerescência envolvendo os dois mesmos estados em $|b_c| = \sqrt{1 - \gamma^2}$.

Neste ponto, é importante analisar o caso $\gamma = 0$ devido às possíveis singularidades nas funções f_1 e f_2 , já que os numeradores também podem se anular. Se $b > b_c = 1$, temos $f_1 \rightarrow \infty$ levando a $|\Psi_G\rangle = |000\rangle$ e $\tilde{f}_1 \rightarrow 0$ levando a $|E_5\rangle = (1/\sqrt{3}) [|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle]$ que é o estado fundamental quando $b < b_c$. Este é o famoso estado $|W\rangle$ que apresenta máximo emaranhamento tripartite e uma concorrência entre pares $C = 2/3$. Apesar das divergências nas funções que definem o estado fundamental, a expressão final para as concorrências também são válidas para o caso $\gamma = 0$.

A matriz reduzida de dois spins $\rho_{12} = \rho_{13} = \rho_{23}$ para γ arbitrário é dada por:

$$\rho_{12} = \frac{1}{f_1^2 + 3} \begin{pmatrix} f_1^2 & 0 & 0 & f_1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ f_1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \text{se } b > b_c \quad (4.11)$$

e

$$\rho_{12} = \frac{1}{\tilde{f}_1^2 + 3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \tilde{f}_1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \tilde{f}_1 & 0 & 0 & \tilde{f}_1^2 \end{pmatrix}, \quad \text{se } b < b_c \quad (4.12)$$

Como a matriz densidade reduzida não corresponde a um estado puro, temos que usar a fórmula de Wootters para estados mistos[14] a fim de analisarmos o emaranhamento bipartite do estado fundamental. As expressões para a concorrência para $b \neq 0$ e $b \neq \sqrt{1 - \gamma^2}$ são:

$$C(1) = \max \left[0, \frac{2(1 - |f_1|)}{f_1^2 + 3} \right], \quad \text{se } b > b_c \quad (4.13)$$

$$C(1) = \max \left[0, \frac{2(1 - |\tilde{f}_1|)}{\tilde{f}_1^2 + 3} \right], \quad \text{se } b < b_c \quad (4.14)$$

Se $b = 0$ ou $|b| = \sqrt{1 - \gamma^2}$, temos uma degenerescência no estado fundamental, cuja matriz densidade reduzida, como já vimos, corresponde a uma mistura estatística balanceada:

$$\rho = \frac{1}{2} \frac{1}{f_1^2 + 3} \begin{pmatrix} f_1^2 & 0 & 0 & f_1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ f_1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \frac{1}{\tilde{f}_1^2 + 3} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \tilde{f}_1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \tilde{f}_1 & 0 & 0 & \tilde{f}_1^2 \end{pmatrix}. \quad (4.15)$$

Antes de apresentarmos gráficos ilustrando o comportamento de tais funções, calculamos a concorrência para o trímero a fim de apresentarmos gráficos que possibilitem uma comparação direta.

4.1.2 Emaranhamento na configuração trímero

Na configuração trímero, como vimos na figura 4.1, os spins 1 e 3 não interagem diretamente, o que significa que o emaranhamento entre estes spins nesta topologia tem origem unicamente no acoplamento indireto mediado pelo spin central 2 ou pelo campo magnético b . A inexistência desta interação resulta na quebra da invariância translacional e, com isso, passamos a ter dois tipos de concorrências: uma entre os dois spins extremos que denominamos de $C(2)$ e a concorrência entre spins vizinhos $C(1)$. O hamiltoniano para este modelo também tem a representação matricial na forma bloco-diagonal. A representação de H_1 na mesma base usada para o triângulo é:

$$H_1 = \begin{pmatrix} 3b & 0 & \gamma & \gamma \\ 0 & -b & 1 & 1 \\ \gamma & 1 & -b & 0 \\ \gamma & 1 & 0 & -b \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

Os autovalores de energia associados a este bloco são:

$$E_1 = -b \quad (4.17)$$

$$E_2 = \frac{2}{3}\text{Re}\mathcal{Z} + \frac{b}{3} \quad (4.18)$$

$$E_3 = -\frac{1}{3}\text{Re}\mathcal{Z} - \frac{1}{\sqrt{3}}\text{Im}\mathcal{Z} + \frac{b}{3} \quad (4.19)$$

$$E_4 = -\frac{1}{3}\text{Re}\mathcal{Z} + \frac{1}{\sqrt{3}}\text{Im}\mathcal{Z} + \frac{b}{3}, \quad (4.20)$$

onde $\mathcal{Z} = \left(\eta + 6i\sqrt{\Delta}\right)^{1/3}$ com $\eta = 36b\gamma^2 - 72b + 64b^3$ e $\Delta = 6\gamma^6 + 18\gamma^4 + 12\gamma^4b^2 + 18\gamma^2 + 240\gamma^2b^2 + 6 - 96b^2 + 384b^4$.

Os autovalores neste caso são consideravelmente mais complexos que os do caso triângulo, o que se deve à quebra da invariância translacional. Os autovetores associados a estes autovalores são:

$$|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [-|110\rangle + |011\rangle] \quad (4.21)$$

$$|n\rangle = C_n [\alpha_n |000\rangle + \beta_n |101\rangle + |110\rangle + |011\rangle] \quad n = 2, 3, 4, \quad (4.22)$$

onde $C_n = (\alpha_n^2 + \beta_n^2 + 2)^{-1/2}$, sendo $\alpha_n = -2\gamma/(3b - E_n)$ e $\beta_n = 2/(b + E_n)$

Temos dois tipos de matriz densidade reduzida, $\rho_{12} = \rho_{23}$ entre primeiros vizinhos e ρ_{13} entre segundos vizinhos que, no caso, são os spins extremos da cadeia. O estado fundamental pode ser $|\Psi_G\rangle = |2\rangle$ para campos maiores que o campo crítico $b'_c = \sqrt{(1 - \gamma^2)}/2$ e $|\Psi_G\rangle = |6\rangle$ para $b < b_c$. Sobre os pontos críticos $|b| = b'_c$ e $b = 0$, o estado fundamental é descrito por uma matriz densidade correspondente a uma mistura estatística balanceada $\rho = (1/2) |2\rangle\langle 2| + (1/2) |6\rangle\langle 6|$. As matrizes densidades são, portanto:

$$\begin{aligned} \rho_{12} &= \frac{1}{\alpha_2^2 + \beta_2^2 + 2} \begin{pmatrix} \alpha_2^2 & 0 & 0 & \alpha_2 \\ 0 & 1 & \beta_2 & 0 \\ 0 & \beta_2 & \beta_2^2 & 0 \\ \alpha_2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ e} \\ \rho_{13} &= \frac{1}{\alpha_2^2 + \beta_2^2 + 2} \begin{pmatrix} \alpha_2^2 & 0 & 0 & \alpha_2\beta_2 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \alpha_2\beta_2 & 0 & 0 & \beta_2^2 \end{pmatrix} \quad \text{se } b > b_c. \end{aligned} \quad (4.23)$$

No caso de $b < b_c$, as matrizes densidades reduzidas são:

$$\begin{aligned}
\rho_{12} &= \frac{1}{\tilde{\alpha}_2^2 + \tilde{\beta}_2^2 + 2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \tilde{\alpha}_2 \\ 0 & \tilde{\beta}_2^2 & \tilde{\beta}_2 & 0 \\ 0 & \tilde{\beta}_2 & 1 & 0 \\ \tilde{\alpha}_2 & 0 & 0 & \tilde{\alpha}_2^2 \end{pmatrix} \text{ e} \\
\rho_{13} &= \frac{1}{\tilde{\alpha}_2^2 + \tilde{\beta}_2^2 + 2} \begin{pmatrix} \tilde{\beta}_2^2 & 0 & 0 & \tilde{\alpha}_2 \tilde{\beta}_2 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \tilde{\alpha}_2 \tilde{\beta}_2 & 0 & 0 & \tilde{\alpha}_2^2 \end{pmatrix} \text{ se } b < b_c, \quad (4.24)
\end{aligned}$$

Neste caso em que $b < b_c$, as concorrências são obtidas fazendo simplesmente $b \rightarrow -b$ nas equações para $C(1)$ e $C(2)$ obtidas para $b > b_c$. Para campos negativos, os papéis são invertidos e as expressões acima servem para $-b_c < b < 0$ e para $b < -b_c$, ou seja há uma troca de sinal de b nas expressões.

Para campos magnéticos correspondentes a campos críticos $b = 0$ ou $b = b_c$, as matrizes reduzidas são dadas por misturas estatísticas balanceadas das matrizes reduzidas referentes aos dois estados degenerados. Temos portanto:

$$\rho_{12} = \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha_2^2 + \beta_2^2 + 2} \begin{pmatrix} \alpha_2^2 & 0 & 0 & \alpha_2 \\ 0 & 1 & \beta_2 & 0 \\ 0 & \beta_2 & \beta_2^2 & 0 \\ \alpha_2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \frac{1}{\tilde{\alpha}_2^2 + \tilde{\beta}_2^2 + 2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \tilde{\alpha}_2 \\ 0 & \tilde{\beta}_2^2 & \tilde{\beta}_2 & 0 \\ 0 & \tilde{\beta}_2 & 1 & 0 \\ \tilde{\alpha}_2 & 0 & 0 & \tilde{\alpha}_2^2 \end{pmatrix} \quad (4.25)$$

e

$$\rho_{13} = \frac{1}{2} \frac{1}{\alpha_2^2 + \beta_2^2 + 2} \begin{pmatrix} \alpha_2^2 & 0 & 0 & \alpha_2 \beta_2 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \alpha_2 \beta_2 & 0 & 0 & \beta_2^2 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \frac{1}{\tilde{\alpha}_2^2 + \tilde{\beta}_2^2 + 2} \begin{pmatrix} \tilde{\beta}_2^2 & 0 & 0 & \tilde{\alpha}_2 \tilde{\beta}_2 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ \tilde{\alpha}_2 \tilde{\beta}_2 & 0 & 0 & \tilde{\alpha}_2^2 \end{pmatrix}. \quad (4.26)$$

O comportamento das concorrências entre pares $C(1)$ e $C(2)$ em função do campo magnético b é resumido na figura 4.2, onde apresentamos gráficos comparativos das concorrências nas configurações trímero e triângulo para três diferentes parâmetros de anisotropia. Nas partes (a) e (b) apresentamos as concorrências para o caso $\gamma = 0$ que, como foi visto anteriormente, só é emaranhado para campos $|b| < |b_c|$. Como o campo crítico b_c é maior para a configuração triângulo, o emaranhamento pode ser sustentado em campos

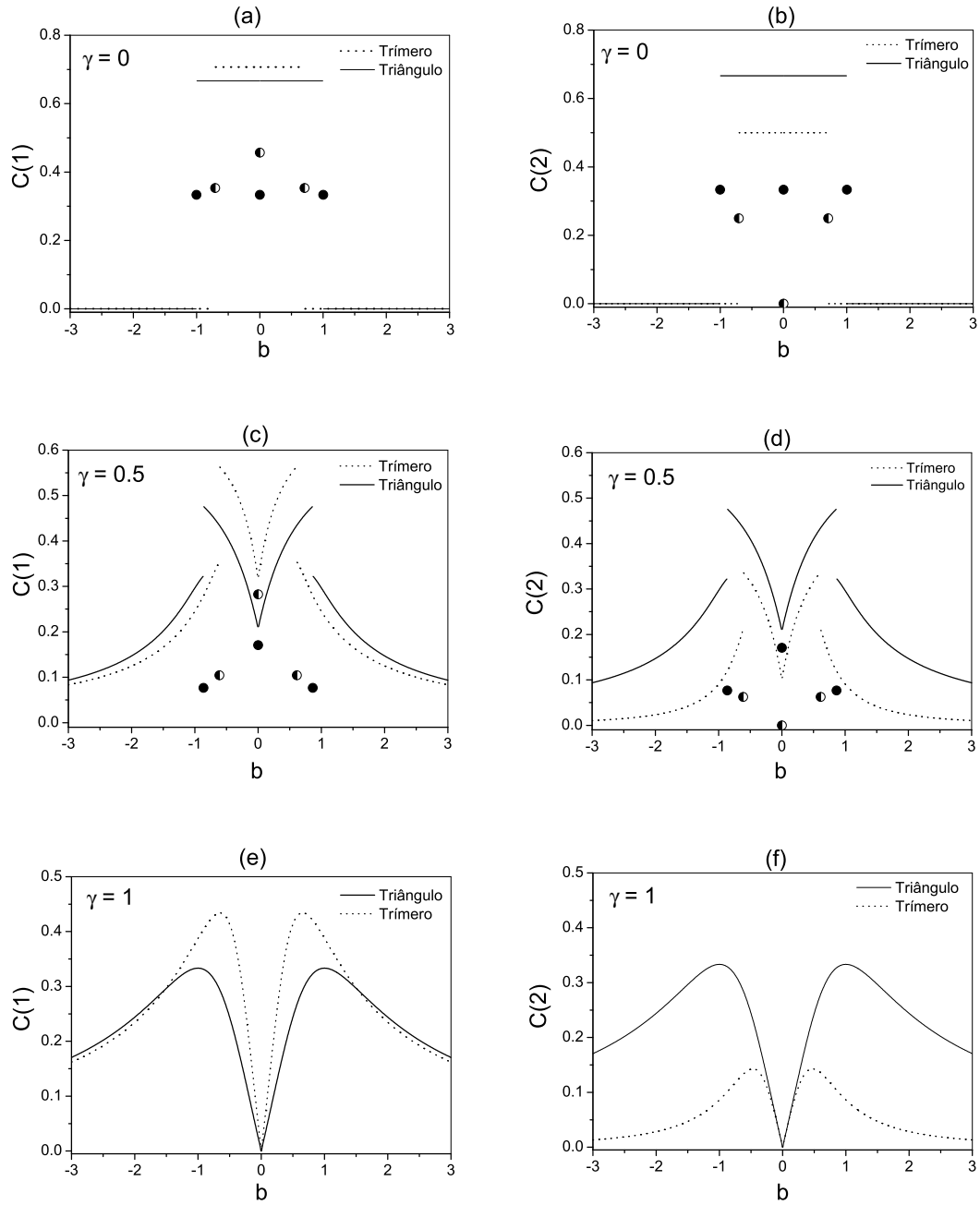


Figura 4.2 Concorrências entre spins vizinhos $C(1)$ e entre segundos vizinhos $C(2)$ em função do campo magnético b . As linhas pontilhadas referem-se à configuração trímero e as linhas cheias à configuração triângulo. Os círculos cheios e semi-cheios são pontos de discontinuidade nas concorrências para o triângulo e o trímero respectivamente.

um pouco maiores. A concorrência entre vizinhos $C(1)$ é maior no trímero do que no triângulo na região $|b| \leq 0.707$, enquanto que a concorrência entre os spins extremos $C(2)$ é, como esperado, maior para o triângulo onde estes dois spins interagem diretamente. Os pontos de degenerescência do estado fundamental, representados por círculos cheios e semi-cheios, além de corresponderem a descontinuidades na concorrência, também parecem delimitar diferentes regiões em relação ao efeito da interação adicional. Para $\gamma = 0.5$, conforme mostrado em (c) e (d), temos um comportamento diferente das concorrências em relação ao campo magnético. Na região de campos mais fracos $|b| < b_c$, ambas as concorrências crescem monotonicamente com o módulo do campo magnético, mas esse comportamento é alterado para $|b| > |b_c|$ onde temos um decaimento com $|b|$ tendendo para zero assintoticamente, o que é coerente com a tendência natural do campo de alinhar os spins levando o sistema a um estado separável. Também para campos menores que o campo crítico do trímero $b_c = \sqrt{(1 - \gamma^2)/2} \approx 0.612$, a concorrência entre vizinhos $C(1)$ do trímero domina sobre a do triângulo, mas isto também acontece no ponto crítico do triângulo onde, em virtude da queda brusca na concorrência devido à degenerescência do estado fundamental, a concorrência entre pares de spins no triângulo se torna menor do que ambos os tipos de concorrência do trímero, um resultado notável. No caso $\gamma = 1$, cujos resultados estão mostrados nas partes (e) e (f), os campos críticos coincidem em $b = 0$ e as concorrências $C(1)$ e $C(2)$ se anulam nesse ponto. Também não existem descontinuidades em outros valores do campo magnético. Podemos notar que o caso $\gamma = 1$ contraria aquela tendência, observada nos valores anteriores de γ , onde os campos críticos delimitam a região onde $C(1)$ do trímero domina sobre o triângulo. No caso $\gamma = 1$, temos um amplo intervalo de campos magnéticos onde $C(1)$ do trímero domina sem que $|b| < \sqrt{(1 - \gamma^2)/2}$.

A caracterização precisa dos tipos de padrões de emaranhamento que existem em relação à dependência com a interação entre os spins extremos será realizada na próxima subseção, onde examinaremos um modelo interpolador com interação entre spins extremos controlada por um parâmetro simples.

4.1.3 Modelo interpolador com acoplamento de segundos vizinhos ajustável

A fim de avaliarmos mais precisamente o efeito do acoplamento entre os spins extremos da cadeia sobre as concorrências, estudamos um modelo interpolador com um acoplamento entre os dois spins extremos ajustável $J_{13} = mJ$, conforme mostrado na figura 4.3 onde m é um parâmetro de controle do acoplamento e que varia de $m = 0$ (trímero) até $m = 1$ (triângulo). O hamiltoniano deste modelo é dado por:

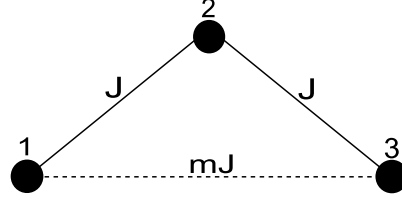


Figura 4.3 Configuração do modelo interpolador com interação entre os spins extremos 1 e 3 controlada pelo parâmetro m que varia de $m = 0$ (trímero) até $m = 1$ (triângulo)

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^2 [(1+\gamma)\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + (1-\gamma)\sigma_i^y \sigma_{i+1}^y] - h \sum_{i=1}^3 \sigma_i^z \\
 & - m \frac{J}{2} [(1+\gamma)\sigma_1^x \sigma_3^x + (1-\gamma)\sigma_1^y \sigma_3^y],
 \end{aligned} \tag{4.27}$$

cuja representação matricial é:

$$H_1^m(b) = \begin{pmatrix} 3b & m\gamma & \gamma & \gamma \\ m\gamma & -b & 1 & 1 \\ \gamma & 1 & -b & m \\ \gamma & 1 & m & -b \end{pmatrix}. \tag{4.28}$$

O caso isotrópico $\gamma = 0$ é o único que possibilita a obtenção de soluções analíticas simples para esse problema. Os demais casos levam a expressões bastante complicadas, dificultando as manipulações algébricas posteriores. Vamos apresentar os resultados analíticos para o caso isotrópico apenas e, em seguida, apresentamos resultados obtidos numericamente para o caso de γ arbitrário.

4.1.3.1 Caso isotrópico $\gamma = 0$. Considerando apenas $b \geq 0$ (A função concorrência é simétrica), temos dois possíveis estados fundamentais, um de H_1 e o outro de H_2 . As energias destes dois estados são $E_1 = -3b$ e $E_2 = -b - m/2 - \sqrt{m^2 + 8}$. Temos, portanto, um ponto crítico em $b = b_c^m (\gamma = 0) = (\sqrt{m^2 + 8} + m)/4$. O estado fundamental é dado, então por:

$$|\Psi_G\rangle = |000\rangle \quad \text{se } b > b_c^m \tag{4.29}$$

$$|\Psi_G\rangle = \frac{1}{\alpha_m^2 + 2} [\alpha_m |101\rangle + |110\rangle + |011\rangle] \quad \text{se } b < b_c^m, \tag{4.30}$$

onde

$$\alpha_m = \frac{1}{2} \left(\sqrt{m^2 + 8} - m \right).$$

Para $b > b_c^m$, o estado fundamental é sempre o estado completamente separável $|000\rangle$ e, portanto, as concorrências entre pares são nulas independentemente do campo e do parâmetro de interação m . Já para $b < b_c^{m=0} \approx 0.7071$, temos sempre o estado fundamental correspondente à energia E_2 , para o qual as concorrências são não nulas, dependentes de m mas independentes do campo magnético. Obtendo as matrizes reduzidas e utilizando a fórmula de Wootters, obtemos os seguintes resultados:

$$\begin{aligned} C(1) &= \frac{2\alpha_m}{\alpha_m^2 + 2} = \frac{2}{\sqrt{m^2 + 8}} \\ C(2) &= \frac{2}{\alpha_m^2 + 2} = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{m}{\sqrt{m^2 + 8}} \right] \quad \text{se } b < b_c. \end{aligned} \quad (4.31)$$

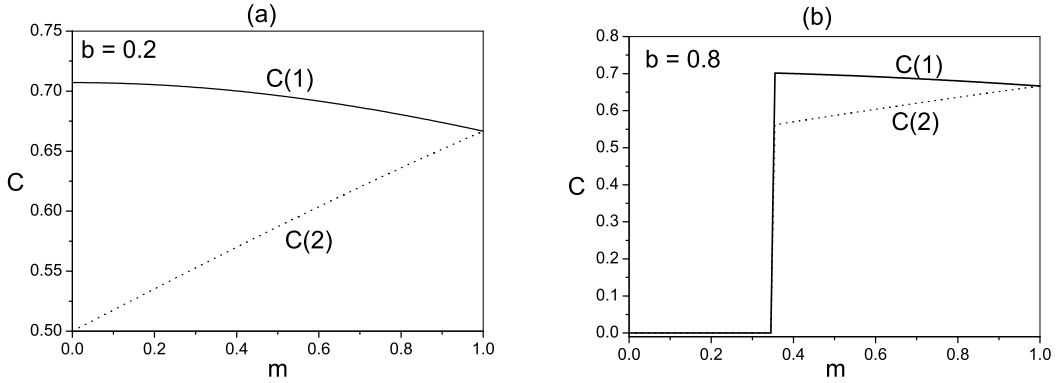


Figura 4.4 Comportamento das concorrências $C(1)$ e $C(2)$ em função do parâmetro de interação m para o caso isotrópico.

Na figura 4.4, apresentamos gráficos para as concorrências $C(1)$ e $C(2)$ em função do parâmetro m e para dois campos diferentes. Na parte (a), temos o resultado para $b = 0.2$ que está abaixo do campo crítico do trímero. Assim, as concorrências em todo o intervalo $m \in [0, 1]$ são descritas pelas equações 4.31. A concorrência $C(2)$ cresce praticamente de forma linear com m , enquanto que $C(1)$ decresce até cruzar com $C(2)$ no ponto $m = 1$ que é a configuração triângulo onde não existe distinção entre os pares de spins. O campo $b = 0.8$ da parte (b) da figura está entre os campos críticos dos dois modelos. Assim, temos uma descontinuidade nas concorrências ao passar por um valor de m para o qual $b_c^m = 0.8$. Abaixo deste ponto, não temos emaranhamento. Para valores de m maiores

que o valor na descontinuidade, recupera-se o comportamento das equações 4.31.

4.1.3.2 Caso anisotrópico $\gamma \in (0, 1]$. Para o caso de parâmetro de anisotropia arbitrário, todos os cálculos foram realizados numericamente. No entanto, algumas características gerais dos modelos anteriores também são encontradas aqui. Temos, por exemplo, um ponto crítico $b_c^m(\gamma)$ onde o estado fundamental é degenerado. Para $b > b_c^m()$ o estado fundamental é o estado de menor energia de H_1 , do contrário fazemos $b \rightarrow -b$ e $|0\rangle \leftrightarrow |1\rangle$. Obtendo este campo numericamente, verificamos que temos um bom ajuste pela semi-elipse $b_c^m(\gamma) = b_c^m(0) \sqrt{1 - \gamma^2}$. Assim, as concorrências tem comportamentos diferentes conforme o campo seja maior ou menor que este ponto crítico. Na figura 4.5, apresentamos resultados destas concorrências em função do parâmetro m . Conforme mostrado na parte (a) da figura, temos basicamente três diferentes padrões de comportamento de $C \times m$, os quais surgem nas regiões do diagrama $b \times \gamma$ denominadas como $(I)_{A,B}$, (II) e (III) . As figuras 4.5(b-d) apresentam amostras de gráficos de $C(1)$ e $C(2)$ em função de m para cada uma destas regiões. À direita, os gráficos de $C(2)$ mostram que a função é sempre monotônica crescente de m enquanto que $C(1)$ apresenta este comportamento apenas em todo intervalo $m \in [0, 1]$ apenas na região (II) . Na região (I) , conforme ocorre no caso isotrópico, temos um decaimento de $C(1)$ em função de m . A linha pontilhada referente a $\gamma = 0.95$ na figura 4.5 é uma amostra do comportamento na região $(I)_B$. A região (III) é especial porque, nesta região, a máxima concorrência entre vizinhos não ocorre nos modelos extremos (trímero ou triângulo), mas em um valor intermediário de m que depende do campo magnético aplicado. Note que a anisotropia tem um papel importante na definição destes padrões. Para γ menor que aproximadamente 0.5, temos apenas os dois padrões $(I)_A$ e (II) como ocorre no caso isotrópico, enquanto que para anisotropias maiores surge o novo padrão (III) além do reaparecimento do padrão (I) para $\gamma > 0.7$ aproximadamente.

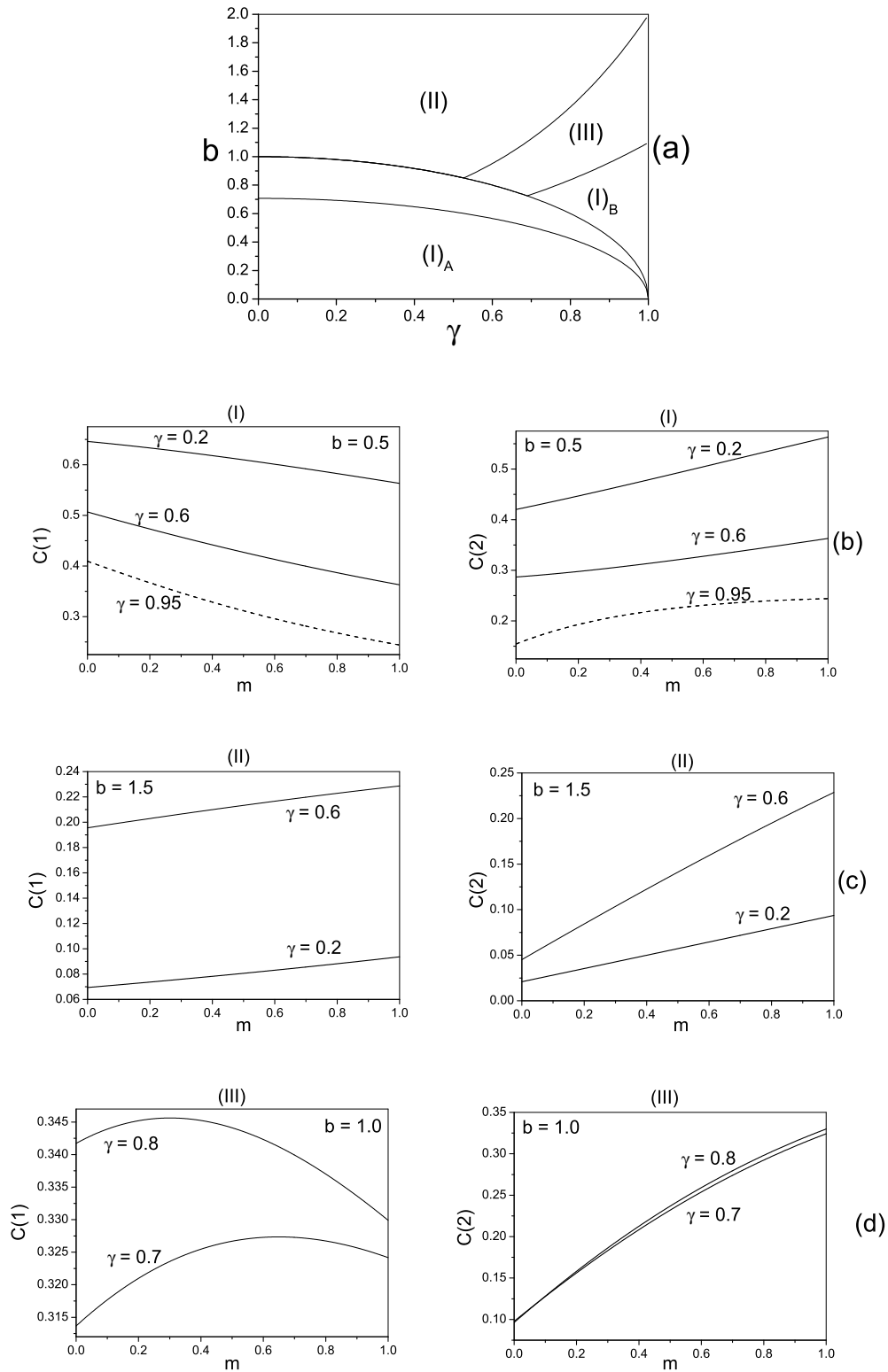


Figura 4.5 Padrões de comportamento de $C \times m$ no espaço dos parâmetros $b \times \gamma$. Em (a), são apresentadas as regiões correspondentes a esses padrões e em (b-d), amostras destes comportamentos.

4.1.3.3 Emaranhamento global e armazenado em pares Para complementar esta análise, é necessário estudar o emaranhamento multipartite presente neste sistema e como ele se comporta em relação à interação entre os spins extremos. Como quantificador, escolhemos o *emaranhamento global*[63] que, no caso de uma cadeia de N qubits, corresponde à pureza média dos estados reduzidos de cada qubit ¹,

$$Q = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 2 [1 - \text{Tr}(\rho_i^2)], \quad (4.32)$$

onde ρ_i é a matriz densidade reduzida do i -ésimo spin em relação aos demais. No caso da nossa cadeia de 3 spins, temos $\rho_1 = \rho_3$. Assim, o emaranhamento global se reduz a:

$$Q = \frac{2}{3} [3 - 2\text{Tr}(\rho_1^2) - \text{Tr}(\rho_2^2)]. \quad (4.33)$$

Na figura 4.6, apresentamos o comportamento do emaranhamento global em função do campo magnético nas configurações trímero e triângulo e para três anisotropias distintas. Note que, nos três casos, sempre temos mais emaranhamento multipartite na configuração triângulo do que no trímero.

Apenas uma parte do emaranhamento global é armazenado nas concorrências entre dois spins, o que significa que apesar da interação entre spins extremos produzir emaranhamento global do sistema, isto não necessariamente resulta em aumento do emaranhamento entre pares de spin, como acontece com a concorrência entre vizinhos $C(1)$. A parte do emaranhamento global que é armazenada entre pares pode ser calculada usando o conceito de *emaranhamento distribuído* ou *monogamia de emaranhamento*[64, 65] que estabelece o emaranhamento entre cada spin e o restante da cadeia como limitador para o emaranhamento entre tal spin e os demais. Assim, o emaranhamento armazenado entre pares Q_p pode ser definido pela média destas somas sobre todos os spins da cadeia. Para o caso da nossa cadeia de 3 spins, podemos definir Q_p como:

$$Q_p \equiv \frac{2}{3} [2C(1)^2 + C(2)^2]. \quad (4.34)$$

O comportamento do emaranhamento global Q e da parte armazenada em concorrências entre pares é apresentada na figura 4.7, onde vemos que o emaranhamento global cresce monotonicamente com a interação adicional. Já a parte de emaranhamento

¹Este quantificador é válido somente para estados puros, ou seja, não é válido nos pontos críticos onde o estado é degenerado e, portanto misto.

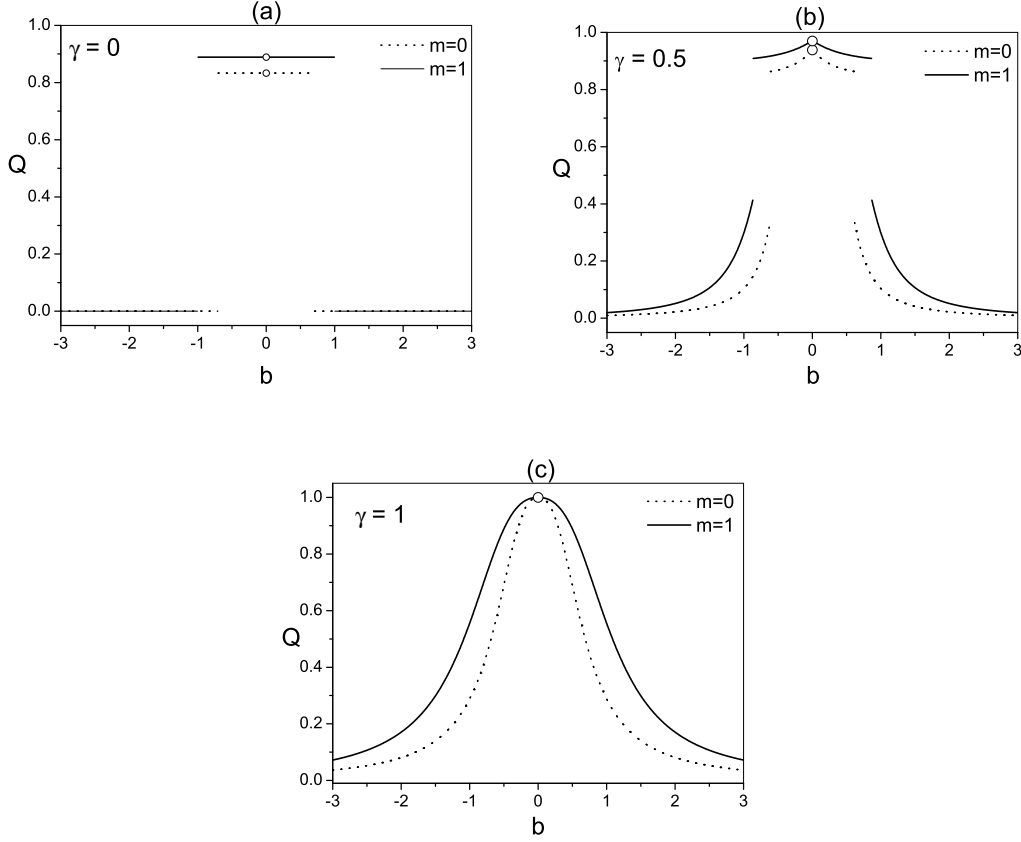


Figura 4.6 Comportamento do emaranhamento global em função do campo magnético b . As linhas pontilhadas referem-se ao trîmero e as linhas cheias à configuração triângulo. Nos pontos $b = 0$ e $b = b_c$, a função Q não é definida. Isto é caracterizado no gráfico pela descontinuidade de Q em b_c e pela círculo vazio em $b = 0$.

que é armazenada em concorrências entre dois spins apresenta diferentes padrões de comportamento dependendo da região do diagrama $b \times \gamma$. A região (I) é caracterizada por um decaimento do emaranhamento armazenado em pares Q_p , o que indica que a interação adicional transfere emaranhamento armazenado em pares para a parte não-armazenada, a qual é denominada de emaranhamento genuinamente multipartite. As regiões (II) e (III) correspondem, neste caso, correspondem ao mesmo padrão. Tanto o emaranhamento global Q quanto a componente Q_p crescem monotonicamente, mas o crescimento de Q_p ocorre numa taxa menor que o de Q , o que significa que a interação adicional produz principalmente emaranhamento genuinamente multipartite. Resumindo, a adição de uma interação adicional entre os spins extremos, apesar de ocorrer em um par específico de spins da cadeia, afeta mais justamente a parte do emaranhamento multipartite indisponível para o emaranhamento armazenado em pares.

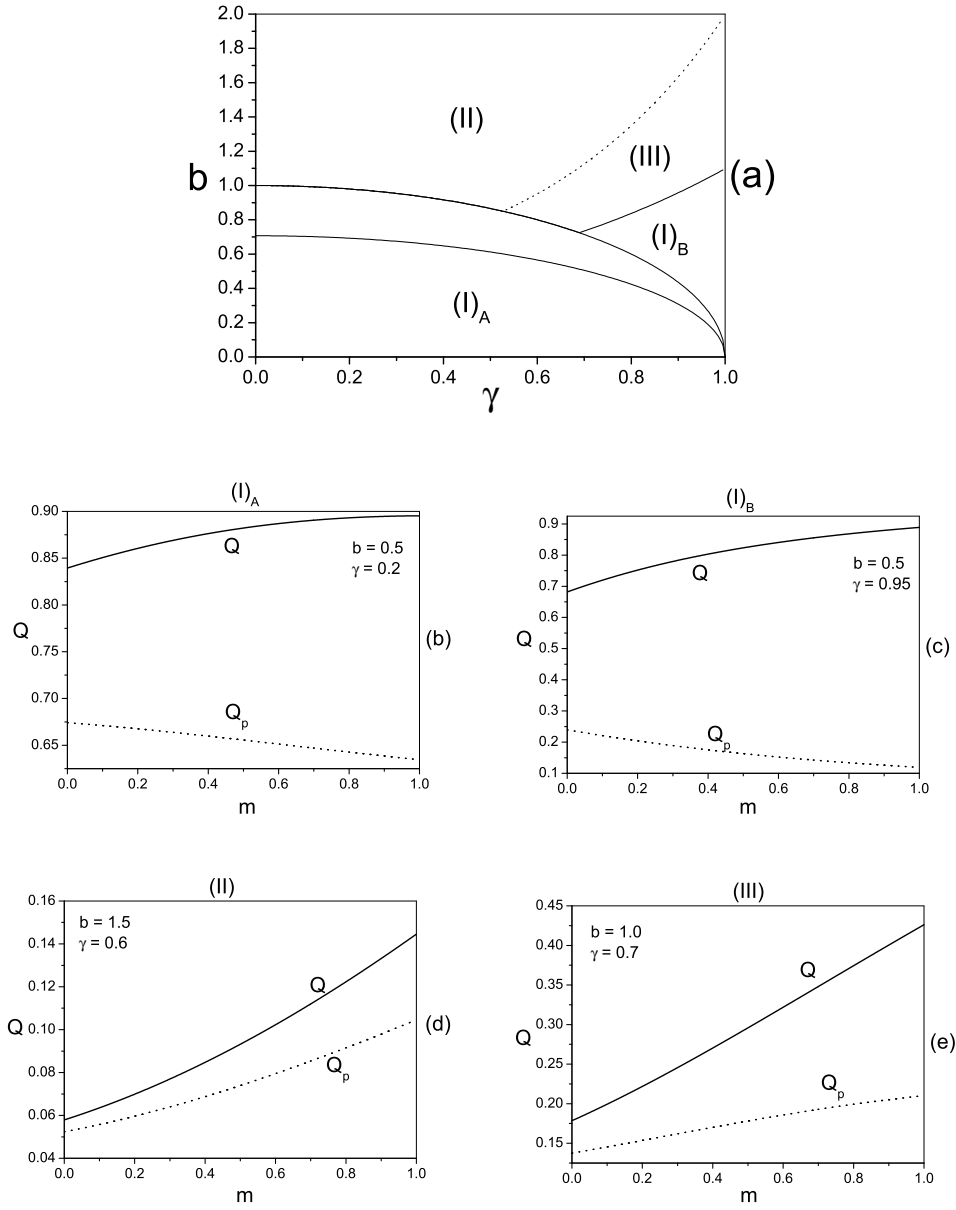


Figura 4.7 Padrões de comportamento do emaranhamento global Q e da parte armazenada em pares Q_p em função do parâmetro de interação m . A parte (a) da figura mostra no diagrama $b \times \gamma$ regiões referentes a diferentes padrões. A linha pontilhada na transição entre (II) e (III) significa que não ocorre uma mudança de comportamento de Q, Q_p no cruzamento desta linha, o que ocorre com $C(1)$ como visto na figura 4.5. As figuras (b-d) são amostras do comportamento de Q, Q_p em função de m em cada região.

4.2 EMARANHAMENTO EM SISTEMAS DE 4 SPINS

Nesta seção, apresentamos resultados para o emaranhamento em cadeias com 4 spins em duas configurações distintas: A cadeia XY onde temos apenas interação de primeiros vizinhos e o sistema LMG [48], que apresenta interação do tipo XY mas com todos os spins interagindo entre si com a mesma constante de acoplamento. Assim, tais configurações se distinguem pela presença de dois novos acoplamentos entre pares de segundos vizinhos, conforme figura 4.8. Neste caso, temos invariância translacional em ambos os modelos mas, ainda assim, temos dois tipos de concorrência entre pares no modelo XY enquanto no modelo LMG não há distinção entre pares de spins. Como feito para o caso de cadeias com 3 spins analisamos as propriedades do emaranhamento do estado fundamental em cada modelo separadamente e em seguida, utilizamos um modelo interpolador onde a interação entre segundos vizinhos é controlável por um parâmetro de interação, o qual utilizamos para estudar mais profundamente o comportamento do emaranhamento na transição de XY para LMG .

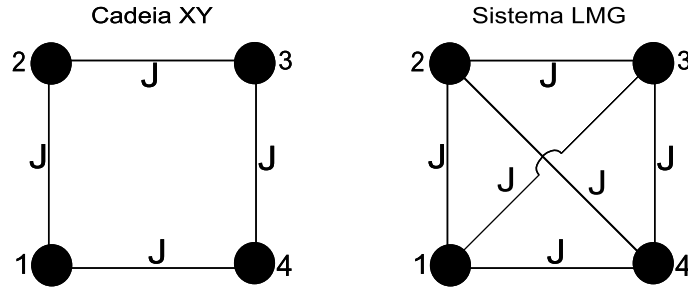


Figura 4.8 Configuração dos sistemas de 4 spins analisadas neste trabalho. À esquerda, a configuração XY onde apenas spins vizinhos interagem. À direita, o sistema LMG onde todos os spins interagem entre si com a mesma constante de acoplamento.

4.2.1 Cadeia XY com interação de primeiros vizinhos

O hamiltoniano do modelo XY de Heisenberg com interação de primeiros vizinhos submetidos a um campo magnético uniforme h ao longo da direção z é dado por:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^4 [(1 + \gamma)\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + (1 - \gamma)\sigma_i^y \sigma_{i+1}^y] - h \sum_{i=1}^4 \sigma_i^z, \quad (4.35)$$

com a condição de contorno $\sigma_{4+1} = \sigma_1$. Definindo $b \equiv h/J$ e utilizando a representação na base canônica, obtemos novamente uma matriz bloco-diagonal na forma $H = -J[H_1, H_2]$, onde os dois blocos são escritos respectivamente nas bases $B_1 =$

$[|0000\rangle, |0011\rangle, |0101\rangle, |0110\rangle, |1001\rangle, |1010\rangle, |1100\rangle, |1111\rangle]$ e $B_2 = [|0001\rangle, |0010\rangle, |0100\rangle, |0111\rangle, |1000\rangle, |1011\rangle, |1101\rangle, |1110\rangle]$ respectivamente. Neste caso não temos a relação $H_2(b) = H_1(-b)$ e, portanto, é necessário diagonalizarmos os dois blocos separadamente. As representações matriciais de H_1 e H_2 são dadas por:

$$H_1 = \begin{pmatrix} 4b & \gamma & 0 & \gamma & \gamma & 0 & \gamma & 0 \\ \gamma & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & \gamma \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \gamma & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & \gamma \\ \gamma & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & \gamma \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ \gamma & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & \gamma \\ 0 & \gamma & 0 & \gamma & \gamma & 0 & \gamma & -4b \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

$$H_2 = \begin{pmatrix} 2b & 1 & 0 & \gamma & 1 & 0 & \gamma & 0 \\ 1 & 2b & 1 & 0 & 0 & \gamma & 0 & \gamma \\ 0 & 1 & 2b & \gamma & 1 & 0 & \gamma & 0 \\ \gamma & 0 & \gamma & -2b & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 2b & \gamma & 0 & \gamma \\ 0 & \gamma & 0 & 1 & \gamma & -2b & 1 & 0 \\ \gamma & 0 & \gamma & 0 & 0 & 1 & -2b & 1 \\ 0 & \gamma & 0 & 1 & \gamma & 0 & 1 & -2b \end{pmatrix}. \quad (4.37)$$

Os autovalores de H_1 e H_2 são dados por:

$$E_1 = E_2 = E_3 = E_4 = 0, \quad (4.38)$$

$$E_{5,6} = \pm 2\sqrt{1 + \gamma^2 + 2b^2 - \sqrt{(1 + \gamma^2 + 2b^2)^2 - 8b^2}}, \quad (4.39)$$

$$E_{7,8} = \pm 2\sqrt{1 + \gamma^2 + 2b^2 + \sqrt{(1 + \gamma^2 + 2b^2)^2 - 8b^2}}, \quad (4.40)$$

$$(4.41)$$

$$E_9 = E_{10} = -2b, \quad (4.42)$$

$$E_{11} = E_{12} = +2b, \quad (4.43)$$

$$E_{13,14} = \pm 2 \left(-1 + \sqrt{b^2 + \gamma^2} \right), \quad (4.44)$$

$$E_{15,16} = \pm 2 \left(1 + \sqrt{b^2 + \gamma^2} \right). \quad (4.45)$$

$$(4.46)$$

Os auto-estados $|n\rangle$ referentes ao bloco H_1 são:

$$|1\rangle = \frac{1}{2} [|0011\rangle + i|0110\rangle - |1100\rangle - i|1001\rangle] \quad (4.47)$$

$$|2\rangle = \frac{1}{2} [|0011\rangle - i|0110\rangle - |1100\rangle + i|1001\rangle] \quad (4.48)$$

$$|3\rangle = \frac{1}{2} [|0011\rangle - |0110\rangle + |1100\rangle - |1001\rangle] \quad (4.49)$$

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0101\rangle - |1010\rangle], \quad (4.50)$$

$$|n\rangle = A_n [a_n |0000\rangle + b_n (|0011\rangle + |0110\rangle + |1001\rangle + |1100\rangle)] \\ + A_n c_n (|0101\rangle + |1010\rangle) + |1111\rangle, \quad n = 5 - 8, \quad (4.51)$$

onde

$$A_n = (a_n^2 + 4b_n^2 + 2c_n^2 + 1)^{-1/2},$$

$$a_n = -\frac{4b + E_n}{4b - E_n}, \quad b_n = \frac{4b + E_n}{\gamma} \quad \text{e} \quad c_n = \frac{4b + E_n}{\gamma E_n}.$$

Os auto-estados associados ao segundo bloco H_2 são:

$$|9\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1011\rangle - |1110\rangle], \quad |10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1011\rangle - |1110\rangle], \quad (4.52)$$

$$|11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1011\rangle - |1110\rangle], \quad |12\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|1011\rangle - |1110\rangle], \quad (4.53)$$

$$(4.54)$$

$$\begin{aligned} |m\rangle &= B_m [\alpha_m (|0001\rangle + |0100\rangle) + \beta_m (|0010\rangle + |1000\rangle)] \\ &+ B_m [\delta_m (|0111\rangle + |1101\rangle) + |1011\rangle + |1110\rangle], \quad m = 13 - 16, \end{aligned} \quad (4.55)$$

onde

$$B_m = (2\alpha_m^2 + 2\beta_m^2 + 2b_{3m}^2 + 2),$$

$$\alpha_m = \frac{4(2b - E_m) - 4\gamma^2(2b + E_m) - (2b - E_m)(2b + E_m)^2}{8\gamma E_m},$$

$$\beta_m = -\frac{2(\gamma + \alpha_m)}{2b - E_m} \text{ e } \delta_m = \frac{2(\gamma\alpha_m + 1)}{2b + E_m}.$$

Considerando $J > 0$, temos dois candidatos a estado fundamental: O estado $|7\rangle$ e o estado $|15\rangle$. Existem dois pontos de degenerescência onde $E_7 = E_{15}$, o campo crítico $b_c = \sqrt{1 - \gamma^2}$ e um segundo ponto b_0 que não possui uma expressão analítica simples. Na figura 4.9, vemos as duas curvas de degenerescência.

As matrizes reduzidas de dois spins tem a mesma forma que aquela vista nos caso da cadeia de 3 spins, ou seja:

$$\rho_{12} = \begin{pmatrix} u & 0 & 0 & w \\ 0 & x & z & 0 \\ 0 & z & y & 0 \\ w & 0 & 0 & v \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \rho_{13} = \begin{pmatrix} \tilde{u} & 0 & 0 & \tilde{w} \\ 0 & \tilde{x} & \tilde{z} & 0 \\ 0 & \tilde{z} & \tilde{y} & 0 \\ \tilde{w} & 0 & 0 & \tilde{v} \end{pmatrix} \quad (4.56)$$

Para o caso $b > b_c$ e $b < b_0$, o estado fundamental é $|\Psi_G\rangle = |7\rangle$ e, portanto, os elementos das matrizes reduzidas são:

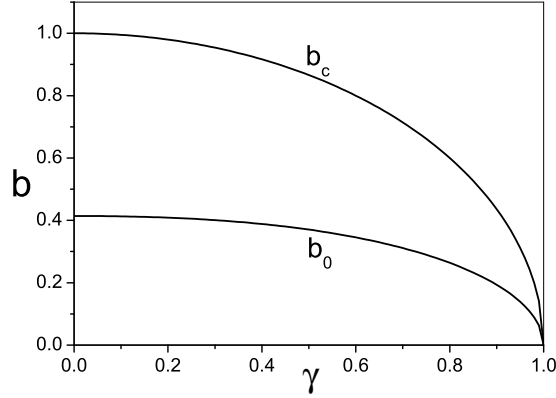


Figura 4.9 curvas de estados fundamentais degenerados na cadeia XY de 4 spins.

$$u = a_n^2 + b_n^2 \quad \text{e} \quad \tilde{u} = a_n^2 + b_n^2, \quad (4.57)$$

$$v = 1 + b_n^2 \quad \text{e} \quad \tilde{v} = 1 + c_n^2, \quad (4.58)$$

$$w = a_n b_n + b_n \quad \text{e} \quad \tilde{w} = a_n c_n + c_n, \quad (4.59)$$

$$x = y = b_n^2 + c_n^2 \quad \text{e} \quad \tilde{x} = \tilde{y} = 2b_n^2, \quad (4.60)$$

$$z = 2b_n c_n \quad \text{e} \quad \tilde{z} = 2b_n^2. \quad (4.61)$$

Para $b_0 < b < b_c$, o estado fundamental é $|\Psi_G\rangle = |15\rangle$ e, portanto, os elementos das matrizes reduzidas são:

$$u = \alpha_m^2 + \beta_m^2 \quad \text{e} \quad \tilde{u} = 2\alpha_m^2, \quad (4.62)$$

$$v = 1 + \delta_m^2 \quad \text{e} \quad \tilde{v} = 2, \quad (4.63)$$

$$w = \alpha_m \delta_m + \beta \quad \text{e} \quad \tilde{w} = 2\alpha_m, \quad (4.64)$$

$$x = \alpha_m^2 + \delta_m^2 \quad \text{e} \quad \tilde{x} = \beta_m^2 + \delta_m^2, \quad (4.65)$$

$$y = \beta_m^2 + 1 \quad \text{e} \quad \tilde{y} = \beta_m^2 + \delta_m^2, \quad (4.66)$$

$$z = \delta_m^2 + 1 \quad \text{e} \quad \tilde{z} = \beta_m^2 + \delta_m^2. \quad (4.67)$$

[illegible]

$$H_2 = \begin{pmatrix} 2b & 1 & 1 & \gamma & 1 & \gamma & \gamma & 0 \\ 1 & 2b & 1 & \gamma & 0 & \gamma & 0 & \gamma \\ 1 & 1 & 2b & \gamma & 1 & 0 & \gamma & \gamma \\ \gamma & \gamma & \gamma & -2b & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 2b & \gamma & \gamma & \gamma \\ \gamma & \gamma & 0 & 1 & \gamma & -2b & 1 & 1 \\ \gamma & 0 & \gamma & 1 & \gamma & 1 & -2b & 1 \\ 0 & \gamma & \gamma & 1 & \gamma & \gamma & 1 & -2b \end{pmatrix}. \quad (4.70)$$

Os autovalores são:

$$E_{1-2} = -2, \quad (4.71)$$

$$E_{3-5} = 0, \quad (4.72)$$

$$E_6 = \frac{4}{3} \text{Re} [\mathcal{Z}], \quad (4.73)$$

$$E_7 = \frac{4}{3} \text{Re} [\mathcal{Z} e^{i2\pi/3}], \quad (4.74)$$

$$E_8 = \frac{4}{3} \text{Re} [\mathcal{Z} e^{i4\pi/3}], \quad (4.75)$$

$$E_{9-11} = -1 + \sqrt{4b^2 + \gamma^2}, \quad (4.76)$$

$$E_{12-14} = -1 - \sqrt{4b^2 + \gamma^2}, \quad (4.77)$$

$$E_{15,16} = 3 \pm \sqrt{9\gamma^2 + 4b^2}. \quad (4.78)$$

onde $\mathcal{Z} = \left(\eta + 3i\sqrt{\Delta} \right)^{1/3}$, com $\eta = 27\gamma^2 - 72b^2 + 8$ e $\Delta = 81\gamma^6 + 324b^2\gamma^4 + 27\gamma^4 + 432b^4\gamma^2 + 720b^2\gamma^2 + 192b^6 - 384b^4 + 192b^2$.

Como estamos tratando apenas o caso $J > 0$, o estado fundamental é definido pelo maior entre os autovalores de H_1 e H_2 . Nesse caso, podemos ter E_6 ou E_{15} como energia do estado fundamental. Essas duas funções-energia se cruzam em dois pontos levando a um estado fundamental degenerado. Na figura 4.10, mostramos as duas curvas caracterizadas por $E_6 = E_{15}$. Apesar de não ter sido possível obter expressões analíticas fechadas para esses pontos críticos, resultados obtidos numericamente mostram que as duas curvas críticas se ajustam muito bem a setores de elipses $b_0 = (1/2)\sqrt{1 - \gamma^2}$ e $b_c = (3/2)\sqrt{1 - \gamma^2}$.

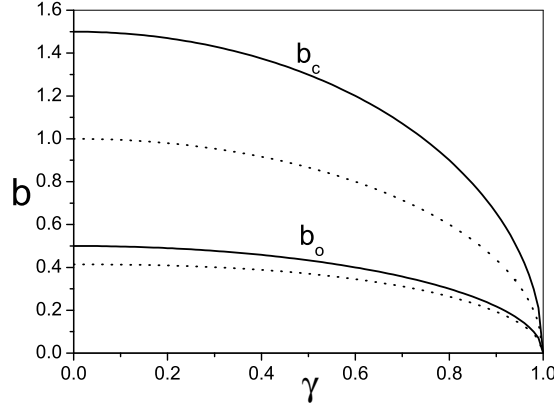


Figura 4.10 Curvas de degenerescência $E_6 = E_{15}$ para a cadeia LMG . As curvas se ajustam bem a setores de elipses, $b_c \approx (3/2)\sqrt{1-\gamma^2}$ e $b_0 \approx (1/2)\sqrt{1-\gamma^2}$.

Nos casos em que $b > b_c$ ou $b < b_0$, o estado fundamental é dado por:

$$|\Psi_G\rangle = |6\rangle = A [a|0000\rangle + b(|0011\rangle + |0101\rangle + |0110\rangle + |1001\rangle + |1010\rangle + |1100\rangle) + |1111\rangle] \quad (4.79)$$

onde $A = (a^2 + 6b^2 + 1)^{-1/2}$, com $a = -(4b + E_6) / (4b - E_6)$ e $b = (4b + E_6) / 6\gamma$, o que nos leva às seguintes expressões para os elementos das matrizes reduzidas no estado fundamental.

$$u = A^2 (a^2 + b^2), \quad (4.80)$$

$$v = A^2 (1 + b^2), \quad (4.81)$$

$$w = A^2 (ab + b), \quad (4.82)$$

$$x = y = z = 2b^2 A^2. \quad (4.83)$$

No caso em que $b_0 < b < b_c$, temos o estado fundamental

$$|\Psi_G\rangle = |15\rangle = B [\alpha (|0001\rangle + |0010\rangle + |0100\rangle + |1000\rangle) + |0111\rangle + |1011\rangle + |1101\rangle + |1110\rangle], \quad (4.84)$$

onde

$$B = (4\alpha^2 + 4)^{-1/2} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{2b + \sqrt{4b^2 + 9\gamma^2}}{3\gamma}.$$

Os elementos da matriz densidade reduzida são:

$$u = 2B^2\alpha^2 \quad (4.85)$$

$$v = 2B^2 \quad (4.86)$$

$$w = 2B^2\alpha \quad (4.87)$$

$$x = y = z = B^2(1 + \alpha^2) \quad (4.88)$$

Na figura 4.11, apresentamos uma série de gráficos que resumem o comportamento das concorrências $C(1)$ e $C(2)$ em função do campo magnético b . Trata-se de gráficos comparativos das concorrências nos sistemas XY e LMG . A existência de 4 pontos, de degenerescência do estado fundamental, ao invés de 3 como no caso de 3 spins, torna o comportamento mais complexo devido à existência de três regiões de campo magnético com comportamentos diferentes. As figuras (a) e (b) mostram os resultados para o caso isotrópico $\gamma = 0$ onde só existe emaranhamento para campos menores que b_c . Para $b > b_c$, temos o estado separável $|0000\rangle$ e, na região $b_0 < b < b_c$, o estado fundamental é o conhecido estado $|W\rangle = (|0001\rangle + |0010\rangle + |0100\rangle + |1000\rangle)/2$ para ambas as cadeias. Quando existe superposição destas regiões, ou seja em $b \in (b'_0, b_c)$ temos $C(1) = C(2) = 1/2$ tanto na cadeia XY quanto na LMG . Na região de campos magnéticos mais fracos $b \in [-b_0, b_0]$, temos mais emaranhamento entre vizinhos na cadeia XY do que na LMG , diferentemente do que ocorre para a concorrência entre segundos vizinhos $C(2)$. Mais uma vez, os pontos de degenerescência parecem ter um papel importante na delimitação de regiões correspondentes a padrões distintos de emaranhamento.

Para o caso $\gamma = 0.5$, conforme mostrado em (c) e (d), as concorrências em $b > b_c$ são não-nulas, mas decaem monotonicamente com o campo magnético, sendo a concorrência entre vizinhos maior na cadeia LMG do que na XY exceto no ponto crítico b'_c da cadeia LMG . Na região intermediária $b \in (b'_0, b_c)$, temos ainda $C(1) = C(2)$ mas dependentes do campo magnético. Outra característica importante é que $C(2) = 0$ em todo o intervalo $b \in (-b_0, b_0)$ na cadeia XY , o que significa que este emaranhamento é induzido pelo campo magnético, já que na ausência ou insuficiência de campo, a interação com os demais não é suficiente para gerar emaranhamento entre os spins não vizinhos. No modelo Ising, só temos emaranhamento com campo magnético aplicado, o que também ocorre nas cadeias de 2 e 3 spins analisadas anteriormente. Na próxima seção, apresentamos um modelo interpolador entre estas duas topologias extremas e analisamos o comportamento do emaranhamento em relação a este acoplamento adicional.

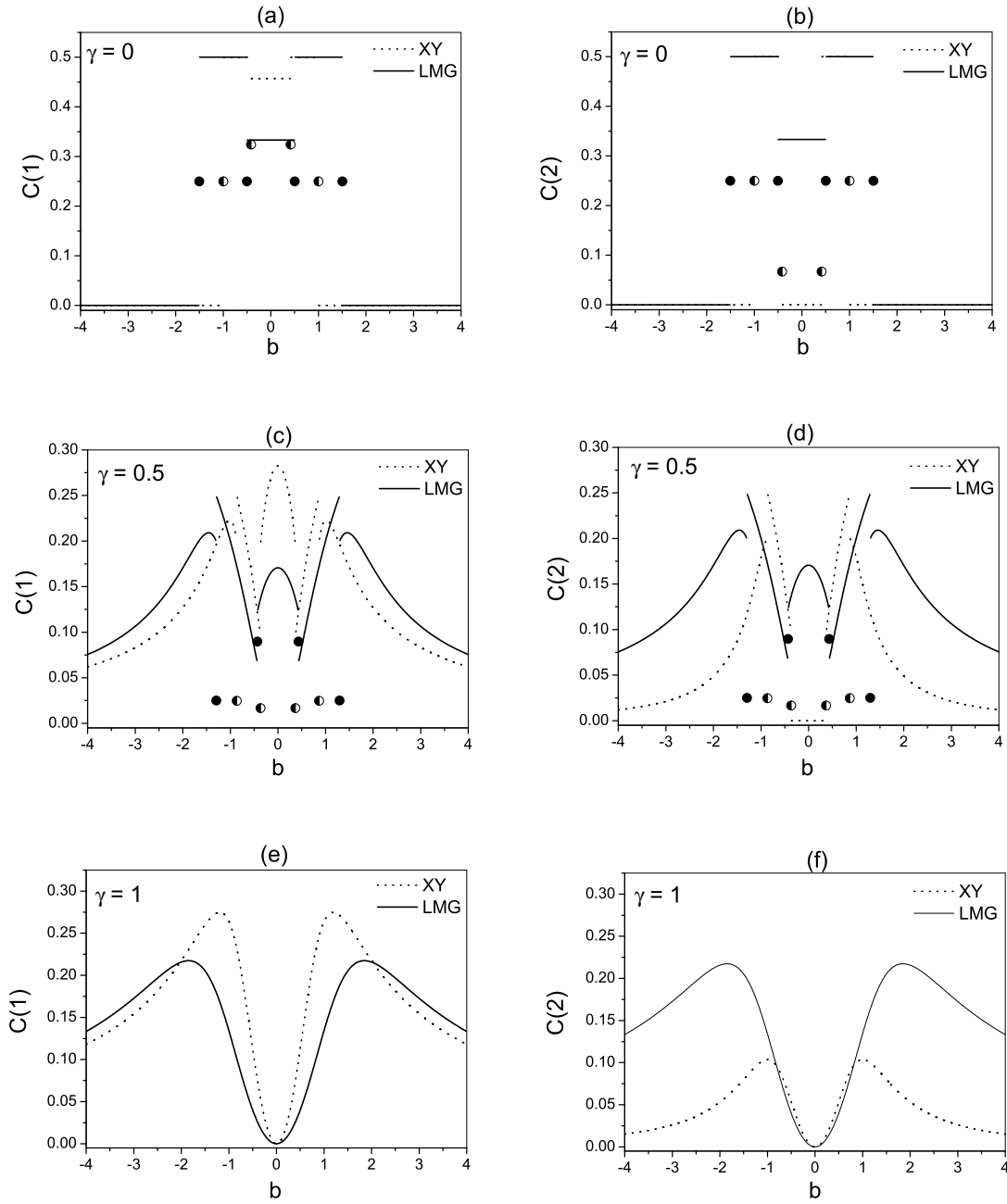


Figura 4.11 Concorrência entre primeiros vizinhos $C(1)$ e entre segundos vizinhos $C(2)$ em função do campo magnético b . Em (a-b), resultados para o caso isotrópico $\gamma = 0$. Em (c-d), o modelo anisotrópico $\gamma = 0.5$ e, finalmente, o modelo Ising $\gamma = 1$ é apresentado em (e-f). As linhas pontilhadas referem-se às cadeias XY enquanto as linhas cheias às cadeias LMG. Os círculos cheios e semi-cheios especificam os valores das concorrências nos pontos de degenerescência do estado fundamental dos modelos LMG e XY respectivamente.

4.2.3 Análise das concorrências no modelo interpolador

Nesta etapa, estudamos as propriedades do emaranhamento em um modelo interpolador onde a interação envolvendo segundos vizinhos tem a forma $J_{13} = J_{24} = m \cdot J$, conforme a figura 4.12, com o parâmetro de interação m variando de $m = 0$ (*XY*) a $m = 1$ (*LMG*). O hamiltoniano para esse modelo é dado por:

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{J}{2} \sum_{i=1}^4 [(1 + \gamma)\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + (1 - \gamma)\sigma_i^y \sigma_{i+1}^y] - h \sum_{i=1}^4 \sigma_i^z \\
 & - m \frac{J}{2} \sum_{i=1}^2 [(1 + \gamma)\sigma_i^x \sigma_{i+2}^x + (1 - \gamma)\sigma_i^y \sigma_{i+2}^y], \quad (4.89)
 \end{aligned}$$

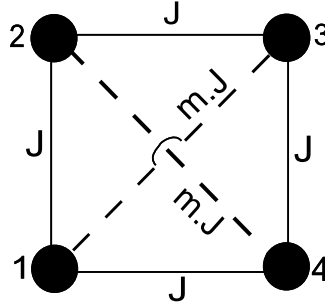


Figura 4.12 Cadeia de 4 spins com acoplamento entre segundos vizinhos controlado por uma parâmetro de interação m que varia de 0 (Cadeia *XY*) a 1 (cadeia *LMG*).

Mais uma vez, analisamos inicialmente o caso isotrópico que possibilita a obtenção de soluções analíticas simples e, conseqüentemente, tornando mais explícitos os efeitos da interação entre segundos vizinhos sobre o emaranhamento.

4.2.3.1 Caso Isotrópico $\gamma = 0$. O procedimento para o cálculo do emaranhamento neste caso é o mesmo dos casos anteriores. Obtemos as representações matriciais de H_1^m e H_2^m e procedemos com a diagonalização direta a fim de determinar o estado fundamental. Neste caso, temos três possíveis estados para o estado fundamental. Logo abaixo, apresentamos os três estados com suas respectivas energias e o intervalo de campos magnéticos onde ocorrem.

$$\begin{aligned}
b > b_c^m & \quad E_G = 4b & |\Psi_G\rangle &= |0000\rangle \\
b_0^m < b < b_c^m & \quad E_G = 2b + m + 2 & |\Psi_G\rangle &= \frac{1}{2} [|0001\rangle + |0010\rangle + |0100\rangle + |1000\rangle] \\
b < b_0^m & \quad E_G = m + \sqrt{m^2 + 8} & |\Psi_G\rangle &= C\alpha_m (|0011\rangle + |0110\rangle + |1001\rangle + |1100\rangle) \\
& & & \quad + C(|0101\rangle + |1010\rangle)
\end{aligned} \tag{4.90}$$

onde $C = (4\alpha_m^2 + 2)^{-1/2}$ e $\alpha_m = (m + \sqrt{m^2 + 8})/4$.

Os campos onde o estado fundamental é degenerado são dados por:

$$b_c^m = 1 + \frac{m}{2} \tag{4.91}$$

$$b_0^m = \frac{1}{2} (\sqrt{m^2 + 8} - 2) \tag{4.92}$$

De imediato, dois resultados são conhecidos. Primeiramente, na região de campos intensos $b > b_c$, o estado fundamental é completamente separável e, portanto, $C(1) = C(2) = 0$. Na região intermediária $b_0^m < b < b_c^m$, o estado fundamental é o estado $|W\rangle$ onde $C(1) = C(2) = 1/2$ também independentemente do campo magnético b e do parâmetro de interação m . Na região de campos mais fracos $b < b_0^m$, o comportamento é um pouco mais complicado mais ainda é possível obter soluções analíticas para o problema. Os resultados para $b < b_0$ são:

$$C(1) = \frac{\alpha_m (2 - \alpha_m)}{1 + 2\alpha_m^2}, \tag{4.93}$$

$$C(2) = \frac{2\alpha_m^2 - 1}{1 + 2\alpha_m^2} \quad \text{se } b < b_0. \tag{4.94}$$

Na figura 4.13, apresentamos o comportamento das concorrências entre spins vizinhos $C(1)$ e entre segundos vizinhos $C(2)$ em função do parâmetro de acoplamento m entre segundos vizinhos. Na região $b < b_0 \approx 0.414$, temos sempre $b < b_0^m$ e, portanto, as concorrências são dadas pelas expressões das equações (4.93) e (4.94). A figura 4.13a mostra que o comportamento é semelhante ao que ocorre no modelo interpolador da cadeia de 3 spins, como vimos na seção anterior, $C(1)$ decai e $C(2)$ cresce com o parâmetro de interação m até que em $m = 1$ temos $C(1) = C(2)$. Na parte (b), o campo escolhido está no intervalo (b_0, b'_0) e, portanto, existe um ponto de descontinuidade separando o comportamento semelhante ao anterior do comportamento referente ao estado $|W\rangle$, $C(1) = C(2) = 1/2$. O estado $|W\rangle$ continua sendo o estado fundamental em todo o intervalo $b \in (b'_0, b_c)$ para qualquer valor do parâmetro de interação m . Para $b \in (b_c, b'_c)$ temos

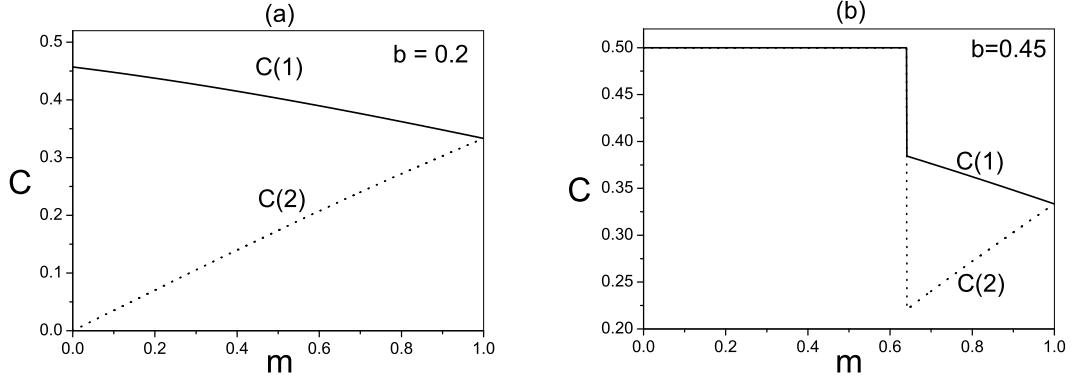


Figura 4.13 Concorrências entre pares de spins em função do parâmetro m no modelo interpolador isotrópico $\gamma = 0$. As linhas pontilhadas referem-se a $C(2)$ e as linhas cheias para $C(1)$. Na parte (a), temos $b < b_0$ e na parte (b) $b_0 < b < b'_0$.

no intervalo $(0, 1)$ de m , uma descontinuidade separando o comportamento referente ao estado $|W\rangle$ do estado completamente separável $|0000\rangle$ onde as concorrências se anulam.

4.2.3.2 Caso anisotrópico $\gamma \in (0, 1)$. A existência de algum grau de anisotropia modifica sensivelmente as propriedades do emaranhamento em função do parâmetro de interação. Na região de campos intensos, não temos a formação do estado completamente separável $|\Psi\rangle = |0000\rangle$ e, portanto, temos emaranhamento na região com $b > b_c^m$. Apesar da complexidade do problema, é possível obter uma solução analítica para campos na região intermediária $b_0^m < b < b_c^m$. O estado fundamental e a respectiva auto-energia nesta região são dados por:

$$E_G = -J \left[m + 2 + \sqrt{4b^2 + \gamma^2 (m + 2)^2} \right] \quad (4.95)$$

$$|\Psi_G\rangle = \sqrt{p_m}|W\rangle + \sqrt{1 - p_m}|\widetilde{W}\rangle, \quad \text{se } b_0^m < b < b_c^m \quad (4.96)$$

onde

$$\sqrt{p_m} = \frac{2b + \sqrt{4b^2 + \gamma^2 (m + 2)^2}}{\sqrt{\gamma^2 (m + 2)^2 + \left(2b + \sqrt{4b^2 + \gamma^2 (m + 2)^2}\right)^2}},$$

$$|W\rangle = (|0001\rangle + |0010\rangle + |0100\rangle + |1000\rangle) / 2 \quad \text{e}$$

$$|\widetilde{W}\rangle = (|1110\rangle + |1101\rangle + |1011\rangle + |0111\rangle) / 2.$$

Os estados $|W\rangle$ e $|\widetilde{W}\rangle$ tem emaranhamento multipartite máximo e a concorrência entre pares de spins satisfaz $C(1) = C(2) = 1/2$. O estado fundamental nesta região é, portanto, uma mistura coerente destes dois estados com coeficientes dependentes do parâmetro de interação m . Assim, o estado fundamental preserva a propriedade $C(1) = C(2)$, mas as concorrências variam com m . Os demais resultados envolvendo outras regiões do espaço dos parâmetros devem ser obtidos numericamente seguindo o mesmo procedimento utilizado para o caso de 3 spins. Um detalhe importante é que na cadeia de 4 spins, a transição entre as topologias extremas é controlada por dois pares de interações adicionais. Por esse motivo, a concorrência de um par de segundos vizinhos não necessariamente aumenta com a interação entre eles, pois a interação entre o outro par de segundos vizinhos também afeta tal concorrência via acoplamento indireto. Assim, ambas as concorrências $C(1)$ e $C(2)$ caracterizam diferentes padrões de emaranhamento, e não somente $C(1)$ como ocorre no caso de 3 spins.

Analizamos inicialmente o comportamento da concorrência entre spins vizinhos $C(1)$ com o parâmetro m . Os resultados são apresentados na figura 4.14, onde vemos os diferentes padrões de $C(1) \times m$ correspondentes às regiões representadas no diagrama $b \times \gamma$ da figura 4.14a. Nas regiões (I)a,b,c, a concorrência entre vizinhos decai monotonicamente em todo o intervalo $m \in [0, 1]$. Em (II), temos um crescimento e, finalmente em (III), temos um comportamento intermediário onde $C(1)$ não é máxima em nenhum dos modelos extremos, mas em um modelo intermediário com um certo valor de m que depende do campo magnético aplicado. Nas figuras 4.14b-d, vemos amostras de gráficos $C(1) \times m$ ilustrando estes comportamentos. Para campos nos intervalos $b \in [b_0, b'_0]$ ou $b \in [b_c, b'_c]$, existe um ponto de descontinuidade em m onde o campo magnético escolhido corresponde ao campo crítico $b = b_0^m$ ou $b = b_c^m$. Essa descontinuidade separa dois diferentes padrões e, portanto, essas regiões do diagrama $b \times \gamma$ não correspondem a novos padrões de emaranhamento.

A concorrência entre segundos vizinhos $C(2)$ também leva a diferentes padrões de comportamento em relação a m . O diagrama $b \times \gamma$ da figura 4.15a apresenta os 4 diferentes padrões que podem surgir. Nas regiões (I)a,b, temos um decaimento de $C(2)$ com o parâmetro de interação m enquanto que em (II)a,b, temos um crescimento. A região (III) é caracterizada pela ocorrência de um máximo de $C(2)$ em um valor intermediário de m . A novidade é o aparecimento de um novo padrão representado por (IV) onde temos um intervalo "escuro" de valores de m para os quais $C(2) = 0$. Novamente,

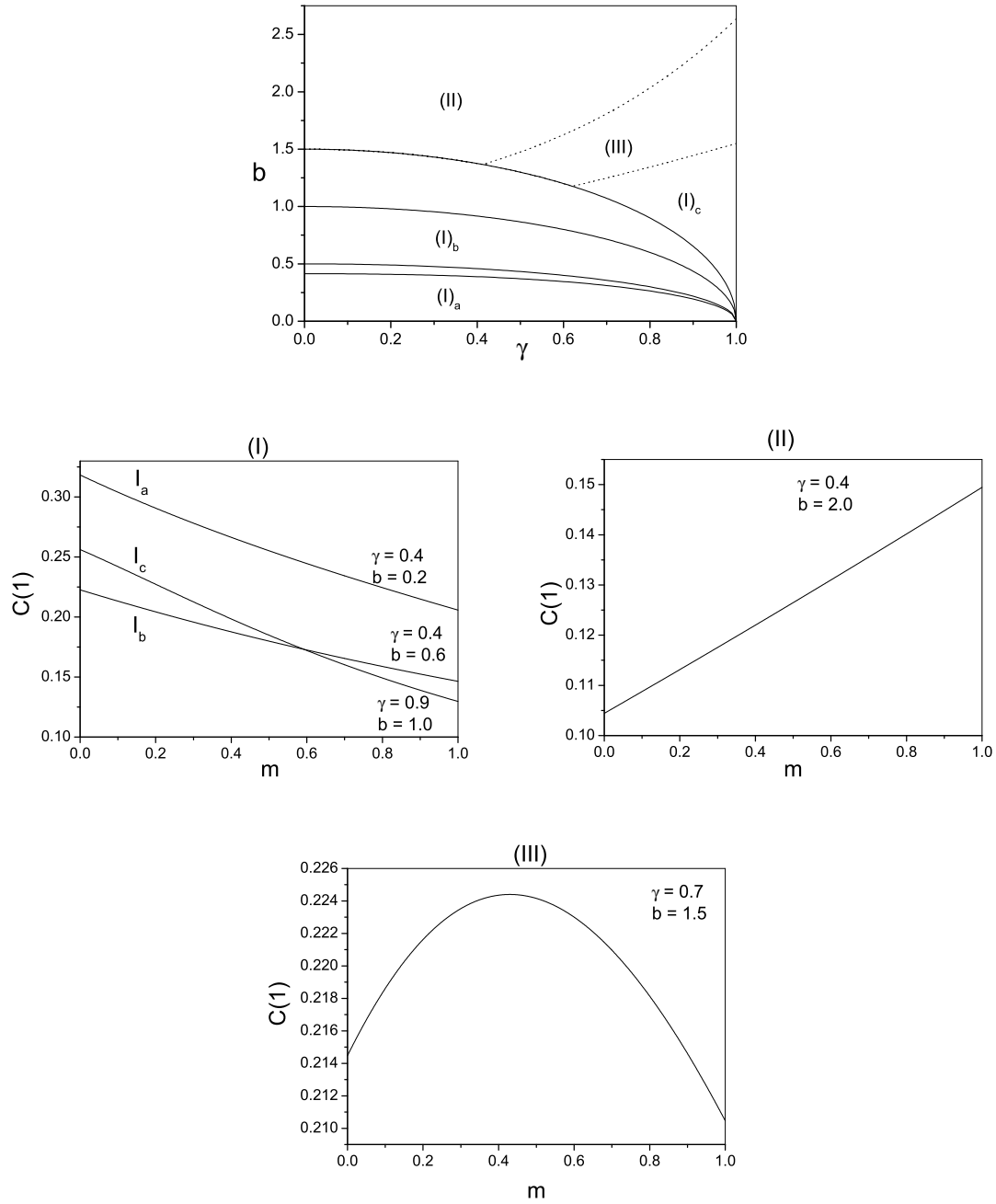


Figura 4.14 Padrões de $C(1) \times m$ no espaço dos parâmetros $b \times \gamma$. Na parte (a), vemos as regiões correspondentes a diferentes padrões de emaranhamento. As curvas cheias correspondem às curvas b_c, b'_c, b_0 e b'_0 enquanto que as linhas pontilhadas não correspondem à degenerescências do estado fundamental, mas definem transições entre padrões de emaranhamento. As figuras (b-d) são amostras de gráficos de $C(1) \times m$ em cada região mostrada na parte (a).

para complementarmos a análise dos efeitos das interações entre segundos vizinhos sobre o emaranhamento, é necessário estudarmos o emaranhamento global Q e a parte armazenada entre pares Q_p .

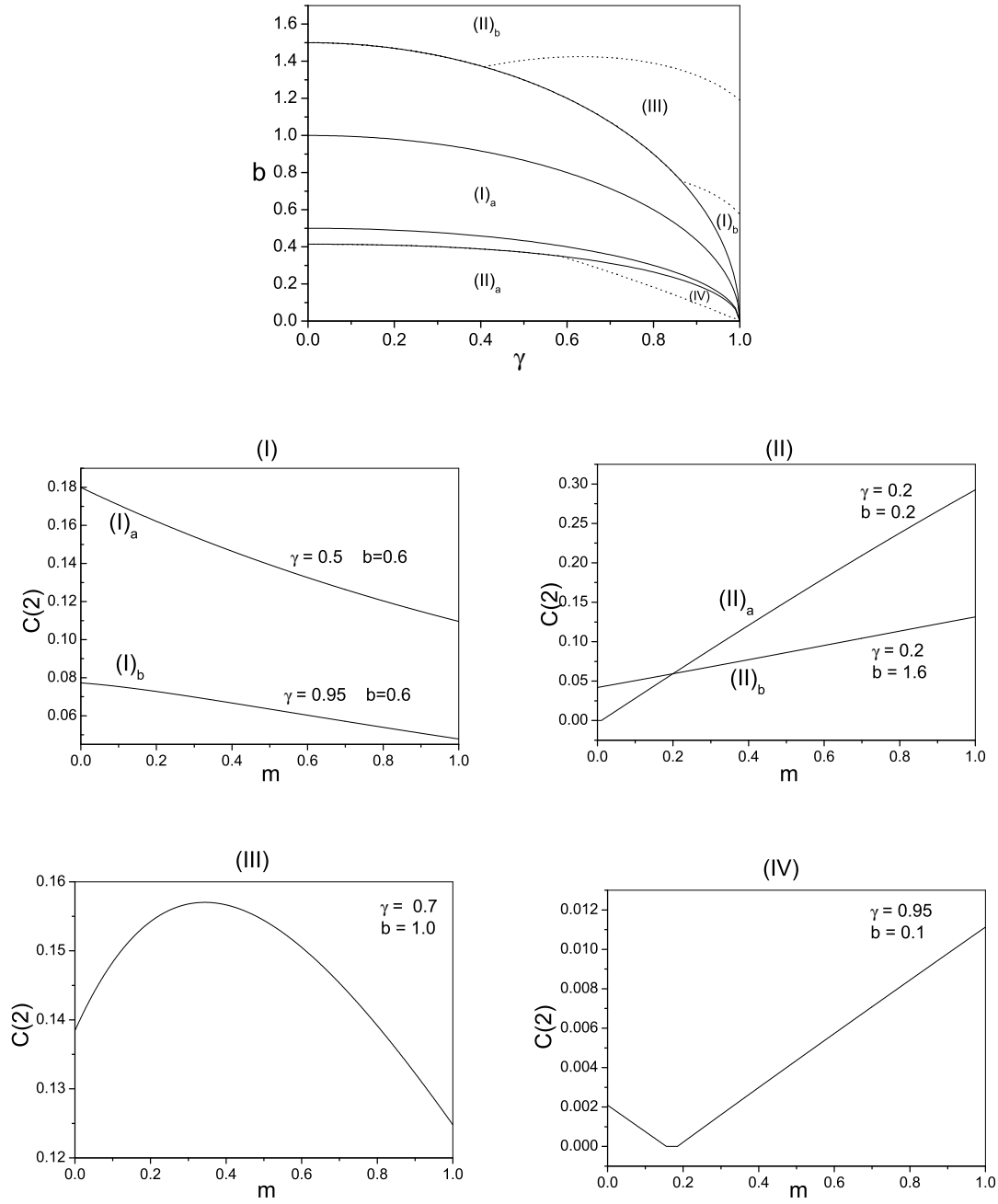


Figura 4.15 Padrões de $C(1) \times m$ no espaço dos parâmetros $b \times \gamma$. Na parte (a), vemos as regiões correspondentes a diferentes padrões de emaranhamento. As curvas cheias correspondem às curvas b_c , b'_c , b_0 e b'_0 enquanto que as linhas pontilhadas não correspondem à degenerescências do estado fundamental, mas definem transições entre padrões de emaranhamento. As figuras (b-d) são amostras de gráficos de $C(1) \times m$ em cada região mostrada na parte (a).

4.2.4 Emaranhamento global e armazenado em pares

Como vimos na seção anterior, o ajuste da interação entre spins segundos vizinhos leva a importantes modificações nas concorrências entre pares $C(1)$ e $C(2)$. O estudo do emaranhamento global Q e da parte armazenada em pares Q_p auxilia na organização e interpretação das informações contidas nos diversos gráficos apresentados anteriormente. Ambos os sistemas que analisamos apresentam invariância translacional no sentido de que todas as matrizes reduzidas de um spin são idênticas. Assim, o emaranhamento global corresponde à concorrência entre um spin arbitrário e o restante da cadeia,

$$Q = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^4 2 [1 - \text{Tr}(\rho_i^2)] = 2 [1 - \text{Tr}(\rho_1^2)]. \quad (4.97)$$

Os resultados mostrados na figura 4.16 mostram um comportamento similar ao caso das cadeias com 3 spins. O emaranhamento global da cadeia XY é sempre menor do que na cadeia LMG . Podemos notar também que o emaranhamento global é máximo $Q = 1$ na ausência de campo magnético, exceto para o modelo Ising, pois $b = 0$ resulta num modelo clássico. Uma análise do comportamento de $Q \times m$ em diferentes regiões do espaço $b \times \gamma$ confirma que Q é sempre uma função monotônica crescente como esperado. No entanto, este emaranhamento que é produzido tem pelo menos duas partes importantes: A parte armazenada nas concorrências entre pares e a parte indisponível para esse tipo de correlação. A parte armazenada em concorrências entre pares é quantificada pela soma dos quadrados das concorrências envolvendo um spin arbitrário e os demais. Como cada spin tem dois vizinhos e apenas um segundo vizinho, temos:

$$Q_p = 2C(1)^2 + C(2)^2 \quad (4.98)$$

Na figura 4.17, apresentamos os padrões do emaranhamento armazenado em pares em função do parâmetro m . Temos 3 regiões distintas: A região $(I)_{A-D}$ onde o emaranhamento armazenado entre pares é reduzido com o aumento do parâmetro m , indicando que nesta região, a interação adicional além de criar emaranhamento global, transforma o emaranhamento já existente no sistema retirando a parte disponível para pares e transferindo para a parte indisponível para esse tipo de correlação. Na região (II) , o emaranhamento armazenado em pares também é criado com o parâmetro de interação m . Na região (III) , existe um máximo de Q_p para um valor específico de m . Estes 3 padrões aparecem também no caso de cadeias com 3 spins, onde a distinção fica por conta das regiões no espaço $b \times \gamma$.

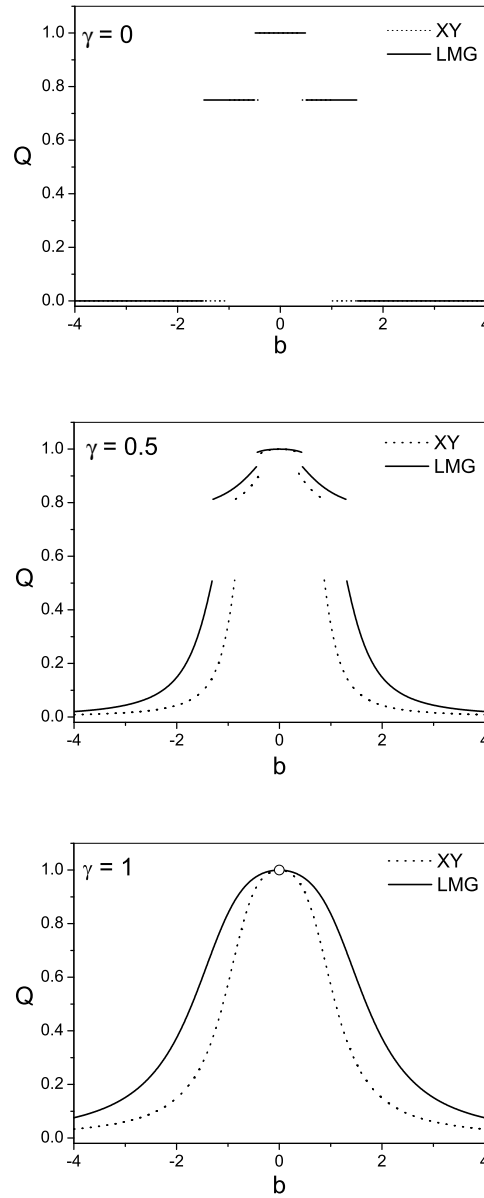


Figura 4.16 Comportamento do emaranhamento global em função do campo magnético b . As linhas pontilhadas referem-se ao modelo XY e as linhas cheias ao modelo LMG . Nos pontos $\pm b_0$ e $\pm b = b_c$, a função Q não é definida, o que pode ser visto através das descontinuidades de Q nestes pontos. O círculo cheio em $Q = 0$ para $\gamma = 1$ indica que o valor Q é conhecido nesse ponto, pois o estado fundamental é um estado completamente separável.

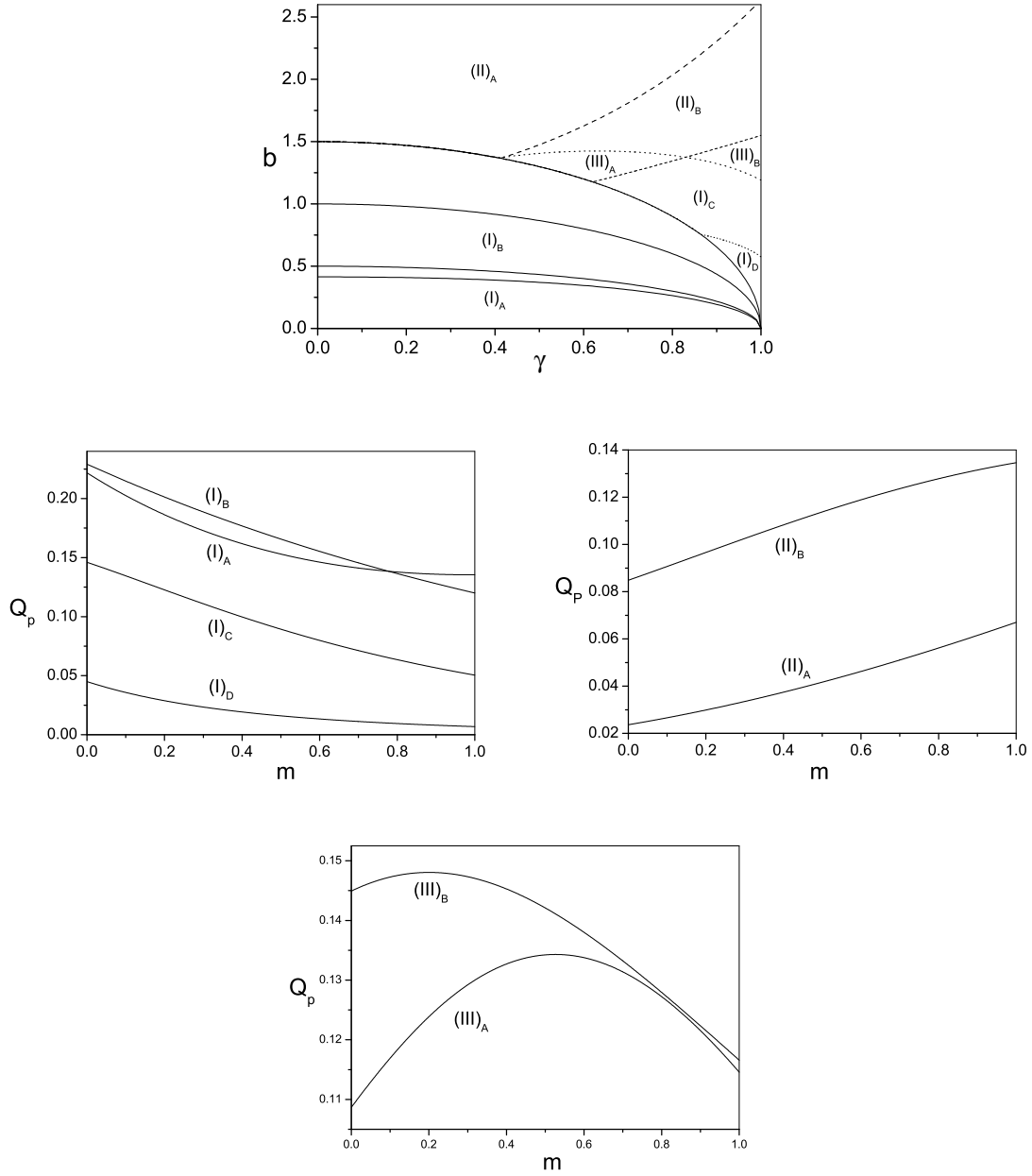


Figura 4.17 Padrões de $Q_p \times m$ representados no diagrama $b \times \gamma$ da figura (a) como 3 regiões distintas. As linhas pontilhadas correspondem as linhas que separam padrões de $C(1) \times m$ e $C(2) \times m$ e as linhas cheias aos pontos críticos das cadeias XY e LMG. Temos um crescimento de Q_p com m na região $(I)_{AC}$, um decaimento em $(II)_{A,B}$ e uma região especial $(III)_{A,B}$, onde Q_p apresenta um máximo local para um valor intermediário de m . As figuras (b-d) fornecem amostras de gráficos para cada um desses padrões.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho foi investigada a possibilidade de se analisar elementos da teoria de ordem quântica em sistemas de spin de tamanho finito do ponto de vista dos padrões de emaranhamento térmico em relação aos parâmetros do hamiltoniano e à temperatura do banho térmico. Inicialmente, foram apresentados resultados para o modelo XY de dois spins, os quais mostram que padrões distintos de emaranhamento podem ser bem definidos neste sistema através da concorrência e da componente quântica pura das funções de correlação de spin. Além disso, foi constatado que estes padrões são separados por curvas que estão relacionadas, entre outras coisas, à degenerescência do estado fundamental e à descontinuidade do limiar de temperatura para o emaranhamento. Em seguida, estudamos o emaranhamento do estado fundamental em sistemas com 3 e 4 qubits em diferentes topologias da rede de acoplamentos, onde demonstramos o efeito de mudanças nos acoplamentos entre os spins sobre o emaranhamento entre spins e também sobre o emaranhamento global. Para redes de 3 spins, analisamos a transição entre as configurações trímero (cadeia aberta) e triângulo (cadeia fechada) e constatamos que a presença da interação adicional no triângulo produz tanto emaranhamento global quanto entre os spins extremos, mas gera diferentes padrões de emaranhamento entre vizinhos, conforme demonstrado pela utilização de um modelo interpolador com interação ajustável entre os spins extremos. Análise similar foi realizada para sistemas com 4 spins, onde foram analisados os sistemas XY e LMG , onde a presença de dois novos pares de spins interagentes no modelo LMG geram diferentes padrões de emaranhamento também entre os segundos vizinhos. Tanto no caso de 3 quanto no de 4 spins, constatamos que a presença de acoplamento adicional produz emaranhamento global além de, em algumas regiões do espaço dos parâmetros, modificar a natureza deste emaranhamento destruindo emaranhamento armazenado entre dois spins e aumentando a parte indisponível para emaranhamento em pares.

Apesar do conceito de transições de fase quânticas e de ordem quântica não se aplicarem, em princípio, a sistemas de poucos spins como os que estudamos neste trabalho,

a formação de distintos padrões de emaranhamento como investigados demonstram que tal conceito pode ser mais abrangente que o de ordem quântica, pois abrange também sistemas com poucos spins. Vale lembrar ainda que as tecnologias atuais envolvendo a manipulação de estados emaranhados se limitam a poucos qubits e, portanto, existe a necessidade de se conhecer a estrutura de emaranhamento neste limite. Um ponto importante ainda não esclarecido diz respeito à observação experimental dos padrões de emaranhamento. Apesar de já ser possível, em alguns sistemas específicos, medir diretamente o emaranhamento[86], ainda não é claro como isso pode ser feito em sistemas arbitrários sem deteriorar a informação relevante devido ao processo de medição. O efeito de ambientes externos sobre o emaranhamento, além do banho térmico, também carece de uma análise mais cuidadosa. Acreditamos que a utilização do formalismo de integrais de trajetória de estados coerentes combinados a modelos tradicionais de ambiente como o modelo de Caldeira-Leggett (banho de osciladores)[87] e o modelo de banho de spins[88] podem ser úteis para a descrição destes efeitos de ambiente. Esta análise fica como uma das possíveis continuções do presente trabalho.

APÊNDICE A

EMARANHAMENTO TÉRMICO PARA AGLOMERADOS DE 3 SPINS

Neste apêndice, apresentamos resultados para a concorrência no estado térmico nos modelos XY de 3 spins nas configurações trímero (cadeia aberta) e triângulo (cadeia fechada). Na figura A.1, apresentamos gráficos da concorrência entre dois spins como função dos parâmetros b e γ do hamiltoniano na configuração triângulo. Os resultados para a configuração trímero são apresentados na figura A.2. Como existem dois tipos de concorrências, entre vizinhos $C(1)$ e entre os spins extremos $C(2)$ ambos os casos são mostrados. Em todos os casos, podemos verificar que, com o aumento da temperatura, o emaranhamento começa a se deteriorar, inicialmente nas proximidades do campo fatorizante e para temperaturas mais altas, apenas existe emaranhamento nas regiões com campos intensos e forte anisotropia.

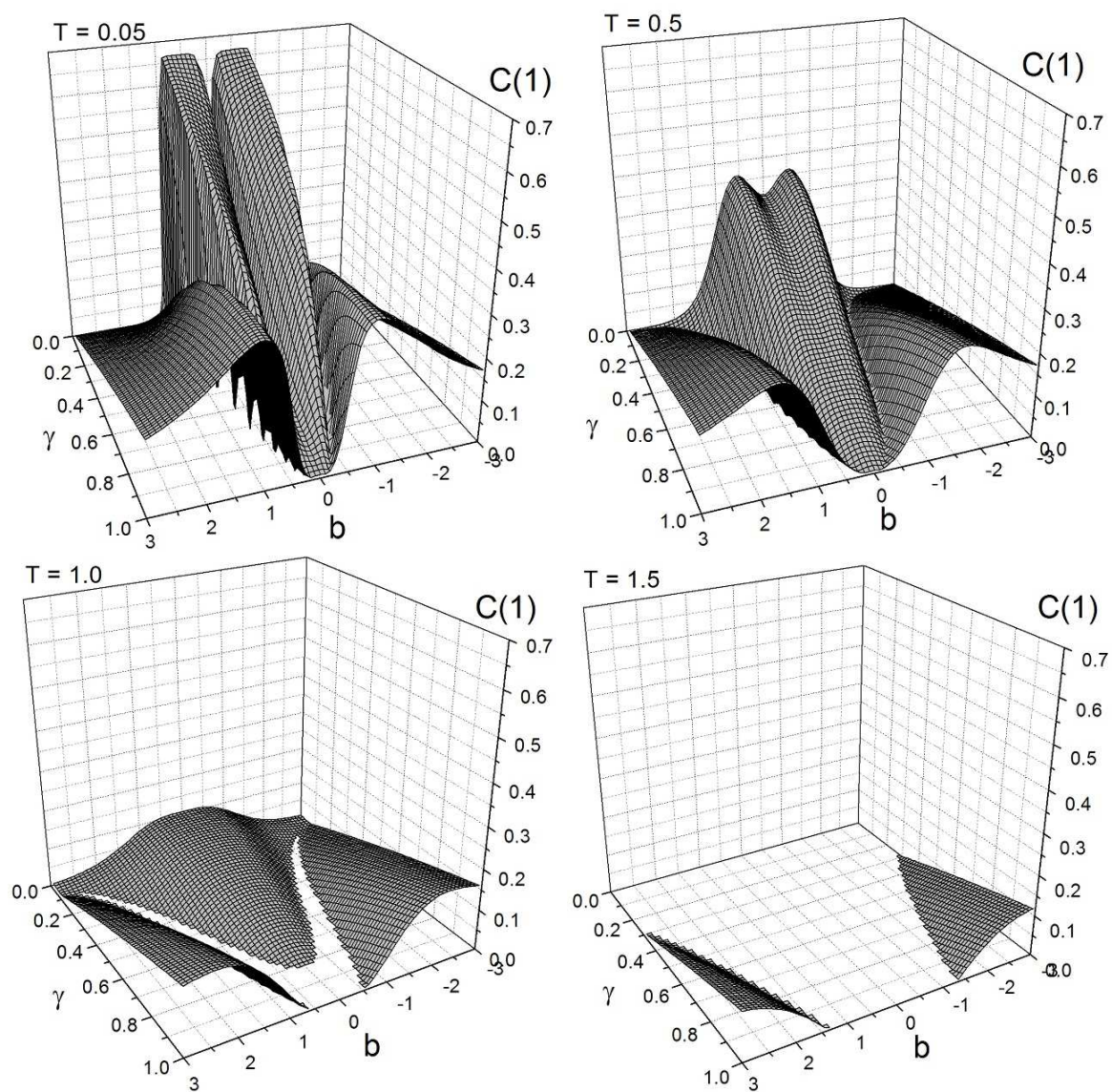


Figura A.1 Concorrência no estado térmico para o modelo XY na configuração triângulo.

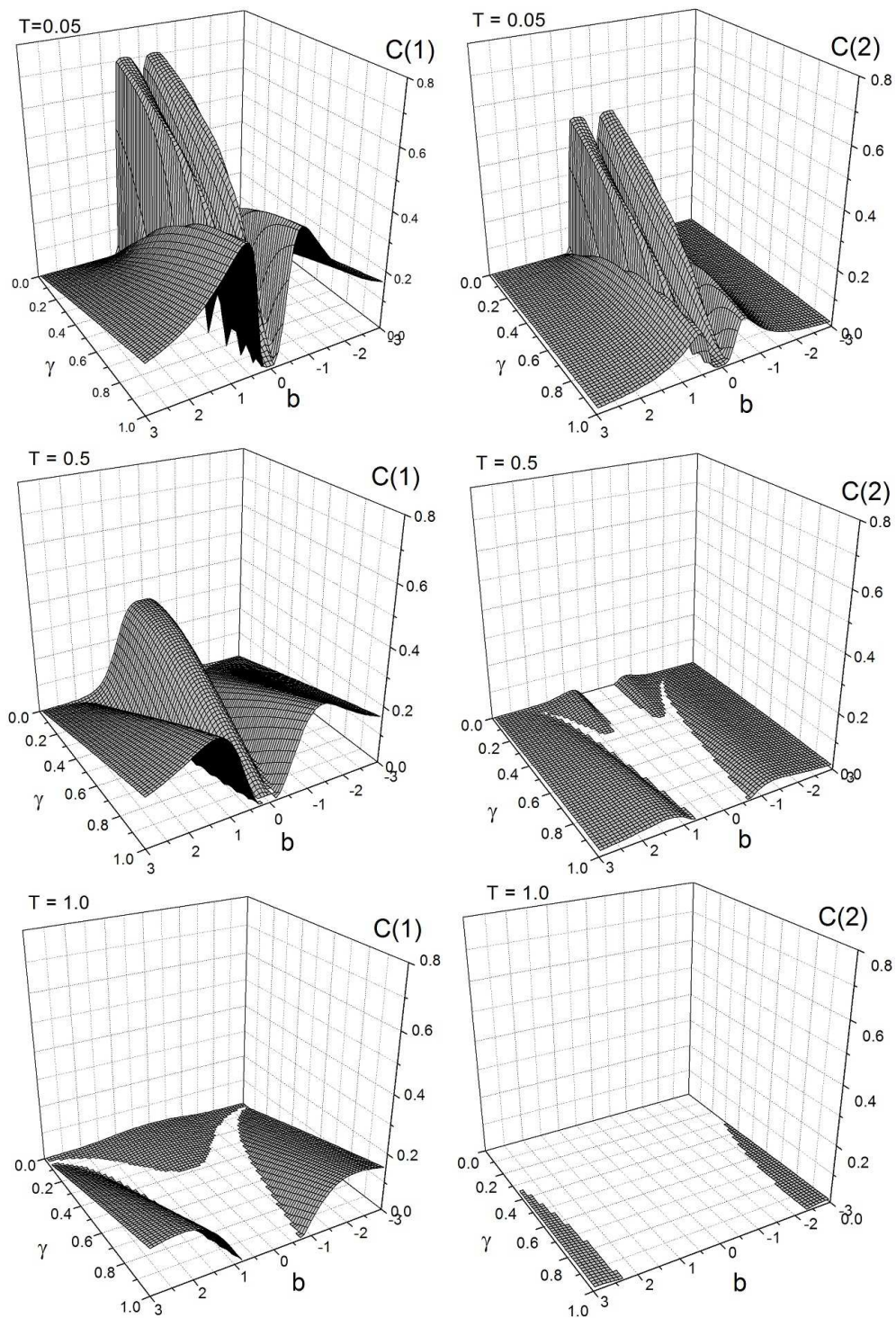


Figura A.2 Concorrência no estado térmico para o modelo XY na configuração trímero. À esquerda, os resultados para a concorrência entre vizinhos $C(1)$ e à direita entre os spins extremos $C(2)$.

APÊNDICE B

EMARANHAMENTO EM SISTEMAS DE 4 SPINS EM TEMPERATURA FINITA

Neste apêndice, mostramos os resultados para o emaranhamento térmico nos sistemas XY e LMG de 4 spins. Inicialmente, apresentamos gráficos da concorrência entre dois spins em termos dos parâmetros b e γ para diferentes temperaturas para os dois sistemas e, em seguida, analisamos o comportamento da temperatura limite T_c acima da qual a concorrência é nula.

Na figura B.1, vemos a dependência das concorrências entre dois spins $C(1)$ e $C(2)$ com os parâmetros b e γ do hamiltoniano do modelo XY de 4 spins. O resultado para $T = 0.05$ reproduz aproximadamente o resultado no estado fundamental, exceto pelas descontinuidades da concorrência que não ocorrem em temperatura finita. À medida em que a temperatura aumenta, ambas as concorrências começam a se anular inicialmente nas proximidades da curva de degenerescência $b_c = \sqrt{1 - \gamma^2}$. Em temperaturas mais altas, a região de concorrência nula tende a crescer e, conforme podemos ver para $T = 1.0$, podemos ainda ter emaranhamento apenas nas regiões de campos intensos e forte anisotropia.

Na figura B.2, apresentamos os resultados para a concorrência em temperatura finita para o modelo LMG de 4 spins. Nesse caso, $C(1) = C(2)$ e não são necessários dois gráficos para cada temperatura. O comportamento é semelhante ao observado para o modelo XY com a diferença no campo fatorizante que nesse caso é $b_c = \frac{3}{2}\sqrt{1 - \gamma^2}$.

É interessante ver o comportamento da temperatura limite para o emaranhamento, o qual é mostrado na figura B.3, onde são mostradas as temperaturas limite para a concorrência entre primeiros e segundos vizinhos respectivamente no modelo XY e, também, para o modelo LMG . Em todos os casos, existe uma descontinuidade na temperatura limite, semelhantemente ao que ocorre no caso de dois spins, em uma certa curva $b_t(\gamma)$ acima do campo onde o estado fundamental é degenerado.

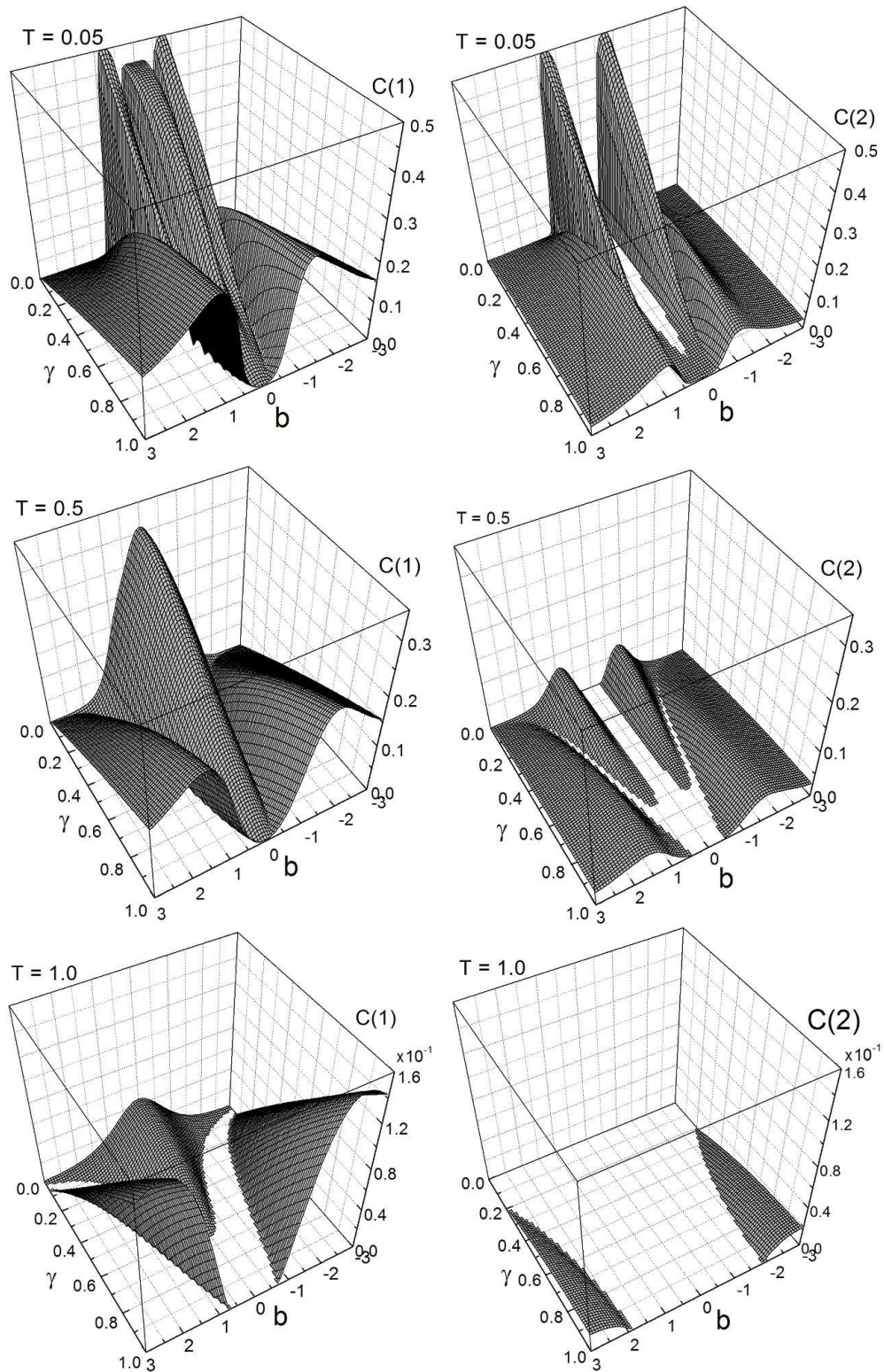


Figura B.1 Concorrências entre dois spins no modelo XY em temperatura finita. À esquerda são mostrados os resultados para a concorrência entre primeiros vizinhos $C(1)$ enquanto que à direita os resultados para segundos vizinhos $C(2)$.

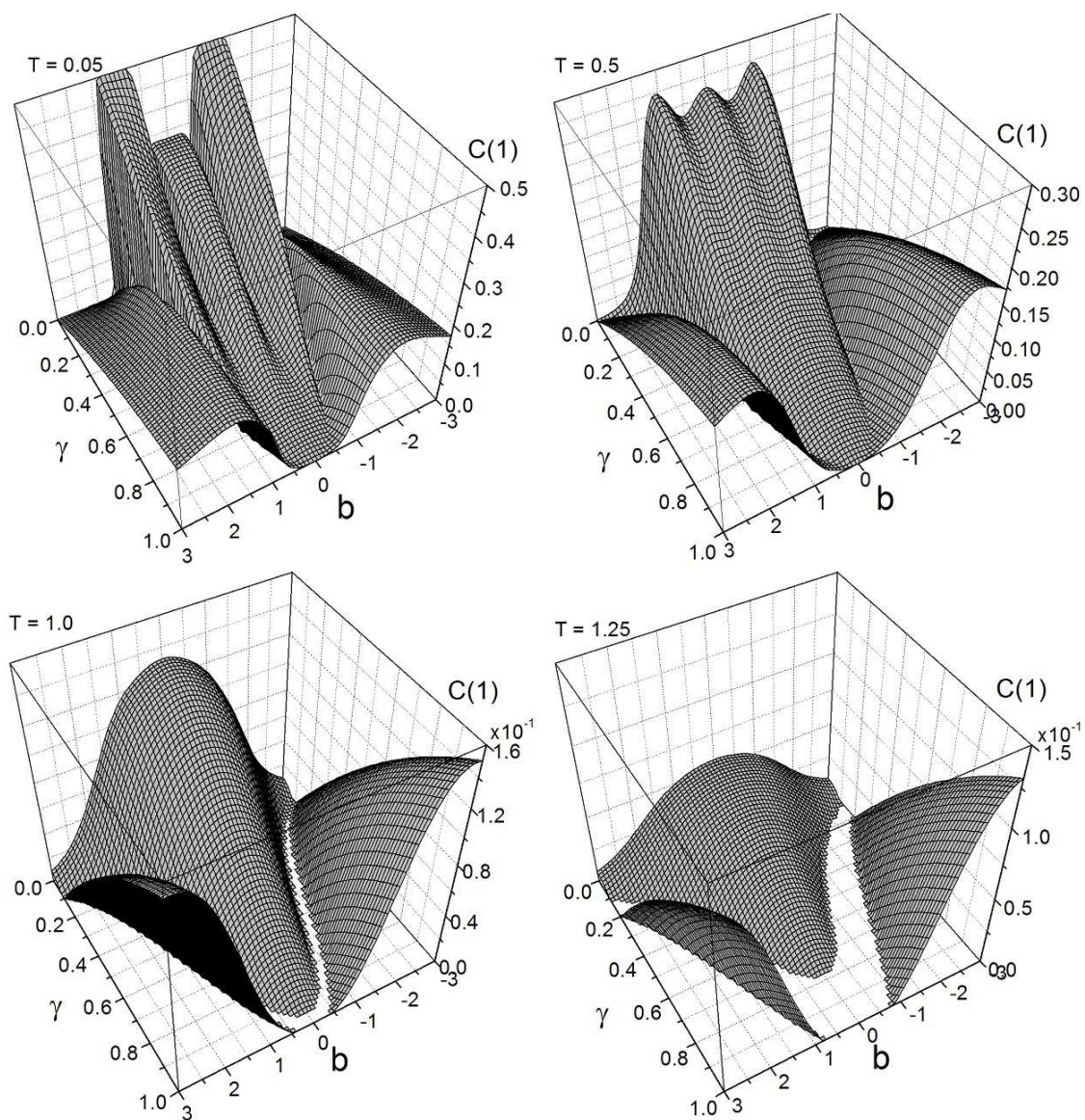


Figura B.2 Concorrências entre dois spins arbitrários no modelo *LMG* em temperatura finita em função dos parâmetros b e γ do hamiltoniano.

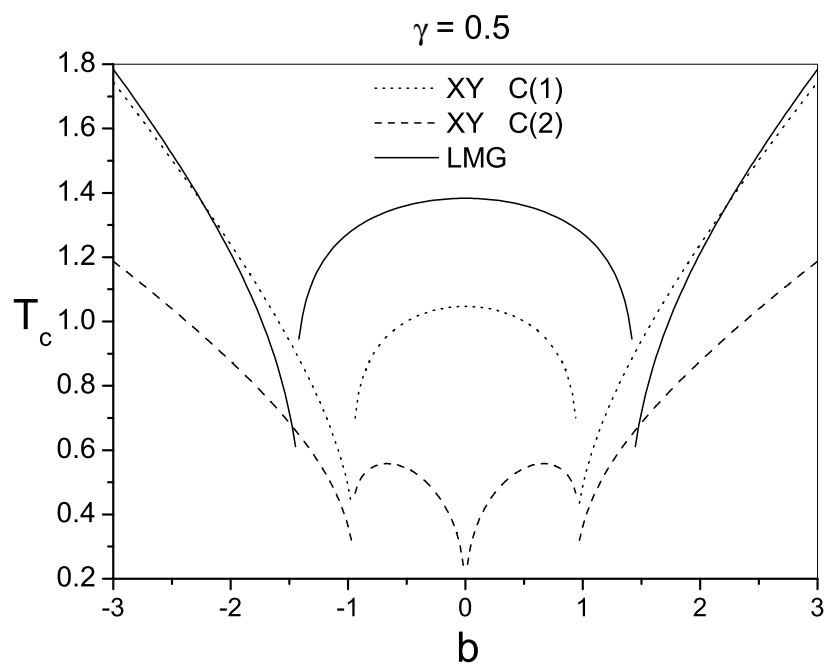


Figura B.3 Temperatura limite T_c em função do campo magnético para a concorrência entre primeiros vizinhos (linha pontilhada) e segundos vizinhos (linha tracejada) no modelo XY e a concorrência entre dois spins quaisquer no modelo LMG (linha cheia). Todos os gráficos foram obtidos utilizando $\gamma = 0.5$

APÊNDICE C

EMARANHAMENTO EM INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA DE ESTADOS COERENTES

O formalismo canônico tem sido utilizado frequentemente em pesquisas envolvendo informação quântica. No entanto, em sistemas com muitos qubits, o crescimento exponencial do espaço de Hilbert associado praticamente impossibilita a análise de muitos destes sistemas, particularmente quando efeitos de ambiente precisam ser considerados. Uma alternativa ao formalismo canônico é o formalismo de Feynmann de integrais de trajetória que, no caso de spin corresponde às integrais de trajetória de estados coerentes de spin. Essa abordagem facilita a execução de aproximações semiclássicas além de possibilitar um tratamento mais realista de efeitos de ambiente [53]. Neste capítulo, apresentamos perspectivas a respeito do uso das integrais de trajetória de estados coerentes de spin na teoria do emaranhamento em sistemas de spins, um tema muito pouco explorado na literatura de informação quântica.

C.1 ESTADOS COERENTES DE MOMENTUM ANGULAR

Estados coerentes encontraram sua primeira aplicação prática na ótica quântica descrevendo as funções de correlações do campo eletromagnético[82]. Posteriormente, mostrou-se que, em princípio, é possível construir estados coerentes para sistemas físicos descritos por grupos dinâmicos arbitrários. Para se construir estados coerentes são necessários os seguintes ingredientes [54]: Um grupo dinâmico G com sua álgebra $\mathfrak{g} \equiv \{T_i\}$ com $[T_i, T_j] \in \mathfrak{g}$, um espaço de Hilbert com uma representação irredutível de G e, finalmente, um estado de referência $|\phi_0\rangle$ sobre o qual elementos de G atuam para formar os estados coerentes. Existe um subgrupo de G , cujos elementos deixam o estado de referência $|\phi_0\rangle$ invariante, que é denominado subgrupo de estabilidade máxima H . Os estados coerentes $|\Omega\rangle$ são gerados pela atuação dos elementos do espaço quociente G/H sobre o estado de

referência $|\phi_0\rangle$, portanto

$$|\Omega\rangle \equiv \Omega|\phi_0\rangle, \quad \Omega \in G/H. \quad (\text{C.1})$$

Nesta seção, apresentamos a construção de estados coerentes de momentum angular também denominados de estados coerentes de $SU(2)$ tendo em vista ser este o grupo dinâmico associado. Os elementos de $SU(2)$ são gerados pelos operadores de momentum angular $J_i, i \in (1, 2, 3)$ que formam uma álgebra com as relações de comutação

$$[J_1, J_2] = iJ_3, \quad [J_2, J_3] = iJ_1 \quad \text{e} \quad [J_3, J_1] = iJ_2. \quad (\text{C.2})$$

A representação irredutível é constituída dos autovetores simultâneos de $\vec{J}^2$ e J_3 que são $\{|jm\rangle, m \in [-j, j]\}$ onde $\vec{J}^2|jm\rangle = j(j+1)\hbar^2|jm\rangle$ e $J_3|jm\rangle = m\hbar|jm\rangle$. Os operadores de criação e aniquilação $J_{\pm} \equiv J_1 \pm iJ_2$ atuam sobre $|jm\rangle$ da forma

$$J_{\pm}|jm\rangle = \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)}|jm\rangle \quad (\text{C.3})$$

Os estados $|jm\rangle$ podem, então ser escritos a partir da aplicação do operador de criação J_+ sobre o estado $|j, -j\rangle$.

$$|jm\rangle = \frac{1}{(j+m)!} \left(\begin{matrix} 2j \\ j+m \end{matrix} \right)^{-1/2} (J_+)^{j+m} |j, -j\rangle \quad (\text{C.4})$$

Os operadores de J_+ e J_- aniquilam os estados $|j, j\rangle$ e $|j, -j\rangle$ respectivamente. Assim, ambos podem ser escolhidos como estado de referência, escolheremos $|j, -j\rangle$. Como os elementos da álgebra gerados por J_z e J_- deixam $|j, -j\rangle$ invariante, os elementos do espaço quociente são do tipo $\Omega = \exp(zJ_+)$ e, portanto, os estados coerentes são dados por $|z\rangle = C \exp(zJ_+)|j, -j\rangle$, onde z é um número complexo e C é a constante de normalização. Utilizando a expansão de $\exp(zJ_+)$ em potências de zJ_+ podemos escrever facilmente os estados coerentes $|z\rangle$ na base $\{|jm\rangle\}$. O resultado já devidamente normalizado é

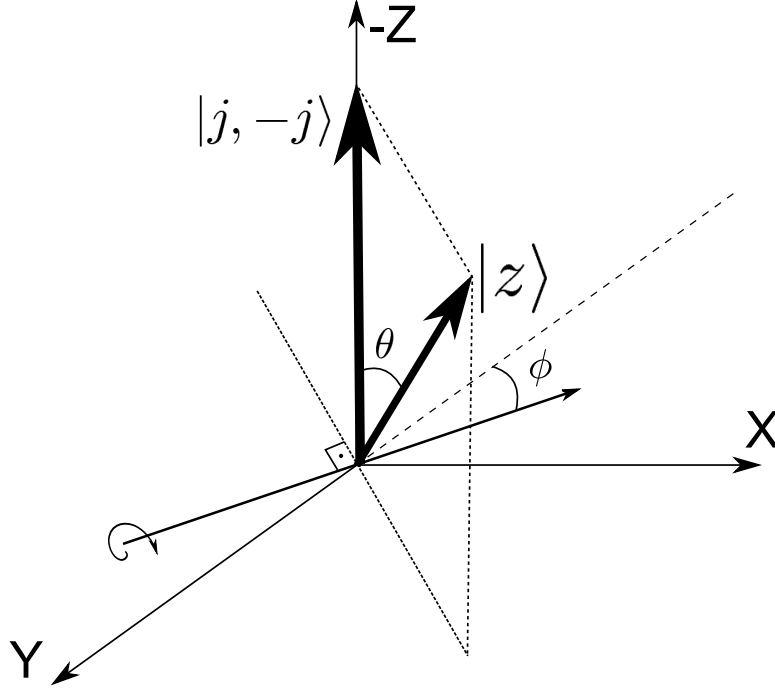


Figura C.1 Estado coerente $|z\rangle$ obtido da rotação de $|j, -j\rangle$ de um ângulo θ em torno de uma direção $\hat{n} = \sin\phi\hat{e}_1 - \cos\phi\hat{e}_2$.

$$\begin{aligned}
 |z\rangle &= \frac{e^{zJ_+}}{(1+|z|^2)^j} |j, -j\rangle \\
 &= \frac{1}{(1+|z|^2)^j} \sum_{m=-j}^j \frac{(zJ_+)^{j+m}}{(j+m)!} |j, -j\rangle \\
 &= \frac{1}{(1+|z|^2)^j} \sum_{m=-j}^j \binom{2j}{j+m}^{1/2} z^{j+m} |jm\rangle
 \end{aligned} \tag{C.5}$$

Os estados coerentes podem ser obtidos de rotações do estado $|j, -j\rangle$ de um ângulo θ em torno da direção $\hat{n} = \sin\phi\hat{e}_1 - \cos\phi\hat{e}_2$. Esta rotação é gerada pelo operador $J_{\hat{n}} \equiv \hat{\vec{J}} \cdot \hat{n} = J_1 \sin\phi - J_2 \cos\phi$. Nesse caso, $|z\rangle$ assume a forma

$$|\theta, \phi\rangle = e^{-iJ_n\theta} |j, -j\rangle = e^{zJ_+ - z^*J_-} |j, -j\rangle, \quad z \equiv \tan(\theta/2) e^{-i\phi} \tag{C.6}$$

Uma característica dos estados coerentes é que não são ortogonais entre si, ou seja $\langle z_1 | z_2 \rangle \neq 0$. Ainda, assim, o conjunto $\{|z\rangle, z \in \mathbb{C}\}$ gera todo o espaço de Hilbert de momentum angular o que é demonstrado pelo fato deles admitirem uma resolução da

identidade.

$$\int_{\mathbb{C}} d\mu(z) |z\rangle\langle z| = \mathbb{I}, \quad (\text{C.7})$$

onde

$$d\mu(z) = \frac{2j+1}{\pi} \frac{d^2 z}{(1+|z|^2)^2}$$

e $d^2 z = d\text{Re}z d\text{Im}z$.

Um estado arbitrário $|\psi\rangle$ pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = \mathbb{I}|\psi\rangle = \int_{\mathbb{C}} d\mu(z) \langle\psi|z\rangle\langle z|.$$

Um operador arbitrário A que atua neste espaço de Hilbert pode ser escrito como

$$A = \mathbb{I}A\mathbb{I} = \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_1) \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_2) |z_1\rangle\langle z_2| \langle z_1|A|z_2\rangle. \quad (\text{C.8})$$

C.2 INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA DE ESTADOS COERENTES DE SPIN

Considere que um sistema de spins seja preparado num estado coerente inicial $|\psi_0\rangle$ em $t = 0$ e que evolua posteriormente de acordo com o seu hamiltoniano $\hat{H}(t)$. Da equação de Schrödinger, a amplitude de probabilidade de que o sistema seja encontrado em um estado $|\psi\rangle$ em um instante posterior t é dada pelo propagador

$$K(\psi, \psi_0; t) = \langle\psi|\mathcal{U}(t)|\psi_0\rangle, \quad (\text{C.9})$$

onde $\mathcal{U}(t)$ é o operador evolução temporal que pode ser escrito na forma geral[83]

$$\mathcal{U}(t) = \mathcal{T} \exp \left(-i \int_0^t \hat{H}(t') dt' \right), \quad (\text{C.10})$$

onde $\mathcal{T}$ é o operador de ordenamento temporal. Utilizando os resultados da seção anterior, podemos expressar $\mathcal{U}(t)$ na base de estados coerentes como

$$\mathcal{U}(t) = \int_{\mathbb{C}} d\mu(z) \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_0) |z\rangle\langle z_0| K[z, z_0; t], \quad (\text{C.11})$$

onde $K[z, z_0; t] = \langle z_2 | \mathcal{U}(t) | z_1 \rangle$ representa a amplitude de probabilidade de que um sistema preparado inicialmente no estado coerente $|z_0\rangle$ seja encontrado em $|z\rangle$ em um instante posterior t . Uma propriedade importante de $\mathcal{U}(t)$ é a lei de composição $\mathcal{U}(t_1 + t_2) = \mathcal{U}(t_1)\mathcal{U}(t_2)$. Com isso, podemos dividir o intervalo $[0, t]$ em um grande número N de pequenos intervalos $\epsilon = t/N$ e escrever

$$K(z, z_0; t) = \langle z | \mathcal{U}(t - t_N) \mathcal{U}(t_N - t_{N-1}) \dots \mathcal{U}(t_2 - t_1) \mathcal{U}(t_1) | z_0 \rangle. \quad (\text{C.12})$$

Inserindo resoluções da identidade $\mathbb{I} = \int_{\mathbb{C}} d\mu(z) |z\rangle\langle z|$ entre os $\mathcal{U}(\epsilon)$, obtemos

$$\begin{aligned} K(z, z_0; t) &= \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_1) \dots \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_N) \prod_{i=1}^N \langle z_i | \mathcal{U}(\epsilon) | z_{i-1} \rangle \\ &\simeq \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_1) \dots \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_N) \prod_{i=1}^N \langle z_i | \left(1 - i\epsilon \hat{H}\right) | z_{i-1} \rangle \\ &\simeq \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_1) \dots \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_N) \prod_{i=1}^N \exp(\ln \langle z_i | z_{i-1} \rangle - i\epsilon H(z_i^*, z_{i-1})) \quad (\text{C.13}) \end{aligned}$$

$$= \left(\prod_{i=1}^N \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_i) \right) e^{i(\mathcal{S}_b + \mathcal{S}_N)} \quad (\text{C.14})$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_b &= -i(\ln \langle z | z_N \rangle + \ln \langle z_1 | z_0 \rangle), \\ \mathcal{S}_N &= -i \sum_{i=2}^N \ln \langle z_i | z_{i-1} \rangle - \epsilon \sum_{i=1}^{N+1} H(z_i^*, z_{i-1}), \end{aligned}$$

e

$$H(z_i^*, z_{i-1}) \equiv \frac{\langle z_i | \hat{H} | z_{i-1} \rangle}{\langle z_i | z_{i-1} \rangle}.$$

No formalismo de integrais de trajetória, a amplitude de probabilidade $K(z, z_0; t)$ corresponde à soma de todas as possíveis “trajetórias” que o sistema pode seguir para ir de $|z_0\rangle$ para $|z\rangle$ passando pelos z'_i s intermediários, conforme mostra a figura C.2.

Para finalizar, precisamos tomar o limite do contínuo $N \rightarrow \infty$ ou $\epsilon \rightarrow 0$. Para isso, precisamos assumir que $\delta_i \equiv z_i - z_{i-1} \sim \mathcal{O}(\epsilon)$. Utilizando as expressões já obtidas para $|z\rangle$ e expandindo os termos em $\ln \langle z_i | z_{i-1} \rangle$ até ordem $\mathcal{O}(\delta_i)$ somente, obtemos que

$$K(z, z_0; t) = \int_{z(0)=z_0}^{z^*(t)=z^*} \mathcal{D}\mu(z) e^{i\mathcal{S}[z^*, z] + \mathcal{S}_b[z^*, z_0; z(t), z^*(0)]}, \quad (\text{C.15})$$

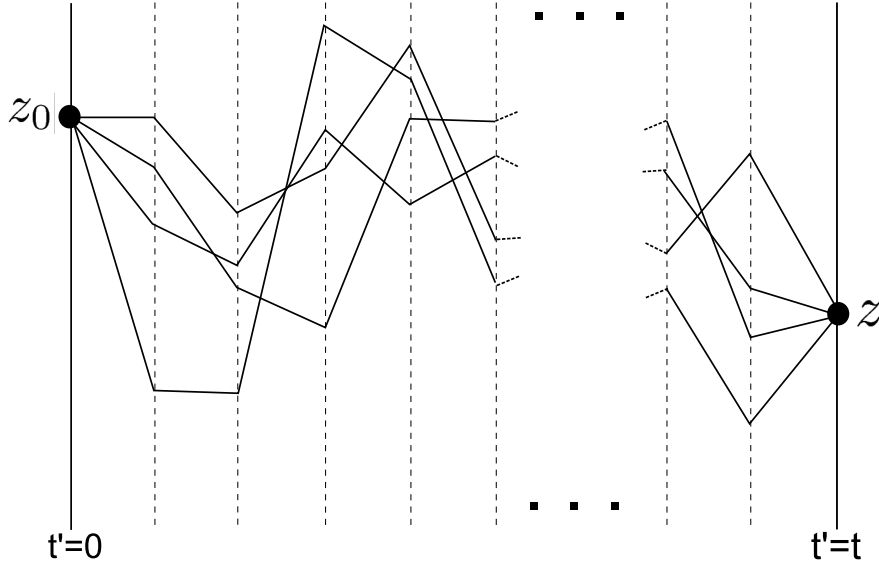


Figura C.2 Alguns possíveis caminhos seguidos pelo sistema para ir de $|z_0\rangle$ a $|z\rangle$. As linhas pontilhadas correspondem às sucessivas integrações no plano complexo dos z'_i s intermediários.

onde

$$\mathcal{S}[z^*, z] = -ij \int_0^t d\tau \frac{\dot{z}^* z - z^* \dot{z}}{1 + |z|^2} - \int_0^t d\tau H(z^*, z),$$

$$\mathcal{S}_b = j \ln \left[\frac{(1 + z^* z(t)) (1 + z^*(0) z_0)}{(1 + |z|^2) (1 + |z_0|^2)} \right].$$

C.3 APROXIMAÇÃO SEMICLÁSSICA

Este formalismo torna rapidamente acessível uma aproximação semiclássica do problema, cujas equações de movimento para $z(t)$ são obtidas a partir de

$$\delta(i\mathcal{S} + \mathcal{S}_b) = 0, \quad (\text{C.16})$$

onde a variação δ corresponde à diferença entre os valores em $[z^* + \delta z^*, z + \delta z]$ e $[z^*, z]$. Realizando este cálculo, obtemos que

$$\begin{aligned} \delta \left(-ij \int_0^t d\tau \frac{\dot{z}^* z - z^* \dot{z}}{1 + z^* z} \right) &= ij \left(\frac{z^* \delta z(t)}{1 + z(t) z^*} + \frac{z_0 \delta z^*(0)}{1 + z_0 z^*(0)} \right) \\ &- ij \int_0^t d\tau \left(\frac{2\dot{z}^*}{(1 + z z^*)^2} \delta z(\tau) - \frac{2\dot{z}}{(1 + z z^*)^2} \delta z^*(\tau) \right) \end{aligned} \quad (\text{C.17})$$

$$\delta \left(- \int_0^t d\tau H(z^*, z) \right) = - \int_0^t \left[\frac{\partial H}{\partial z} \delta z(\tau) + \frac{\partial H}{\partial z^*} \delta z^*(\tau) \right] \quad (\text{C.18})$$

e

$$\delta \mathcal{S}_b = j \left(\frac{z^* \delta z(t)}{1 + z^* z(t)} + \frac{z_0 \delta z^*(0)}{1 + z_0 z^*(0)} \right). \quad (\text{C.19})$$

Combinando estes resultados, obtemos a seguinte expressão

$$\delta(i\mathcal{S} + \mathcal{S}_b) = \int_0^t d\tau \left[\left(\frac{2j\dot{z}^*}{(1 + z z^*)^2} - i \frac{\partial H}{\partial z} \right) \delta z - \left(\frac{2j\dot{z}}{(1 + z z^*)^2} + i \frac{\partial H}{\partial z^*} \right) \delta z^* \right]. \quad (\text{C.20})$$

Igualando esta expressão a zero e considerando que δz e δz^* são arbitrárias, chegamos às equações de movimento

$$\dot{z} = -i \frac{(1 + |z|^2)^2}{2j} \frac{\partial H}{\partial z^*} \quad (\text{C.21})$$

$$\dot{z}^* = i \frac{(1 + |z|^2)^2}{2j} \frac{\partial H}{\partial z}, \quad (\text{C.22})$$

que são as equações de Hamilton de movimento, que devem ser resolvidas com as condições de contorno $z^*(t) = z^*$ e $z(0) = z_0$.

Como uma aplicação simples deste resultado, utilizamos o problema de um spin na presença de um campo magnético uniforme com o hamiltoniano

$$H = \omega J_3 \rightarrow H(z^*, z) = -j\omega \frac{1 - z^* z}{1 + z^* z} \quad (\text{C.23})$$

As equações de movimento na aproximação semiclássica são, portanto,

$$\dot{z} = -i\omega z \quad \text{e} \quad \dot{z}^* = i\omega z^*. \quad (\text{C.24})$$

Considerando as condições de contorno $z(0) = z_0$ e $z^*(t) = z^*$, obtemos a seguinte solução

$$z(\tau) = z_0 e^{-i\omega\tau} \quad \text{e} \quad z^*(\tau) = z^* e^{i\omega(\tau-t)}. \quad (\text{C.25})$$

Substituindo nas expressões para $\mathcal{S}$ e $\mathcal{S}_b$, obtemos

$$i\mathcal{S} + \mathcal{S}_b = ij\omega t + 2j \ln(1 + z^* z_0 e^{-i\omega t}) - j \ln(1 + |z|^2)(1 + |z_0|^2), \quad (\text{C.26})$$

resultando no propagador

$$K(z^*, z_0; t) = \frac{e^{ij\omega t} (1 + z^* z_0 e^{-i\omega t})^{2j}}{(1 + |z|^2)^j (1 + |z_0|^2)^j}. \quad (\text{C.27})$$

Este resultado coincide com a expressão exata para o propagador que pode ser obtido diretamente utilizando o propagador $\mathcal{U} = \exp(-iHt)$ que assume esta expressão simples por se tratar de um hamiltoniano independente do tempo. Esta coincidência entre o resultado semiclássico e o resultado exato é denominada *localização equivariante*.

C.4 EMARANHAMENTO EM INTEGRAIS DE TRAJETÓRIA DE ESTADOS COERENTES DE SPIN

Nesta seção, utilizamos o método de integrais de trajetória de estados coerentes para analisar o emaranhamento do estado fundamental em uma cadeia de spins entre um bloco de spins contíguos e o restante da cadeia. O resultado para o modelo XY foi apresentado no Capítulo 2. Em primeiro lugar, é necessário generalizarmos os resultados da seção anterior para um conjunto de L spins $j = 1/2$. Nesse caso, a resolução da identidade é dada por

$$\int_{\mathbb{C}} d\mu(z_1) \dots \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_L) |z_1, \dots, z_L\rangle \langle z_1, \dots, z_L| = \mathbb{I}. \quad (\text{C.28})$$

Considerando o caso em que o sistema está em contato com um banho térmico, seu estado é descrito pela matriz densidade $\rho = \exp(-\beta \hat{H})/Z$, onde $Z = \text{Tr} \exp(-\beta \hat{H})$. Para construirmos o estado térmico, utilizamos integrais de trajetória em tempo imaginário $t = -i\tau$ no intervalo $\tau \in [0, \beta]$. Com isso, a função de partição fica na forma

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \mathcal{U}(\beta, 0) = \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_1) \dots \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_L) \langle z_1, \dots, z_L | \mathcal{U}(\beta, 0) | z_1, \dots, z_L \rangle \\ &= \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_1) \dots \int_{\mathbb{C}} d\mu(z_L) \oint \mathcal{D}\mu(z_1) \dots \oint \mathcal{D}\mu(z_L) e^{-\mathcal{S}[z_1^*, \dots, z_L^*, z_1, \dots, z_L]}. \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

Estamos interessados na entropia de von Neumann da matriz reduzida do bloco de l spins contíguos ρ_A obtida do traço parcial sobre os spins restantes. Sem perda de generalidade, consideramos os l primeiros spins como o bloco de interesse. Nesse caso, a matriz reduzida é obtida através da integração apenas sobre os spins restantes, ou seja

$$\rho_A = \frac{1}{Z} \int_{\mathfrak{c}} d\mu(z_{l+1}) \dots \int_{\mathfrak{c}} d\mu(z_L) \langle z_{l+1}, \dots, z_L | \mathcal{U}(\beta, 0) | z_{l+1}, \dots, z_L \rangle. \quad (\text{C.30})$$

Em princípio poderíamos calcular $S_A = -\text{Tr} \rho_A \log \rho_A$ utilizando diretamente este resultado. Entretanto, existe uma maneira engenhosa[55] de calcular a entropia utilizando uma versão do “truque das réplicas” onde se calcula ρ_A^n para um número n de cópias do sistema e obtém-se a entropia S_A através de

$$S_A = -\text{Tr} \rho_A \log \rho_A = -\left. \frac{\partial}{\partial n} \text{Tr} \rho_A^n \right|_{n=1}, \quad (\text{C.31})$$

onde se assume a validade de uma continuação analítica para n real. Como já vimos, o traço é obtido fazendo os limites de integração iguais, ou seja $z \{\tau = 0\} = z \{\tau = \beta\}$ e integrando sobre z no plano complexo. O traço sobre n cópias é feito da seguinte forma: Para cada i -ésima cópia adicionada, utilizamos $z^{i+1} \{\tau = 0\} = z^i \{\tau = \beta\}$ e, assim, quando n cópias são inseridas, fazemos $z \{\tau = 0\} = z \{\tau = n\beta\}$ e integramos sobre z . A expressão final na forma de integral funcional fica

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho_A^n &= \frac{1}{Z^n} \int_{\mathfrak{c}} d\mu(z_1) \dots \int_{\mathfrak{c}} d\mu(z_l) \left[\int_{\mathfrak{c}} d\mu(z_{l+1}) \dots \int_{\mathfrak{c}} d\mu(z_L) \right]^n \\ &\oint_{0, n\beta} \mathcal{D}\mu(z_1) \dots \oint \mathcal{D}\mu(z_l) \left(\oint_{0, \beta} \mathcal{D}\mu(z_{l+1}) \dots \oint \mathcal{D}\mu(z_L) \right)^n e^{-\sum_{i=1}^n \mathcal{S}_i} \end{aligned} \quad (\text{C.32})$$

A integral acima é, sem dúvida, difícil de tratar analiticamente na maioria dos casos. Entretanto, a vantagem do formalismo de integrais de trajetória aparece na aplicação de esquemas eficientes de aproximação. A entropia no estado fundamental $\beta \rightarrow \infty$ em um ponto crítico quântico, por exemplo, pode ser obtido utilizando métodos de teoria de campo conforme para fazer um mapeamento de $\text{Tr} \rho_A^n$ em altas temperaturas[55], que pode ser calculado com boa aproximação, para o resultado no estado fundamental.

No limite de altas temperaturas, o efeito de descoerência devido ao banho térmico fazem com que a entropia tenda para o resultado clássico. Para ver isso explicitamente,

assumimos que neste limite operadores de evolução temporal fatoram nas partes referentes aos subsistemas A e B . Assim, utilizando $\mathcal{U}(i\beta, (i-1)\beta)$ para a i -ésima cópia, temos que ρ_A^n assume a forma

$$\begin{aligned} \text{Tr} \rho_A^n &= \frac{1}{Z^n} \text{Tr} \left(\prod_{i=1}^n \int_{\mathfrak{C}} d\mu(z_{l+1}) \dots \int_{\mathfrak{C}} d\mu(z_L) \right) \\ &\quad \langle z_{l+1}^{(i)}, \dots, z_L^{(i)} | \mathcal{U}_B(i\beta, (i-1)\beta) | z_{l+1}^{(i)}, \dots, z_L^{(i)} \rangle \mathcal{U}_A(i\beta, (i-1)\beta) \\ &= \frac{Z_1^n(L-l, \beta)}{Z^n} \text{Tr} \mathcal{U}_A(n\beta, 0). \end{aligned} \quad (\text{C.33})$$

Mas $\text{Tr} \mathcal{U}_A$ é justamente a função de partição $Z_1(l, n\beta)$ associada à região A mas com um parâmetro de temperatura $n\beta$. A mesma hipótese de separabilidade em altas temperaturas pode ser aplicada a Z^n , donde obtemos $Z^n = Z_1^n(l, \beta) Z_1^n(L-l, \beta)$. Temos portanto que

$$\text{Tr} \rho_A^n \sim \frac{Z_1(l, n\beta)}{Z_1^n(l, \beta)} \sim \frac{e^{-n\beta F_A(n\beta)}}{e^{-n\beta F_A(\beta)}}, \quad (\text{C.34})$$

onde F_A é a energia livre de Helmholtz para o subsistema A . Assim, diferenciando $\text{Tr} \rho_A^n$ em relação a n e fazendo $n = 1$, obtemos a entropia de von Neumann

$$S_A = \beta^2 \frac{\partial F_A}{\partial \beta} = \beta (E_A - F_A),$$

onde E_A é o valor esperado da energia referente ao bloco A . Este resultado corresponde à entropia termodinâmica clássica, como esperado neste limite. Como estamos no limite de altas temperaturas, o estado do sistema não é um estado puro e, portanto, a entropia não quantifica o emaranhamento entre o bloco e o restante da cadeia. Na verdade, trata-se do emaranhamento entre o bloco A e o banho térmico.

Considerando que o sistema está em um ponto crítico com expoente crítico dinâmico $z = 1$, temos uma relação de dispersão $\omega = |k|$ para cada modo sem gap. Como estamos utilizando $\hbar = 1$, temos $E = |k|$. A energia livre de Helmholtz pode então ser obtida

$$F_A = -\beta^{-1} \int_0^\infty dE \mathcal{D}(E) \ln(1 - e^{-\beta E}) = -\frac{c\pi l}{6\beta^2}, \quad (\text{C.35})$$

onde c é o número de espécies de bósons livres e $\mathcal{D}(E)$ é a densidade de estados. Aplicando este resultado à equação C.34, obtemos

$$\text{Tr} \rho_A^n \sim e^{-\frac{\pi c}{6\beta} (n - \frac{1}{n}) l}. \quad (\text{C.36})$$

Agora, para obtermos o resultado para o estado fundamental $\beta \rightarrow \infty$, utiliza-se o mapeamento conforme $l \rightarrow \frac{\beta}{2\pi} \log l$, o que nos leva à expressão

$$\text{Tr} \rho_A^n \sim l^{-\frac{c}{12}(n-1/n)} \Rightarrow S_A \sim \frac{c}{6} \log l, \quad (\text{C.37})$$

onde a constante $c/6$ equivale ao resultado para o problema com condições de contorno abertas [85]. Se considerarmos condições de contorno fechadas, teremos um fator 2 e o coeficiente passa a ser $c/3$. Esta dependência logarítmica com o tamanho l do bloco foi obtida pela primeira vez utilizando técnicas de teoria de campo conforme [84], onde a constante c é a carga central da teoria e, posteriormente, foi obtida especificamente para o modelo XY utilizando métodos de segunda quantização [41, 42]. É importante notarmos que, durante os cálculos, não foi feita nenhuma especificação do hamiltoniano do sistema. Trata-se de propriedades universais do emaranhamento em pontos críticos que podem ser capturadas nesse formalismo e que talvez não fosse possível utilizando o formalismo canônico. Estes resultados mostram o caráter promissor da utilização do formalismo de integrais de trajetória no estudo do emaranhamento em sistemas de interesse em física da matéria condensada.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] G. Auletta, *Foundations and Interpretation of Quantum Mechanics*, World Scientific (2001).
- [2] A. Einstein, B. Podolsky e N. Rosen, Phys. Rev. **47**, 777 (1935).
- [3] Naturwissenschaften **23**, 807-821; 823-828; 844-849 (1935).
- [4] J. S. Bell, Physics **1**, 195 (1964).
- [5] A. Aspect, P. Grangier e G. Roger, Phys. Rev. Letters. **47**, 460 (1981).
- [6] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press, New York (2000).
- [7] C. H. Bennett e D. P. DiVincenzo, Nature **404**, 247 (2000).
- [8] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Chepeau, R. Jozsa, A. Peres e W. K. Wothers, Physical Review Letters **70**, 1895 (1993).
- [9] P. W. Shor, SIAM Journal on Computing **26**, 5 (1997).
- [10] L. K. Grover, A fast quantum mechanical algorithm for database search. In *Proceedings of the twenty-eight annual ACM symposium on Theory of Computing*, pages 212-219. ACM, New York, USA, 1996.
- [11] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, and K. Horodecki, arXiv:quant-ph/0702225v1.
- [12] I. Bengtsson, K. Życzkowski, *Geometry of Quantum States*, Cambridge University Press, New York (2006).
- [13] C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin e W.K. Wothers, Phys. Rev. A **54**, 3824 (1996).
- [14] W. K. Wothers, Phys. Rev. Lett. **80**, 2245 (1998); arXiv:quant-ph/9709029v1.

- [15] G. Vidal e R. F. Werner Phys. Rev. A **65**, 032314 (2002).
- [16] P. Rungta, V. Bužek, C. M. Caves, M. Hillery, G. J. Milburn e W. K. Wootters, Phys. Rev. A **64**, 042315 (2001).
- [17] F. Mintert, Ph.D. thesis, Ludwig-Maximilians Universität München, München 2004, <http://edoc.ub.uni-muenchen.de/archive/00002133>.
- [18] F. Mintert, M. Kuš e A. Buchleitner. Phys. Rev. Lett. **92**, 167902 (2004).
- [19] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh e V. Vedral, arXiv:quant-ph/0703044v1.
- [20] A. Imamoglu, D. D. Awschalom, G. Burkard, D. P. DiVincenzo, D. Loss, M. Sherwin e A. Small, Phys. Rev. Lett. **83**, 4204 (1999).
- [21] C. Veronica, W. A. Coish, O. Gywat e D. Loss, Nanotechnology **16**:R27 (2005).
- [22] J. I. Cirac e P. Zoller, Nature **404**, 579 (2000).
- [23] B. E. Kane, Nature **393**, 133 (1998).
- [24] M. A. Nielsen, PhD Thesis, University of New Mexico, New Mexico, USA(1998). arXiv:quant-ph/0011036v1.
- [25] G. L. Kamta e A. F. Starace, Phys. Rev. Lett. **88**, 10 (2002).
- [26] X. Wang, Phys. Rev. A **64**, 012313 (2001).
- [27] F. B. M. dos Santos, R. M. Dias e A. M. S. Macedo Phys. Rev. A **79**,032329 (2009).
- [28] X. Wang, H. Fu e A. I. Solomon, arXiv:quantum-ph/0105075.
- [29] C. Min e Z. Shi-Qun Chin. Phys. Lett. **23**, 2888 (2006).
- [30] M. C. Arnesen, S. Bose e V. Vedral. Phys. Rev. Lett. **87**,17901 (2001).
- [31] S.-J. Gu, H. Li, Y.-Q Li e H.-Q. Lin, Phys. Rev. A **70**, 052302 (2004).
- [32] B. V. Fine, F. Mintert e A. Buchleitner, Phys. Rev. B **71**, 153105 (2005).
- [33] D. Braun, Phys. Rev. Letters **89**, 277901 (2002).
- [34] L. Jakóbczyk, J. Phys. A: Math. Gen. **35**, 6383 (2002).
- [35] F. Benatti, R. Floreanini e Marco Piani, Phys. Rev. Letters **91**, 070402 (2003).

- [36] Z. Ficek e R. Tanaś, Phys. Rev. A, **74**, 024304 (2006).
- [37] S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions*, Cambridge Univ. Press. (2000).
- [38] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci e R. Fazio, Nature **416**, 608 (2002).
- [39] T. J. Osborne, M. A. Nielsen, Phys. Rev. A **66**, 032110 (2002).
- [40] F. Baroni, A. Fubini, V. Tognetti e P. Verruchi, J. Phys. A: Math. Theor. **40**, 9845 (2007).
- [41] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico e A. Kitaev, Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003).
- [42] J. I. Latorre, R. Rico e G. Vidal. Quant. Inf. Comput. **4**, 48 (2004).
- [43] J. P. Keating e F. Mezzadri. Commun. Math. Phys, **252**, 543 (2004).
- [44] B.-Q. Jin e V. E. Korepin. J. Stat. Phys. **116**, 79 (2004).
- [45] A. Fubini, T. Roscilde, V. Tognetti, M. Tusa e P. Verruchi, Eur. Phys. J. D. **38**, 563 (2006).
- [46] L. Amico, F. Baroni, A. Fubini, D. Patanè, V. Tognetti e P. Verruchi. Phys. Rev. A **74**, 022322 (2006).
- [47] T. Roscilde, P. Verrucchi, A. Fubini, S. Haas e V. Tognetti, Phys. Rev. Letters **94**, 147208 (2005).
- [48] N. Meshkov, A. J. Glick e H. J. Lipkin, Nucl. Phys. **62**, 199 (1965).
- [49] J. Vidal, G. Palacios e R. Mosseri, Phys. Rev. A **69**, 022107 (2004).
- [50] J. I. Latorre, R. Orús, Enrique Rico e J. Vidal, Phys. Rev. A **71**, 064101 (2005).
- [51] S. Dusuel e J. Vidal, Phys. Rev. B **71**, 224420 (2005).
- [52] X.-G. Wen, Quantum Field Theory of Many-Body Systems, Oxford University Press, (2004).
- [53] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial Markets*, World Scientific (2004).
- [54] W-M. Zhang, D. H. Feng e R. Gilmore, Reviews of Modern Physics **62**, 4 (1990).

- [55] J. L. Cardy, Eur. Phys. J. B **64**, 321 (2008).
- [56] J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony e R. A. Holt, Phys. Rev. Letters **23**, 880 (1969).
- [57] R. F. Werner, Phys. Rev. A **40**, 4277 (1989).
- [58] R. F. Werner e M. M. Wolf, *Bell inequalities and entanglement*, pre-print arXiv:quant-ph/0107093 (2001).
- [59] T. M. Cover e J. A. Thomas, *Elements of Information Theory*, John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey (2006).
- [60] A. Uhlmann, Phys. Rev. A **62**, 032307 (2000).
- [61] A. Peres, Physical Review Letters **77**, 1413 (1996).
- [62] M. Horodecki e R. Horodecki, Physics Letters A **223**, 1 (1996).
- [63] D. A. Meyer e N. R. Wallach, J. Math. Phys **43**, 4273 (2002).
- [64] V. Coffman, J. Kundu e W. K. Wothers, Phys. Rev. A **61**, 052306 (2000).
- [65] T. J. Osborne e F. Verstraete, Phys. Rev. Letters **96**, 220503 (2006).
- [66] A. P. Hines e P. C. E. Stamp, Phys. Rev. A **75**, 062321 (2007).
- [67] J. Kempe, Contemp. Phys. **44**, 307 (2003).
- [68] N. Shenvi, J. Kempe e K. B. Whaley, Phys. Rev. A **67**, 052307 (2003).
- [69] E. Farhi e S. Guttman, Phys. Rev. A **58**, 915 (1998).
- [70] S. Katsura, Physical Review **127**, 1508 (1962).
- [71] E. Barouch e B. M. McCoy, Phys. Rev. A **3**, 786 (1971).
- [72] P. M. Chaikin e T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics*, Cambridge (1995).
- [73] N. Goldenfeld, *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*, Addison Wesley (1992).
- [74] R. B. Laughlin, Phys. Rev. Lett. **50**, 1395

- [75] X.-G. Wen, Phys. Rev. Lett. **90**, 016803 (2003).
- [76] Z. Xiao-Yue e T. Pei-Qing, Chin. Phys. Lett. **24**, 9 (2007).
- [77] J. Kurmann, H. Thomas e G. Müller, Physica A **112**, 235 (1982).
- [78] R. Ruskov e A. N. Korotkov, Phys. Rev. B **67**, 241305(R) (2003).
- [79] K. Wu, B. Zhou e W. Cao, Physics Letters A **362**, 381 (2007).
- [80] A. Hutton e S. Bose, quant-ph/0408077.
- [81] A. Hutton e S. Bose, Phys. Rev. A **66**, 032320 (2002).
- [82] R. J. Glauber, Phys. Rev. Lett. **10**, 277 (1963) ; R. J. Glauber, Phys. Rev. **130**, 2529 (1963); R. J. Glauber Phys. Rev. **131**, 2766 (1963).
- [83] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, Addison Wesley, Reading, 1994.
- [84] C. Holzhey, F. Larsen e F. Wilczek, Nucl. Phys. B **424**, 443(1994).
- [85] F. C. Alcaraz, V. Rittenberg e G. Sierra Phys. Rev. B **80**, 030102 (R) (2009).
- [86] S. P. Walborn, P. H. S. Ribeiro, L. Davidovich, F. Mintert e A. Buchleitner, Nature **440**, 1022 (2006).
- [87] A.O. Caldeira e A.J. Leggett, Physica A **121**, 587 (1983).
- [88] N. V. Prokof'ev e P. C. E. Stamp, arXiv: cond-mat 0001080 (2000).