

UNIVERSIDADE FEDERAL DE GOIÁS

INSTITUTO DE FÍSICA

**CORRELAÇÕES QUÂNTICAS
EM SISTEMAS CRÍTICOS**

Andesson Brito Nascimento

GOIÂNIA

Julho de 2015

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**CORRELAÇÕES QUÂNTICAS
EM SISTEMAS CRÍTICOS**

Por

Andesson Brito Nascimento

Dissertação submetida ao Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Física.

ORIENTADOR: Prof. Dr. Lucas Chibebe Céleri

GOIÂNIA

Julho de 2015

Agradecimentos

Gostaria de expressar meus mais sinceros agradecimentos a todos aqueles que, de uma forma ou de outra, contribuíram para a realização deste Trabalho. Agradeço primeiramente a minha mãe, Sandra, a meu pai, Antonio, a e meu irmão, Andrey, e a meu avô, Henrique, pelo apoio incondicional e moral para continuar nessa jornada. À tios, tias e primos(as) deixo meus sinceros agradecimentos.

Ao Prof. Dr. Lucas Chibebe Céleri pela orientação, estímulo, apoio e paciência durante a realização desse trabalho. Aos professores, Prof. Dr. Agnaldo Rosa de Almeida e Prof. Dr. Norton Gomes de Almeida pela disposição em participar da banca examinadora.

Aos amigos que estiveram sempre do meu lado nos momentos felizes e principalmente nos tristes que se passaram durante esse período: Karen, Fracy, Andrés, Naiana e Pedro.

Aos amigos do Instituto de Física da UFG pela colaboração na realização desse trabalho, em especial à Thiago pelas contribuições na realização do trabalho e aos moradores da sala 223 "O cortiço", pela convivência harmoniosa.

Ao Programa de Pós-Graduação do IF-UFG e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo financiamento dessa pesquisa.

Conteúdo

Lista de Figuras	iii
1 Introdução	1
2 Correlações quânticas	6
2.1 Emaranhamento	15
2.1.1 Desigualdades de Bell	17
2.1.2 Transposição parcial positiva	20
2.1.3 Medidas de emaranhamento	21
2.2 Discórdia quântica	25
2.2.1 Propriedades de Discórdia Quântica	26
2.3 Incerteza quântica local	29
2.3.1 Propriedades da LQU	30
2.3.2 Formas fechadas	33
3 Transição quântica de fase	35
3.1 Transição de fase	35
3.1.1 Transição de fase clássica	36
3.1.2 Transição quântica de fase	38
3.2 Modelos para cadeias de spins	45
3.2.1 Cadeia de spin XYT	46
3.2.2 Cadeia de spin XY	50
3.2.3 Cadeia de spin-1	52
4 Correlações quânticas e cadeias de spins	56
4.1 Modelo XY	56
4.1.1 Emaranhamento	57

4.1.2	LQU	60
4.2	Modelo XYT	64
4.2.1	LQU	65
4.3	Spin 1	71
4.3.1	Emaranhamento	71
4.3.2	LQU	76
5	Conclusões e Perspectivas	82
	Bibliografia	85

Lista de Figuras

2.1	Diagrama de Venn para um sistema de duas variáveis aleatórias correlacionadas.	11
3.1	Diagrama de fase de um fluido simples.	37
3.2	Cruzamento entre os níveis de energia fundamental e excitado no ponto $g = g_c$ [10].	39
3.3	Aproximação dos valores de energia dos estados fundamental e excitados no ponto $g = g_c$ [10].	39
3.4	O ponto crítico existe apenas para temperatura nula [10].	42
3.5	Linha de transição de fase à temperatura não-nula terminando no ponto crítico [10].	43
3.6	Diagrama de fase nas vizinhanças do ponto crítico [10].	44
3.7	Representação esquemática da cadeia XYT [5].	46
3.8	Diagrama de fase para o modelo XYT [60].	50
4.1	Emaranhamento, considerando os primeiros vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY, para temperatura $T = 0$	58
4.2	Emaranhamento, considerando os segundos vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY, para temperatura $T = 0$	59
4.3	Emaranhamento, considerando os terceiros vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY, para temperatura $T = 0$	59
4.4	Emaranhamento, considerando os quartos vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY, para temperatura $T = 0$	60
4.5	Incerteza quântica local, considerando os primeiros vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY, para temperatura $T = 0$	61
4.6	Incerteza quântica local, considerando os segundos vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY, para temperatura $T = 0$	62

4.7	Incerteza quântica local, considerando os terceiros vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$	62
4.8	Incerteza quântica local, considerando os quartos vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$	63
4.9	LQU considerando os primeiros vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 2000$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$	66
4.10	Diagrama de fase para o modelo XYT [60].	66
4.11	LQU considerando os segundos vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 2000$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$	67
4.12	LQU considerando os terceiros vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 2000$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$	67
4.13	LQU considerando os quartos vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 2000$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$	68
4.14	LQU considerando os primeiros vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 100$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$	69
4.15	Variação do emaranhamento com o campo magnético e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$	72
4.16	Variação do emaranhamento com o campo magnético para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$ e $T = 0.01$	73
4.17	Variação do emaranhamento com campo magnético para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$ e $T = 0.1$	73
4.18	Variação do emaranhamento com o campo magnético para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$ e $T = 0.3$	74
4.19	Variação do emaranhamento com o campo e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 5$	74
4.20	Variação do emaranhamento com o campo e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 10$	75
4.21	Variação do emaranhamento com o campo magnético e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 0.01$	76
4.22	Variação da LQU com a constante de troca J e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $B = 0$	77
4.23	Variação da LQU com a constante de troca J e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $B = 0.5$	78

4.24	Varição da LQU com a constante de troca J e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $B = 1$	78
4.25	Varição da LQU como função de B e T para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$	79
4.26	Varição da LQU como função de B e T para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 5$	80
4.27	Varição da LQU como função de B e T para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 10$	81

Resumo

As correlações são onipresentes na natureza e têm desempenhado um papel extremamente importante na vida humana por um longo tempo. Por exemplo, na economia correlações entre oferta e demanda são extremamente importantes para um homem de negócios (ou mesmo para um governo) tomar decisões à respeito de sua política de investimento. No campo da biologia, correlações genéticas são fundamentais para seguirmos características individuais. A relação entre distribuição de renda e taxa de criminalidade é apenas um dos exemplos vindos das Ciências Sociais. De um modo geral, a correlação é uma quantidade que descreve o grau de relação entre duas variáveis. No domínio clássico, essa quantidade pode ser medida no âmbito da teoria da informação, desenvolvida por Shannon em 1948. Focando no assunto do presente trabalho, a discussão sobre a natureza quântica das correlações permeia a física desde que Einstein, Podolski e Rosen publicaram seu famoso artigo criticando a mecânica quântica. Desde então, as chamadas correlações quânticas têm se mostrado uma ferramenta muito importante no estudo da Física de muitos corpos.

Outra característica da Física de muitos corpos é que certos sistemas, em certas condições, exibem o que chamamos de transição de fase quântica. Tais transições são análogas às transições clássicas, mas sendo governadas por flutuações de natureza puramente quântica, podendo ocorrer à temperatura zero, ao contrário das primeiras, que são guiadas por flutuações térmicas. Um dos principais fenômenos que caracterizam estas transições é o fato de que o comprimento de correlação (definido entre dois subsistemas do sistema global) torna-se de longo alcance no ponto de transição. Isso significa que tais subsistemas podem estar fortemente correlacionados mesmo estando separados por uma grande distância.

O objetivo deste trabalho é o estudo de correlações quânticas, mais especificamente do emaranhamento e da incerteza local quântica (LQU), em cadeias de spin que apresentem uma ou mais transições quânticas de fase. Especificamente, estudamos três modelos de cadeias de spin: Os modelos XY e XYT , que são cadeias formadas por spins-1/2, sendo

que o segundo considera interação entre três spins enquanto o primeiro somente entre pares; um modelo formado por partículas bosônicas de spin-1. Como conclusão geral, temos que as correlações quânticas fornecem uma ferramenta muito boa para o estudo de fenômenos críticos, oferecendo, entre outros, um meio de identificarmos uma transição quântica de fase.

Abstract

Correlations are ubiquitous in nature and have played an extremely important role in human life for a long time. For example, in economy, correlations between price and demand are extremely important for a businessman (or even a government) to make decisions regarding their investment policy. In the field of biology, genetic correlations are central to follow individual characteristics. The relationship between income distribution and crime rate is just one example coming from the social sciences. Mathematically, correlation is a number that describes the degree of relationship between two variables. In the classical domain, this number can be computed in the context of information theory, developed by Shannon in 1948. Focusing on the subject of the present work, the discussion regarding the quantum nature of the correlations permeates physics since Einstein, Podolski and Rosen published their famous article criticizing quantum mechanics. Since then, the so-called quantum correlations have been shown to be a very important tool in the study of many-bodies physics.

Another feature of many-body physics is that certain systems, under certain conditions, exhibit what we call quantum phase transition. Such transitions are analogous to the classical transitions, but being governed by purely quantum fluctuations and, as such, may occur at zero temperature, unlike the former, which are guided by thermal fluctuations. One of the main phenomenon that characterizes these transitions is the fact that the correlation length (defined between two subsystems of the global system) highly increases at the transition point. This means that such subsystems can be strongly correlated even if they are separated by a large distance.

The main goal of the present work is the study of quantum correlations, specifically the entanglement and the local quantum uncertainty (LQU), in systems presenting one or more quantum phase transitions. Specifically, we consider three models of spin chains: 1) The XY and the XYT , which describes chains of spins- $1/2$ —the second considering three spins interaction while the first one takes into account only pairwise interactions; 2) A model

describing a chain formed by bosonic spins, i.e. particles with spin-1. As a general conclusion, quantum correlation provides a very powerful tool for the study of critical phenomena, providing, among other things, a means to identify a quantum phase transition.

Capítulo 1

Introdução

Estudos de modelos quânticos de cadeias de spins tem sido um importante assunto em física de muitos corpos. Estudos teóricos e experimentais tem mostrado, em muitos materiais magnéticos, que elétrons são bem localizados devido à forte repulsão Coulombiana, e cálculos iniciais mostraram que a interação entre elétrons pode ser bem representada por um modelo de Hamiltoniano descrevendo um conjunto de spins interagentes [1].

O primeiro tratamento matemático dado a este tipo de sistema considerou a chamada cadeia de spins de Heisenberg, e foi apresentado por H. Bethe em 1931 [2], em que uma técnica para o cálculo dos autovalores do Hamiltoniano da cadeia foi introduzida. Pouco tempo depois, o estado fundamental de energia foi encontrado por Hulthén [3]. No entanto, o método utilizado por esses autores era limitado e impossibilitava a generalização para cadeias que não fossem unidimensionais. Motivados por essa dificuldade, Lieb e colaboradores [4] propuseram dois novos modelos, denominados XY e Ising quântico, para descrever cadeias de spins mais gerais. Tais modelos são semelhantes ao modelo proposto para a cadeia de Heisenberg, com solução analítica apresentada no próprio trabalho. Esses modelos apresentam interação quântica de troca entre spins vizinhos tomadas aos pares, sendo o primeiro dado por uma cadeia anisotrópica e o segundo por uma cadeia isotrópica. Um modelo considerando interação de troca entre três vizinhos foi proposto na Ref. [5],

sendo denominado de cadeia de spin XYT . Um tratamento mais detalhado destes modelos será fornecido no Capítulo 3.

As cadeias dos modelos XY e XYT são formadas por partículas de spin-1/2 e apresentam diversas aplicações como, por exemplo, em comunicação [6] e computação quântica [7]. Cadeias de partículas bosônicas também são estudadas, como o modelo apresentado em [8,9], onde temos cadeias formadas por átomos de spin-1 situados em redes óticas. Neste trabalho, além das cadeias fermiônicas, também consideraremos um modelo bosônico.

Estudos realizados nesses modelos verificaram a existência de transições quânticas de fase. Um fato importante é que a transição ocorre, em alguns modelos, mesmo quando a temperatura do sistema vai a zero. Transições de fase que ocorrem à temperatura nula são denominadas transições de fase quânticas [10]. Uma característica dessas transições é que no ponto de criticalidade —ponto em que ocorre a transição de fase— ocorre a divergência do comprimento de correlação, grandeza que nos fornece o quão distante dois subsistemas da cadeia podem estar separados enquanto ainda permanecem correlacionados. É importante observar aqui, que o comportamento divergente desse comprimento de correlação não está associado necessariamente ao comportamento das correlações quânticas existentes no sistema [11]. Este comprimento de correlação se refere à função de correlação de dois pontos da rede.

Vários autores abordaram a questão do comportamento das correlações (clássicas e quânticas) em cadeias de spins, dentre os quais mencionamos aqui os trabalhos pioneiros [12, 13] que calcularam o emaranhamento em cadeias descritas pelo modelo de Ising unidimensional, analisando o que ocorre nas proximidades da transição de fase desses modelos. Os autores de [13] também realizaram a análise para o modelo de cadeia XY . Foi observado nesses trabalhos que o emaranhamento entre dois sítios da cadeia atingia um valor máximo nas proximidades do ponto crítico. Outros trabalhos foram realizados com o intuito de estudar correlações quânticas em cadeias de spins, como as referências [14–17] que apresentam estudos do emaranhamento em sistemas críticos e [14, 18, 19] que estudam

o comportamento da discórdia quântica (uma medida de correlações quânticas para além do emaranhamento que será introduzida no próximo capítulo) no modelo da cadeia de spin-1/2 XY . Para o modelo com interação entre 3 spins vizinhos, podemos citar os trabalhos [15,20,21] que realizam uma análise do emaranhamento nesses sistemas e [20] onde são analisadas as propriedades da discórdia quântica no modelo XYT . Para o modelo de cadeia de spin-1, as referências [8,9] apresentam um estudo sobre o emaranhamento em uma cadeia composta por dois átomos de spin-1, sendo que a referência [9] também realiza um estudo sobre a discórdia quântica nesse modelo.

O conceito de correlações quânticas surgiu há aproximadamente 80 anos, quando Schrödinger [22,23] descreve as partículas propostas no artigo de Einstein, Podolsk e Rosen (EPR) [24] como partículas emaranhadas, ou seja, partículas que possuíam correlação de natureza não-clássica e que não podiam ser descritas matematicamente por um vetor de estado separável (para um artigo recente de revisão sobre emaranhamento, vide [25]). No entanto, um tratamento matemático consistente, que permitisse a investigação experimental do problema, só foi apresentado por J. Bell [26] quando este propõe uma série de desigualdades para as correlações estatísticas de um sistema bipartido. Tais relações, conhecidas hoje como desigualdades de Bell, deveriam ser obedecidas por modelos físicos com características locais e realistas (sistemas clássicos). Experimentalmente verificou-se que sistemas emaranhados não respeitavam essas desigualdades, possuindo, portanto, caráter não-local, ou não-realista, ou ambos. Tais conceitos serão apresentados em maiores detalhes no próximo capítulo. Para um artigo de revisão sobre desigualdades de Bell sobre uma perspectiva geométrica veja [27]. Por algum tempo o emaranhamento foi associado com não-localidade e foi tido como sinônimo de correlação quântica, isto é, estados quânticos eram estados emaranhados que violavam uma desigualdade de Bell. Porém, tal situação mudou quando, em 1981, R. Werner [28] mostrou que existiam estados emaranhados que não violavam nenhuma desigualdade de Bell assumindo, portanto, uma característica local (poderia ser descrito por um modelo realista local de variáveis ocultas). Isto significava que

estados emaranhados (não separáveis) poderiam ser descritos por uma teoria clássica de probabilidades, separando os conceitos de emaranhamento e não-localidade.

Uma mudança na ideia de correlação quântica surge quando Ollivier e Zurek [29] apresentam uma medida de correlação baseada na informação mútua entre duas partes de um sistema quântico. Essa quantidade foi nomeada como *discórdia quântica* e poderia estar presente mesmo quando o estado do sistema fosse separável, diferentemente do emaranhamento que é nulo para esses estados, sendo, neste sentido, mais abrangente. É evidente que tal medida deve se reduzir ao emaranhamento para o caso de estados puros. Novamente observamos uma separação entre os tipos de correlações consideradas quânticas. Agora tínhamos estados emaranhados que violavam uma desigualdade de Bell e estados que não violavam e, além disso, tínhamos estados separáveis que continham um novo tipo de correlação quântica, permitidos pelo princípio da superposição. Mais recentemente, na referência [30], foi proposta uma interessante medida de correlação, denominada *incerteza local quântica* (LQU da sigla em inglês), que é baseada na minimização de uma quantidade denominada *skew information* [31,32] que pode ser interpretada como a quantidade de incerteza contida na medida de um observável local sobre um sistema bipartido. Portanto, a LQU pode ser considerada uma medida da correlação quântica em um sistema bipartido devido ao fato de que a existência de incerteza na medida de um observável local (minimizada sobre todos os possíveis) é característica de sistemas que contém correlação quântica [30], pois isso impede que o estado do sistema seja auto-estado de um dos observáveis.

Desde então muitas outras medidas de correlação foram propostas na literatura e estudadas em diversos sistemas e a partir de diferentes pontos de vista, desde puramente informacional até suas relações com termodinâmica e relatividade. Para um artigo de revisão sobre este vasto tópico, vide referência [33]

Neste trabalho, estudaremos correlações quânticas nos modelos de cadeias de spin- $1/2$ XY e XYT anisotrópicas, bem como em um modelo de cadeia bosônica, de spin-1 [8]. Nosso estudo focará no comportamento do emaranhamento e da incerteza quântica local

nesses modelos, analisamos o que ocorre com essas medidas quando nos aproximamos do ponto de criticalidade do sistema. O comportamento da discórdia quântica também será discutido.

Este trabalho está organizado da seguinte maneira: o capítulo 2 apresenta uma breve discussão sobre correlações quânticas, onde apresentaremos o emaranhamento, a discórdia quântica e a incerteza quântica local. No capítulo 3, apresentamos alguns pontos sobre transição de fase clássica, sobre transição de fase quântica, bem como a descrição matemática dos modelos aqui utilizados. No capítulo 4 serão discutidos os comportamentos das correlações introduzidas no capítulo 3 nas vizinhanças de um ponto de transição quântica de fase para os diversos modelos aqui considerados. Por fim, no capítulo 5, expomos as conclusões e perspectivas de trabalhos futuros.

Capítulo 2

Correlações quânticas

As correlações são de extrema importância para o funcionamento e estudo da nossa sociedade, tendo em vista que as utilizamos nas mais diversas áreas do conhecimento humano. No âmbito da Física, correlações surgem como uma quantificação do grau de relação entre duas variáveis aleatórias de um dado sistema. Um sistema físico pode ser constituído de uma ou mais partes, sendo que no segundo caso temos a possibilidade da existência de correlações entre as diversas variáveis de cada uma das diferentes partes, chamadas subsistemas. Quando essa correlação existe, é possível obtermos informação de uma parte do sistema devido ao conhecimento de outra parte. Em outras palavras, do ponto de vista informacional, podemos entender a correlação como a medida do quanto podemos aprender sobre um dado subsistema quando adquirimos informação sobre outro.

Dada esta interpretação (e importância), surge a pergunta: como podemos quantificar a informação de uma determinada variável aleatória?

Uma variável aleatória é definida por um conjunto de possíveis valores que ela pode assumir e por uma distribuição de probabilidades associada a estes valores. Ao conjunto dos possíveis resultados de determinada variável aleatória, damos a denominação de espaço amostral. Estes valores podem resultar, por exemplo, de uma medida que fazemos sobre um sistema quântico. Como sabemos, em geral, o resultado deste processo de medida

é completamente aleatório. Para deixar mais claro, pegaremos como exemplo um dado de seis faces com probabilidade de ocorrência das faces igualmente distribuída (dado justo). Nesse caso, nossa variável aleatória, X , retornará um dos números, x , correspondente à face do dado, a que ficar para cima como usualmente é feito. Portanto, o espaço amostral dessa variável é o conjunto $\mathcal{X} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ e a probabilidade de ocorrência de um desses resultados será $1/6$, definindo, assim, a distribuição uniforme $p(X) = \{1/6, 1/6, 1/6, 1/6, 1/6, 1/6\}$ sobre todos os possíveis valores x que X pode assumir. Matematicamente, definimos, então, a variável aleatória como sendo o par $(\mathcal{X}, p(X))$.

Para fazer a quantificação da informação contida em uma variável aleatória, vamos considerar uma variável X com espaço amostral \mathcal{X} . A probabilidade do resultado x ocorrer será denotada por $p(x)$. A quantidade de informação contida nessa variável é quantificada através da chamada entropia de Shannon [34]:

$$H(X) = - \sum_{x \in \mathcal{X}} p(x) \log_2 p(x). \quad (2.1)$$

Esta importante quantidade foi introduzida, em 1948, por C. Shannon, lançando as bases do que hoje conhecemos como teoria clássica da informação [34]. Estudando como a informação poderia ser transmitida de um local para outro sem ser degradada, Shannon foi capaz de mostrar que essa é a única função matemática que respeita três postulados muito naturais, introduzidos por ele, para uma medida de informação: (i) A informação contida em um evento deve ser função apenas da probabilidade, p , deste evento ocorrer; (ii) A informação contida em eventos independentes deve ser aditiva; (iii) A medida de informação deve ser contínua. O último destes postulados pode ser entendido no sentido de que uma mudança infinitesimal na probabilidade de um evento ocorrer não pode causar uma mudança arbitrariamente grande na informação contida neste evento.

Partindo destes postulados, Shannon foi capaz de mostrar que a informação contida em um evento deve ser quantificada pela seguinte relação

$$I = \log_2 \frac{1}{p}.$$

Note que é natural definirmos a informação com relação ao inverso da probabilidade de um dado evento ocorrer, pois quanto mais raro é o evento, mais informação ele nos fornece ao ocorrer. Desta maneira, $H(X)$ definida na Eq. (2.1), descreve a *informação média* contida em uma dada distribuição de probabilidades, portanto sendo carregada pela variável aleatória associada. Para uma descrição detalhada da teoria de informação clássica indicamos os excelentes livros [35,36], onde também pode ser encontrada a definição de todas as quantidades informacionais (clássicas) utilizadas nesta dissertação.

De posse de uma maneira de quantificar a informação contida em uma variável aleatória, podemos agora nos perguntar como quantificar a *correlação* entre duas (ou mais) variáveis. Para simplificar a discussão, vamos considerar um sistema composto por duas variáveis aleatórias, X e Y , com espaços amostrais \mathcal{X} e \mathcal{Y} , e distribuições de probabilidades para os resultados x e y ocorrerem denotadas por $p(x)$ e $p(y)$, respectivamente. Neste trabalho nos ateremos somente ao caso bipartido, deixando o caso multipartido para futuros estudos. A probabilidade associada à ocorrência do par (x, y) , isto é, a probabilidade conjunta de obtermos os dois resultados, será denotada por $p(x, y)$. Temos duas possibilidades para essas variáveis: quando são independentes, ou seja, o resultado de uma variável está completamente descorrelacionado do resultado da outra (como no caso de dois dados independentes); e quando são dependentes, caso em que as correlações entre as variáveis são não nulas.

Começaremos com o cenário no qual elas são independentes. Neste caso, a probabilidade associada ao resultado conjunto (x, y) pode ser escrita na seguinte forma

$$p(x, y) = p(x)p(y), \quad (2.2)$$

indicando que elas são descorrelacionadas. A entropia conjunta de Shannon, $H(X, Y)$, ou seja, a entropia associada a essas duas variáveis, toma então a forma

$$H(X, Y) = - \sum_{x \in \mathcal{X}, y \in \mathcal{Y}} p(x, y) \log_2 p(x, y). \quad (2.3)$$

Seguindo a interpretação dada à entropia de Shannon, esta quantidade pode ser interpretada como a quantidade de informação contida no sistema descrito conjuntamente pelas variáveis aleatórias X e Y . Mais precisamente, no estado que representa este sistema. Devido a independência destas variáveis aleatórias e a conseqüente possibilidade de decomposição da probabilidade conjunta na forma (2.2) (postulado da adição de Shannon), podemos reescrever a entropia conjunta da seguinte maneira

$$H(X, Y) = H(X) + H(Y), \quad (2.4)$$

o que nos mostra que a informação contida em um sistema composto por duas partes independentes é, simplesmente, a soma da informação contida nas partes, de acordo com a teoria de Shannon.

Por outro lado, quando consideramos variáveis dependentes, a condição dada pela equação (2.2) deixa de ser válida. Surge então a definição da probabilidade condicional. Para ver isso, consideremos as probabilidades marginais

$$p(x) = \sum_y p(x, y) \quad (2.5)$$

e

$$p(y) = \sum_x p(x, y) \quad (2.6)$$

que definem as distribuições de probabilidade associadas às variáveis individuais. Para a probabilidade conjunta teremos então

$$p(x, y) = p(x)p(y|x) \quad (2.7)$$

e, de maneira análoga,

$$p(x, y) = p(y)p(x|y), \quad (2.8)$$

sendo as quantidades $p(y|x)$ e $p(x|y)$ denominadas probabilidades *condicionais*. O significado dessa quantidade é o seguinte: a probabilidade condicional $p(x|y)$ nos dá a probabilidade de

obtermos o resultado $x \in \mathcal{X}$ sabendo-se que o resultado $y \in \mathcal{Y}$ foi obtido para a variável Y . Pode-se ler $p(x|y)$ como probabilidade condicional de x dado y . Definida essa quantidade, podemos partir para a definição da entropia condicional. A entropia condicional de Y , dado que já temos o conhecimento do resultado da variável X é escrita como

$$H(Y|X) = - \sum p(y|x) \log_2 p(y|x). \quad (2.9)$$

Podemos também pensar nesta quantidade como sendo uma medida do quanto nossa ignorância sobre uma variável é reduzida quando conhecemos outra variável com a qual ela esteja correlacionada. É possível reescrever essa expressão em termos das entropias conjunta e de apenas uma das variáveis utilizando a expressão (2.7), resultando em

$$H(Y|X) = H(X, Y) - H(X). \quad (2.10)$$

De maneira análoga, podemos obter a expressão

$$H(X|Y) = H(X, Y) - H(Y). \quad (2.11)$$

De um outro ponto de vista, a entropia condicional nos dá a quantidade de informação obtida sobre uma parte do sistema devido a medição realizada na outra parte. Por exemplo, $H(X|Y)$ é a quantidade de informação contida no subsistema X sendo que temos o conhecimento do resultado da medida do subsistema Y (informação que ganhamos ao medirmos o sistema descrito por X). Desta interpretação, fica claro que esta quantidade só pode ser não nula quando houver correlação entre as duas variáveis aleatórias consideradas.

A quantidade de informação compartilhada entre as variáveis aleatórias é o ponto importante nessa seção. Como podemos quantificar a informação compartilhada entre as partes do sistema? Em outras palavras, como podemos quantificar o grau de correlação entre as duas variáveis aleatórias? A quantidade que nos fornece isso é denominada informação mútua e é definida como

$$I(X : Y) = H(X) + H(Y) - H(X, Y). \quad (2.12)$$

Em outras palavras, esta quantidade é uma medida da diferença entre as entropias individuais das duas variáveis (informação contida em cada uma delas) e da entropia conjunta (informação que obtemos medindo as duas variáveis conjuntamente). Na figura 2.1 podemos visualizar melhor o que foi discutido com respeito as entropias. Podemos verificar que existe uma interseção entre os dois conjuntos que estão representando as entropias $H(X)$ e $H(Y)$, onde localizamos a informação mútua, que nos remete à ideia de informação compartilhada entre as variáveis X e Y . Podemos notar que, para sistemas independentes, essa quantidade é nula, o que faz sentido pois não teríamos nenhum sistema contendo informação sobre o outro.

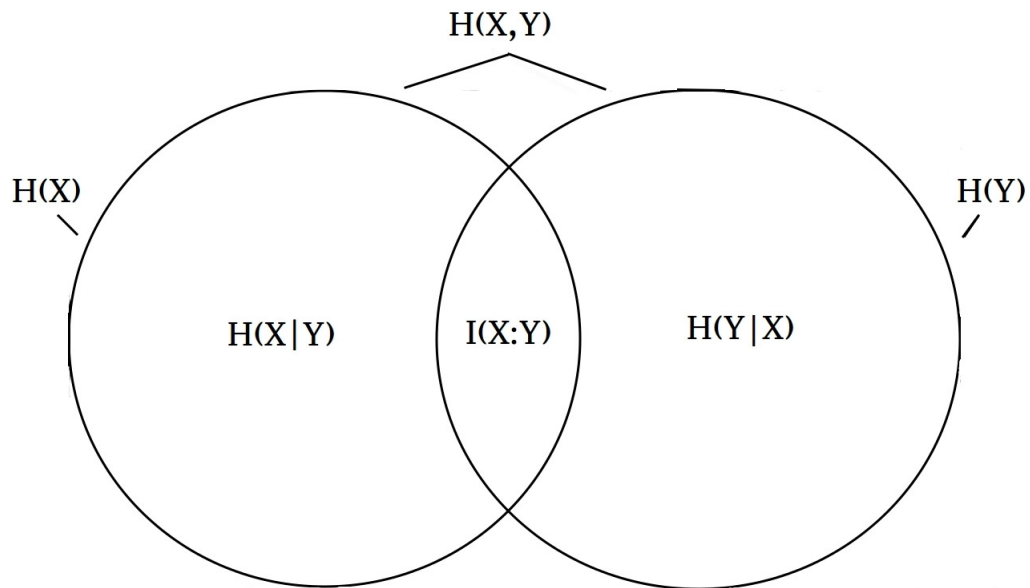


Figura 2.1: Diagrama de Venn para um sistema de duas variáveis aleatórias correlacionadas.

Outra maneira de escrevermos a informação mútua é utilizando a equação (2.10) ou

a equação (2.11), obtendo as expressões

$$I(X : Y) = H(Y) - H(Y|X) \quad (2.13)$$

ou

$$I(X : Y) = H(X) - H(X|Y), \quad (2.14)$$

respectivamente. Perceba que na expressão (2.12) não há necessidade de conhecermos o resultado da medida de nenhuma parte do sistema, já em (2.13) e (2.14), temos que conhecer um dos resultados. Esse conhecimento só é possível de se obter por meio de medição sobre o sistema considerado. Tal fato levou à definição da discórdia quântica, pois a extensão destas duas equações para o mundo quântico, devido ao processo de medida, é fundamentalmente discordante.

Quando um sistema contém informação de outro, dizemos que esses sistemas estão correlacionados, portanto, vemos que a informação mútua pode ser tomada como uma medida da correlação entre dois sistemas físicos [35].

Até aqui consideramos a teoria clássica da informação. Como nosso objetivo é estudar o comportamento de correlações quânticas em sistemas críticos, a seguir descreveremos como a teoria clássica de informação pode ser estendida para sistemas quânticos. Considerando um sistema quântico representado pelo operador densidade ρ definido em um espaço de Hilbert \mathcal{H} de dimensão finita, podemos medir o quanto de informação temos nesse sistema por meio da entropia de von Neumann, definida da seguinte maneira [37]:

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho). \quad (2.15)$$

No caso de um sistema composto por duas partes, denominadas A e B e representado por um operador densidade ρ_{AB} , teremos a entropia conjunta $S(A, B)$ escrita da mesma maneira que está colocado na equação (2.15), porém, com o operador densidade global, quantificando assim toda a informação contida no sistema composto. Esta quantidade é uma generalização direta da entropia de Shannon para o caso quântico, em que sistemas físicos

são descritos por um operador densidade ao invés de uma distribuição de probabilidades. A partir desta definição podemos nos perguntar sobre como quantificar a correlação existente entre dois sistemas quânticos quaisquer.

Fazendo o paralelo com a equação (2.12), podemos escrever uma expressão para a informação mútua quântica do sistema descrito pelo operador ρ_{AB} da seguinte maneira

$$\mathcal{I}(A : B) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}), \quad (2.16)$$

que, como visto antes, nos fornece a quantidade de informação compartilhada pelas duas partes do sistema. Lembrando que a informação mútua é tomada como a quantidade de correlação contida entre dois sistemas, podemos tomar a expressão (2.16) como a correlação *total* existente entre as partes A e B , isto é, a soma das correlações clássica e quântica. Devido à diferença fundamental da natureza das correlações clássicas e quânticas, é natural supormos que estas quantidades somam-se de maneira simples, resultando na informação mútua.

Entretanto, quando tentamos escrever as expressões análogas as equações (2.14) e (2.13) para o caso quântico, esbarramos no fato de que essas quantidades estão definidas em termos da entropia condicional, que por sua vez depende do conhecimento do resultado obtido por um processo de medida realizada em uma parte do sistema. Portanto, para termos a entropia condicional, temos que *medir* um dos sistemas considerados. Entretanto, diferentemente do mundo clássico, uma medida realizada em um sistema quântico causa, geralmente, uma perturbação irreversível neste. Podemos dizer que, no mundo quântico, a aquisição de informação é um processo irreversível.

Portanto, para definirmos a entropia condicional, precisamos considerar o operador que representa uma medida em um sistema quântico, que são os chamados *positive-operator-valued measure* (POVM), cujos elementos podem ser escritos como $E_a = M_a^\dagger M_a$, sendo M_a o operador de medida e a o resultado clássico, associado ao elemento E_a , dessa medida. O conjunto $\{E_a\}$ é o POVM dado por todos os elementos E_a . Sob esse conjunto de medidas, o

estado inicial do sistema será transformado como segue [29, 33]

$$\rho_{AB} \rightarrow \sum_a M_a \rho_{AB} M_a^\dagger, \quad (2.17)$$

com o resultado a ocorrendo com probabilidade $p_a = \text{Tr}(E_a \rho_{AB})$. O estado condicional da parte B , após a medição ter sido realizada sobre o subsistema A , é então definido como

$$\rho_{B|a} = \frac{\text{Tr}_A(E_a \rho_{AB})}{p_a}. \quad (2.18)$$

Note que a definição deste estado está baseada no fato de que não apenas medimos o sistema, mas também conhecemos o resultado a da medida. Tal resultado nos possibilita a definição de uma entropia condicional quântica de B dado o conhecimento da parte A do sistema. Essa entropia é expressa como [29, 33]:

$$S(B|\{E_a\}) = \sum_a p_a S(\rho_{B|a}), \quad (2.19)$$

que é uma média do conhecimento adquirido por um conjunto completo de medidas realizadas sobre A . Dessa maneira, podemos escrever a forma análoga da equação (2.14) para um sistema quântico como segue

$$\mathcal{J}(B : \{E_a\}) = S(\rho_B) - S(B|\{E_a\}). \quad (2.20)$$

Esta quantidade encontra-se no centro de uma das mais utilizadas medidas de correlações quânticas, como veremos mais a frente.

Em resumo, temos agora uma maneira precisa de quantificar a correlação total entre dois subsistemas, tanto clássicos como quânticos. Resta-nos, agora, separar a parte clássica da parte quântica desta quantidade. Neste trabalho, estaremos interessados nas correlações quânticas. Dentre os vários tipos de correlações quânticas já propostas, descreveremos a seguir três tipos de direto interesse para este trabalho: O emaranhamento (primeira medida de correlação proposta, como discutido na introdução), a discórdia quântica (primeira medida de correlação para além do emaranhamento) e a incerteza local quântica (uma medida baseada na incerteza em um observável local devido à existência de correlações quânticas entre

o sistema de interesse e o resto do universo). Para um tratamento mais detalhado destas e de outras grandezas relacionadas, remetemos o leitor à referência [33].

2.1 Emaranhamento

A primeira das correlações quânticas a ser proposta e discutida foi o chamado emaranhamento. Nomeado inicialmente por Schrödinger [22, 25] ao descrever as partículas utilizadas no experimento mental proposto por Einstein, Podolsky e Rosen [24] em 1935, o emaranhamento foi qualificado como não apenas um dos muitos traços da teoria quântica, mas sim o traço mais característico dos sistemas quânticos [22, 25].

A definição de emaranhamento é baseada na de estados separáveis. Vamos considerar um sistema bipartido definido num espaço de Hilbert do sistema composto $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$, com \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B representando os espaços de Hilbert das partes A e B , respectivamente. O caso de emaranhamento multipartido é muito mais complexo e ainda motivo de grande debate na comunidade internacional. Neste trabalho, vamos considerar apenas correlações entre dois subsistemas, as chamadas correlações bipartidas, tanto para o emaranhamento como também para os demais tipos de correlação. Dito isso, se o estado do sistema for *puro*, dizemos que ele é separável se pudermos escrevê-lo na forma [38]

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle, \quad (2.21)$$

com $|\psi_A\rangle$ e $|\psi_B\rangle$ representando os estados dos subsistemas A e B , nessa ordem. Quando tratamos de estados de mistura a definição torna-se diferente. Um estado geral ρ é dito separável se puder ser escrito como uma soma convexa de estados produtos [38]

$$\rho = \sum_i p_i \rho_A^i \otimes \rho_B^i, \quad (2.22)$$

sendo $\{p_i\}$ a probabilidade de o sistema estar no estado produto $\rho_A^i \otimes \rho_B^i$.

A definição de estado emaranhado é, então, feita por negação. Um estado é dito emaranhado se ele não puder ser escrito na forma separável, ou seja, se ele não puder ser

escrito na forma (2.21) ou na forma (2.22). Se for possível essa representação dizemos então que o estado possui emaranhamento nulo [25].

Uma definição operacional de emaranhamento pode ser dada por meio das chamadas operações locais assistidas por comunicação clássica (LOCC). Para entender melhor o que seriam estas LOCC vamos considerar o seguinte caso: tomemos um sistema composto por duas partículas, enviamos uma das partículas a um observador situado em um laboratório A e a outra enviamos a um outro observador, situado em um laboratório B , separado espacialmente de A . Cada observador pode agir localmente em seu laboratório (operações unitárias, medidas, etc.) e eles podem se comunicar classicamente (telefone, rádio, etc.). A esse protocolo damos o nome de LOCC (devido o nome em inglês: Local Operations and Classical Communication). Esse protocolo nos permite criar apenas correlações de caráter clássico, isto é, correlações cujos estados podem ser escritos na forma separável. Em outras palavras, dado um estado escrito na forma 2.22 (ou na forma 2.21), é impossível, por meio de LOCC, transformar este estado em um não separável, isto é, é impossível criar emaranhamento por meio de LOCC. Como pode ser observado, tal noção é muito importante para protocolos de comunicação e processamento quântico de informação, em que o emaranhamento é um recurso que não pode ser criado localmente.

Devido a isso, uma definição operacional de emaranhamento pode ser feita da seguinte maneira: Estados emaranhados são estados que não podem ser gerados apenas por operações locais e comunicação clássica.

A pergunta natural que surge então é: dado um estado, este pode ser escrito na forma separável ou não? Este é um problema fundamental e de difícil abordagem. Vários métodos para fazer essa classificação foram propostos, mas a complexidade aumenta exponencialmente com a dimensão dos sistemas considerados. De uma maneira geral, ainda não sabemos como classificar um estado arbitrário.

Dentre os métodos propostos até o momento, citamos dois devido à sua importância: a violação das desigualdades de Bell e o critério de transposição parcial positiva de

Peres, que passamos a descrever a seguir.

2.1.1 Desigualdades de Bell

Para entendermos o conteúdo físico das desigualdades de Bell, precisamos antes descrever o problema colocado no chamado artigo EPR [24]. O objetivo de tal artigo era o de mostrar que a mecânica quântica não poderia ser uma teoria completa, baseada em conceitos naturais de realidade e localidade.

EPR consideraram os seguintes conceitos como naturais em uma teoria física. *Realidade* —se pudermos prever, sem interferir no sistema, o valor de uma quantidade, então esta quantidade é um elemento da realidade, possuindo uma representação matemática na teoria associada. *Localidade* —o que ocorre em um laboratório não pode afetar o que ocorre em algum outro que esteja espacialmente separado do primeiro (em um tempo inferior ao que a luz levaria para viajar entre os dois laboratórios). Juntos, estes conceitos constituem a chamada hipótese do realismo local.

Consideremos novamente duas partículas emaranhadas. Cada uma delas encontra-se em posse de um cientista, denominados Alice (A) e Bob (B). Baseados na hipótese do realismo local, EPR foram capazes de mostrar que a descrição dada pelo vetor de estado da mecânica quântica a este sistema deveria ser incompleta. Isto porque, de acordo com a mecânica quântica, observáveis (elementos da realidade) que não comutam não podem ter seus valores simultaneamente especificados. No experimento mental proposto por EPR, isso seria possível. Logo, a teoria quântica deveria ser completada no sentido a permitir a definição simultânea de todos os elementos de realidade.

A ideia de realismo remete à existência de uma quantidade física, relacionada a uma propriedade física do sistema, independentemente da nossa observação. Por exemplo, se jogamos uma moeda que tenha duas faces diferentes, ela cairá com uma das faces viradas para cima, independentemente de olharmos ou não o resultado, ou seja, existe um resultado

(cara ou coroa) para aquele evento independente da nossa medição. Esta simples observação parecia estar em contradição com a mecânica quântica, como evidenciado pelo paradoxo EPR.

Este argumento perdurou até 1964, quando J. Bell colocou o problema em uma base matemática sólida, conhecida hoje como desigualdades de Bell [26]. Este foi um passo extremamente importante na discussão, pois, pela primeira vez, o paradoxo estava pronto para ser testado experimentalmente.

Fundamentalmente, as desigualdades de Bell são inequações que nos fornecem um limite para a força das correlações estatísticas dos resultados de medições realizadas em sistemas bipartidos espacialmente separados. A mecânica quântica, por meio do emaranhamento, excede este limite, quando então dizemos que a desigualdade de Bell é violada por estados emaranhados. Embora existam desigualdades hoje propostas para o caso multipartido, tal discussão encontra-se fora do escopo deste texto. Note que estas desigualdades não dizem respeito à força das correlações quânticas, mas apenas colocam um limite para as correlações que podem ser criadas dentro do mundo clássico.

A ideia central do argumento de Bell é a introdução de certas variáveis, denominadas ocultas, que seriam necessárias para completar a mecânica quântica, no sentido de EPR. Matematicamente, Bell assumiu que existe uma distribuição de probabilidade conjunta dos dois sistemas e da variável oculta (λ) da qual a probabilidade quântica observada experimentalmente seria a marginal, isto é

$$p(A, B) = \sum_{\lambda} p(A, B, \lambda).$$

Aqui escolhemos uma distribuição discreta para simplificar a discussão, mas os argumentos permanecem válidos para distribuições contínuas. Esta variável oculta seria a responsável pelo restabelecimento do realismo local, tão arraigado na descrição clássica do mundo.

Impondo as condições de realismo, isto é, de que o valor de qualquer quantidade está definido independentemente da medição, e também de localidade, Bell foi capaz de

obter um conjunto de desigualdades que seriam respeitadas por qualquer teoria clássica de probabilidades. Toda desigualdade de Bell pode ser escrita na seguinte forma

$$\langle \hat{B} \rangle \leq c,$$

sendo \hat{B} o chamado operador de Bell (geralmente uma soma de diferentes correlações entre operadores dos dois subsistemas considerados) e c o limite imposto pela teoria clássica de probabilidades à esta soma. O símbolo $\langle \cdot \rangle$ representa uma média tomada sobre um número muito grande de repetições do mesmo experimento. Isto significa que as correlações permitidas por qualquer teoria realista local devem satisfazer estas desigualdades.

Em 1981 foi realizado o primeiro experimento mostrando que a mecânica quântica viola, por meio de seus estados emaranhados, estas desigualdades e, portanto, ou a hipótese de realismo, ou a de localidade, ou ambas, devem ser abandonadas. Por isso a mecânica quântica é hoje descrita como sendo uma teoria não-local, embora o sentido físico desta palavra deva ser considerado cuidadosamente, uma vez que sabemos que a mecânica quântica é uma teoria local no sentido Einsteiniano.

Portanto, estados quânticos que violam a desigualdade de Bell não podem ser descritos por um modelo local de variáveis ocultas, o que significa que possuem correlações não-clássicas na forma de emaranhamento. Isto é, a violação de uma desigualdade de Bell nos diz imediatamente que o estado em questão não pode ser escrito na forma separável. Em outras palavras, as desigualdades de Bell podem ser entendidas como testemunhas de emaranhamento.

No entanto, em [28], foi mostrado que existe uma classe de estados emaranhados que podem ser descritos por um modelo de variáveis ocultas e que, portanto, não violam nenhuma das desigualdade de Bell. Logo, a violação da desigualdade de Bell é uma condição suficiente para a indicação da presença de emaranhamento em um estado quântico, mas não necessária. Esta foi a primeira vez que os conceitos de não-localidade (associado à violação de uma desigualdade de Bell) foi separado do conceito de emaranhamento (as-

sociado à separabilidade de um estado quântico). Isto é, emaranhamento e não-localidade eram conceitos distintos. Uma revisão moderna destas desigualdades, do ponto de vista geométrico, pode ser encontrada na referência [27].

2.1.2 Transposição parcial positiva

O critério de transposição positiva parcial, proposto por A. Peres [39], é um critério necessário para testar a separabilidade do estado de um sistema quântico. Para sistemas com dimensões 2×2 e 2×3 (um dos subsistemas tem dimensão 2 e o outro 2 ou 3) ele também é suficiente. Para entender como este critério funciona, considere uma matriz densidade ρ_{AB} que representa um sistema bipartido e a matriz $\rho_{AB}^{T_B}$, obtida a partir da matriz original por meio de uma transposição parcial sobre o subsistema B . Os elementos desta nova matriz são calculados da seguinte maneira

$$\langle m | \langle \mu | \rho_{AB}^{T_B} | n \rangle | \nu \rangle = \langle m | \langle \nu | \rho_{AB} | n \rangle | \mu \rangle, \quad (2.23)$$

onde os índices m e n representam bases do subsistema A e os índices μ e ν do subsistema B . Dada esta definição, Peres mostrou que o estado ρ_{AB} é separável se a matriz $\rho_{AB}^{T_B}$ ainda representar um operador densidade, isto é, se for positiva de traço unitário. Note que o critério é simétrico, podendo ser aplicado também ao subsistema A .

Essa condição além de necessária é suficiente quando estamos lidando com sistemas de dimensão 2×2 e 2×3 [25], como mencionado acima, e é um critério mais forte para indicar separabilidade que o critério da violação da desigualdade de Bell [39], no sentido que somente estados muito emaranhados violam Bell, mas qualquer estado emaranhado (consideradas as dimensões) é revelado pelo critério de Peres. Outros critérios de separabilidade podem ser encontrados na referência [25].

Até o momento, sabemos caracterizar e identificar o emaranhamento. Entretanto, ainda falta uma questão importante a ser respondida, que é como podemos quantificar a quantidade de emaranhamento presente em um sistema. Tal pergunta é fundamental uma

vez que o emaranhamento é um recurso para realizarmos muitas operações que não seriam possíveis de outra maneira como, por exemplo, o teletransporte [40]. O objetivo da última parte desta seção é o de discutir algumas das medidas propostas para este fim.

2.1.3 Medidas de emaranhamento

Muitas medidas de emaranhamento foram propostas na literatura e apresentaremos apenas três dessas medidas nessa seção, remetendo o leitor à referência [41] para outras medidas. Começaremos com uma medida aplicável a estados puros e em seguida apresentaremos duas medidas aplicáveis a estados mistos.

Entropia de emaranhamento

A primeira medida de emaranhamento considerada aqui é a chamada *entropia de emaranhamento*, proposta em [42]. Podemos definir a entropia de emaranhamento para um estado puro $|\Psi_{AB}\rangle$, com matriz densidade $\rho_{AB} = |\Psi_{AB}\rangle\langle\Psi_{AB}|$, como

$$E_e(\rho_{AB}) = S(\rho_A) = S(\rho_B), \quad (2.24)$$

sendo $S(\rho_X) = -\text{Tr}(\rho_X \log_2 \rho_X)$ a entropia de von Neumann para a parte X .

A entropia de von Neumann pode ser escrita na forma

$$S(\rho_X) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i, \quad (2.25)$$

em que $\{\lambda_i\}$ são os autovalores de ρ_X , com $X = A, B$. Portanto, podemos escrever a entropia de emaranhamento como segue:

$$E_e(\rho_{AB}) = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i. \quad (2.26)$$

A entropia de emaranhamento pode ser considerada uma medida de emaranhamento devido ao fato de não podermos atribuir um estado definido (puro) para cada parte do sistema se este estiver emaranhado globalmente. Isso pode ser visto da própria definição

de emaranhamento apresentada anteriormente. Quando tomamos o traço parcial do estado global, o estado de qualquer uma das partes será misto, mesmo que o estado global seja puro. Este fato foi observado por Schrödinger, afirmando que, em estados deste tipo, existe mais informação globalmente do que localmente.

Da definição da entropia de von Neumann vemos que estados puros tem entropia nula, pois, todos os λ_i são nulos, exceto um deles, que tem valor 1. Para o caso de estados mistos, teremos uma distribuição destes valores fazendo com que a entropia tenha um valor finito. Como o grau de mistura dos estados locais está associado com o grau de emaranhamento contido no sistema global, a entropia de uma das partes é então uma medida deste emaranhamento.

Em outras palavras, quando a entropia de emaranhamento é nula, o estado de uma parte do sistema bipartido é puro, levando à conclusão de que o estado global é produto.

Emaranhamento de formação

O emaranhamento de formação (EoF) é usado como medida de emaranhamento para estados mistos [43, 44]. Se pensarmos nessa mistura de estados como uma soma convexa de vários estados puros, podemos adotar que o emaranhamento nesse estado misto seria uma média do emaranhamento dos estados puros. No entanto, existem inúmeras maneiras de se obter um estado misto utilizando-se sua decomposição em estados puros. Dentre as varias possibilidade, devemos tomar a média que minimiza o valor do EoF. Uma vez que a entropia de emaranhamento quantifica o emaranhamento em um estado puro, o EoF é dado por

$$E_f(\rho_{AB}) = \min_{p_i|\Psi_{AB}^i\rangle} \sum_i p_i E_e(|\Psi_{AB}^i\rangle), \quad (2.27)$$

com mínimo tomado sobre todas as possíveis decomposições de ρ_{AB} em estados puros:

$$\rho_{AB} = \sum_i p_i |\Psi_{AB}^i\rangle \langle \Psi_{AB}^i|, \quad (2.28)$$

onde $\{p_i\}$ é a distribuição de probabilidades.

A interpretação física desta quantidade é a seguinte. Ela quantifica o número de e-bits (estados maximamente emaranhados de dois qubits, isto é, elementos da base de Bell) que são necessários para a formação do estado considerado, justificando assim seu nome.

Para sistemas de dois qubits, o EoF pode ser obtido analiticamente [43,44]

$$E_f(\rho_{AB}) = H_2\left(\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2}\right), \quad (2.29)$$

em que

$$H_2(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2(1 - x) \quad (2.30)$$

é a entropia binária e

$$C(\rho_{AB}) = \max\left(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}\right) \quad (2.31)$$

é a chamada *concorrência* [45]. Na expressão da concorrência, λ_i são os autovalores de $\rho_{AB}\tilde{\rho}_{AB}$ em ordem decrescente e

$$\tilde{\rho}_{AB} = (\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho_{AB}^*(\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (2.32)$$

sendo ρ_{AB}^* é o complexo conjugado de ρ_{AB} e $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ a matriz de Pauli.

Como definido, o emaranhamento de formação é uma função monotônica da concorrência, portanto, se esta for nula, o EoF também será, o que nos garante que não há emaranhamento. Por outro lado, quando a concorrência atinge seu valor máximo, o emaranhamento é também máximo. Isso faz com que se utilize a concorrência como sendo a medida de emaranhamento, ao invés do EoF.

Negatividade

Como vimos anteriormente, o espectro da matriz obtida por meio de uma transposição parcial é independente da base escolhida para tomarmos a transposição, bem como

da parte escolhida para tal operação, isto é, podemos escolher tanto a parte A como a parte B . A positividade (autovalores positivos ou nulos) da transposição parcial é uma condição necessária para separabilidade. A quantidade chamada negatividade logarítmica é uma medida de emaranhamento baseada neste fato. Esta grandeza é definida para medir o grau em que o espectro da matriz transposta parcialmente viola a positividade.

Considerando um sistema bipartido descrito pelo operador densidade ρ_{AB} , a negatividade é definida da seguinte forma [46]

$$N(\rho) = \frac{\|\rho_{AB}^T\| - 1}{2}, \quad (2.33)$$

onde ρ^T é a transposição parcial de ρ_{AB} e $\|\rho^T\| = \text{Tr} \sqrt{\rho^\dagger \rho}$ é a chamada distância de traço (ou norma).

Embora monotônica, a negatividade não é aditiva. Uma medida mais apropriada é a chamada negatividade logarítmica, definida como

$$E_N(\rho) = \log_2 \|\rho^T\|. \quad (2.34)$$

Esta medida, embora falhe ao ser convexa e assintoticamente contínua (o que faz com que ela não recaia na medida de emaranhamento para todos os casos puros), ela apresenta algumas vantagens, dentre as quais podemos citar a facilidade de cálculo e suas diversas interpretações operacionais, como por exemplo ela fornecer um limite para a capacidade de teleportação [47].

Até pouco tempo atrás, acreditou-se que emaranhamento era a única correlação que apresentava caráter quântico. Porém, no início desse século foi proposta a existência de um novo tipo de correlação quântica, que não é necessariamente nula para estados quânticos separáveis. Esse tipo de correlação será considerado na próxima seção.

2.2 Discórdia quântica

Antes de definirmos a chamada discórdia quântica, retornaremos às equações definidas no início desse capítulo. Vimos que a Eq. (2.16) nos fornece a quantidade de correlação total compartilhada entre dois sistemas representados pelo operador densidade global ρ_{AB} . Vimos também que temos outra expressão, a equação (2.20), que pode ser obtida para a informação mútua de um sistema quântico e que esta depende de uma medida sobre um dos subsistemas. Portanto, com o intuito de obter uma quantificação da correlação clássica que não dependa de nenhuma medida específica, foi proposta a maximização da equação (2.20) sobre todas as possíveis medidas $\{E_a\}$, resultando em [29]

$$\mathcal{J}(B : A) = \max_{\{E_a\}} \mathcal{J}(B : \{E_a\}). \quad (2.35)$$

Note que a maximização na equação (2.35) é equivalente a uma minimização da entropia condicional apresentada em (2.20). Esta é uma medida da correlação clássica compartilhada entre os dois sistemas considerados. Tal afirmação está baseada no fato de que uma medida destrói as correlações quânticas presentes no sistema, restando apenas as clássicas.

Tomando a diferença entre as equações (2.16) e (2.35) temos

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}(A|B) &= \mathcal{I}(A : B) - \mathcal{J}(B : A) \\ &= \min_{\{E_a\}} \sum_a p_a S(\rho_{B|a}) + S(\rho_A) - S(\rho_{AB}). \end{aligned} \quad (2.36)$$

que é a chamada *discórdia quântica* [29]. Portanto, a discórdia quântica nada mais é do que a diferença entre a correlação total e as correlações clássicas presentes em um sistema. Não temos motivos para duvidarmos de que estas correlações somam-se de maneira simples, ao menos para o caso bipartido.

É importante ressaltar aqui que o termo $\mathcal{J}(B : A)$ presente na equação (2.36) é uma medida de correlação clássica, proposta independentemente por Henderson e Vedral em [48], fazendo com que a discórdia possa ser tomada como uma medida genuína de correlação quântica.

2.2.1 Propriedades de Discórdia Quântica

Listaremos e discutiremos algumas das propriedades da discórdia quântica.

- 1) É não-simétrica, implicando em que $\mathcal{Q}(A|B) \neq \mathcal{Q}(B|A)$, em geral.
- 2) É não negativa, isto é, $\mathcal{Q}(A|B) \geq 0$.
- 3) É invariante sob transformações unitárias locais.

A primeira propriedade segue diretamente da definição da discórdia. Existem hoje propostas para esta medida que são simétricas, isto é, que consideram medidas sobre ambos os subsistemas, calculando a maximização sobre todas estas medidas. Entretanto, dada a natureza das correlações como recursos que podem ser utilizados para a realização de tarefas, é natural pensar em uma medida assimétrica, uma vez que um observador de posse de um sistema pode ser capaz de realizar menos operações do que o que tem a posse do outro. Portanto, a discórdia calculada com a medida sendo feita na parte B , $\mathcal{Q}(A|B)$, não será necessariamente a mesma que a calculada medindo-se a parte A , $\mathcal{Q}(B|A)$ [29].

Para provar a segunda propriedade, precisamos definir alguns elementos. Considere um sistema bipartido, com espaços de Hilbert \mathcal{H}_a e \mathcal{H}_b , cujas dimensões são $\dim\mathcal{H}_a = m$ e $\dim\mathcal{H}_b = n$, respectivamente. Seja $L(\mathcal{H}_a)$ e $L(\mathcal{H}_b)$ os espaços constituídos por todos os operadores lineares em \mathcal{H}_a e \mathcal{H}_b , e, além disso, considere $L(\mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b)$ o espaço definido da mesma maneira para o sistema global. Com isso definimos o produto interno como

$$\langle A|B \rangle = \text{Tr } A^\dagger B. \quad (2.37)$$

Sendo que os conjuntos de operadores hermitianos $\{A_i : i = 1, 2, \dots, m^2\}$ e $\{B_j : j = 1, 2, \dots, n^2\}$ constituem bases ortonormais para $L(\mathcal{H}_a)$ e $L(\mathcal{H}_b)$, respectivamente, isto é

$$\text{Tr } A_i A_{i'} = \delta_{ii'} \quad (2.38)$$

e

$$\text{Tr } B_j B_{j'} = \delta_{jj'}. \quad (2.39)$$

O conjunto $\{A_i \otimes B_j\}$ constitui então uma base ortonormal para $L(\mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b)$.

Em particular, qualquer estado bipartido $\rho \in \mathcal{H}_a \otimes \mathcal{H}_b$ pode ser escrito como [49]

$$\rho = \sum_{i,j} c_{ij} A_i \otimes B_j, \quad (2.40)$$

onde $c_{ij} = \text{Tr}(\rho A_i \otimes B_j)$. Considere também um conjunto de medidas projetivas B_k ortogonais atuando em B .

O estado após a medição sobre a partição B (por meio do operador B_k) é

$$\rho^k = \frac{1}{p_k} (I \otimes B_k) \rho (I \otimes B_k), \quad (2.41)$$

com $p_k = \text{Tr}(I \otimes B_k \rho)$ sendo a probabilidade de obtermos o resultado k . Então,

$$\rho^D = \sum_k p_k \rho^{(k)}. \quad (2.42)$$

Substituindo (2.41) em (2.42), obtemos

$$\rho^D = \sum_k (I \otimes B_k) \rho (I \otimes B_k) \quad (2.43)$$

o que nos leva, usando a equação (2.40), a

$$\rho^D = \sum_k \sum_{i,j} c_{ij} A_i \otimes B_k B_j B_k. \quad (2.44)$$

Sendo B_j hermitiano, podemos escrevê-lo em termos das bases ortogonais, $B_j = \sum_l \lambda_l |b_l^j\rangle \langle b_l^j|$.

Escrevendo também $B_k = |b_k\rangle \langle b_k|$ resulta

$$\rho^D = \sum_{i,j,k} c_{ij} A_i \otimes \sum_l \lambda_l |b_k\rangle \langle b_k| b_l^j \rangle \langle b_l^j| b_k\rangle \langle b_k|, \quad (2.45)$$

$$= \sum_{i,j,k} c_{ij} \alpha_{jk} A_i \otimes B_k, \quad (2.46)$$

com $\alpha_{jk} = \sum_l \lambda_l \langle b_k| b_l^j \rangle \langle b_l^j| b_k\rangle$. Podemos reescrever a expressão acima na forma:

$$\rho^D = \sum_{i,j,k} \frac{c_{ij} \alpha_{jk}}{p_k} A_i \otimes p_k B_k. \quad (2.47)$$

Tomando o traço em B de ρ^k , teremos $\text{Tr}_B \rho^k = \rho_A^k = \frac{c_{ij} \alpha_{jk}}{p_k} A_i$ e, portanto, a equação (2.47)

torna-se

$$\rho^D = \sum_{i,j,k} \rho_A^k \otimes p_k B_k. \quad (2.48)$$

A entropia conjunta pode ser escrita na forma [37]

$$S(\rho^D) = H(p_k) + \sum_k p_k S(\rho_A^k). \quad (2.49)$$

Sendo $\rho_B^k = \text{Tr}_A \rho^k = \text{Tr}_A(\rho_A^k \otimes B_k) = B_k$, podemos escrever

$$\text{Tr}_A \rho^D = \rho_B^D = \sum_k p_k \rho_B^k = \sum_k p_k B_k, \quad (2.50)$$

Utilizando o expressão (2.49) em (2.50) obtemos $S(\rho_B^D) = H(p_k)$, que leva a Eq. (2.49) à forma

$$\sum_k p_k S(\rho_A^k) = S(\rho^D) - S(\rho_B^D). \quad (2.51)$$

Sendo a entropia condicional dada por $S(A|B) = \min_{\{B_k\}} \sum_k p_k S(\rho_A^k)$, teremos

$$S(A|B) = \min_{\{B_k\}} [S(\rho^D) - S(\rho_B^D)], \quad (2.52)$$

Sendo, $\rho_A^D = \text{Tr}_B \rho^D$, e, como $\rho_A^D = \text{Tr}_B \rho = \rho_A$, podemos escrever $S(A) = S(\rho_A^D)$.

Utilizando esse resultado e também a equação (2.52), podemos escrever

$$S(A) - S(A|B) = S(\rho_A^D) + S(\rho_B^D) - S(\rho^D) \quad (2.53)$$

Notemos que o lado esquerdo da equação (2.53) é a expressão que nos dá a medida da informação clássica do sistema, o que denominamos de $\mathcal{J}(A : B)$ anteriormente. E o lado direito é a informação mútua $I(A' : B')$ do sistema após a realização da medida na parte B , portanto, a correlação total do sistema após essa medida. Logo, podemos concluir que $\mathcal{J}(A : B) = I(A' : B')$ e, portanto, a discórdia é dada por:

$$\mathcal{Q}(A|B) = I(A : B) - I(A' : B') \quad (2.54)$$

Como operações quânticas locais, que foi o que foi realizado em $I(A', B')$, não aumentam a informação mútua, temos que

$$I(A' : B') \leq I(A, B), \quad (2.55)$$

e, então,

$$\mathcal{Q}(\rho_{AB}) \geq 0. \quad (2.56)$$

Provando assim a propriedade 2.

A igualdade é atingida para o caso em que não há diferença entre as informações mútuas antes e depois da medida, ou seja, quando a informação mútua do sistema não é afetada pela medida realizada sobre o sistema, o que é uma característica de sistemas clássicos. Portanto, se $\rho = \rho^D$ temos $Q(A|B) = 0$.

Esta medida tem desempenhado um papel importante no estudo das correlações quânticas presentes em um dado sistema, dando origem à várias outras definições, como pode ser visto no artigo de revisão publicado em [33]. Além de encontrar aplicações em diversos protocolos de informação e computação quântica [50, 51], suas relações com a termodinâmica também foram demonstradas [52], fazendo com que esta medida adquirisse alta relevância para a teoria quântica da informação.

A seguir descreveremos uma nova medida de correlação quântica, recentemente introduzida na Ref. [30], e que será central ao estudo realizado nesta dissertação.

2.3 Incerteza quântica local

Antes de definir a chamada Incerteza quântica local, precisamos apresentar o conceito de *skew information*, primeiramente introduzida em [31]. A skew information é uma medida da quantidade de incerteza na medida de um observável quântico devido exclusivamente à não-comutatividade deste observável com o estado do sistema antes da medida, isto é, é uma incerteza puramente quântica, sendo definida da seguinte forma [31]

$$I(\rho, K) = -\frac{1}{2} \text{Tr}\{[\rho^{\frac{1}{2}}, K]^2\}, \quad (2.57)$$

onde K é um observável quântico e ρ é o estado de um sistema bipartido. Observe que esta quantidade é nula somente se o estado do sistema considerado for um autoestado do observável medido. Neste caso, temos certeza absoluta do resultado da medida. Em qualquer outro estado, teremos uma variância não nula para os possíveis resultados da medida deste

observável. Esta variância, de origem quântica, é o que é detectado pela skew information.

Esta observação nos leva a uma importante propriedade da skew information, a saber, que ela é sempre menor ou igual a variância $I(\rho, K) \leq \langle K^2 \rangle_\rho - \langle K \rangle_\rho^2$, sendo a igualdade atingida quando o estado é puro, ou seja, quando não temos incerteza clássica sobre qual estado puro o sistema se encontra.

Visto isso, podemos introduzir a incerteza quântica local (LQU da sigla em inglês) como sendo a minimização da skew information sobre todas as possíveis medidas locais. A ideia básica é a seguinte. Se existe um operador local cujo resultado da medida pode ser previsto com certeza, então este sistema não está quanticamente correlacionado com nenhum outro. A minimização é inspirada na ideia da discórdia, definida anteriormente, e tem como objetivo introduzir uma quantidade que independe dos observáveis sendo mensurados.

Consideramos então que ρ_{AB} representa um sistema bipartido e $K^\Lambda = K_A^\Lambda \otimes \mathbf{I}_B$ é um observável, com K_A^Λ sendo um operador hermitiano atuando no sub-espço de A . Λ representa o espectro deste operador. A LQU é então definida como [30]

$$\mathcal{U}_A^\Lambda = \min_{K^\Lambda} I(\rho, K^\Lambda), \quad (2.58)$$

sendo a minimização realizada sobre todos os observáveis em A com espectro Λ não-degenerado. A consideração da não degenerescência do espectro do observável é feita com intuito de obtermos a maior quantidade de informação possível sobre observável na medida.

2.3.1 Propriedades da LQU

A seguir apresentaremos e discutiremos algumas das principais propriedades da incerteza local quântica.

1) A LQU Λ -dependente, para qualquer Λ não degenerado, é invariante por transformação unitária local.

2) É nula se e somente se o estado ρ do sistema for um estado de discórdia zero com relação a medida de um observável em A .

3) É reduzida à uma medida de emaranhamento quando o estado ρ do sistema é um estado puro.

Para provar a invariância da LQU sob transformação unitária local vamos considerar um estado de um sistema bipartido dado pelo operador densidade ρ e uma transformação unitária arbitrária sobre este estado definida por $U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger$, sendo $U_{AB} = U_A \otimes U_B$. Consideramos aqui operações locais, pois, operações globais podem criar correlações, inclusive emaranhamento. Consideremos o operador de medida na parte A do sistema dado por $K^A = K_A \otimes \mathbf{I}_B$, de forma que a LQU para esse caso é dada por

$$\mathcal{U}_A(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger) = \min_{K^A} \mathcal{I}(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger, K^A). \quad (2.59)$$

Usando a definição da skew information mostrada na equação (2.57), podemos escrever

$$\mathcal{I}(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger, K^A) = -\frac{1}{2} \text{Tr}\{[(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}}, K^A]^2\}. \quad (2.60)$$

Abrindo os termos da equação acima, obtemos a seguinte expressão

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger, K^A) &= -\frac{1}{2} \text{Tr}\{(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}} K^A (U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}} K^A \\ &+ K^A (U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}} K^A (U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}} \\ &- (U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}} K^A K^A (U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}} \\ &- K^A (U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}} (U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}} K^A\}, \end{aligned} \quad (2.61)$$

Agora, utilizando a propriedade cíclica do traço, a unitariedade do operador U_{AB} , e o fato de que

$$(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger)^{\frac{1}{2}} = U_{AB} \rho^{\frac{1}{2}} U_{AB}^\dagger \quad (2.62)$$

podemos reescrever a equação (2.61) na forma

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger, K^A) &= -\frac{1}{2} \text{Tr}\{\rho^{\frac{1}{2}} U_{AB}^\dagger K^A U_{AB} \rho^{\frac{1}{2}} U_{AB}^\dagger K^A U_{AB} \\ &+ U_{AB}^\dagger K^A U_{AB} \rho^{\frac{1}{2}} U_{AB}^\dagger K^A U_{AB} \rho^{\frac{1}{2}} \\ &- \rho^{\frac{1}{2}} U_{AB}^\dagger K^A U_{AB} U_{AB}^\dagger K^A U_{AB} \rho^{\frac{1}{2}} \\ &- U_{AB}^\dagger K^A U_{AB} \rho^{\frac{1}{2}} \rho^{\frac{1}{2}} U_{AB}^\dagger K^A U_{AB}\}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

A equação (2.63) pode agora ser reescrita como

$$\mathcal{I}(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger, K_A) = \mathcal{I}(\rho, U_{AB}^\dagger K_A U_{AB}). \quad (2.64)$$

Como a minimização realizada em K_A é equivalente a uma minimização realizada no observável transformado unitariamente $U_{AB}^\dagger K_A U_{AB}$, temos que

$$\mathcal{U}_A(U_{AB} \rho U_{AB}^\dagger) = \mathcal{U}_A(\rho), \quad (2.65)$$

provando, dessa forma, que a LQU é invariante por transformações unitárias locais.

Para provar a segunda propriedade vamos considerar um sistema bipartido, AB , que possui um estado classicamente correlacionado ρ_c com relação a medidas em A , ou seja, não há incerteza quântica em uma medida local realizada no subsistema A . Estados desse tipo são conhecidos como estados de discórdia zero em relação à partição A [53]. Para estados desse tipo, podemos escrever ao menos um conjunto de projetores que mantém esse estado invariante, digamos, $\{\Pi_i = \Pi_i^A \otimes \mathbf{I}^B$ tais que, $\rho_c = \sum_i \Pi_i \rho_c \Pi_i$. Claramente estes estados tem discórdia nula. Estados que possuem correlações apenas clássicas com relação a medida na parte A tomam então a forma geral $\rho_c = \sum_i p_i |i\rangle \langle i|_A \otimes \rho_B$, sendo $\{|i\rangle\}$ as bases ortonormais do subsistema A .

Considerando um observável $K^\Pi = K_A^\Pi \otimes \mathbf{I}_B$, com K_A^Π diagonal nas bases definidas por $\{\Pi_i^A\}$, temos que, para um estado classicamente correlacionado, ocorre $[\rho_c, K^\Pi] = 0$ garantindo que $\mathcal{U}_A = 0$. Por outro lado, o fato de a LQU ser nula nos garante a existência de um observável local \tilde{K}_A , tal que $\mathcal{I}(\rho, K_A) = 0$. Portanto, K_A comuta com a matriz densidade do sistema, podendo então ser diagonalizados simultaneamente. Considerando que o observável K_A é não-degenerado, seus autovetores definem uma única base $\{|k_i\rangle\}$ no espaço do subsistema A . Com isso, uma possível base de autovetores para o operador \tilde{K}_A é $\{|k_i\rangle_A \otimes |\phi_{ij}\rangle_B\}$ e o estado deve ser definido por

$$\rho_{K_A} = \sum_i p_{ij} |k_i\rangle \langle k_i|_A \otimes |\phi_{ij}\rangle \langle \phi_{ij}|_B \quad (2.66)$$

que é um estado de discórdia nula. Portanto, isso prova que $\mathcal{U}_A(\rho)$ se anula se, e somente se, ρ for um estado classicamente correlacionado com relação a medidas na parte A [53].

2.3.2 Formas fechadas

A solução deste processo de otimização para sistemas bipartidos de dimensão $2 \times d$ foi obtida na mesma referência [30] em que a LQU foi definida. Considerando um sistema bipartido de dimensão $2 \times d$ descrito por uma matriz densidade ρ_{AB} , definido em um espaço $\mathcal{C}^2 \otimes \mathcal{C}^d$, temos que a LQU definida em 2.58 admite a forma fechada

$$\mathcal{U}_A(\rho_{AB}) = 1 - \lambda_{max}\{W_{AB}\}, \quad (2.67)$$

em que λ_{max} é o autovalor máximo do observável medido e W_{AB} é uma matriz simétrica 3×3 cujos elementos são dados por

$$(W_{AB})_{ij} = \text{Tr}\{\rho_{AB}^{\frac{1}{2}}(\sigma_{iA} \otimes \mathbf{I}_B)\rho_{AB}^{\frac{1}{2}}(\sigma_{jA} \otimes \mathbf{I}_B)\}, \quad (2.68)$$

sendo σ_{iA} a i -ésima matriz de Pauli atuando sobre o subsistema A ($i, j = x, y, z$). As matrizes de Pauli surgem quando parametrizamos o operador de medida K_A na forma $K_A = V_A \sigma_{zA} V_A^\dagger = \vec{n} \cdot \vec{\sigma}_A$, com $|\vec{n}| = 1$. Fazer essa parametrização corresponde a normalizar a LQU para a unidade quando o estado está maximamente emaranhado. Estados de dimensão $2 \times d$ são uma classe muito importante de estados quando consideramos as aplicações em processamento quântico de informação.

Uma forma fechada para sistemas bipartidos com dimensões $d_A \times d_B$ foi proposta em [54]. Considerando um sistema bipartido de dimensões $d_A \times d_B$ descrito por uma matriz densidade ρ_{AB} e definido em um espaço $\mathcal{C}^{d_A} \otimes \mathcal{C}^{d_B}$, com d_A e d_B sendo as dimensões das partes A e B respectivamente, a LQU para esse sistema admite a forma fechada dada por [54]

$$\mathcal{U}_A = \frac{2}{d_A} - \lambda_{max}(\mathcal{W}_{ij}), \quad (2.69)$$

com λ_{max} sendo o autovalor máximo da matriz \mathcal{W} , com dimensão $(d_A^2 - 1) \times (d_B^2 - 1)$, e cujos elementos são dados por

$$\mathcal{W}_{ij} = \text{Tr}\{\rho_{AB}^{\frac{1}{2}}(\lambda_i \otimes \mathbf{I}_{d_B})\rho_{AB}^{\frac{1}{2}}(\lambda_j \otimes \mathbf{I}_{d_B})\} - G_{ij}L. \quad (2.70)$$

As matrizes G_{ij} e L que aparecem acima são dadas por

$$G_{ij} = (g_{ij1}, \dots, g_{ijk}, \dots, g_{ijd_1^2-1}) \quad (2.71)$$

e

$$L = (\text{Tr}(\rho_{AB} \lambda_1 \otimes \mathbf{I}_{d_2}), \dots, \text{Tr}(\rho_{AB} \lambda_k \otimes \mathbf{I}_{d_2}), \dots, \text{Tr}(\rho_{AB} \lambda_{d_1^2-1} \otimes \mathbf{I}_{d_2}))^T, \quad (2.72)$$

onde definimos

$$f_{ijk} = \frac{1}{4\mathfrak{B}} \text{Tr}([\lambda_i, \lambda_j] \lambda_k) \quad (2.73)$$

e

$$g_{ijk} = \frac{1}{4} \text{Tr}(\{\lambda_i, \lambda_j\} \lambda_k). \quad (2.74)$$

As matrizes λ_i são as matrizes geradoras do espaço da parte A do sistema, e surgem, assim como no caso de um sistema de dimensão $2 \times d$, da parametrização do operador de medida. Notemos que, para o caso de $d_A = 2$ recaímos na forma apresentada na equações (2.67) e (2.68), uma vez que o vetor G_{ij} torna-se nulo devido a anticomutação das matrizes de Pauli que passam a ser as geradoras do espaço nesse caso.

Capítulo 3

Transição quântica de fase

Neste capítulo vamos discutir alguns pontos sobre transições quânticas de fase, bem como três modelos muito utilizados na literatura para descrever cadeias de spins que também foram considerados nesse trabalho. Na primeira seção apresentaremos os pontos básicos sobre transição de fase, buscando identificar e diferenciar as que podem ser descritas por uma teoria clássica e as que não podem. Para a construção desta seção utilizamos as referências [10,55,56]. Na segunda seção apresentaremos os três modelos específicos de cadeias de spin: o modelo XY com interação entre dois e três spins vizinhos, o chamado modelo XYT , e um modelo descrevendo uma cadeia de spin-1, isto é, uma cadeia bosônica. No próximo capítulo iremos, então, estudar o comportamento das correlações quânticas nestes modelos, com foco nas vizinhanças de uma transição quântica de fase.

3.1 Transição de fase

Transições de fase são fenômenos que levam um sistema físico de uma fase em que ele possui determinado ordenamento em sua estrutura para outra fase com ordenamento diferente, causando uma mudança nas propriedades físicas do sistema. A transformação do gelo em água líquida e da água líquida em vapor de água são exemplos de transições de

fase mais comuns e recorrentes no nosso dia-a-dia. Outro exemplo que podemos citar, que não é tão perceptível em nosso cotidiano, é a transição, em um material ferromagnético, da fase ferromagnética, em que os spins do material estão alinhados e apontando em uma mesma direção, para a fase paramagnética, na qual temos os spins do material apontando em direções e sentidos diversos, aleatórios. Nesses casos, transições da água e do material ferromagnético, temos exemplos de transições de fase clássicas, que ocorrem à temperatura finita, sendo guiadas por flutuações termodinâmicas. Nosso objetivo aqui é estudar sistemas críticos quânticos, em que as transições de fase são guiadas por flutuações quânticas, ocorrendo à temperatura zero.

A seguir discutiremos estes dois tipos de transições de fase, para deixar claro suas diferenças, nos aprofundando nos sistemas quânticos, nosso principal interesse aqui.

3.1.1 Transição de fase clássica

Transições de fase clássicas são transições devidas aos efeitos da temperatura sobre o sistema, isto é, são causadas pelas flutuações térmicas. No caso da transição líquido-sólido que ocorre na água, por exemplo, a mudança de fase ocorre quando resfriamos o sistema, retirando-lhe calor, até atingir a chamada temperatura crítica de solidificação da água (0°C quando submetida a pressão de 1Atm), considerando que estamos mantendo a pressão constante. Nesse caso há a mudança da fase onde as moléculas de água estavam desordenadas para a fase onde existe um maior ordenamento dessas moléculas [55]. É importante observar que as propriedades termodinâmicas das duas fases são distintas.

Uma transição de fase clássica pode ser classificada de duas maneiras distintas: transições de primeira ordem e transições de segunda ordem. Para entender essa classificação, recorreremos a um exemplo que pode ser encontrado na referência [56].

Vamos considerar o diagrama de fase, representado na figura 3.1, de um fluido simples em termos da pressão (p) e da temperatura (T). No diagrama podemos ver as regiões

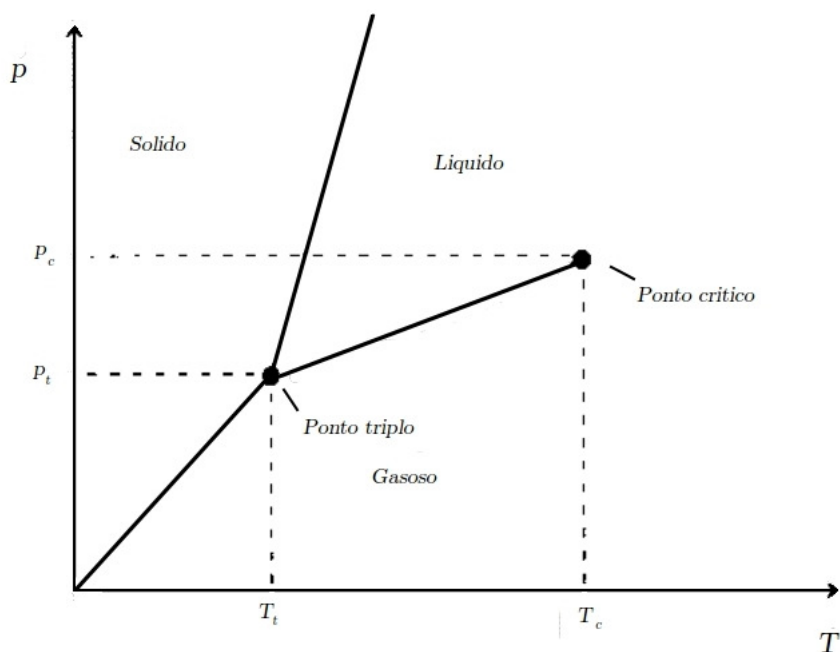


Figura 3.1: Diagrama de fase de um fluido simples.

correspondentes às fases sólida, líquida e gasosa deste fluido. As linhas contínuas representam as linhas de coexistência das fases que elas separam, isto é, pontos sobre estas linhas constituem uma mistura das duas fases. No ponto triplo mostrado, temos uma região de coexistência das três fases. Como já foi mencionado, a transição ocorre quando passamos de uma fase para outra e, pelo gráfico, podemos perceber que essa transição pode ser atingida, nesse caso, quando alteramos a temperatura, a pressão, ou ambos. Podemos variar essas quantidade de tal maneira que a passagem de uma fase para outra se dá através de uma das linhas de coexistência presente no gráfico ou podemos atingir valores de temperatura e pressão acima dos valores críticos (denotados por p_c , T_c , respectivamente) fazendo com que a transição ocorra sem que passemos por uma linha de coexistência. A transição que ocorre ao atravessarmos uma linha de coexistência é denominada de transição de primeira ordem, já a transição que ocorre quando extrapolamos o ponto crítico é denominada transição de segunda ordem [56].

Para identificar a ocorrência de uma transição, analisamos uma quantidade termodinâmica do sistema que sofrerá mudança na transição. À essa quantidade, introduzida por Landau, damos a denominação de parâmetro de ordem. O parâmetro de ordem deve ser o parâmetro que apresente a maior diferença entre as fases do sistema [55]. Podemos aplicar a classificação acima mencionada pela análise do parâmetro de ordem. Quando o parâmetro sofre descontinuidade no momento da transição, classificamos a transição como de primeira ordem (ou transição descontínua), já quando o parâmetro de ordem vai a zero continuamente a transição é denominada de segunda ordem (ou transição contínua).

3.1.2 Transição quântica de fase

Transições de fase quânticas, assim como as transições clássicas, são caracterizadas por uma mudança em alguma propriedade do sistema. No entanto, enquanto transições clássicas são causadas por flutuações de natureza clássica, como as flutuações térmicas, as transições de fase quânticas são causadas por flutuações exclusivamente quânticas.

Para discutimos transições de fase quânticas vamos considerar um sistema físico descrito por um operador hamiltoniano $H(g)$, que depende de um parâmetro de acoplamento g , geralmente controlado externamente, como um campo magnético por exemplo. Sob variações dessa quantidade, o sistema geralmente se comporta de maneira analítica. No entanto, existem casos em que essa analiticidade deixa de existir. É nesta região de quebra de analiticidade que estamos interessados.

Vamos considerar que estamos analisando, por exemplo, o estado fundamental do hamiltoniano de uma certa configuração de átomos. Se temos a presença de um cruzamento de níveis entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado em um dado ponto $g = g_c$, temos então um ponto de não-analiticidade no estado fundamental, onde este passa a ser o primeiro estado excitado do sistema e o primeiro estado excitado torna-se o estado fundamental. No ponto de cruzamento, o estado fundamental passa a ser degenerado. Na

figura 3.2 esboçamos o gráfico da energia em função do parâmetro g para um certo sistema [10].

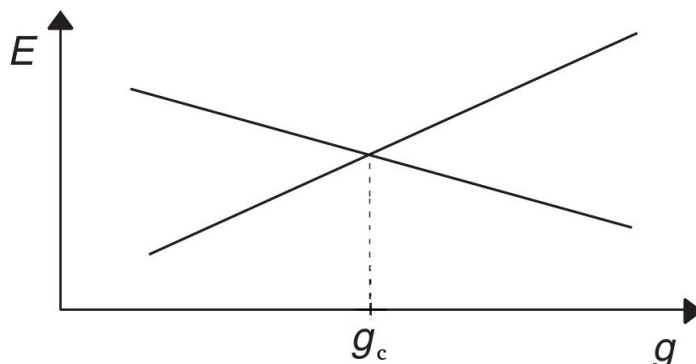


Figura 3.2: Cruzamento entre os níveis de energia fundamental e excitado no ponto $g = g_c$ [10].

Uma outra possibilidade é a existência de uma aproximação entre os autovalores de energia referentes aos estados fundamental e excitado quando nos aproximamos do ponto $g = g_c$, como está ilustrado na figura 3.3.

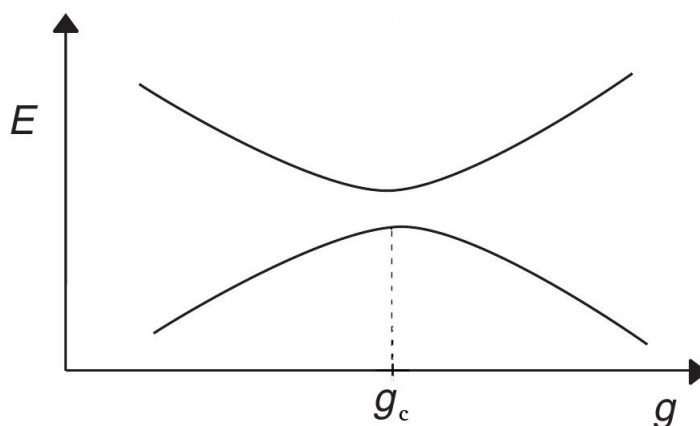


Figura 3.3: Aproximação dos valores de energia dos estados fundamental e excitados no ponto $g = g_c$ [10].

A diferença entre as energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado, no ponto crítico g_c , torna-se menor quando tomamos a dimensão do sistema maior. Por exemplo, se nosso sistema é uma cadeia de átomos, quanto maior for a cadeia menor será a

diferença entre a energia do estado fundamental e a energia do primeiro estado excitado, quando nos aproximamos do ponto crítico. Essa diferença torna-se nula quando tomamos o limite de tamanho infinito do sistema, o chamado limite termodinâmico, gerando um ponto de não analiticidade no estado fundamental em $g = g_c$ [10].

Os pontos não analíticos em determinada função do sistema, para o limite de uma cadeia infinita, são considerados uma manifestação de uma transição de fase quântica, e por esse motivo podem ser utilizados para sinalizar uma transição de fase.

Assim como nas transições clássicas, podemos classificar as transições de fase quântica em primeira e segunda ordem (existem transições de maior ordem, mas não iremos tratar destes efeitos aqui). As transições de primeira ordem são as que possuem cruzamento entre as funções do estado fundamental e do primeiro estado excitado, como foi mostrado na figura 3.2. Já as transições de segunda ordem são caracterizadas por um desaparecimento da escala característica de energia das flutuações acima do estado fundamental quando nos aproximamos do ponto crítico [10].

Para entendermos isso melhor, é preciso definir essa escala característica de energia, a qual denominaremos por Δ . A escala de energia característica representa a diferença entre a energia do estado fundamental e a energia do primeiro estado excitado acima do estado fundamental, portanto, se essa diferença for não nula, Δ será o chamado *gap* de energia. O comportamento de Δ nas proximidades do ponto $g = g_c$ é dado da seguinte maneira [10]

$$\Delta \sim J|g - g_c|^{z\nu}. \quad (3.1)$$

sendo J a escala de energia de um acoplamento microscópico característico e $z\nu$ é o chamado expoente crítico. É possível notar que o valor de Δ na equação (3.1) diminui quanto mais nos aproximamos do ponto de criticalidade, tornando-se nulo quando $g = g_c$, caracterizando uma transição de fase de segunda ordem, uma vez que o desaparecimento desse *gap* de energia nos leva a uma não analiticidade do estado fundamental, como discutimos anteriormente.

Outra quantidade que podemos utilizar para identificar a transição de fase quântica é a escala de comprimento característica de correlações ξ . Essa escala de comprimento determina o decaimento das correlações do sistema a longas distâncias. Quando temos dois spins separados a uma distância maior que o comprimento de correlação para determinado valor de g , dizemos que esses spins estão descorrelacionados. Uma característica desse comprimento de correlação é que, tanto para o caso de transições clássicas quanto para transições quânticas, ele aumenta com a aproximação do ponto crítico do sistema e diverge, tornando-se infinito, quando atingimos o ponto crítico. Em outras palavras, na transição de fase o sistema torna-se altamente correlacionado. A divergência do inverso desse comprimento é dada por [10,57]

$$\xi^{-1} \sim \Lambda |g - g_c|^\nu \quad (3.2)$$

onde Λ é uma escala de comprimento inversa a ordem do espaçamento da estrutura e ν é um expoente crítico. É importante deixar claro aqui que essa divergência ocorre apenas para transições de segunda ordem, tanto no caso das transições clássicas quanto no caso das transições quânticas. Notemos que tanto a escala de energia característica, Δ , quanto o inverso da escala de comprimento da correlação, ξ^{-1} , decaem com a proximidade do ponto crítico, portanto, podemos fazer uma comparação entre esses dois parâmetros obtendo a seguinte relação:

$$\Delta \sim \xi^{-z} \quad (3.3)$$

sendo z um expoente crítico. Essas duas quantidades, Δ e ξ^{-1} , caracterizam uma transição de fase quântica pelo seu anulamento no ponto crítico do sistema. Lembrando que os parâmetros de ordem tem a característica de se anularem no ponto de transição de fase (para os casos de transições de fase de segunda ordem), podemos considerar tanto Δ quanto ξ^{-1} como parâmetros de ordem de um sistema físico.

Até aqui consideramos um sistema em que a temperatura é mantida nula. Porém a realização experimental dessa condição é muitas vezes inviável. Surge dessa inviabilidade

a necessidade do entendimento do comportamento, próximo de um ponto crítico, de um sistema quântico a uma temperatura não-nula.

Com a consideração de temperatura finita no sistema, temos duas possibilidades: no primeiro caso, a transição desaparece para valores de $T \neq 0$, mantendo o ponto crítico apenas para $T = 0$. Já no segundo caso, a transição para temperatura não-nula existe, porém não pode ser tratada da mesma maneira que é tratada no caso $T = 0$ [57].

No primeiro caso, em que existe singularidade apenas para $T = 0$, todas as funções termodinâmicas do sistemas são funções analíticas de g para $T > 0$, o que nos aponta uma não existência de transição de fase, mesmo quando atingimos o valor $g = g_c$ (calculado para temperatura nula). A representação gráfica desse caso pode ser vista na figura 3.4.

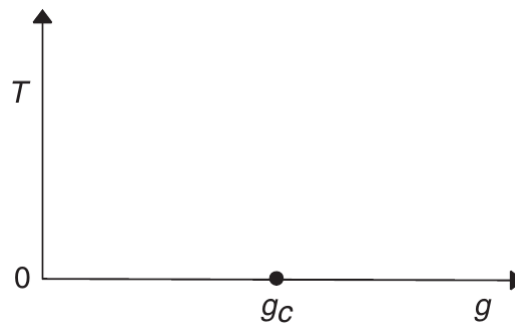


Figura 3.4: O ponto crítico existe apenas para temperatura nula [10].

Já no segundo caso, temos a presença de uma linha de transição de fase para temperaturas não-nulas. A transição que ocorre é uma transição de fase de segunda ordem, ou seja, nessa linha de transição, a energia livre termodinâmica é não-analítica. Apresentamos na figura 3.5 um gráfico representando o que acontece nesse caso.

Podemos notar que a medida que o valor da temperatura diminui, menor fica a diferença $|g - g_c|$ (considerando o valor de g para a transição a uma temperatura T), sendo que essa diferença é nula quando atingimos o valor $T = 0$. Como vimos anteriormente, quando essa diferença torna-se nula temos a caracterização de uma transição de fase quântica. Portanto, podemos perceber que a transição de fase quântica só ocorrerá quando o

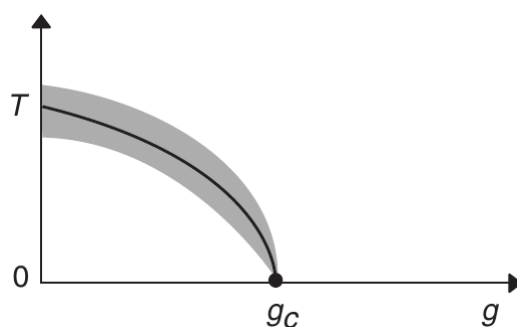


Figura 3.5: Linha de transição de fase à temperatura não-nula terminando no ponto crítico [10].

sistema estiver à temperatura nula. Do contrário, a transição será clássica.

Contudo, a contribuição de flutuações quânticas tem influência no processo de transição, mesmo com esta ocorrendo a temperatura não-nula. Para sabermos em que regime essa contribuição é significativa, vamos recorrer ao conceito de tempo de equilíbrio térmico local, que denominaremos por τ_{eq} . Essa quantidade é definida como o tempo necessário para que um sistema restabeleça o equilíbrio após a imposição de uma perturbação externa fraca, como um pulso de calor por exemplo. Caracterizaremos a seguir a importância da contribuição das flutuações quânticas baseadas no tempo de equilíbrio do sistema [10].

Quando a temperatura é não-nula no sistema, temos a presença de uma escala de energia associada a essa temperatura dada por $k_b T$, sendo k_b a constante de Boltzmann. Então, se compararmos essa escala de energia com a escala de energia definida em (3.1), teremos duas regiões, apresentadas no diagrama de fase da figura 3.6, onde uma prevalecerá em detrimento da outra.

Na região (2) da figura 3.6, onde prevalece a escala de energia Δ , temos que o tempo de equilíbrio satisfaz

$$\tau_{eq} \gg \frac{\hbar}{k_b T}. \quad (3.4)$$

A consequência desse tempo de equilíbrio grande é que a dinâmica do sistema torna-se efetivamente clássica [10].

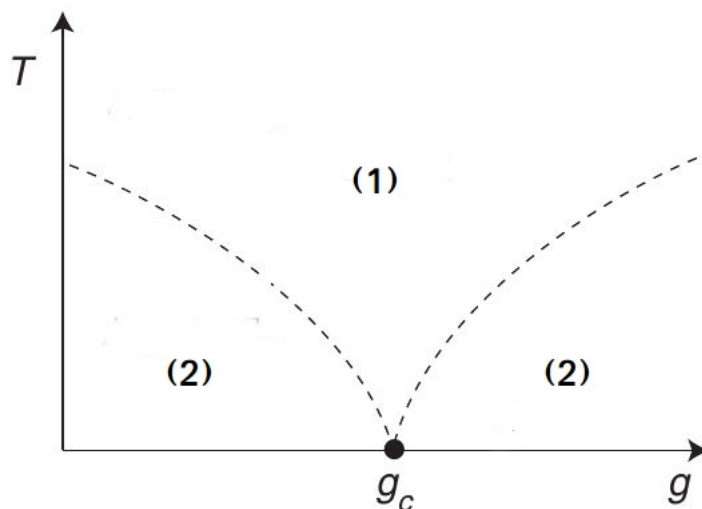


Figura 3.6: Diagrama de fase nas vizinhanças do ponto crítico [10].

Porém, nosso interesse não é nessa região, mas sim na região onde os efeitos quânticos influenciam o sistema. A região (1) da figura 3.6, onde isso ocorre, é a que prevalecem os efeitos da escala de energia relacionada a temperatura. Nessa região temos um tempo de equilíbrio térmico dado por

$$\tau_{eq} \sim \frac{\hbar}{k_b T}, \quad (3.5)$$

Para tempos de equilíbrios dessa ordem, não podemos usar uma descrição efetivamente clássica para descrever o reequilíbrio do sistema. Flutuações térmicas e quânticas são importantes nessa região e há uma competição entre elas, sendo difícil diferenciar qual é a predominante. A predominância das flutuações quânticas é evidente quando a temperatura do sistema se anula (ou torna-se muito pequena no sentido definido acima), pois as flutuações térmicas se anulam, permitindo-nos afirmar que a transição é efetivamente quântica.

Com objetivo de deixar a ideia de transição de fase quântica mais clara, apresentaremos um exemplo em que essa transição ocorre.

Trataremos de uma transição de um sistema de partículas bosônicas de fase superfluida para a fase isolante [58]. O sistema considerado é um gás formado por partículas bosônicas localizadas em redes óticas submetido a baixa temperatura, fazendo com que o

gás torne-se um condensado de Bose-Einstein, que apresenta um comportamento superfluido. Esse sistema pode ser representado por um operador hamiltoniano na forma [58]:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger a_j + \sum_i \epsilon n_i + \frac{1}{2} U \sum_i n_i (n_i - 1), \quad (3.6)$$

onde $\langle i, j \rangle$ representa a soma sendo feita sobre os vizinhos próximos, a_i^\dagger e a_i os operadores criação e aniquilação bosônicos no sítio i , n_i o operador número de átomos no i -ésimo sítio da rede, J é o termo que caracteriza a força da constante de tunelamento das partículas entre os sítios adjacentes e U é o termo responsável pela força de repulsão entre os átomos localizados no mesmo sítio.

Um comportamento interessante desse sistema ocorre quando aplicamos o potencial de rede no condensado. Se o potencial for aplicado de maneira suave, o condensado permanece na fase superfluida enquanto as interações de repulsão átomo-átomo forem pequenas quando comparadas com a constante de tunelamento. Caso a interação de repulsão átomo-átomo seja maior que constante de tunelamento, o sistema passa a ter um comportamento de isolante de Mott, que é caracterizado por uma ocupação igualitária dos sítios da rede, ou seja, cada sítio da rede possuirá a mesma quantidade de partículas. O J no Hamiltoniano (3.6) é função do potencial da rede ótica, portanto, a mudança do potencial gera uma mudança na relação entre J e U , atingindo o ponto crítico quando a transição de fase superfluido-isolante ocorre. Um tratamento mais detalhado dessa transição pode ser encontrado na ref. [58].

3.2 Modelos para cadeias de spins

Nesta seção apresentaremos três modelos que servirão de base para nosso estudo sobre o comportamento de correlações nas vizinhanças de um ponto crítico. A saber, são eles o modelo XYT , que pode ser visto como o modelo XY para interação entre partículas com spin-1/2, mas considerando interação entre três spins simultaneamente, o próprio modelo

XY e, por último, um modelo para um sistema de spin-1, isto é, para bósons.

3.2.1 Cadeia de spin XYT

Vamos inicialmente apresentar o modelo XYT . Esse modelo descreve uma cadeia anisotrópica de spin-1/2 sob ação de um campo magnético externo transverso, com interação entre três spins. Uma representação esquemática do modelo é apresentada na figura 3.7 [5].

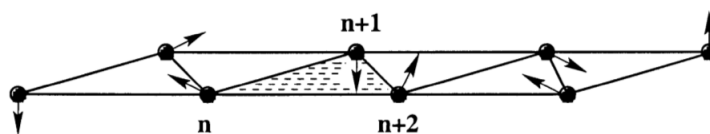


Figura 3.7: Representação esquemática da cadeia XYT [5].

O hamiltoniano que rege esse sistema é dado por [20]

$$\begin{aligned}
 H_{XYT} = & - \sum_{j=1}^N \left\{ \left(\frac{1+\gamma}{2} \right) \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \left(\frac{1-\gamma}{2} \right) \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \lambda \sigma_j^z \right\} \\
 & - \sum_{j=1}^N \alpha \left(\sigma_{j-1}^x \sigma_j^z \sigma_{j+1}^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^z \sigma_{j+1}^y \right), \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

sendo $\sigma_j^{x,y,z}$ as matrizes de Pauli atuando no sítio j :

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

$$\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

N é o número total de spins na cadeia, γ é o grau de anisotropia da cadeia, λ é a força do campo magnético externo e α é a força de interação entre os três spins.

Este modelo pode ser diagonalizado analiticamente. Isso pode ser feito da seguinte maneira. Primeiro devemos fazer um mapeamento dos operadores de spin $\sigma^{x,y,z}$ em operadores fermiônicos sem spin através de uma transformação de Jordan-Wigner dada da seguinte maneira [10]

$$\sigma_j^z = 1 - 2c_j^\dagger c_j, \quad (3.11)$$

$$\sigma_j^x = \prod_{i<j} (1 - 2c_i^\dagger c_i) (c_j^\dagger + c_j) \quad (3.12)$$

e

$$\sigma_j^y = -i \prod_{i<j} (1 - 2c_i^\dagger c_i) (c_j^\dagger - c_j) \quad (3.13)$$

com c_j^\dagger e c_j sendo os operadores criação e aniquilação de fermions sem spin. Utilizando essa transformação podemos reescrever o hamiltoniano do sistema na forma

$$H = - \sum_{j=1}^N \left[c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j + \gamma (c_j^\dagger c_{j+1}^\dagger - c_j c_{j+1}) \right] \quad (3.14)$$

$$+ 2\alpha (c_{j-1}^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_{j-1}) + \lambda (1 - 2c_j^\dagger c_j). \quad (3.15)$$

Para prosseguirmos com a diagonalização desse operador, recorremos à uma transformação de Fourier dos operadores de fermions sem spin

$$c_j = -\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_k \exp \frac{i2\pi k j}{N}, \quad (3.16)$$

com $k = -M, \dots, M$ e $M = \frac{N-1}{2}$ para valores de N ímpar. Em seguida, fazemos uma transformação de Bogoliubov utilizando os operadores

$$d_k = \cos \frac{\theta_k}{2} c_k - i \sin \frac{\theta_k}{2} c_{-k}^\dagger \quad (3.17)$$

sendo o ângulo θ_k definido por $\cos \theta_k = \frac{\epsilon}{\epsilon_k}$ com $\epsilon_k = \sqrt{\epsilon_k^2 + [\gamma \sin(x_k)]^2}$, $\epsilon = \lambda - \cos(x_k) - 2\alpha \cos(2x_k)$ e $x_k = \frac{2\pi k}{n}$. Com isso, podemos escrever o operador hamiltoniano na forma

forma diagonal [20]

$$H = \sum_k 2\varepsilon_k \left(d_k^\dagger d_k - \frac{1}{2} \right). \quad (3.18)$$

Estamos aqui interessados no comportamento das correlações entre dois spins desta cadeia. Precisamos, portanto, definir o operador densidade reduzido que representa estes spins (considerando o estado fundamental da cadeia). Para obtermos tal matriz devemos recorrer a alguns argumentos de simetria. A cadeia XYT possui duas simetrias: a de translação espacial e a chamada simetria Z_2 , ou de paridade. A simetria de translação garante que as correlações entre os dois spins considerados dependam somente da distância entre eles, e não de suas posições específicas na cadeia. A simetria Z_2 é devido à comutação do operador hamiltoniano com o operador paridade $\Sigma_z = \sigma_{1z} \otimes \sigma_{2z} \otimes \cdots \otimes \sigma_{Nz}$. Considerando essas simetrias, a matriz densidade do sistema reduzido de dois spins desta cadeia toma a forma [21]

$$\rho = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 & \rho_{14} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} & 0 \\ 0 & \rho_{32} & \rho_{33} & 0 \\ \rho_{41} & 0 & 0 & \rho_{44} \end{pmatrix}, \quad (3.19)$$

com elementos dados por

$$\rho_{11} = \frac{1}{4} (1 + 2 \langle \sigma^z \rangle + \langle \sigma_i^z \sigma_{i+r}^z \rangle), \quad (3.20)$$

$$\rho_{22} = \rho_{33} = \frac{1}{4} (1 - \langle \sigma_i^z \sigma_{i+r}^z \rangle), \quad (3.21)$$

$$\rho_{23} = \rho_{32} = \frac{1}{4} (\langle \sigma_i^x \sigma_{i+r}^x \rangle + \langle \sigma_i^y \sigma_{i+r}^y \rangle), \quad (3.22)$$

$$\rho_{14} = \rho_{41} = \frac{1}{4} (\langle \sigma_i^x \sigma_{i+r}^x \rangle - \langle \sigma_i^y \sigma_{i+r}^y \rangle), \quad (3.23)$$

$$\rho_{44} = \frac{1}{4} (1 - 2 \langle \sigma^z \rangle + \langle \sigma_i^z \sigma_{i+r}^z \rangle), \quad (3.24)$$

sendo r a distância entre os spins. As expressões das funções correlação de dois pontos $\langle \sigma_0^i \sigma_n^i \rangle$ e da magnetização $\langle \sigma^z \rangle$ são dadas por [20]

$$\langle \sigma^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_k [\epsilon_k \tanh(\beta \epsilon_k)] \frac{1}{\epsilon_k}, \quad (3.25)$$

$$\langle \sigma_0^x \sigma_r^x \rangle = \begin{vmatrix} g_{-1} & g_{-2} & \cdots & g_{-r} \\ g_0 & g_{-1} & \cdots & g_{-r+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ g_{r-2} & g_{r-3} & \cdots & g_{-1} \end{vmatrix}, \quad (3.26)$$

$$\langle \sigma_0^y \sigma_r^y \rangle = \begin{vmatrix} g_1 & g_0 & \cdots & g_{-r+2} \\ g_2 & g_1 & \cdots & g_{-r+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ g_r & g_{r-1} & \cdots & g_1 \end{vmatrix}, \quad (3.27)$$

e

$$\langle \sigma_0^z \sigma_r^z \rangle = \langle \sigma^z \rangle^2 - (g_r g_{-r}), \quad (3.28)$$

com

$$g_r = - \sum_k [\cos(x_k r) \epsilon_k + \gamma \sin(x_k r) \sin(x_k)] \times \tanh(\beta \epsilon_k) \frac{1}{N \epsilon_k}. \quad (3.29)$$

De posse desta matriz densidade, podemos estudar o comportamento de qualquer medida de correlação quântica, como veremos no próximo capítulo.

Esse modelo apresenta duas linhas de transição de fase quânticas, separando as fases ferromagnética, spin-líquido I e spin-líquido II. Nesse modelo, a transição não ocorre para valores específicos de λ e α , como podemos ver na figura 3.8

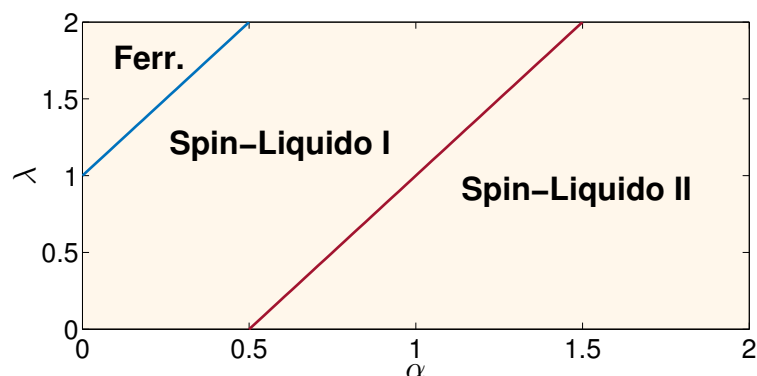


Figura 3.8: Diagrama de fase para o modelo XYT [60].

Notemos que a mudança de fase do sistema depende tanto do valor de α quanto do valor de λ . Por outro lado, os valores de γ não influenciam no comportamento do sistema [59].

3.2.2 Cadeia de spin XY

O modelo de cadeia de spin XYT pode se transformar em outros modelos quando adotamos alguns valores para os parâmetros de anisotropia (γ), interação entre os spins (α) e campo (λ). Um desses modelos é o XY , que é uma cadeia de spin anisotrópica, com interação entre dois spins, e sujeita a uma campo magnético externo na direção z . Portanto, para obtermos o hamiltoniano do modelo XY basta tomarmos o limite $\alpha \rightarrow 0$ na equação (3.7) [18], resultando em

$$H_{XY} = - \sum_{j=1}^N \left\{ \left(\frac{1+\gamma}{2} \right) \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \left(\frac{1-\gamma}{2} \right) \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \lambda \sigma_j^z \right\}. \quad (3.30)$$

Assim como o modelo XYT , este também possui solução analítica, que pode ser obtida por meio de uma transformação de Jordan-Wigner seguido por uma transformação de Bogoliubov [19], da mesma maneira que no modelo XYT.

Para obtermos o estado reduzido de dois spins, vamos utilizar o estado térmico à temperatura finita e levar em conta a simetria Z_2 que o modelo, assim como o modelo XYT , também possui, além da simetria translacional. Com isso, de maneira completamente

análoga ao caso anterior, é possível encontrarmos o estado reduzido do sistema para os spins 0 e n , que é dado por [13]

$$\rho_{0n} = \frac{1}{4} \{ \mathbf{I}^{0n} + \langle \sigma^z \rangle (\sigma_0^z + \sigma_n^z) + \sum_{i=x,y,z} \langle \sigma_0^i \sigma_n^i \rangle \sigma_0^i \sigma_n^i \} \quad (3.31)$$

Esse sistema também apresenta invariância translacional e, portanto, o estado reduzido tem dependência apenas da distância entre os spins considerados.

As expressões das funções correlação de dois pontos $\langle \sigma_0^i \sigma_n^i \rangle$ e da magnetização $\langle \sigma^z \rangle$ para este modelo são dadas por [18]

$$\langle \sigma^z \rangle = - \int_0^\pi \frac{(1 + \lambda^{-1} \cos \phi) \tanh(\beta \omega_\phi)}{2\pi \omega_\phi} d\phi \quad (3.32)$$

$$\langle \sigma_0^x \sigma_r^x \rangle = \begin{vmatrix} G_{-1} & G_{-2} & \cdots & G_{-r} \\ G_0 & G_{-1} & \cdots & G_{-r+1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_{r-2} & G_{r-3} & \cdots & G_{-1} \end{vmatrix}, \quad (3.33)$$

$$\langle \sigma_0^y \sigma_r^y \rangle = \begin{vmatrix} G_1 & G_0 & \cdots & G_{-r+2} \\ G_2 & G_1 & \cdots & G_{-r+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ G_r & G_{r-1} & \cdots & G_1 \end{vmatrix}, \quad (3.34)$$

e

$$\langle \sigma_0^z \sigma_r^z \rangle = \langle \sigma^z \rangle^2 - (G_r G_{-r}), \quad (3.35)$$

sendo $\omega_\phi = \sqrt{(\gamma \lambda^{-1} \sin \phi)^2 + (1 + \lambda^{-1} \cos \phi)^2} / 2$, $\beta = 1/kT$, k a constante de Boltzmann e

$$G_r \equiv \int_0^\pi \frac{\tanh(\beta \omega_\phi)}{2\pi \omega_\phi} [\cos(r\phi)(1 + \lambda^{-1} \cos \phi) - \gamma \lambda^{-1} \sin(r\phi) \sin \phi] d\phi. \quad (3.36)$$

Esse modelo possui uma transição de fase quântica governada pelo parâmetro λ . A transição que ocorre aqui é uma transição de segunda ordem, no valor crítico $\lambda_c = 1$. Para

valores de $\lambda > 1$, a magnetização na direção x assume valores diferentes de zero. Por outro lado, para valores de $\lambda < 1$, a magnetização na direção x se anula. A magnetização na direção z é diferente de zero para todos os valores de λ . Podemos considerar então, a magnetização na direção x como um parâmetro de ordem para o modelo XY [16], sinalizando a transição de fase que ocorre na linha crítica $\lambda_c = 1$.

3.2.3 Cadeia de spin-1

Nessa seção apresentaremos um modelo que se diferencia dos apresentados anteriormente. Temos aqui um modelo formado por átomos de spin-1, ou seja, temos uma cadeia de partículas bosônicas, diferentemente do caso dos modelos anteriores, que são formados por partículas de spin- $\frac{1}{2}$, que são fermiônicas. Átomos bosônicos (a baixas temperaturas) podem ser aprisionados por redes óticas como observado em [61, 62], formando as cadeias que podem ser descritas por este modelo.

Aqui consideraremos um modelo mais simples, mas que já apresenta propriedades interessantes, como veremos. Nosso sistema é formado por dois átomos de spin-1, localizados em uma rede ótica. A dinâmica de átomos bosônicos em redes óticas pode ser descrita pelo chamado modelo de Bose-Hubbard [63]. Redes óticas podem ser formadas por lasers ortogonais, criando poços de potenciais que podem ser controlados pela intensidade dos lasers [9, 63]. Os átomos encontram-se no regime denominado de Mott, garantindo a existência de apenas um átomo por poço [8]. Cada átomo pode assumir um dos três estados possíveis de spin, -1 , 0 ou 1 , aos quais associamos os estados $|-1\rangle$, $|0\rangle$ e $|1\rangle$, respectivamente. Podemos representar o operador hamiltoniano do sistema na forma conhecida como de Bose-Hubbard [9]

$$H = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + K(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + B(\mathbf{S}_1^z + \mathbf{S}_2^z) \quad (3.37)$$

sendo J a constante de acoplamento linear e K a constante de acoplamento não-linear, enquanto \mathbf{S}_n é o operador de spin atuando no sítio n . O terceiro termo da equação (3.37) é

referente a presença de um campo magnético B alinhado na direção z , perpendicular a cadeia. Por simplicidade, tomaremos $J \gg K$ fazendo com que a parte não-linear possa ser ignorada, o que leva o hamiltoniano a ser escrito na forma [9]

$$H = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) + B(S_1^z + S_2^z). \quad (3.38)$$

Escrevendo explicitamente a expressão acima e assumindo que o termo de acoplamento no eixo z é muito menor que o termo de acoplamento nos eixos x e y , temos

$$H = J(S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + B(S_1^z + S_2^z). \quad (3.39)$$

A representação matricial do operador de spin, para o caso de sistemas de spin-1, é dada por [9]

$$S^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$S^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$

$$S^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

Por fim, podemos usar os operadores de abaixamento e levantamento definidos, respectivamente, na forma [8]:

$$S^- = S^x - iS^y \quad (3.40)$$

e

$$S^+ = S^x + iS^y, \quad (3.41)$$

para obter o operador hamiltoniano dado da seguinte maneira:

$$H = \frac{J}{2}(S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+) + B(S_1^z + S_2^z). \quad (3.42)$$

Os autovalores e autovetores do operador hamiltoniano dado pela equação (3.42) podem ser obtidos analiticamente, sendo dados por [8]:

$$H |1, 1\rangle = 2B |1, 1\rangle, \quad (3.43)$$

$$H |-1, -1\rangle = -2B |-1, -1\rangle, \quad (3.44)$$

$$H |\psi_1\rangle = 0, \quad (3.45)$$

$$H |\psi_2^\pm\rangle = \frac{1}{2}(-2B \pm J) |\psi_2^\pm\rangle, \quad (3.46)$$

$$H |\psi_3^\pm\rangle = \frac{1}{2}(2B \pm J) |\psi_3^\pm\rangle, \quad (3.47)$$

$$H |\psi_4^\pm\rangle = \pm \frac{J}{\sqrt{2}} |\psi_4^\pm\rangle. \quad (3.48)$$

e

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, -1\rangle - |-1, 1\rangle), \quad (3.49)$$

$$|\Psi_2^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0, -1\rangle \pm |-1, 0\rangle), \quad (3.50)$$

$$|\Psi_3^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle \pm |0, 1\rangle), \quad (3.51)$$

$$|\Psi_4^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |-1, 1\rangle \pm |0, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1, -1\rangle. \quad (3.52)$$

Quando o sistema está em equilíbrio térmico a uma dada temperatura T , podemos representar o operador densidade do sistema como [9]:

$$\rho(T) = \frac{1}{Z} \sum_i e^{-\frac{E_i}{T}} |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (3.53)$$

sendo $|\psi_i\rangle$ os autovetores correspondente aos autovalores E_i e $Z = \text{Tr} e^{-\frac{H}{T}}$ a função de partição, considerando $k_b \equiv 1$. Utilizando os autovalores e autovetores calculados anteriormente,

podemos encontrar o operador densidade para o sistema dado por:

$$\begin{aligned}
\rho(T) = & \frac{1}{Z} \{ |\Psi_1\rangle \langle \Psi_1| + e^{\left(\frac{-2B}{T}\right)} |-1, -1\rangle \langle -1, -1| \\
& + e^{\frac{2B}{T}} |1, 1\rangle \langle 1, 1| + e^{\left(\frac{J}{2T} - \frac{B}{T}\right)} |\Psi_2^+\rangle \langle \Psi_2^+| \\
& + e^{\left(\frac{-J}{2T} - \frac{B}{T}\right)} |\Psi_2^-\rangle \langle \Psi_2^-| + e^{\left(\frac{J}{2T} + \frac{B}{T}\right)} |\Psi_3^+\rangle \langle \Psi_3^+| \\
& + e^{\left(\frac{B}{T} - \frac{J}{2T}\right)} |\Psi_3^-\rangle \langle \Psi_3^-| + e^{\left(\frac{\sqrt{2}J}{2T}\right)} |\Psi_4^+\rangle \langle \Psi_4^+| \\
& + e^{\left(\frac{-\sqrt{2}J}{2T}\right)} |\Psi_4^-\rangle \langle \Psi_4^-| \},
\end{aligned} \tag{3.54}$$

com a função de partição $Z = 1 + 2 \cosh\left(\frac{2B}{T}\right) + 4 \cosh\left(\frac{B}{T}\right) \cosh\left(\frac{\sqrt{2}J}{2T}\right) + 4 \cosh\left(\frac{\sqrt{2}J}{2T}\right)$ e os valores de m e n dados por $m = \frac{J}{2T}$ e $n = \frac{B}{T}$.

Sistemas descritos pelo modelo de Bose-Hubbard predizem transição de fase entre as fases superfluida (SF) e isolante de Mott (IM) [63]. A fase SF é caracterizada por uma ocupação desigual dos sítios da rede e por uma grande flutuação do número de ocupação dos sítios. Já a fase IM é caracterizada por uma pequena flutuação do número de ocupação dos sítios e por uma igualdade da quantidade de átomos em cada sítio da rede.

No entanto, esta transição ocorre para um grande número de átomos e o nosso sistema possui apenas dois átomos, não apresentando portanto essa transição. O que ocorre aqui é uma transição da fase anti-ferromagnética, quando os spins estão paralelos e apontando em sentidos diferentes (com relação ao campo magnético externo de referência), para a fase ferromagnética, em que os spins continuam paralelos mas agora apontando no mesmo sentido. A constante de troca J é a responsável pela transição de fase. Quando temos $J > 0$ o sistema está na fase anti-ferromagnética e quando $J < 0$ o sistema encontra-se na fase ferromagnética [9].

Capítulo 4

Correlações quânticas e cadeias de spins

Neste capítulo apresentamos estudos sobre o comportamento das correlações quânticas, como medidas pelo emaranhamento e pela incerteza quântica local, nas cadeias de spins discutidas no capítulo anterior, a saber, as cadeias fermiônicas descritas pelos modelos XY e XYT , bem como para um modelo bosônico de spin-1. Nosso principal interesse aqui é na região de criticalidade, onde a transição de fase ocorre. Também apresentamos uma discussão sobre resultados obtidos na literatura para a discórdia quântica nesses modelos. Como veremos, os resultados aqui mostrados claramente revelam que correlações quânticas são uma ferramenta extremamente útil para o estudo de fenômenos críticos na física de muitos corpos.

4.1 Modelo XY

O modelo matemático aqui utilizado está descrito na seção 3.2.2. O operador hamiltoniano que representa este sistema é dado pela equação (3.30):

$$H_{XY} = - \sum_{j=1}^N \left\{ \left(\frac{1+\gamma}{2} \right) \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \left(\frac{1-\gamma}{2} \right) \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \lambda \sigma_j^z \right\}.$$

Esse modelo possui uma transição de fase quântica de segunda ordem que ocorre

quando atingimos o ponto crítico $\lambda_c = 1$, que separa os comportamentos ferromagnético e paramagnético que o sistema pode assumir. As próximas duas subseções consideram o comportamento do emaranhamento e da incerteza quântica local, LQU, respectivamente, para este modelo.

4.1.1 Emaranhamento

Este tipo de correlação foi estudado, para este modelo, nas referências [13, 15, 18]. Apresentaremos, aqui, as principais conclusões obtidas nestas referências.

Considerando o estado reduzido de dois spins desta cadeia, como mostrado no capítulo anterior, procederemos com o estudo do emaranhamento, como calculado pela concorrência [45]. Vamos considerar o seguinte intervalo de variação para os parâmetros físicos do modelo: $\gamma \in [0, 1]$ e $\lambda \in [0, 2]$. Consideraremos a temperatura nula. Isto é, o estado fundamental da cadeia completa é o estado térmico à temperatura zero, e o estado reduzido dos dois spins é então o traço parcial deste estado global sobre todos os qubits, menos os dois considerados.

Na figura 4.1 apresentamos o comportamento do emaranhamento quando consideramos os primeiros vizinhos da cadeia.

Percebe-se que o emaranhamento apresenta um rápido decaimento nas proximidades do ponto crítico do sistema e torna-se descontínuo em $\lambda = 1$ para valores do parâmetro de anisotropia, γ , próximos de zero. Por outro lado, tem um comportamento contínuo quando γ assume valores mais elevados. Podemos notar também que o emaranhamento apresenta comportamentos diferentes com relação à variação de γ em fases distintas. Para o intervalo $0 < \lambda < 1$ o emaranhamento cresce com o aumento de γ , comportamento contrário ao observado para o intervalo $1 < \lambda < 2$, em que o emaranhamento decresce com o aumento de γ .

Como ressaltado anteriormente, esperamos que as correlações apresentem um com-

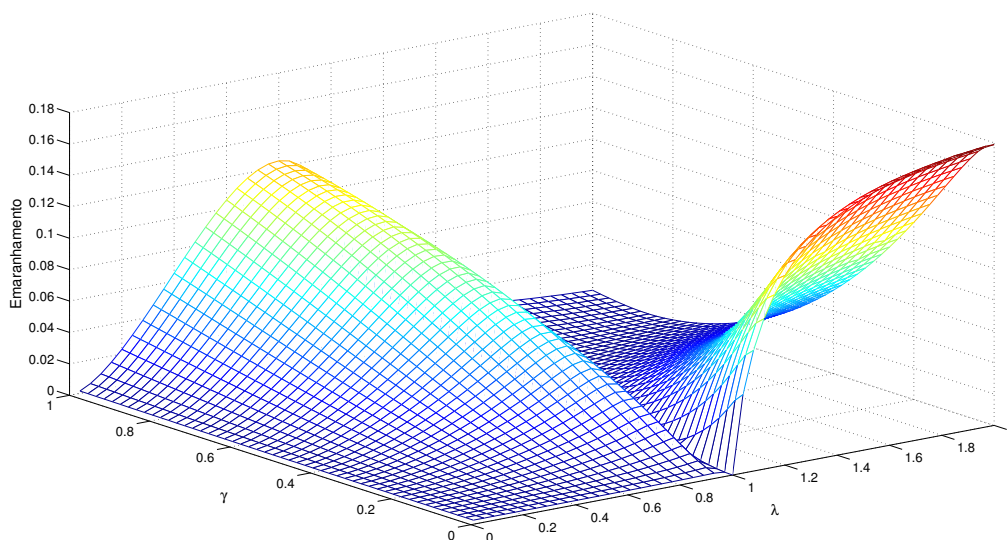


Figura 4.1: Emaranhamento, considerando os primeiros vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$.

portamento de longo alcance na região crítica, isto é, esperamos que spins distantes ainda mantenham correlação. Para investigarmos essa expectativa, nas figuras 4.2, 4.3 e 4.4 mostramos o comportamento do emaranhamento considerando os segundos, terceiros e quartos vizinhos da cadeia. Os n -ésimos vizinhos da cadeia são àqueles que distam nb um do outro, sendo b o parâmetro de rede.

Nota-se que o decaimento no ponto de criticalidade se mantém quando tomamos vizinhos mais distantes que os primeiros. No entanto, ocorre um decréscimo considerável no valor do emaranhamento. Quanto mais distantes estiverem os spins, mais próximo de zero estará o valor do emaranhamento. Para os terceiros e quartos vizinhos, temos que considerar também o valor da constante de anisotropia do sistema, pois, nesses casos, só há emaranhamento para valores de γ próximos de zero, mostrando que o emaranhamento é fortemente influenciado pela distância entre os sítios, não concordando com o comportamento apresentado pelo comprimento de correlação, que é de longo alcance. Tal fato indica uma diferença clara entre estes dois tipos de correlações, e também revela que o emaranha-

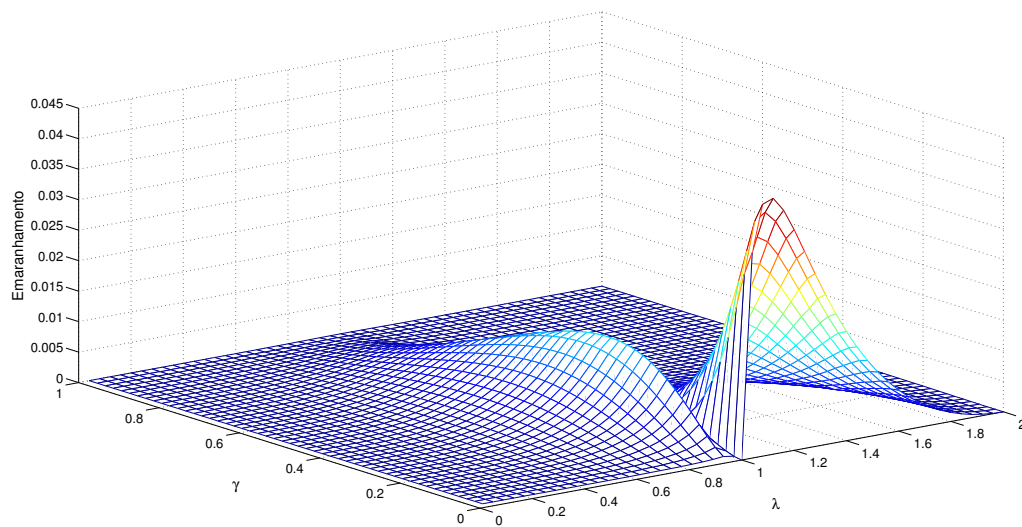


Figura 4.2: Emaranhamento, considerando os segundos vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$.

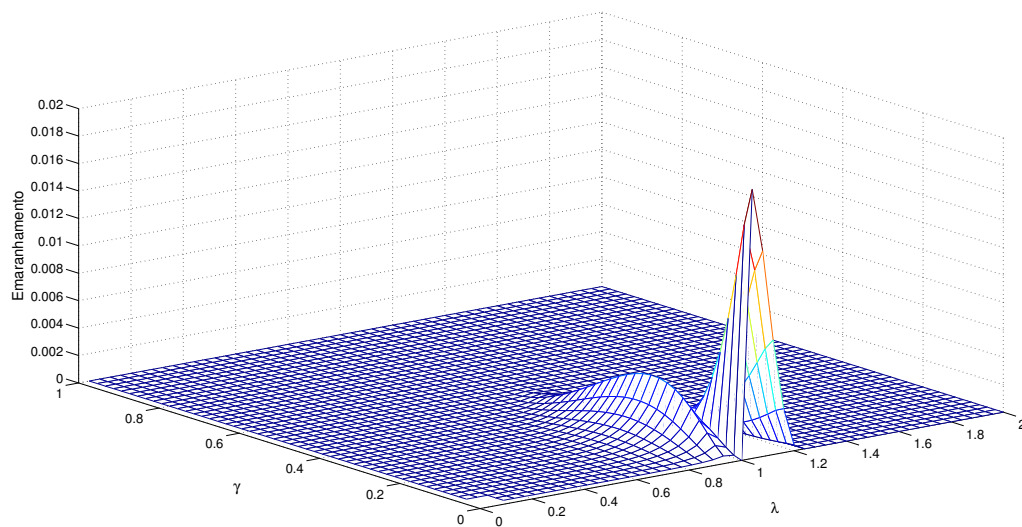


Figura 4.3: Emaranhamento, considerando os terceiros vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$.

mento é um tipo mais frágil de correlação.

Podemos dizer que o emaranhamento é um bom indicador da transição de fase

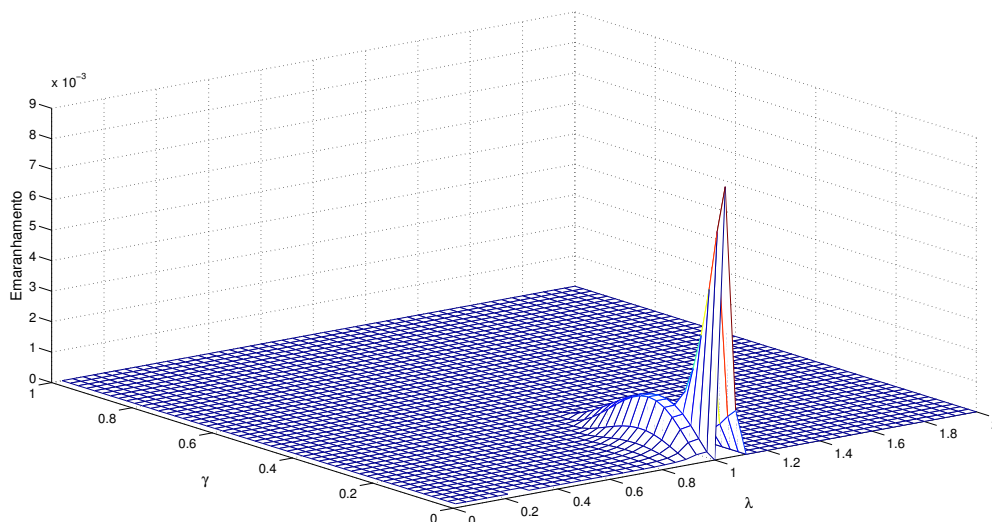


Figura 4.4: Emaranhamento, considerando os quartos vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$.

quântica nesse modelo quando estivermos tratando do emaranhamento entre os primeiros vizinhos, para valores de γ próximo de zero. Porém, quando consideramos emaranhamento entre vizinhos mais distantes, temos dificuldades em identificar a transição devido ao rápido decaimento do emaranhamento, bem como sua nulidade para constantes de anisotropias $\gamma \sim 1$ para os primeiros vizinhos, acima de $\gamma = 0.5$, para o emaranhamento entre os terceiros vizinhos e $\gamma \sim 0.3$, para o caso do emaranhamento entre os quartos vizinhos.

Vamos agora considerar o comportamento de outro tipo de correlação quântica, como medido pela incerteza local quântica, LQU.

4.1.2 LQU

Um estudo da LQU para o modelo XY pode ser encontrado na referência [59].

Consideramos aqui a mesma faixa de variação dos parâmetros do sistema que foram consideradas na seção precedente, bem como temperatura nula. Utilizamos a forma fechada apresentada na seção 2.3.2 para a construção dos gráficos apresentados, considerando a cor-

relação entre os primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos, da mesma maneira que procedemos no caso do emaranhamento.

Na figura 4.5 podemos ver o comportamento da LQU considerando a interação entre os primeiros vizinhos da cadeia quando variamos os parâmetros do sistema.

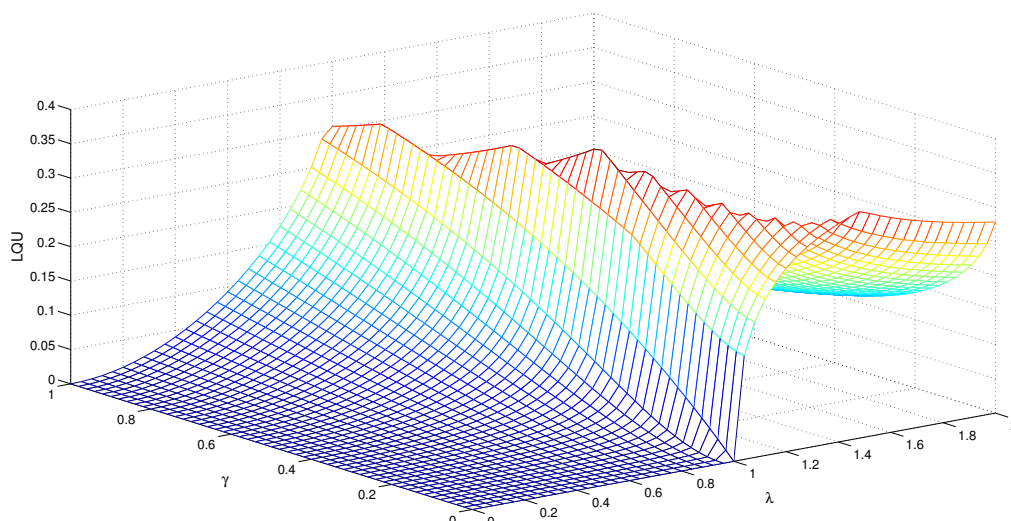


Figura 4.5: Incerteza quântica local, considerando os primeiros vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$.

Notemos que, no ponto de criticalidade do modelo, $\lambda_c = 1$, a LQU apresenta uma grande variação no seu valor, apresentando des-continuidade nessa região. Devido a essa descontinuidade esperamos que a derivada da LQU nos forneça uma função que possua uma divergência nesse ponto, sinalizando a transição de fase quântica. A referência [59] apresenta um estudo sobre a LQU juntamente com o comportamento de sua primeira derivada com respeito a λ . A derivada da LQU entre os primeiros sítios vizinhos apresenta um comportamento divergente sob a linha de transição de fase, podendo ser considerada como uma boa identificadora da transição de fase quântica que ocorre nesse sistema [59].

Para analisarmos o comportamento de longo alcance da LQU, consideremos a interação entre vizinhos mais distantes. Tal comportamento para os segundos, terceiros e quar-

tos vizinhos são apresentado nas figuras 4.6, 4.7 e 4.8, respectivamente.

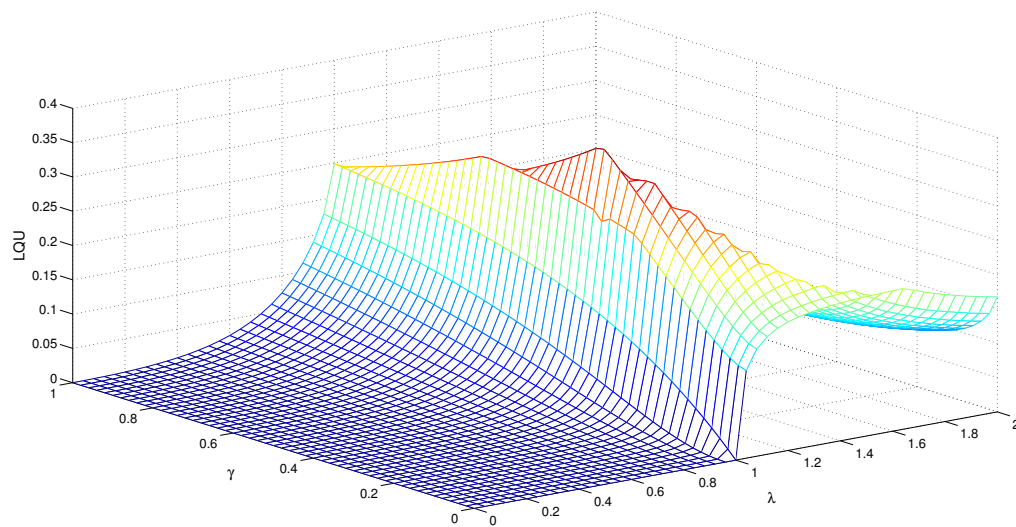


Figura 4.6: Incerteza quântica local, considerando os segundos vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$.

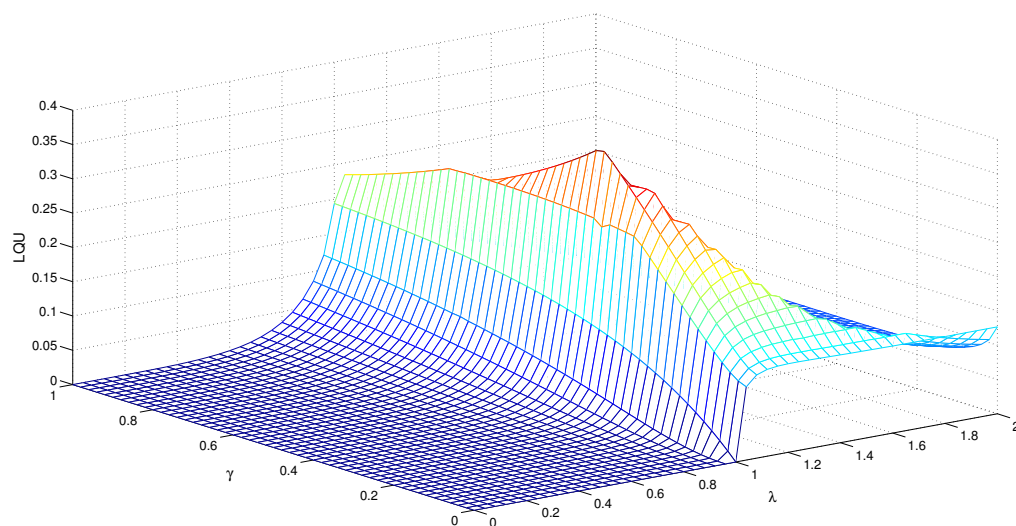


Figura 4.7: Incerteza quântica local, considerando os terceiros vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$.

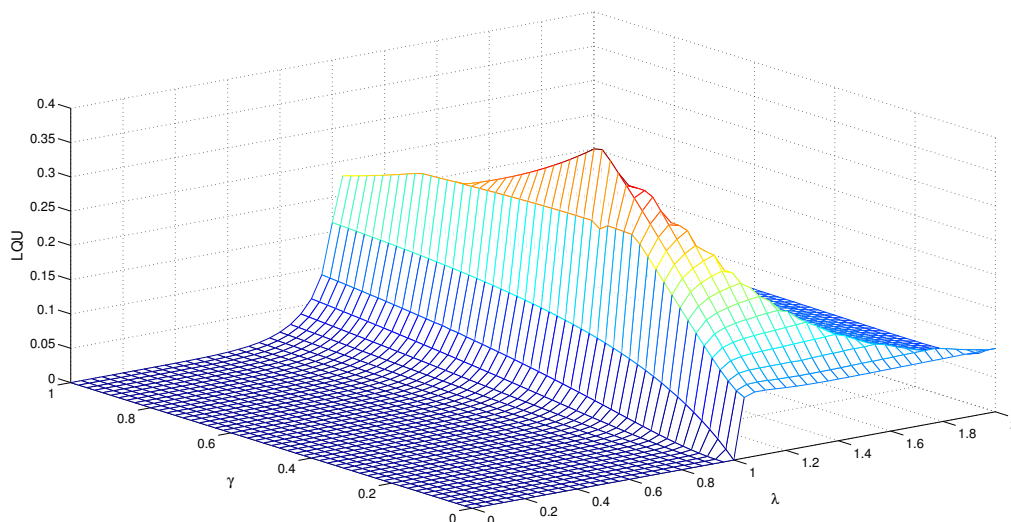


Figura 4.8: Incerteza quântica local, considerando os quartos vizinhos, como função dos parâmetros γ e λ para o modelo XY , para temperatura $T = 0$.

Podemos notar que o comportamento da LQU é similar em todos os casos, possuindo uma descontinuidade no ponto de transição de fase. A primeira derivada da LQU também apresenta divergência para quando tomamos vizinhos mais distantes [59]. Portanto, a transição de fase quântica desse modelo pode ser estudada através do comportamento da LQU (e de sua primeira derivada) entre os spins vizinhos da cadeia. Temos também uma grande diferença entre as correlações nas diferentes fases que o sistema pode estar mostrando que há um grande crescimento da correlação quântica na transição de fase.

Diferentemente do que ocorre com o emaranhamento, a LQU é uma boa quantidade para a identificação da transição de fase para todos os valores de γ e não tem um decaimento muito grande quando tomamos os vizinhos mais distantes. Isso, além de mostrar uma das diferenças entre estes dois tipos de correlação quântica, emaranhamento e LQU, também indica que a LQU é mais robusta e apresenta comportamento compatível com o do comprimento de correlação, sendo de longo alcance, indicando que o sistema, na região crítica, está fortemente correlacionado também no nível quântico. Portanto, podemos considerá-la

como uma boa indicadora de transição de fase quântica para esse modelo, tanto devido a grande diferença entre as correlações nas diferentes fases, quanto com relação ao não desaparecimento para vizinhos mais distantes.

Cálculos da discórdia quântica para este modelo considerando primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos foram apresentados nas referências [18, 19]. Nesses trabalhos são apresentados o comportamento da discórdia quântica com a variação dos parâmetros $\gamma \in [0, 1]$ e $\lambda \in [0, 2]$, considerando também temperatura nula, e variando a distância entre os sítios. Os resultados apresentados mostram que a discórdia tem um pequeno decréscimo com o aumento da distância entre os sítios e que há uma grande diferença entre a correlação nas regiões $\lambda > 1$ e $\lambda < 1$, o que faz com que o comportamento da discórdia seja similar ao comportamento da LQU, diferente então do emaranhamento. Além do mais, no ponto crítico do sistema temos uma taxa máxima de crescimento dessa função. Portanto, a medida da discórdia nesse modelo é, também, considerada como um bom identificador de transição de fase quântica.

Na próxima seção veremos o que ocorre com essas medidas de correlação quântica quando adotamos um modelo um pouco mais geral que o XY , a cadeia de spin 1/2 com interação entre três spins vizinhos, o modelo XYT .

4.2 Modelo XYT

Nessa seção, apresentamos os resultados para as correlações quânticas no modelo apresentado na seção 3.2.1. O operador hamiltoniano que descreve esse modelo é dado pela equação (3.7):

$$H_{XYT} = - \sum_{j=1}^N \left\{ \left(\frac{1+\gamma}{2} \right) \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \left(\frac{1-\gamma}{2} \right) \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \lambda \sigma_j^z \right\} \\ - \sum_{j=1}^N \alpha \left(\sigma_{j-1}^x \sigma_j^z \sigma_{j+1}^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^z \sigma_{j+1}^y \right).$$

Mais uma vez considerando um operador densidade reduzido de dois spins da cadeia. Consideraremos novamente a LQU, o emaranhamento e a discórdia quântica.

Para este modelo, a LQU foi estudada na referência [59]. Um estudo sobre a discórdia quântica pode ser encontrada na referências [20] e a referência [15] apresenta um estudo sobre o emaranhamento entre dois sítios desta cadeia.

4.2.1 LQU

Aqui calculamos a LQU para o modelo descrito na seção 3.2.1. Esse modelo se diferencia do modelo XY devido a interação entre três spins, enquanto o modelo XY apresenta apenas interação entre pares de spins. A intensidade dessa interação é governada pelo parâmetro α . Quando tomamos $\alpha = 0$ recaímos no caso da cadeia de spin descrita pelo modelo XY . Calculamos a LQU variando os valores dos parâmetros λ e α no intervalo $[0, 2]$, mantendo a temperatura nula e o valor de $\gamma = 0.5$ fixo. Os cálculos foram realizados considerando uma cadeia finita, com $N = 2000$ spins.

O comportamento da LQU considerando os primeiros vizinhos apenas, isto é, tomando dois spins separados por uma distância igual ao parâmetro de rede, é apresentado na figura 4.9.

Podemos perceber que há um crescimento súbito do valor da LQU em uma determinada faixa de valores para α e λ . Para entender o que ocorre nessa região, vamos recorrer a figura 4.10 que representa o diagrama de fase para o modelo XYT em função de α e λ .

O diagrama de fase nos mostra que esse sistema possui três fases para os intervalos considerados dos parâmetros $\alpha \in [0, 2]$ e $\lambda \in [0, 2]$, as fases spin-líquido I (SL1) e spin-líquido II (SL2) bem como uma fase ferromagnética [60]. Comparando o diagrama apresentado aqui com os resultados obtidos para a LQU, podemos perceber que a mudança brusca no comportamento da correlação quântica ocorre nas proximidades da linha de transição de fase do sistema, tanto da linha de transição entre as fases ferromagnética-SL1 quanto para

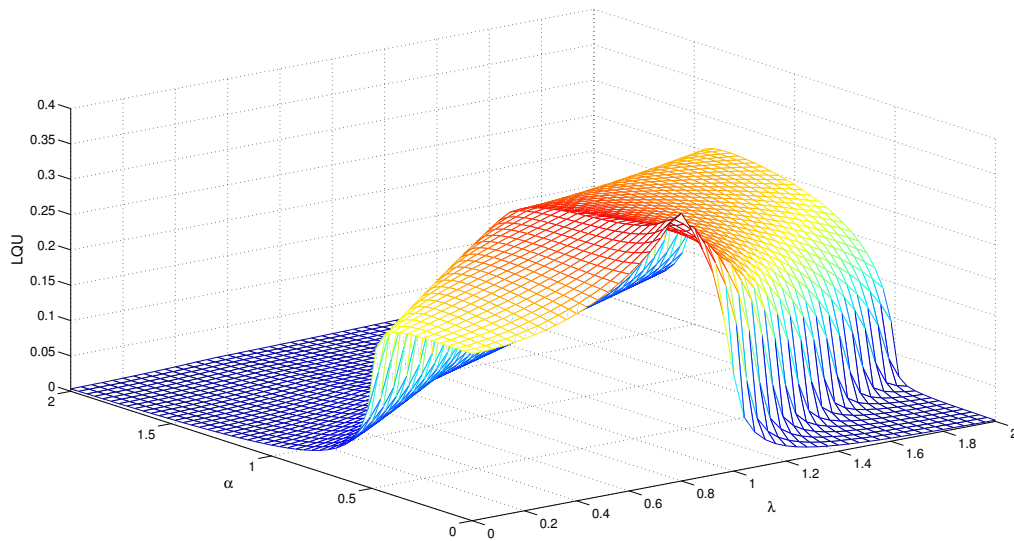


Figura 4.9: LQU considerando os primeiros vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 2000$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$.

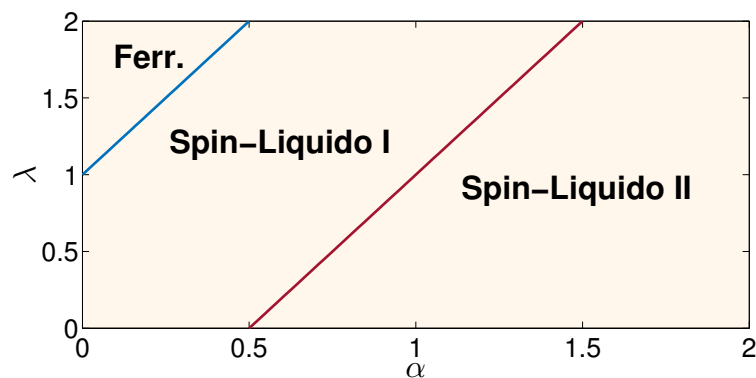


Figura 4.10: Diagrama de fase para o modelo XYT [60].

a proximidade da linha de transição entre as fases SL1-SL2. Isso nos mostra que a LQU claramente muda de comportamento quando atravessa uma linha crítica.

Agora nos perguntamos se a LQU apresenta, neste caso, o mesmo comportamento de longo alcance observado para o modelo XY . Para responder a essa pergunta, mostramos o comportamento da LQU para os segundos, terceiros e quartos vizinhos nas figuras 4.11, 4.12 e 4.13, respectivamente.

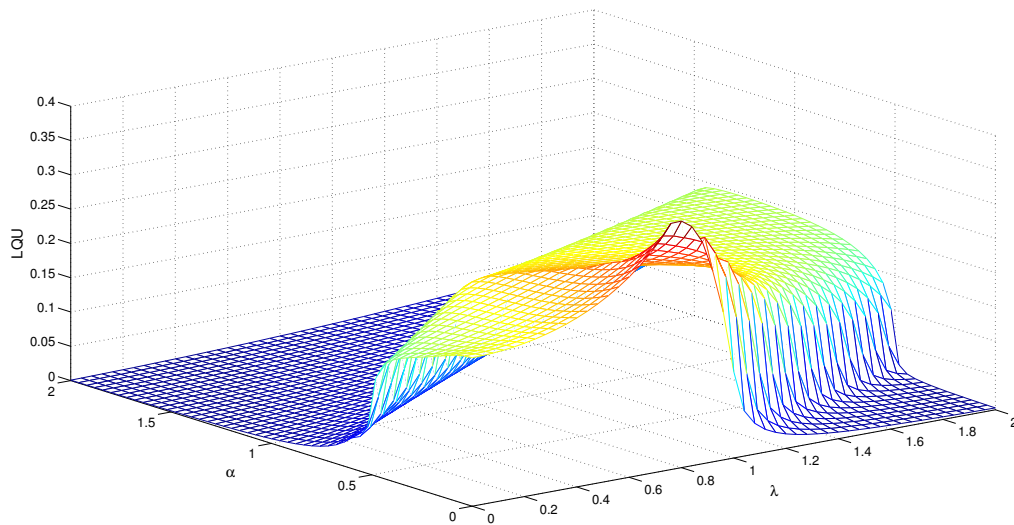


Figura 4.11: LQU considerando os segundos vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 2000$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$.

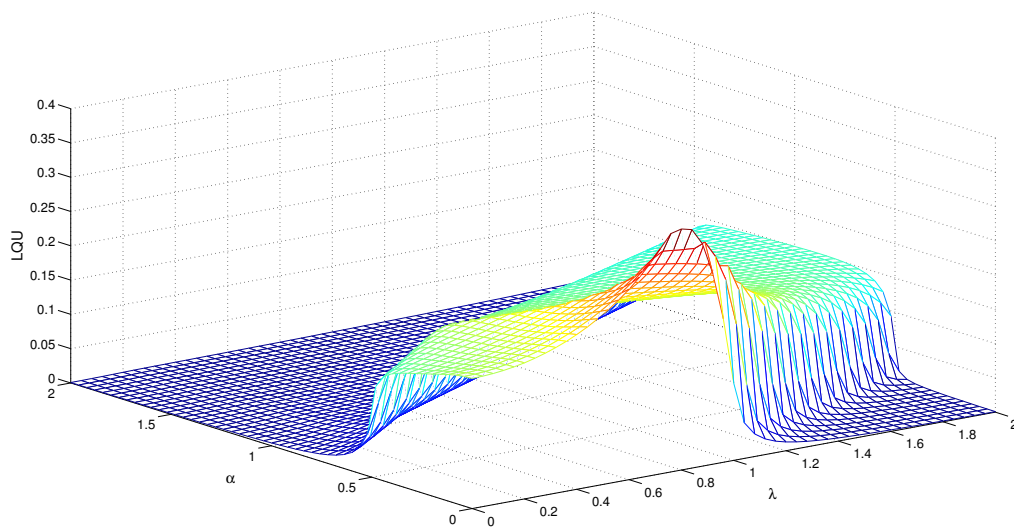


Figura 4.12: LQU considerando os terceiros vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 2000$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$.

Podemos perceber que o comportamento da LQU, quando tomamos vizinhos mais distantes, se mantém qualitativamente inalterado, assim como ocorre para o comportamento

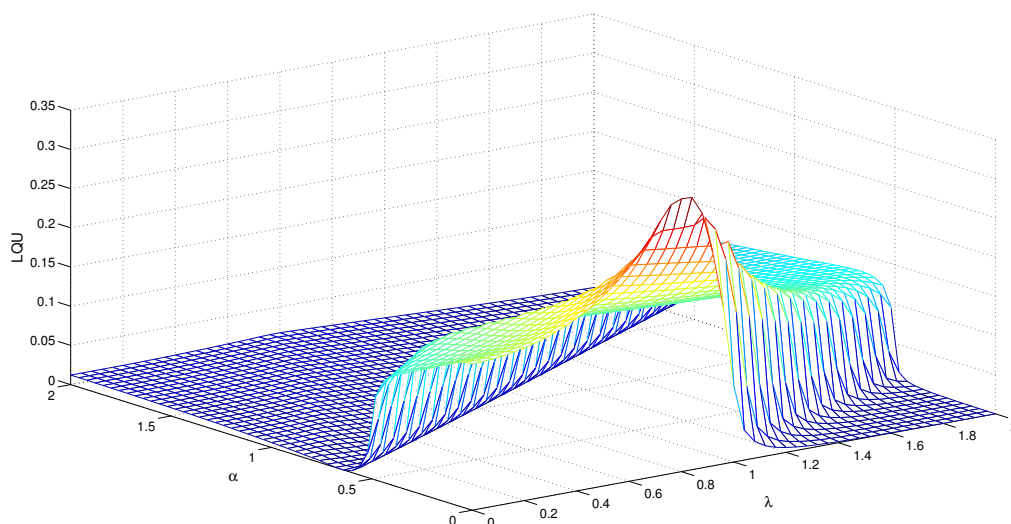


Figura 4.13: LQU considerando os quartos vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 2000$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$.

da LQU para o modelo XY , ou seja, a LQU não sofre forte influência da distancia entre os sítios para o qual está sendo calculada. Importante citarmos aqui que o comportamento qualitativo da LQU para qualquer distância entre os sítios também não sofre influência do valor do parâmetro de anisotropia do sistema, portanto, para qualquer valor de γ a LQU terá um comportamento similar. O mesmo ocorre quando variamos o tamanho da cadeia, como podemos ver na figura 4.14, onde estamos considerando a LQU entre os primeiros vizinhos para uma cadeia de tamanho $N = 100$ spins. Notamos que o comportamento é similar ao apresentado na figura 4.9 que representa a mesma medida para uma cadeia de $N = 2000$ spins. Isso nos diz que, também neste modelo, os spins estão fortemente correlacionados, na região de transição de fase, também no sentido quântico.

Portanto, a correlação quântica medida através da LQU pode ser tomada como uma quantidade útil para o estudo do comportamento crítico de sistemas descritos pelo modelo XYT à temperatura nula, para cadeias finitas e diversos valores da anisotropia, tendo em vista que a mudança quantitativa dessa medida é abrupta nas proximidades das linhas de

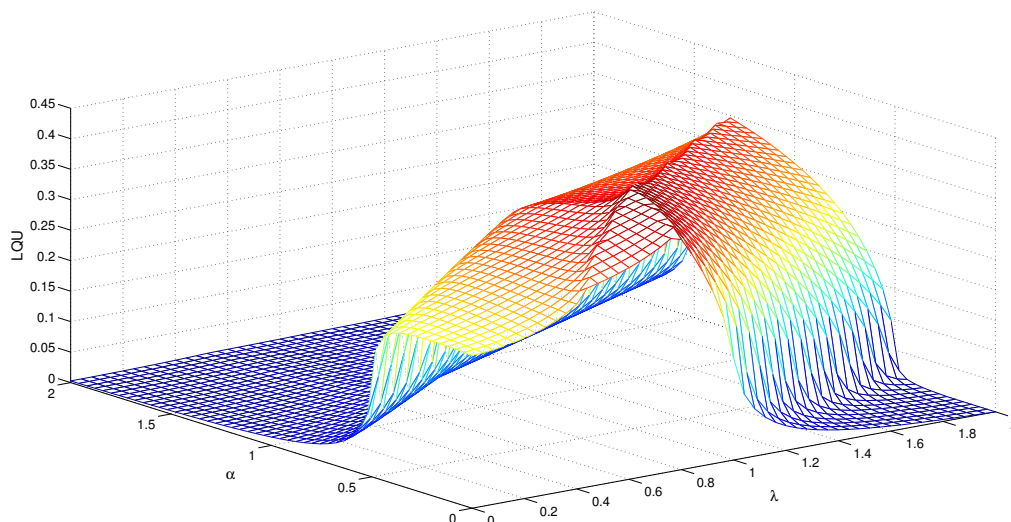


Figura 4.14: LQU considerando os primeiros vizinhos, como função dos parâmetros α e λ , para o modelo XYT com $N = 100$ spins, temperatura $T = 0$ e $\gamma = 0.5$.

transição de fase, linhas críticas do modelo, bem como para diferentes distâncias entre os sítios considerados.

No trabalho [59], os autores apresentam o comportamento da primeira derivada da LQU para o modelo XYT quando variamos os parâmetros α e λ . Foi considerada uma cadeia de tamanho $N = 2000$ spins, à temperatura nula, e $\gamma = 0.5$. Percebe-se que a primeira derivada da LQU tem um comportamento divergente quando o sistema sofre transição de fase, o que era esperado, pois a variação da LQU nessa região é muito grande, como vemos nas figuras acima. Esse comportamento se mantém para diferentes tamanhos de cadeias, diferentes valores de γ e para diferentes distâncias entre os sítios, uma vez que o comportamento da LQU não é alterado sob mudanças desses parâmetro. Isso indica que o sistema está fortemente correlacionado nas regiões críticas. A derivada da LQU é tida, então, como uma identificadora da transição de fase quântica nesse sistema, devido a essa divergência.

Outras medidas de correlação quântica tem sido estudadas nesse sistema. Podemos citar a referência [15] onde os autores apresentam um estudo do emaranhamento neste

sistema, como medido pelo emaranhamento de formação (EoF), para calcular o emaranhamento entre sítios vizinhos. Foi considerada uma cadeia de spins de tamanho $N = 2001$, parâmetro de anisotropia $\gamma = 0.5$ e temperatura nula. O EoF foi calculado em função de α e λ variados no intervalo $[0, 2]$. Os resultados foram semelhantes aos mostrados aqui para a LQU, isto é, o emaranhamento apresenta mudanças súbitas nas regiões onde ocorrem as transições de fase do sistema. Além disso, é mostrado que a derivada do EoF tem um comportamento divergente quando o sistema está na linha de transição, assim como ocorre com a derivada da LQU. O comportamento do EoF e de sua primeira derivada também não variam qualitativamente com crescimento da cadeia ou com a mudança na anisotropia do sistema. Portanto, pode-se considerar o emaranhamento como uma boa ferramenta no estudo da região crítica desse sistema, uma vez que sua derivada também é uma indicadora da transição de fase quântica para o modelo XYT para os vários valores de N e γ , devido sua divergência.

O comportamento da discórdia quântica para uma cadeia XYT foi apresentado na referência [20]. O cálculo foi feito para uma cadeia com $N = 2001$ spins, adotando $\gamma = 0.5$ e variando os parâmetros α e λ e, tomando $\lambda = 0$, variando-se α e γ . Para os dois casos a discórdia apresentou uma mudança brusca nas regiões onde o sistema passava por uma transição de fase, assim como as outras medidas citadas até aqui. No entanto, a diferença do comportamento da discórdia com relação ao comportamento do EoF e da LQU é que, para o caso onde foi assumido $\lambda = 0$, a discórdia apresentou uma singularidade que está relacionada a uma transição de fase de primeira ordem. Já sua primeira derivada com relação ao parâmetro λ e a segunda derivada com relação ao parâmetro γ possuem comportamentos divergentes quando tomamos o limite termodinâmico. O comportamento da discórdia e de suas derivadas são então ferramentas bastante úteis para o estudo e identificação da região crítica de sistemas descritos por esse modelo.

Portanto, temos que, para o modelo de cadeia de spin XYT , as medidas de correlação adotadas aqui se mostraram boas indicadoras das regiões críticas do sistema, assim

como suas derivadas, que divergem nas linhas críticas.

4.3 Spin 1

Nesta última seção trataremos da cadeia bosônica definida na seção 3.3.3. O operador hamiltoniano que descreve esse sistema é dado pela equação (3.39)

$$H = J (S_1^x S_2^x + S_1^y S_2^y) + B (S_1^z + S_2^z). \quad (4.1)$$

Apresentaremos os resultados obtidos para os comportamentos do emaranhamento e da LQU. Além disso, discutiremos, também, os resultados obtidos para a discórdia quântica. O estudo sobre o emaranhamento foi apresentado na referência [8] enquanto o resultado para a LQU é inédito.

4.3.1 Emaranhamento

Estamos considerando um modelo de cadeia de spin-1 com dois spins. Esse modelo possui uma transição de fase que leva o sistema da fase ferromagnética para a fase antiferromagnética, ocorrendo quando variamos a constante de troca J entre os dois spins. O ponto crítico se dá quando $J = 0$, separando os regimes $J > 0$ (fase antiferromagnética) e $J < 0$ (fase ferromagnética) [9].

Para calcular o emaranhamento nesse modelo utilizamos a medida de negatividade e variamos os parâmetros B (campo magnético) e T (temperatura) nos intervalos $[0, 1]$, escolhendo diferentes valores de J .

Na figura 4.15 apresentamos o comportamento do emaranhamento entre os dois átomos da cadeia. Notemos que o emaranhamento sofre forte influência da temperatura e do campo magnético, decaindo com o aumento do campo e da temperatura. No entanto, para temperaturas muito baixas, da ordem de $T = 0.01$, o emaranhamento tem um comportamento diferente com relação ao campo magnético. Para esses valores de temperaturas, o

emaranhamento atinge um valor constante, e máximo, para valores do campo entre $B = 0$ e $B \approx 0.2$. Quando B atinge o valor aproximado de 0.2, o emaranhamento sofre um decaimento súbito, tornando-se constante novamente para o intervalo entre $B \approx 0.3$ e $B \approx 0.5$, onde ocorre outro decaimento súbito, que leva o emaranhamento a zero.

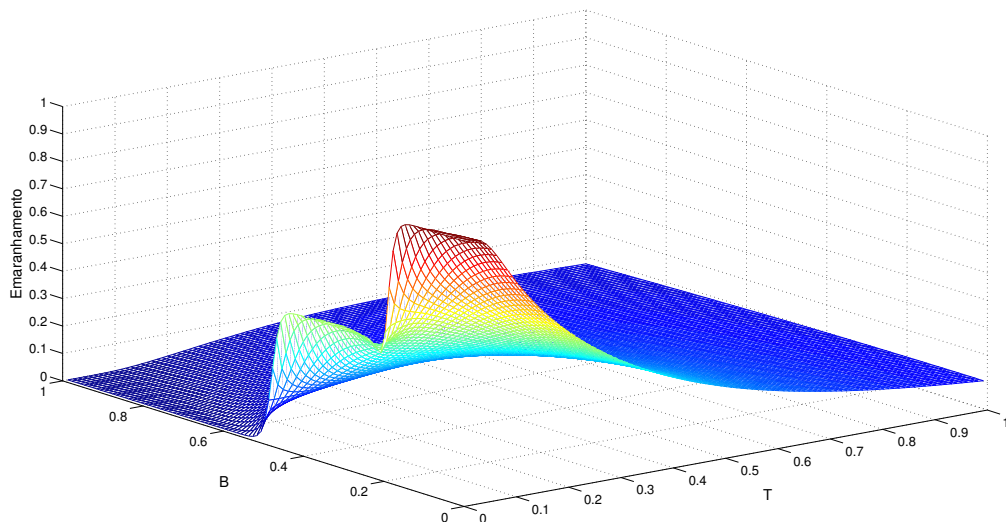


Figura 4.15: Variação do emaranhamento com o campo magnético e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$.

Podemos observar esse comportamento com mais clareza na figura 4.16, onde apresentamos o emaranhamento em função do campo magnético para valores de $J = 1$ e $T = 0.01$.

Para os outros valores de temperatura, como por exemplo $T = 0.1$, como mostrado na figura 4.17 e $T = 0.3$ como mostrado na figura 4.18, temos sempre um decaimento da LQU quando o valor do campo magnético aumenta.

Foi encontrado também o comportamento do emaranhamento em função de B e T para diferentes valores de J . Apresentamos, nas figuras 4.19 e 4.20, a variação do emaranhamento como função dos parâmetros B e T , para os valores de $J = 5$ e $J = 10$, respectivamente.

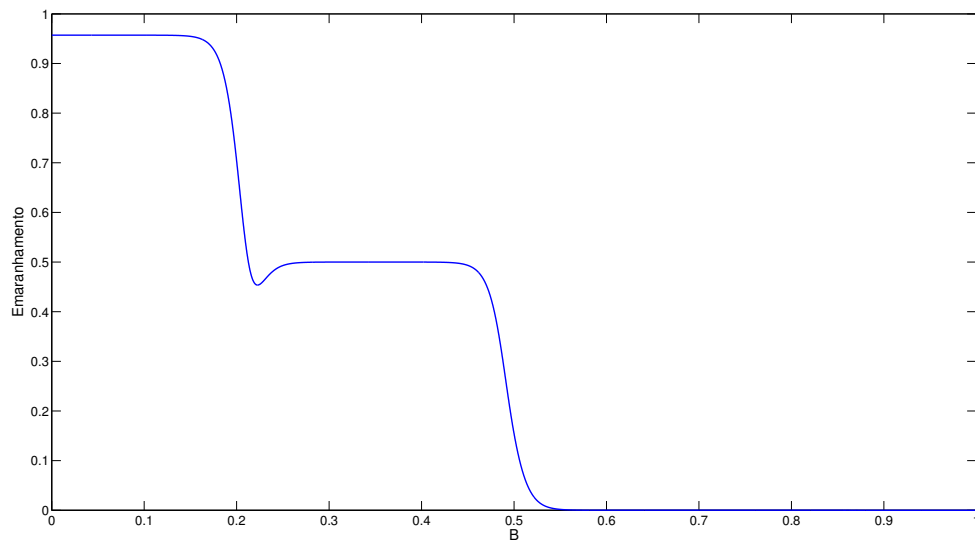


Figura 4.16: Variação do emaranhamento com o campo magnético para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$ e $T = 0.01$.

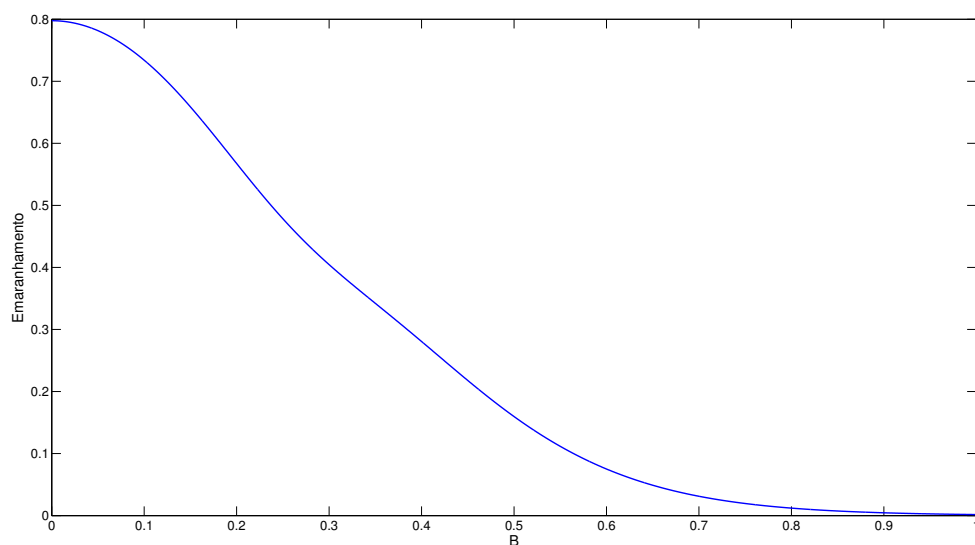


Figura 4.17: Variação do emaranhamento com campo magnético para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$ e $T = 0.1$.

Percebe-se que o emaranhamento continua a sofrer um decaimento com o aumento da temperatura, porém de forma mais suave e passa a sofrer pouca influência do campo

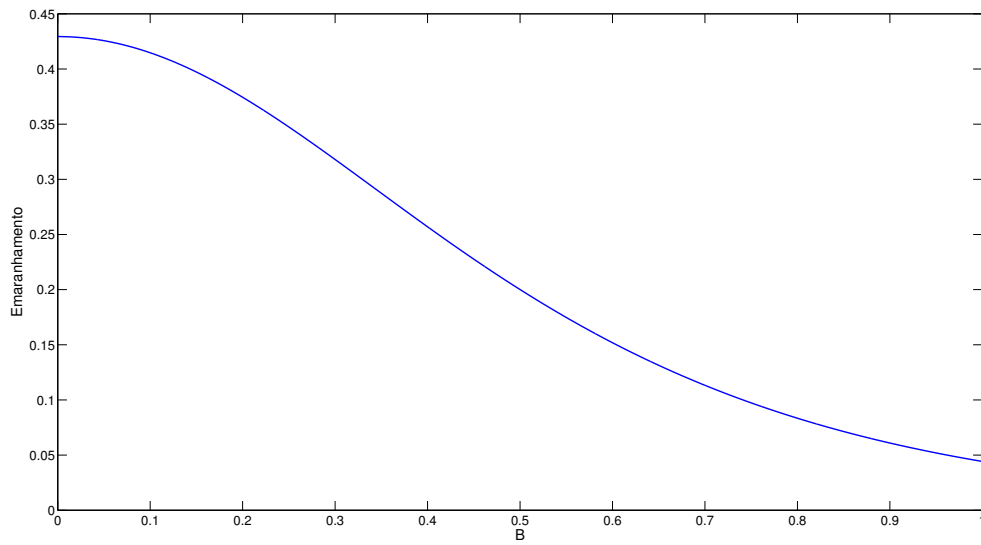


Figura 4.18: Variação do emaranhamento com o campo magnético para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$ e $T = 0.3$.

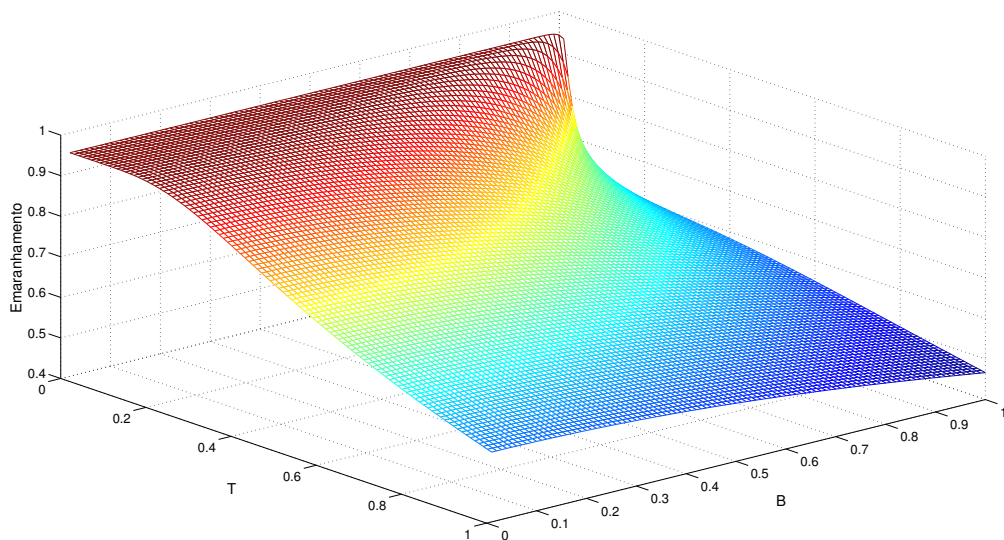


Figura 4.19: Variação do emaranhamento com o campo e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 5$.

magnético. Quanto maior o valor de J , menor será a influência do campo magnético no comportamento da correlação e mais suave será o decaimento dessa correlação com a tem-

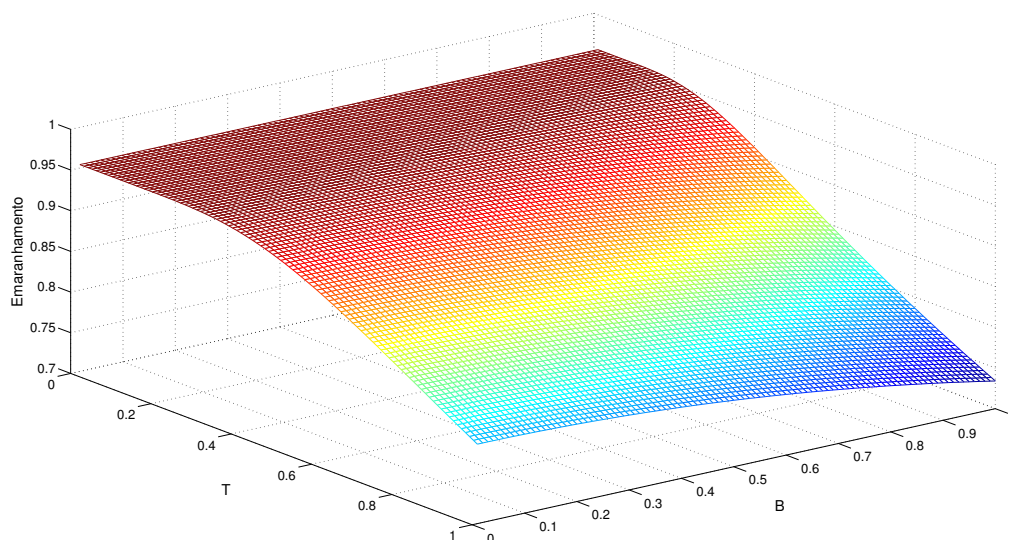


Figura 4.20: Variação do emaranhamento com o campo e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 10$.

peratura. O comportamento contrário pode também ser observado. Quando tomamos um valor muito pequeno para J , observamos que o emaranhamento sofre muita influência do campo magnético e da temperatura. Podemos observar isso na figura 4.21, que nos mostra que, para $J = 0.01$, temos que o emaranhamento entre os dois spins está presente somente para valores muito baixos de B e T . Quando usamos o valor crítico $J = 0$, o emaranhamento torna-se nulo. Portanto, podemos identificar a transição de fase do modelo utilizando esse comportamento do emaranhamento. Além disso, quando tomamos valores de J mais elevados, fazemos com que o emaranhamento entre os spins torne-se mais resistente aos efeitos da temperatura e do campo magnético.

Portanto, o emaranhamento é fortemente influenciado pela temperatura e pelo campo magnético neste sistema, decaindo com seu crescimento. No entanto, a escolha do valor da constante de troca do sistema também tem grande influência no comportamento do emaranhamento, nesse caso, quanto maior for o valor da constante de troca, menos influência dos parâmetros B e T o emaranhamento sofrerá. Esse é um comportamento esperado, pois

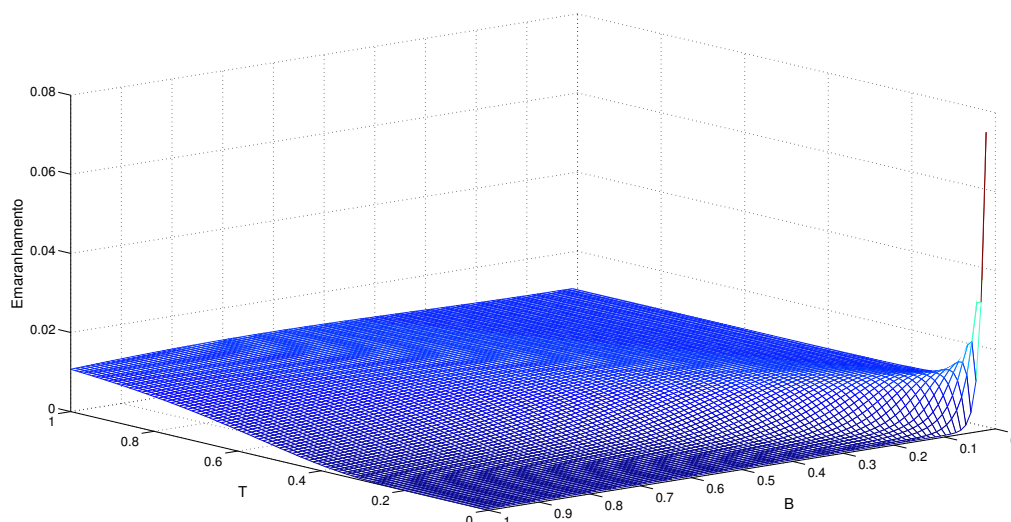


Figura 4.21: Variação do emaranhamento com o campo magnético e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 0.01$.

conforme a força da interação entre os spins aumenta, a força das correlações também deve aumentar.

A seguir, apresentamos os resultados referentes à LQU para este modelo.

4.3.2 LQU

Aqui apresentamos os cálculos da LQU entre as duas partículas desse sistema. Para isso, utilizamos a forma fechada apresentada na seção 2.3.2, considerando $d_1 = d_2 = 3$. O comportamento da LQU foi obtido para os parâmetro J e T variando nos intervalos $[-10, 10]$ e $[0, 2]$, respectivamente.

Na figura 4.22 é mostrado o comportamento da LQU quando consideramos $B = 0$.

Percebemos que, para temperaturas próximas de zero, a LQU possui comportamento constante em duas regiões, separadas pelo valor de $J = 0$. Nesse ponto, a LQU sofre uma mudança brusca em seu valor, levando-a de seu máximo para seu mínimo valor. Para valores mais elevados de temperatura, o comportamento é mais suave quando não es-

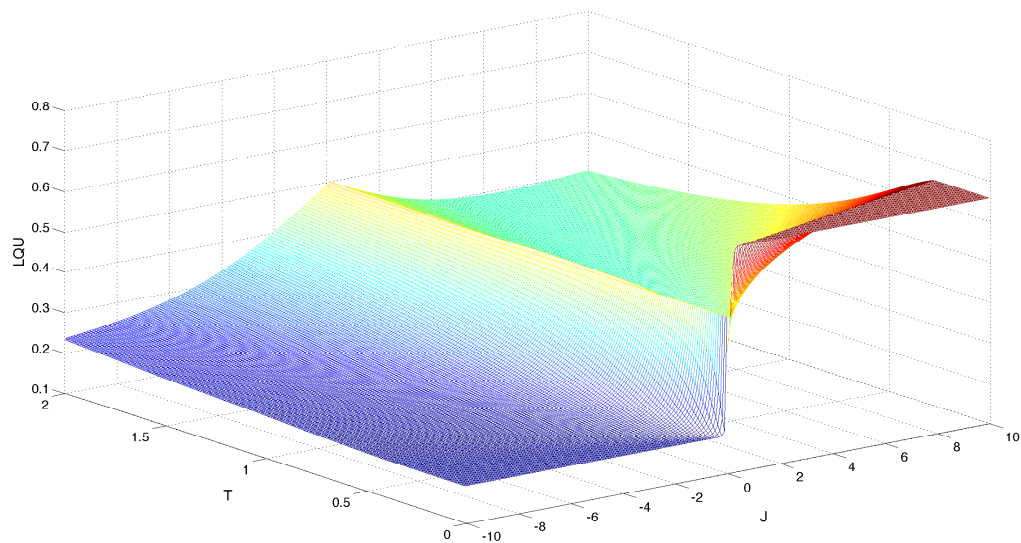


Figura 4.22: Variação da LQU com a constante de troca J e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $B = 0$.

tamos próximo do ponto de transição de fase $J = 0$. Na linha definida por $J = 0$, a LQU assume o valor máximo para cada valor de temperatura. Essa linha é a linha de transição de fase do sistema.

Para outros valores de campo magnético, a LQU apresenta mudanças súbitas de comportamento para baixos valores de temperatura. As figuras 4.23 e 4.24 mostram o comportamento da LQU quando tomamos os valores do $B = 0.5$ e $B = 1$, respectivamente.

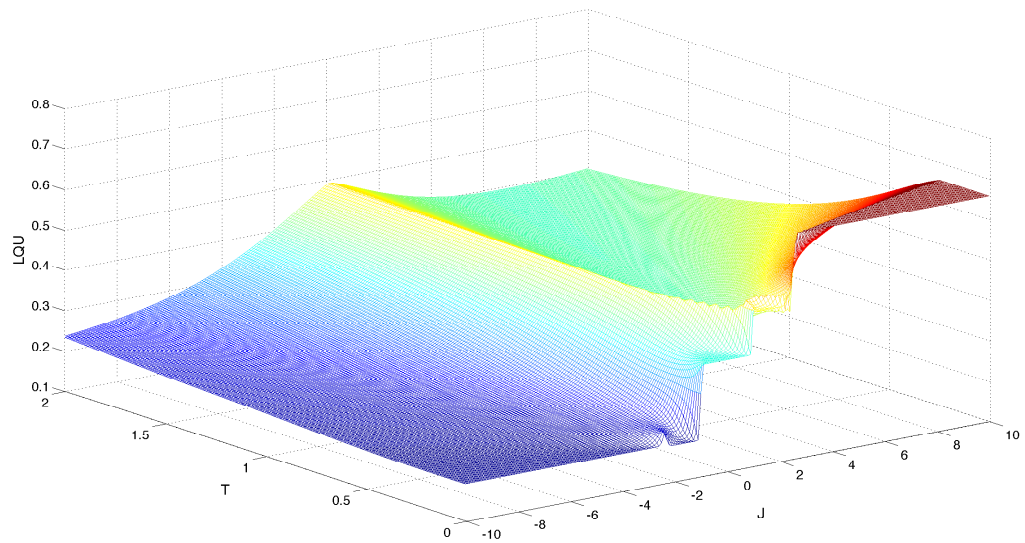


Figura 4.23: Variação da LQU com a constante de troca J e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $B = 0.5$.

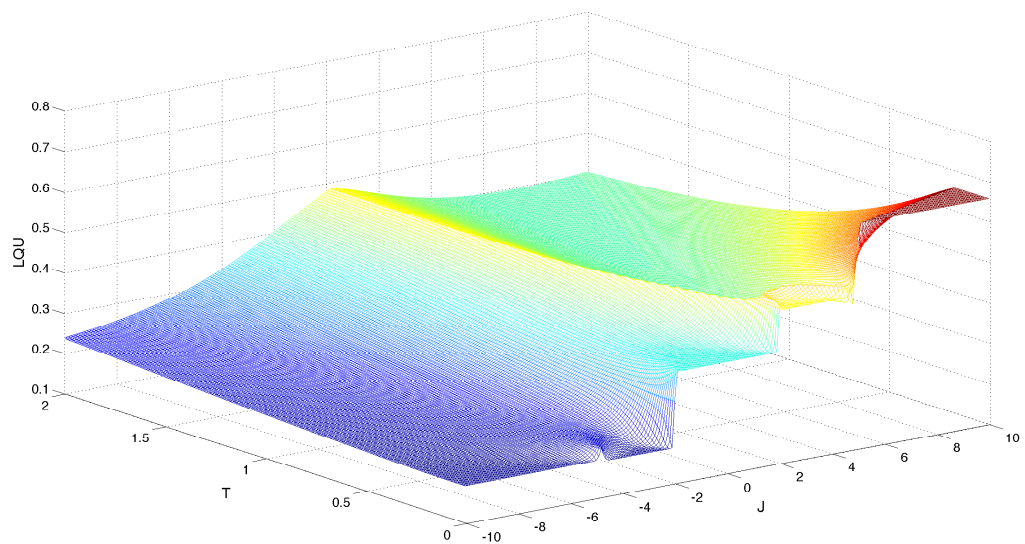


Figura 4.24: Variação da LQU com a constante de troca J e com a temperatura para o modelo de cadeia de spin 1 com $B = 1$.

Podemos perceber que o aumento do valor de B não tem grande influência no

comportamento da LQU quando não estamos a considerando temperaturas muito baixas ($T \approx 0$), uma vez que o comportamento nessas regiões mantém-se similar. No entanto, nas proximidades de $T = 0$, a LQU assume um comportamento que possui variações muito drásticas. Como podemos ver em 4.23 e 4.24, a função passa por decaimentos súbitos e por regiões de estabilidade. Importante notarmos que a LQU não assume valores nulos, diferentemente do que ocorre com o emaranhamento, mesmo com o aumento da temperatura. Isso nos indica que a LQU pode ser uma melhor ferramenta para o estudo da criticalidade neste tipo de sistema.

Fizemos também a análise da LQU quando são variados o campo e a temperatura no intervalo $[0, 1]$. Escolhemos três valores de J para fazer essa análise. A figura 4.25 apresenta o comportamento da LQU quando tomamos $J = 1$.

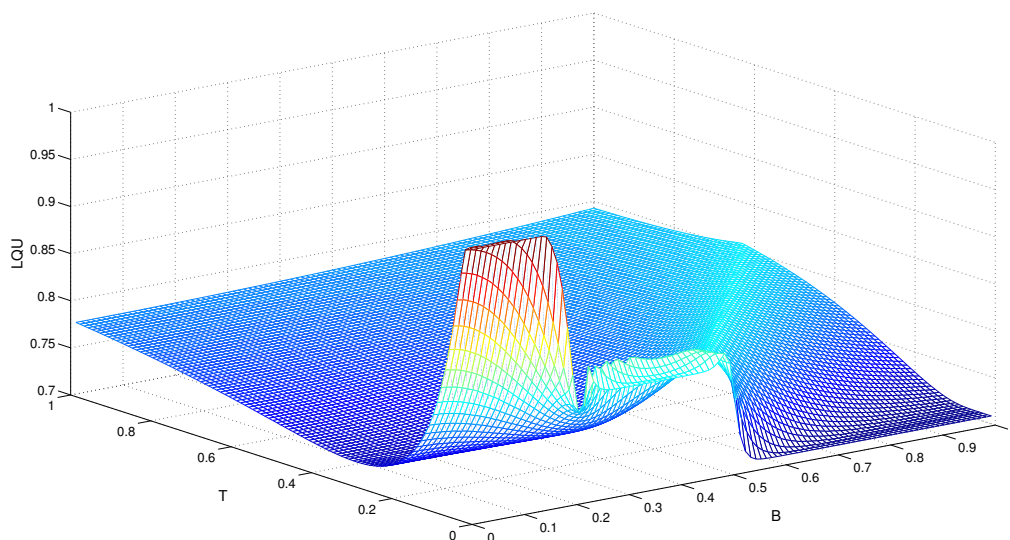


Figura 4.25: Variação da LQU como função de B e T para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 1$.

Podemos observar que a LQU apresenta um comportamento similar ao apresentado pelo emaranhamento, quando tomamos o valor $J = 1$, como mostrado na figura 4.15, inclusive nas regiões onde a função se mantém constante e onde sofre os decaimentos, a

temperaturas muito baixas. No entanto, enquanto o emaranhamento assume valores próximos de zero para temperaturas e campos elevados a LQU não se anula, indicando que o sistema encontra-se quanticamente correlacionado.

Nas figuras 4.26 e 4.27 apresentamos o comportamento da LQU para os valores de $J = 5$ e $J = 10$, respectivamente.

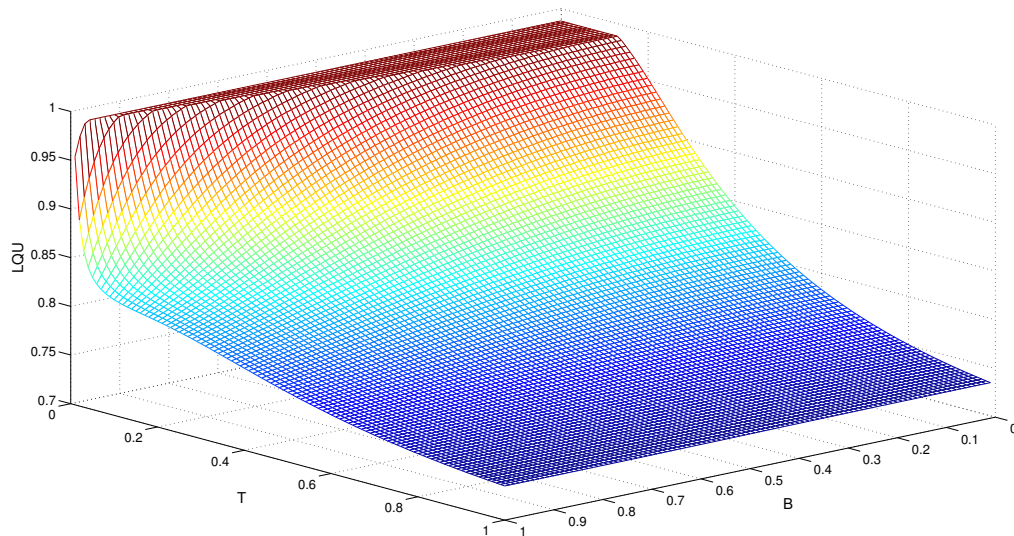


Figura 4.26: Variação da LQU como função de B e T para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 5$.

Notemos que a LQU não sofre muitas variações com relação ao aumento do campo magnético conforme aumentamos o valor J , e que decai com a temperatura de maneira suave, da mesma forma que acontece com o emaranhamento, ou seja, a LQU também torna-se mais robusta aos efeitos externos quando aumentamos os valores da constante de troca entre os átomos. Podemos notar então que emaranhamento e LQU possuem comportamentos semelhantes para esse sistema, com a diferença que o emaranhamento é mais sensível à variações dos parâmetros do sistema.

A ref. [9] faz um estudo sobre a discórdia quântica e sobre o emaranhamento nesse modelo. Os resultados apresentados pelos autores mostram que o comportamento da dis-

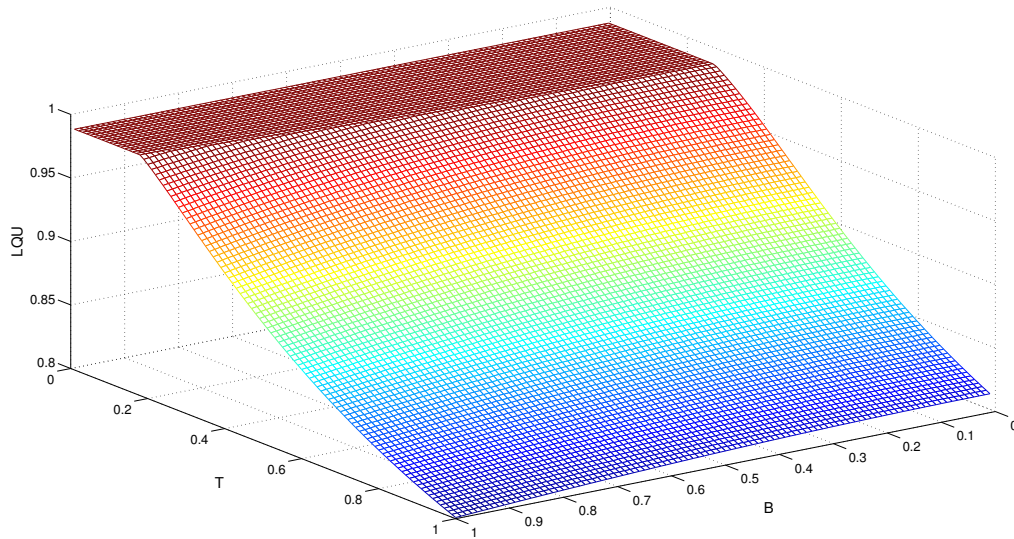


Figura 4.27: Variação da LQU como função de B e T para o modelo de cadeia de spin 1 com $J = 10$.

córdia é similar ao comportamento apresentado pelo emaranhamento, com relação aos parâmetros T e J , sofrendo um decaimento com o crescimento do valor de T , e adquirindo uma maior resistência aos efeitos da temperatura quanto maior for o valor de J . Nesse trabalho não são apresentados os comportamentos dessas quantidade em função do campo magnético. Foi observado que o emaranhamento é mais sensível aos efeitos da temperatura que a discórdia quântica (assim como o observado aqui com relação à LQU) e que o emaranhamento torna-se nulo para a região crítica do sistema, diferentemente da discórdia, que tem um decaimento abrupto nessa região, mas não se anula.

De maneira geral, podemos dizer que as correlações quânticas são ferramentas úteis para a investigação dos fenômenos críticos do presente modelo, com a LQU (bem como a discórdia) apresentando comportamento mais robusto que o emaranhamento, tornando-as candidatas naturais para estudos futuros.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Nesse trabalho nos propomos a estudar correlações quânticas em sistemas formados por cadeias de spins que possuem comportamento crítico para determinados valores dos parâmetros característicos de cada sistema. Embora também discutimos a discórdia quântica, nosso foco foram nas correlações como quantificadas pelo emaranhamento e pela incerteza local quântica (LQU). Utilizamos essas medidas para estudar o comportamento da correlação quântica entre pares de spins dessas cadeias. Consideramos os modelos XY e XYT , que são cadeias anisotrópicas formadas por partículas de spin-1/2 bem como um modelo de cadeia formada por duas partículas de spin-1.

Para o modelo XY , foram calculadas o emaranhamento e a LQU entre os sítios vizinhos. Consideramos os primeiros, segundos, terceiros e quartos vizinhos e variamos o parâmetro de anisotropia γ no intervalo $[0, 1]$ e a força do campo magnético externo λ no intervalo $[0, 2]$ mantendo a temperatura $T = 0$. Percebemos que tanto o emaranhamento quanto a LQU sofrem mudanças bruscas nas proximidades do ponto de criticalidade, que é dado por $\lambda_c = 1$ para esse modelo. No entanto, uma diferença importante entre essas medidas é que a LQU não sofre grandes mudanças qualitativas e nem quantitativas quando tomamos vizinhos mais distantes que os primeiros, enquanto o emaranhamento tem um decaimento expressivo quando calculado entre sítios mais distantes. Isso reflete uma das

diferenças entre estes dois tipos de correlação, indicando ainda que a LQU é uma quantidade mais robusta para o estudo de sistemas críticos.

O LQU também foi calculada para o modelo XYT . Esse modelo difere do modelo XY pela presença de interação de troca entre três spins vizinhos, enquanto o modelo XY admite apenas interação de troca entre dois spins. Essa interação entre três spins é regida pelo parâmetro α . Calculamos a LQU para os quatro primeiros vizinhos variando os parâmetros α e λ no intervalo de $[0, 2]$, para $T = 0$. Notou-se que a LQU sofre grandes variações em duas regiões desse modelo e que essas regiões coincidem com as linhas de transições de fases que ocorrem para os intervalos considerados dos parâmetros. Não variamos o parâmetro γ pois as correlações não sofrem mudanças qualitativas quando isso é feito, apenas pequenas mudanças de caráter quantitativo.

Por fim, para o modelo de cadeia bosônica, calculamos o emaranhamento entre as duas partículas variando o campo magnético B e a temperatura T , ambos no intervalo de $[0, 1]$, mantendo o valor de J constante. Os resultados apresentados mostraram que o emaranhamento tem um decaimento com o aumento da temperatura e do campo magnético. Um comportamento interessante aparece quando assumimos o valor $T = 0.01$. Nesse regime existem dois intervalos em que o emaranhamento do sistema é constante com o crescimento do campo e decai rapidamente a zero quando atingimos $B \approx 0,5$. Já para outros valores de temperatura o comportamento é decrescente sempre. Estudamos o comportamento do emaranhamento para diferentes valores da constante de troca J e percebemos que com o aumento do valor de J o emaranhamento adquire mais "resistência" aos efeitos da temperatura e campo magnético e, para valores muito elevados de J , como por exemplo $J = 10$, o emaranhamento apresenta um decaimento suave com relação aos parâmetros do sistema. Por outro lado, para valores muito pequenos de J , os efeitos da temperatura e do campo são muito intensos sobre o emaranhamento entre os spins. Para $J = 0.01$ o emaranhamento só toma valores consideráveis (mesmo que pequenos) para B e T próximos de zero.

Além disso, discutimos os resultados obtidos em [18,19] para a discórdia no modelo

XY , para a discórdia nos modelos XYT [20] e spin-1 [9] e para o emaranhamento no modelo XYT [15].

As correlações quânticas sofrem mudanças abruptas no comportamentos nas proximidade de pontos críticos de sistemas descritos pelos modelos apresentados aqui. Esse comportamento faz com que as correlações quânticas sejam uma boa ferramenta de estudo de regiões críticas do sistemas modelados por cadeia de spin.

A física de muitos corpos tem demonstrado renovado interesse nos últimos anos devido à aplicação de ferramentas advindas da teoria da informação ao estudo de propriedades termodinâmicas de sistemas críticos. Baseado no estudo preliminar apresentado aqui, nosso objetivo para o futuro é abordar questões sobre o processo de termalização nestes sistemas. Após um sistema de muitos corpos ser retirado do equilíbrio térmico, como ele segue sua rota de volta ao equilíbrio? Sob quais condições um sistema quântico atinge o equilíbrio? Qual o estado que caracteriza este equilíbrio? Acreditamos que o estudo do comportamento das correlações quânticas, especialmente a LQU, por estar diretamente relacionada à variância de observáveis, possa servir de guia para abordarmos estas e outras questões ligadas à termodinâmica de sistemas quânticos que apresentam comportamento crítico.

Bibliografia

- [1] H. Q. Lin. Exact diagonalization of quantum-spin models. *Phys. Rev. B*, **42**, 6561 (1990).
- [2] H. Bethe. Zur theorie der metalle. *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
- [3] L. Hulthèn. Über das austauschproblem eines kristalls. *Arkiv. Mat. Astron. Fys.* **26a**, 11 (1938).
- [4] E. Lieb, T. Schultz e D. Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Ann. Phys.* **16**, 407 (1961).
- [5] I. Titvniidze e G. I. Japaridze. Phase diagram of the spin $S = \frac{1}{2}$ extended *XY* model. *Eur. Phys. J. B.* **32**, 383 (2003).
- [6] S. Bose. Quantum communication through an unmodulated spin chain. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 207901 (2003).
- [7] B. E. Kane. A silicon-based nuclear spin quantum computer. *Nature* **393**, 133 (1998).
- [8] G. Zhang, S. Li e J. Liang. Thermal entanglement in Spin-1 biparticle system. *Opt. Comm.* **245**, 457 (2005).
- [9] J. Shi, T. Wu, X. Song e L. Ye. Quantum correlations of two spin-1 particles in the optical lattice. *Int. J. Mod. Phys. B* **28**, 1450049 (2014).
- [10] S. Sachdev. *Quantum phase transitions* (Cambridge, 2011).

- [11] L. Amico, R. Fazio, A. Osterloh e V. Vedral. Entanglement in many-body systems. *Rev. Mod. Phys.* **80**, 517 (2008).
- [12] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci e R. Fazio. Scaling of entanglement close to a quantum phase transition. *Nature*, **416**, 608 (2002).
- [13] T. J. Osborne e M. A. Nielsen. Entanglement in a simple quantum phase transition. *Phys. Rev. A*, **66**, 032110 (2002).
- [14] B-Q. Liu, B. Shao, J-G. Li, J. Zou e L-A. Wu. Quantum and classical correlations in the one-dimensional XY model with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. *Phys. Rev. A* **83**, 052112 (2011).
- [15] F. Altintas e R. Eryigit. Correlation and nonlocality measures as indicators of quantum phase transitions in several critical systems. *Ann. Phys.* **327**, 3084 (2012).
- [16] L. Amico e R. Fazio. Entanglement and magnetic order. *J. Phys. A: Math. Theor.* **42**, 504001 (2009).
- [17] K. M. O'Connor e W. K. Wootters. Entangled rings. *Phys. Rev. A* **63**, 052302 (2001).
- [18] J. Maziero, H. C. Guzman, L. C. Céleri, M. S. Sarandy e R. M. Serra. Quantum and classical thermal correlations in the XY spin- $\frac{1}{2}$ chain. *Phys. Rev. A* **82**, 012106 (2010).
- [19] J. Maziero, L. C. Céleri, R. M. Serra e M. S. Sarandy. Long-range quantum discord in critical spin systems. *Phys. Lett. A* **376**, 1540 (2012).
- [20] Y. Li e H. Lin. Thermal quantum and classical correlations and entanglement in the XY spin Model with three-spin interaction. *Phys. Rev. A* **83**, 052323 (2011).
- [21] X. Wang. Entanglement and spin squeezing in the three-qubit transverse Ising model. *Phys. Lett. A* **331**, 164 (2004).

- [22] E. Schrödinger. Discussion of probability relations between separated systems. Proc. Cambridge Phil. Soc. **31**, 555 (1935).
- [23] E. Schrödinger. Probability relations between separated systems. Proc. Cambridge Phil. Soc. **32**, 446 (1936).
- [24] A. Einstein, B Podolsky e N. Rosen. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? Phys. Rev. **47**, 777 (1935).
- [25] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki e K. Horodecki. Quantum entanglement. Rev. Mod. Phys. **81**, 865 (2009).
- [26] J. S. Bell. On the Einstein Podolski Rosen paradox. Physics **1**, 195 (1964).
- [27] N. Brunner, D. Cavalcanti, S. Pironio, V. Scarani e S. Wehner. Bell nonlocality. Rev. Mod. Phys. **86**, 419 (2014).
- [28] R. F. Werner. Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model. Phys. Rev A **40**, 4277 (1989).
- [29] H. Ollivier e W. H. Zurek. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. Phys. Rev. Lett. **88**, 017901 (2001).
- [30] D. Girolami, T. Tufarelli e G. Adesso. Characterizing nonclassical correlations via local quantum uncertainty. Phys. Rev. Lett. **110**, 240402 (2013).
- [31] E. P. Wigner e M. M. Yanase. Information contents of distributions. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **49**, 910 (1963).
- [32] S. Luo. Wigner-Yanase skew information and uncertainty relations. Phys. Rev. Lett. **91**, 180403 (2003).
- [33] K. Modi, A. Brodutch, H. Cable, T. Paterek e V. Vedral. The classical-quantum boundary for correlations: Discord and related measures. Rev. Mod. Phys. **84**, 1655 (2012).

- [34] C. E. Shannon. A mathematical theory of communication. *Bell Syst. Tech. J.* **27**, 379 (1948).
- [35] T. Cover e J. A. Thomas *Elements of information theory* (Wiley, 2005).
- [36] S. Kullback, *Information theory and statistics* (Dover, 1997).
- [37] M. A. Nielsen e I. L. Chuang. *Computação quântica e informação quântica* (Bookman, 2005).
- [38] L. C. Céleri, J. Maziero e R. M. Serra. Theoretical and experimental aspects of quantum discord and related measures. *Int. J. Quantum Inf.* **9**, 1837 (2011).
- [39] A. Peres. Separability criterion for density matrices. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 1413 (1996).
- [40] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres e W. K. Wootters. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).
- [41] M. B. Plenio e S. Virmani. An introduction to entanglement measures. *Quant. Inf. Comput.* **7**, 1 (2007).
- [42] C. H. Bennett, H. J. Bernstein, S. Popescu e B. Schumacher. Concentrating partial entanglement by local operations. *Phys. Rev. A* **53**, 2046 (1996).
- [43] W. Wootters. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2245 (1998).
- [44] S. Hill e W. K. Wootters. Entanglement of a pair of quantum bits. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5022 (1997).
- [45] S. Hill e W. K. Wootters. Entanglement of a pair of quantum bits. *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5022 (1997).

- [46] J. Eisert e M. B. Plenio. A comparison of entanglement measures. *J. Mod. Opt.* **46**, 145 (1999).
- [47] G. Vidal e R. F. Werner. Computable measure of entanglement. *Phys. Rev. A* **65**, 032314 (2002).
- [48] L. Henderson e V. Vedral. Classical, quantum and total correlations. *J. Phys. A: Math. Gen.* **34**, 6899(2001).
- [49] A. S. M. Hassan, B. Lari e P. S. Joag. Tight lower bound to the geometric measure of quantum discord. arXiv:1010.1920 (2010).
- [50] B. Dakić, Y. O. Lipp, X. Ma, M. Ringbauer, S. Kropatschek, S. Barz, T. Paterek, V. Vedral, A. Zeilinger, C. Brukner e P. Walther. Quantum discord as resource for remote state preparation. *Nature Physics* **8**, 666 (2012).
- [51] M. Gu, H. M. Chrzanowski, S. M. Assad, T. Symul, K. Modi, T. C. Ralph, V. Vedral e P. K. Lam. Observing the operational significance of discord consumption. *Nature Physics* **8**, 671 (2012).
- [52] W. H. Zurek. Quantum discord and Maxwell's demons. *Phys. Rev. A* **67**, 012320 (2003).
- [53] Material suplementar da referência [30].
- [54] S. Wang, H. Li, X. Lu e G-L. Long. Closed form of local quantum uncertainty and a sudden change of quantum correlations. arXiv:1307.0576 (2013).
- [55] W. Greiner, L. Neise e H. Stöcker. *Thermodynamics and statistical mechanics* (Springer, 2004).
- [56] S. Salinas. *Introdução à física estatística* (Edusp, 1999).
- [57] S. L. Sondhi, S. M. Girvin, J. P. Carini e D. Shahar. Continuous quantum phase transitions. *Rev. Mod. Phys.* **69**, 315 (1997).

-
- [58] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch e I. Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature* **415**, 39 (2002).
- [59] T. M. Carrijo, A. T. Avelar e L. C. Céleri. Quantum uncertainty in critical systems with three spins interaction. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **48**, 125501 (2015).
- [60] M. Suzuki. Relationship among exactly soluble models of critical phenomena I. *Prog. Theor. Phys.* **46**, 1337 (1971).
- [61] L. Guidoni e P. Verkerk. Direct observation of atomic localization in optical superlattices. *Phys. Rev. A* **57**, R1501 (1998).
- [62] S. Friebe, C. D'Andrea, J. Walz, M. Weitz e T. W. Hänsch. CO_2 -laser optical lattice with cold rubidium atoms. *Phys. Rev. A* **57**, R20 (1998).
- [63] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner e P. Zoller. Cold bosonic atoms in optical lattices. *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3108 (1998).