



**INSTITUTO DE FÍSICA**  

---

**Universidade Federal Fluminense**

**Leonardo Justino Pereira**

**Emaranhamento e Desigualdade de Bell no Modelo  
XXZ**

Niterói

2012

**Leonardo Justino Pereira**

**Emaranhamento e Desigualdade de Bell no Modelo  
XXZ**

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para a obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Thiago Rodrigues de Oliveira

Niterói

2012

## **Agradecimentos**

A todos os que me apoiaram e me deram suporte para seguir em frente, com paciência e dedicação: meu orientador, Prof. Thiago Rodrigues de Oliveira, família, amigos, professores e funcionários do IF-UFF.

Ao apoio financeiro fornecido pela CAPES-REUNI.

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>i</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>iv</b>
<b>Resumo</b>	<b>viii</b>
<b>Abstract</b>	<b>ix</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Fundamentos da Mecânica Quântica</b>	<b>4</b>
2.1 Emaranhamento . . . . .	6
2.1.1 Detectando estados emaranhados . . . . .	8
2.1.2 Quantificando emaranhamento . . . . .	11
2.2 Desigualdades de Bell . . . . .	19
2.2.1 Realismo e Localidade . . . . .	20
2.2.2 Desigualdade CHSH . . . . .	23
2.2.3 Teorema de Bell sem Desigualdade . . . . .	25
<b>3 Noções de Transição de Fase</b>	<b>29</b>
3.1 Transição de fase . . . . .	30
3.1.1 Expoentes Críticos e Universalidade . . . . .	33

3.2	Transição de Fase Quântica . . . . .	35
3.3	Quebra Espontânea de Simetria . . . . .	38
3.4	Emaranhamento e Transição de Fase Quântica . . . . .	39
3.4.1	Concorrência . . . . .	41
<b>4</b>	<b>Modelo XXZ</b>	<b>44</b>
4.1	Hamiltoniano . . . . .	44
4.2	Simetrias . . . . .	47
4.2.1	Simetria Contínua - $SU(2)$ e $U(1)$ . . . . .	48
4.2.2	Simetrias Discretas . . . . .	52
4.3	Solução do modelo XXZ . . . . .	56
<b>5</b>	<b>Emaranhamento e desigualdade de Bell no modelo XXZ</b>	<b>60</b>
5.1	Discussões . . . . .	61
5.2	Discussões complementares . . . . .	66
<b>6</b>	<b>Conclusão e Perspectivas Futuras</b>	<b>69</b>
<b>A</b>	<b>Estado de Werner</b>	<b>71</b>
<b>B</b>	<b>Expressões das Funções de Correlação do Modelo XXZ</b>	<b>73</b>
B.1	$\Delta \leq -1$ . . . . .	74
B.2	$-1 < \Delta < 1$ . . . . .	74
B.3	$\Delta = 1$ . . . . .	76
B.4	$\Delta > 1$ . . . . .	76
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>77</b>

# Lista de Figuras

3.1	Retirada de [29]. Espaço de fase $PT$ . . . . .	31
3.2	Retirada de [29]. Espaço de fase $HT$ . . . . .	32
3.3	Retirada de [30]. Parâmetro de ordem de alguns sistemas. . . . .	33
3.4	Retirada de [29]. Espaço de fase $\rho T$ para oito fluidos diferentes com a curva sendo uma equação cúbica, i.e., $\beta = \frac{1}{3}$ . . . . .	35
3.5	Retirada de [16]. Dois possíveis cenários para a ocorrência de uma não analiticidade na energia do estado fundamental, conforme um parâmetro $g$ que ajusta a transição é variado. No lado esquerdo ocorre um cruzamento de níveis, gerando, em grande parte dos casos, uma transição de primeira ordem, que pode ocorrer em sistemas finitos. No caso onde este cruzamento é evitado por um <i>gap</i> que tende a zero no limite termodinâmico ocorre uma não analiticidade, na derivada segunda da energia. Esta última situação está ilustrada no lado direito da figura. . . . .	36

3.6	Retirada de [16]. Diagrama de fase numa situação onde a fase ordenada persiste a temperatura finita (esquerda) e no caso onde a transição só ocorre a $T = 0$ (direita). Na figura do lado esquerdo a linha sólida demarca a fronteira entre as fases ordenada e desordenada, enquanto que entre as linhas tracejadas temos a região onde as flutuações térmicas e quânticas são equiparáveis, definindo a fase desordenada em três regiões. A região acinzentada e hachurada em torno da linha sólida marca a zona crítica onde o comportamento crítico (lei de potência) pode ser descrito classicamente. Note que tanto a fronteira de comportamento crítico como a que separa a região clássica da quântica não são bem demarcadas, ou seja, temos uma passagem suave (“crossover”) entre os dois comportamentos distintos. . . . .	37
3.7	Retirada de [34]. Análise da derivada primeira da concorrência entre spins primeiros vizinhos na região crítica. As diferentes curvas correspondem a diferentes tamanhos para a cadeia: $N = 11, 41, 101, 251, 401, \infty$ . O inset à direita mostra o comportamento da concorrência entre primeiros vizinhos para um sistema infinito. . . . .	40
5.1	Energia fundamental por sítio do modelo XXZ. A TFQ em $\Delta = -1$ é determinado por essa curva, enquanto que em $\Delta = 1$ tem uma TFQ do tipo BKT que não pode ser identificada. . . . .	61
5.2	Função de correlação na direção x para primeiros, segundos e terceiros vizinhos do modelo XXZ. Observa-se que essa correlação indica a TFQ em $\Delta = -1$ , mas não indica a TF em $\Delta = 1$ . . . . .	62
5.3	Função de correlação na direção z para primeiros $\left(\langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} \rangle = 4 \frac{de_0}{d\Delta}\right)$ , segundos e terceiros vizinhos do modelo XXZ. Observa-se que essa correlação indica a TFQ em $\Delta = -1$ , mas não indica a TFQ em $\Delta = 1$ . . . . .	63

5.4	Medida de Bell (as três curvas superiores) e concorrência (as três curvas inferiores) para primeiros, segundos e terceiros vizinhos do modelo XXZ. Observa-se que a desigualdade de Bell nunca é violada, mesmo em regiões onde há emaranhamento. Enquanto ambas as medidas são capazes de indicar a TFQ1 em $\Delta = -1$ , apenas a medida de Bell é capaz de indicar a transição de ordem infinita em $\Delta = 1$ . . . . .	64
5.5	Espaço de parâmetro de uma matriz densidade de dois spins- $\frac{1}{2}$ com as simetrias do modelo XXZ. O triângulo maior define os estados físicos, no diamante interno estão os estados separáveis (SEP), nos dois triângulos menores nos vértices inferiores estão os estados emaranhados (ENT) e nas duas regiões menores também nos vértices inferiores estão os estados que violam a desigualdade de Bell (NL). As linhas paralelas a borda da região emaranhada são linhas de contorno da concorrência. As curvas são trajetórias do estado fundamental do modelo XXZ para primeiros, segundos e terceiros vizinhos e a trajetória do estado de Werner. Também marcamos os pontos $\Delta = -1$ (círculo), 0,999 (quadrado), 0 (triângulo) e 1 (diamante). . . . .	65
5.6	"Concorrência"antes da maximização para primeiros, segundos e terceiros vizinhos. Observa-se que a não analiticidade na concorrência em $\Delta = -1$ é acidental, devido a maximização, se não levarmos em conta a QES. . . . .	67
5.7	Entropia de von Neumann da partícula $i$ , que representa o emaranhamento entre a partícula $i$ e o resto da cadeia. Observa-se que essa medida indica uma TFQ em $\Delta = -1$ . . . . .	68

A.1 Emaranhamento e medida de Bell do estado de Werner. O intervalo  $-\frac{1}{3} \leq x \leq 1$  indica a região onde o estado representa um estado físico, na região  $x \leq \frac{1}{3}$  o estado é separável, na região  $\frac{1}{3} < x \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$  o estado esta emaranhado mas não viola Bell, e na região  $x > \frac{1}{\sqrt{2}}$  o estado esta emaranha e viola Bell. . . . . 72

## Resumo

Por muitos anos acreditou-se que emaranhamento e violação das desigualdades de Bell eram o mesmo aspecto peculiar da Mecânica Quântica: não localidade. Hoje em dia sabe-se que essa equivalência não é completa, sendo válida apenas para estados puros; ou seja, existem estados mistos emaranhados que não violam as desigualdades de Bell. Deste modo, é interessante analisar as propriedades de estados que exibem essa diferença para melhor entendê-la. Aqui apresentamos esse estudo da relação entre emaranhamento e violação das desigualdades de Bell em Transições de Fase Quânticas. Mais especificamente, analisamos essa relação para duas partículas em uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  unidimensional e infinita descrita pelo modelo XXZ. Mostramos que as duas partículas não violam a desigualdade de Bell-CHSH para nenhum valor da anisotropia, mesmo em regiões onde estão emaranhadas. Portanto, o emaranhamento relevante na Transição de Fase Quântica é de um tipo "não trivial", uma vez que não é revelado pela desigualdade de Bell-CHSH. Também demonstramos que o estudo da desigualdade de Bell-CHSH pode indicar não só a transição de primeira ordem como a de ordem infinita, enquanto que a energia fundamental por partícula e a concorrência indicam apenas a transição de primeira ordem.

## Abstract

For many years it was believed that entanglement and violation of the Bell inequalities were the same peculiar aspect of Quantum Mechanics: non-locality. Nowadays, it is known that this equivalence is not complete, being true only for pure states; in other words, there are entangled mixed states that do not violate the Bell inequalities. Thus it is interesting to analyze properties of states which exhibit such difference, in order to better understand it. Here we present such a study of the connection between entanglement and violation of the Bell inequalities in Quantum Phase Transitions. More specifically, we analyze this relation for two particles in an infinity one-dimensional spin- $\frac{1}{2}$  chain described by the XXZ model. We show that the two particles do not violate the Bell-CHSH inequality for any value of anisotropy, even in regions where they are entangled. Therefore, the entanglement that is relevant in Quantum Phase Transitions is "not a trivial one", since it is not revealed by the Bell-CHSH inequality. We also demonstrate that the study of the Bell-CHSH inequality can indicate not only the first order phase transition as the infinity order one, while the fundamental energy per particle and the concurrence can only indicate the first order phase transition.

# Capítulo 1

## Introdução

O termo emaranhamento foi introduzido por Schrödinger em 1935 ao analisar o paradoxo EPR [1], também publicado nesse ano. A partir daí surgiram intensos debates filosóficos sobre o que exatamente seria o emaranhamento. Foi então que em 1964 John Bell [2] levou essas questões ao laboratório através das famosas desigualdades de Bell, aumentando a sua importância. Com isso as buscas por um maior entendimento sobre o emaranhamento se intensificaram a ponto de criar, na década de 90, as áreas de Computação e Informação Quântica, onde ele surge como um recurso em aplicações como: tele-transporte, criptografia quântica, codificação super densa, entre outras. Atualmente muitas questões sobre o emaranhamento ainda não estão totalmente resolvidas e estudos sobre o mesmo continuam ganhando cada vez mais espaço.

Estudos sobre o emaranhamento e as desigualdades de Bell revelaram que, para estados puros, violar Bell era condição necessária e suficiente para esses estados estarem emaranhados ([3] para duas partículas e [4] para  $n$  partículas). Posteriormente, com a definição de estados mistos emaranhados introduzida por Werner [5], foram identificados estados emaranhados que não violavam Bell, sugerindo a existência de um tipo de emaranhamento "oculto" que não pode ser

capturado pela desigualdade de Bell. Com isso, vem se desenvolvendo outras desigualdades, conhecidas como desigualdades de Bell ou do tipo Bell, para tentar fechar esse *gap* entre o emaranhamento e as desigualdades de Bell. Um exemplo de algumas desigualdades do tipo Bell para dois qubits<sup>1</sup> pode ser visto em [6].

Uma aplicação bem recente do emaranhamento é a sua utilização como ferramenta na determinação das Transições de Fase Quânticas. Estudos indicam que seu comportamento mostra algumas particularidades nas transições. Assim, uma busca por medidas de emaranhamento capazes de identificar corretamente Transições de Fase Quânticas se mostrou bastante interessante, principalmente a partir de 2004 quando Wu e colaboradores [7] propuseram que a concorrência e a negatividade possuíam essa característica.

Assim, os objetivos dessa dissertação serão: analisar o emaranhamento e uma das desigualdades de Bell (a CHSH) e a relação entre elas em um modelo de Matéria Condensada, mais especificamente uma cadeia unidimensional infinita de spin- $\frac{1}{2}$  descrita pelo modelo XXZ; e estudar essa relação do emaranhamento (que já vem sendo feita desde de 2002) e da desigualdade de Bell (que até onde sabemos começou com [8] em 2010) com Transições de Fase Quânticas no modelo.

Portanto, essa dissertação está dividida em: No Capítulo 2 fazemos uma discussão sobre o paradoxo EPR seguido da definição atual de emaranhamento, apresentando alguns indicadores e quantificadores do mesmo; também introduzimos as desigualdades de Bell e suas hipóteses: o realismo e a localidade. No Capítulo 3 faremos uma breve revisão sobre Transição de Fase, Transição de Fase Quântica e Quebra Espontânea de Simetria seguido de uma discussão mais detalhada da relação entre emaranhamento e Transições de Fase Quânticas. No Capítulo 4 falaremos do modelo XXZ unidimensional no limite termodinâmico, de suas simetrias e da solução do modelo, que é a energia fundamental por partícu-

---

<sup>1</sup>Qubits - bit quântico, i.e., vetor de estado de um sistema de dois níveis na mecânica quântica.

la, as funções de correlação entre duas partículas, as magnetizações, a concorrência, e o que chamamos de medida de Bell. No Capítulo 5 mostraremos que o modelo XXZ, olhando para apenas duas partículas, não viola Bell-CHSH mesmo em regiões onde está emaranhado, e que a medida de Bell pode indicar as transições de fase desse modelo. No Capítulo 6 concluímos e apresentamos perspectivas futuras. Por fim no Apêndice A temos o estado de Werner<sup>2</sup> e no Apêndice B temos as expressões das funções de correlação de duas partículas do modelo XXZ.

---

<sup>2</sup>O estado de Werner é um estado que varia em função de um certo parâmetro, sendo que para alguns valores desse parâmetro ele está emaranhado mas não viola Bell.

## Capítulo 2

# Fundamentos da Mecânica Quântica

Toda essa discussão sobre emaranhamento e não localidade surgiu em 1935 quando A. Einstein, B. Podolski e N. Rosen, em seu trabalho [1] (conhecido como paradoxo EPR, ou EPR), propuseram que uma teoria física completa deveria satisfazer duas condições:

i) cada elemento de realidade deveria estar na teoria;

ii) se, sem perturbar o sistema, é possível prever com certeza o valor de uma grandeza física, então existe um elemento de realidade associado a essa grandeza.

Assumindo haver localidade no sistema, eles concluíram que:

i) a descrição de realidade dada pela função de onda na mecânica quântica não é completa; ou

ii) os observáveis das partes em questão não podem ter realidades simultâneas.

A ideia deles, na versão de Bohm [9], foi a seguinte: Dado o estado singleto de duas partículas de spin- $\frac{1}{2}$ , onde enviamos uma para Alice e a outra para Bob

$$|S\rangle = \frac{|0\rangle_A|1\rangle_B - |1\rangle_A|0\rangle_B}{\sqrt{2}}, \quad (2.1)$$

sabemos que uma medida de  $\sigma_z$  feita nesse estado por Alice ou Bob resulta em  $+1$

(autoestado  $|0\rangle$ ) com probabilidade  $\frac{1}{2}$ , ou  $-1$  (autoestado  $|1\rangle$ ) com probabilidade  $\frac{1}{2}$ . Portanto, não conseguimos prever o valor de  $\sigma_z$  de nenhuma das partículas sem realizar a medida, assim perturbando o sistema.

Porém se Alice fizer uma medida de  $\sigma_z$  na sua partícula e obtiver  $+1$  ( $-1$ ) ela imediatamente saberá, com certeza, que se Bob fizer uma medida de  $\sigma_z$  em sua partícula encontrará  $-1$  ( $+1$ ), e analogamente para Bob. Ou seja, esse estado contém uma forte correlação entre as partículas de Alice e Bob e após Alice realizar uma medida de  $\sigma_z$  ela consegue atribuir um elemento de realidade para  $\sigma_z$  da partícula do Bob.

Como o estado singlete, Eq. (2.1), é perfeitamente anti-correlacionado as medidas de Alice e Bob terão valores opostos opostas em qualquer direção, ou seja, se Alice medir  $+1$  em uma certa direção Bob medirá  $-1$  nessa mesma direção. Assim a Eq. (2.1) passa a ser escrita, a menos de uma fase global, como [10]

$$|S\rangle = \frac{|0\rangle_{Ai}|1\rangle_{Bi} - |1\rangle_{Ai}|0\rangle_{Bi}}{\sqrt{2}}, \quad (2.2)$$

de modo que  $\sigma_i|0\rangle_i = +|0\rangle_i$  e  $\sigma_i|1\rangle_i = -|1\rangle_i$  para  $i = \{x, y, z\}$ .

Logo, se Alice fizer medidas das outras componentes de spin,  $\sigma_x$  e  $\sigma_y$ , ela conseguirá atribuir elementos de realidade para essas medidas da partícula de Bob. Mas, segundo a mecânica quântica,  $\sigma_x$  e  $\sigma_y$  não tem valor bem definido quando  $\sigma_z$  é bem definido, então Alice não poderia atribuir elementos de realidade simultaneamente para  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  e  $\sigma_z$  da partícula de Bob. Portanto concluiríamos, desse paradoxo entre a mecânica quântica e os elementos de realidade, que a mecânica quântica é uma teoria incompleta. Esse é o paradoxo EPR.

O paradoxo EPR descreve um fenômeno da Mecânica Quântica que é conhecido como emaranhamento. Este conceito ganha mais importância em 1964 quando John Bell [2] desenvolve as desigualdades de Bell e o emaranhamento consegue ser visto experimentalmente. No entanto, ele só recebe a atenção da co-

munidade da física quando passa a ser utilizado como um recurso, sendo amplamente estudado com a criação das áreas de Computação e Informação Quântica.

Assim, tomando essa questão discutida no paradoxo EPR como ponto de partida para esse capítulo, vamos discutir um pouco sobre o emaranhamento, citando algumas maneiras de medi-lo e quantificá-lo, e sobre as desigualdades de Bell e suas hipóteses: localidade e realismo.

## 2.1 Emaranhamento

O termo emaranhamento foi introduzido em 1935 por E. Schrödinger como sendo uma "ação fantasmagórica à distância", que surge ao analisar o paradoxo EPR e se questionar: como medidas em uma partícula podem influenciar a outra se elas estão suficientemente distantes a ponto de não haver interação? Essa questão introdutória gerou bastante discussão, até que, pouco antes dos anos 90, o emaranhamento passa a ser visto como um recurso que acabou dando início, nos anos 90, às áreas de Computação Quântica e Informação Quântica.

Essa "ação fantasmagórica à distância" gera correlações não locais que não podem ser explicadas classicamente, por isso dizemos que são correlações "mais fortes" que as clássicas.

Mas como tratar essa questão de forma mais prática? Para isso vamos a definição matemática de emaranhamento:

Um estado puro de  $N$  partículas é dito separável quando pode ser escrito como

$$|\psi\rangle = |\psi_A\rangle \otimes |\psi_B\rangle \otimes \dots \otimes |\psi_N\rangle. \quad (2.3)$$

Portanto, um estado puro emaranhado é um estado puro não separável.

Posteriormente o conceito de emaranhamento evoluiu, se estendendo a estados mistos quando R. F. Werner [5] deu sua contribuição. Para Werner um

estado misto separável, ou classicamente correlacionado, é aquele que pode ser produzido por Operações Locais e Comunicação Clássica (LOCC<sup>1</sup>)

$$\rho = \sum_k p_k \rho_A^{(k)} \otimes \rho_B^{(k)} \otimes \dots \otimes \rho_N^{(k)}, \quad (2.4)$$

que é uma combinação convexa dos subsistemas, onde  $0 \leq p_k \leq 1$  e  $\sum_k p_k = 1$ . E, como para estados puros, um estado misto emaranhado é um estado misto não separável.

Uma LOCC é uma operação que gera correlação clássica por ser realizada comunicação clássica entre as partes que estão criando seus estados. Um exemplo de como entender melhor essa operação é o seguinte: Alice e Bob utilizam o resultado do sorteio de uma moeda para combinar uma estratégia de como gerar o estado global. Por exemplo, se der cara com probabilidade  $p$  eles preparam os estados  $\rho_A^+$  e  $\rho_B^+$  e comunicam o resultado do sorteio da moeda, e se der coroa com probabilidade  $1 - p$  eles preparam os estados  $\rho_A^-$  e  $\rho_B^-$  e comunicam o resultado do sorteio da moeda. Assim, o estado global, agora classicamente correlacionado, será

$$\rho = p \rho_A^+ \otimes \rho_B^+ + (1 - p) \rho_A^- \otimes \rho_B^-. \quad (2.5)$$

É importante mencionar que uma LOCC não é capaz de criar emaranhamento, ela só mantém ou destrói o emaranhamento do sistema. Outra característica que é importante mencionar é que se tivermos  $p_i = 1$  e  $p_{k \neq i} = 0$  na Eq. (2.4), ela se torna

$$\rho = \rho_A \otimes \rho_B \otimes \dots \otimes \rho_N, \quad (2.6)$$

que é um estado misto separável que não possui correlação nenhuma entre seus subsistemas.

---

<sup>1</sup>Do inglês Local Operation and Classical Communication.

O emaranhamento possui várias aplicações como codificação super densa, criptografia quântica, teletransporte, entre outras. Uma outra aplicação mais recente do emaranhamento esta em matéria condensada, onde ele é aplicado no estudo de Transições de Fase Quântica, que será um dos objetos de estudo desse trabalho. Assim, estudos sobre o mesmo vêm crescendo à medida que ele se mostra um recurso cada vez mais útil.

### 2.1.1 Detectando estados emaranhados

Dado um estado quântico geral, a pergunta se há ou não emaranhamento está, geralmente, longe de ter uma resposta trivial. Em outras palavras, saber se estados gerais podem ser escritos como a Eq. (2.3) ou como a Eq. (2.4) não é uma tarefa fácil, mesmo para os melhores computadores que dispomos no momento. Isso se deve ao fato de existirem diversas maneiras possíveis de se escrever um estado em diferentes bases, e para saber se um estado é separável temos que testar todas as maneiras possíveis.

Sendo assim, a busca por métodos para tentar resolver esta questão é um dos objetivos da teoria do emaranhamento. Nesta subseção apresentaremos dois dos critérios mais discutidos na literatura até então, e na seguinte discutiremos como quantificá-los.

#### Decomposição de Schmidt

O primeiro critério será a decomposição de Schmidt [11], que é uma ferramenta bastante poderosa para descobrir se um estado puro é separável ou não.

Considere um estado puro  $|\psi\rangle$  e divida em duas partes A e B ( $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ )

$$|\psi\rangle = \sum_{mn} c_{mn} |\psi_m^A\rangle |\psi_n^B\rangle, \quad (2.7)$$

onde  $|\psi_m^A\rangle$  e  $|\psi_n^B\rangle$  são ortonormais e  $c_{mn}$  são elementos de uma matriz complexa  $C$ . Usando a decomposição em valores singulares obtemos

$$C = U\Lambda V^T, \quad (2.8)$$

onde  $U$  é uma matriz unitária quadrada,  $\Lambda$  é uma matriz retangular com elementos diferentes de zero na diagonal e  $V$  também é uma matriz unitária quadrada, mas com dimensão diferente de  $U$ . Com isso temos

$$|\psi\rangle = \sum_{mn} \left( \sum_k^l u_{mk} \lambda_{kk} v_{nk} \right) |\psi_m^A\rangle |\psi_n^B\rangle = \sum_k^l \lambda_{kk} \left( \sum_m u_{mk} |\psi_m^A\rangle \right) \left( \sum_n v_{nk} |\psi_n^B\rangle \right),$$

onde  $l = \min[\dim(\mathcal{H}_A), \dim(\mathcal{H}_B)]$ . Definimos os estados  $|\phi_k^A\rangle = \sum_m u_{mk} |\psi_m^A\rangle$  e  $|\phi_k^B\rangle = \sum_n v_{nk} |\psi_n^B\rangle$ , e  $\lambda_{kk} = \lambda_k$ , e enfim encontramos a decomposição de Schmidt

$$|\psi\rangle = \sum_k^l \lambda_k |\phi_k^A\rangle |\phi_k^B\rangle. \quad (2.9)$$

Os coeficientes  $\lambda_k$  são chamados de *coeficientes de Schmidt* e a quantidade de coeficientes  $\lambda_k$  não-nulos necessários para decompor  $|\psi\rangle$ , denotado por  $\#\lambda_k$ , é chamado de *número de Schmidt*. A seguir mostraremos que  $|\psi\rangle$  é separável se e somente se  $\#\lambda_k = 1$  [11, 12], deixando o emaranhamento codificado nos  $\lambda_k$ .

**Teorema:** Um estado puro  $|\psi\rangle$  é separável se e somente se as matrizes densidade reduzidas

$$\rho_{A(B)} = Tr_{B(A)}(|\psi\rangle\langle\psi|) \quad (2.10)$$

correspondem a estados puros, isso é, se  $Tr(\rho_{A(B)}^2) = 1$ .

*Prova:* Usando a decomposição de Schmidt, Eq. (2.9), temos

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \sum_{k,k'}^l \lambda_k \lambda_{k'}^* |\phi_k^A\rangle |\phi_k^B\rangle \langle\phi_{k'}^A| \langle\phi_{k'}^B|. \quad (2.11)$$

Assim temos

$$\rho_{A(B)} = \sum_k^l |\lambda_k|^2 |\phi_k^{A(B)}\rangle \langle \phi_k^{A(B)}| \quad (2.12)$$

$$\rho_{A(B)}^2 = \sum_k^l |\lambda_k|^4 |\phi_k^{A(B)}\rangle \langle \phi_k^{A(B)}|. \quad (2.13)$$

Sabendo que toda matriz densidade tem que ter traço igual a um, então tirando o traço da Eq. (2.12) temos que  $\sum_k^l |\lambda_k|^2 = 1$ . Tirando o traço da Eq. (2.13) temos

$$\text{Tr}(\rho_A^2) = \text{Tr}(\rho_B^2) = \sum_k^l |\lambda_k|^4, \quad (2.14)$$

$$\sum_k^l |\lambda_k|^4 = \left( \sum_k^l |\lambda_k|^2 \right)^2 - \sum_{j \neq k}^l |\lambda_k|^2 |\lambda_j|^2 = 1 - \sum_{j \neq k}^l |\lambda_k|^2 |\lambda_j|^2, \quad (2.15)$$

onde  $\text{Tr}(\rho_{A(B)}^2) = 1$  se e somente se  $\lambda_i = 1$  e  $\lambda_{k \neq i} = 0$ , ou seja, se  $\#\lambda_k = 1$ .

Concluindo assim que  $|\psi\rangle$  é separável se e somente se  $\#\lambda_k = 1$ .  $\square$

A decomposição de Schmidt só consegue detectar a existência de emaranhamento para estados puros. Mas como detectar emaranhamento em estados mistos? Para responder a essa pergunta vamos ao critério seguinte.

### Critério PPT

O critério PPT<sup>2</sup>, que em português significa Transposta Parcial Positiva, desenvolvido por A. Peres [13], serve para indicar se um estado misto é separável ou não. Ele consiste em realizar a transposta parcial de um estado misto e se o estado resultante for positivo dizemos que ele é PPT. Para dimensões  $2 \otimes 2$  e  $2 \otimes 3$  pode-se provar [14] que o estado ser PPT é condição necessária e suficiente para que ele seja separável, enquanto que para outras dimensões o estado ser PPT é

---

<sup>2</sup>Do inglês Positive Partial Transpose

apenas condição necessária<sup>3</sup>. Vamos ao critério, ilustrado em [15]:

Dado um estado

$$\rho = \sum_{ijkl} \lambda_{ik}^{jl} |ij\rangle\langle kl|, \quad (2.16)$$

definimos sua transposta parcial em  $A$

$$\sigma = \rho^{TA} = \sum_{ijkl} \lambda_{ki}^{jl} |kj\rangle\langle il|. \quad (2.17)$$

Com isso Peres mostrou, através de um exemplo, que para o estado ser separável é necessário que ele seja PPT. No entanto, isso só é necessário e suficiente para dimensões  $2 \otimes 2$  e  $2 \otimes 3$ , como dito antes.

A prova desse critério, dada pelos Horodecki's [14, 12], vem do fato da transposta parcial ser um mapa positivo, mas não completamente positivo. Assim eles provaram que o estado é separável se ele se mantém positivo sob ação de todos os mapas completamente positivos. E provaram que para dimensões  $2 \otimes 2$  e  $2 \otimes 3$  todos os mapas positivos podem ser construídos por combinações de mapas completamente positivos e a transposição parcial.

## 2.1.2 Quantificando emaranhamento

Nesta seção apresentaremos duas formas de quantificar o emaranhamento contido nos estados: uma conhecida como operacional e a outra como axiomática; e duas medidas que são capazes de quantificar o emaranhamento, tanto de forma operacional quanto axiomática.

As discussões a seguir podem ser vistas em [12, 15, 16].

---

<sup>3</sup>Se o estado for PPT e emaranhado, chamamos este de "bound entanglement"(emaranhamento preso).

## Quantificação operacional

Uma forma de quantificar emaranhamento é estabelecer sua utilização como um recurso que não pode ser obtido por LOCC; por exemplo, violar a desigualdade de Bell-CHSH ou realizar teletransporte com fidelidade 1. Nesse caso escolhamos um estado como nosso padrão para medir emaranhamento. Em geral utilizamos o singleto como unidade máxima de emaranhamento (1 *ebit*<sup>4</sup>), ou padrão, pois ele realiza essas tarefas de maneira ótima. Assim, com a definição do nosso *ebit* podemos definir o que chamamos de *emaranhamento de custo* e *emaranhamento destilável*.

O *emaranhamento de custo* quantifica quantos pares de singletos devem ser compartilhados entre duas partes para que outro estado  $\rho_{AB}$  possa ser produzido utilizando apenas LOCC, indicando o custo em *ebit* necessário para produzir  $\rho_{AB}$ . Então se tivermos um mapa  $\Lambda_{LOCC}$  que leve  $m$  pares singletos em  $n$  pares do estado  $\rho_{AB}$  concluiríamos que o emaranhamento de  $\rho_{AB}$  é  $E(\rho_{AB}) = \frac{n}{m} \text{ebits}$ . No entanto, pode haver outro mapa  $\Lambda'_{LOCC}$  que obtenha a transformação desejada a um custo menor. Assim, o *emaranhamento de custo*  $E_C(\rho_{AB})$  é definido no limite em que infinitos estados (limite assintótico)  $\rho_{AB}$  são produzidos utilizando um  $\Lambda_{LOCC}$  que minimiza  $E(\rho_{AB})$ , i.e.

$$E_C(\rho_{AB}) = \inf_{\Lambda_{LOCC}} \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{n}{m} \text{ebits}. \quad (2.18)$$

O *emaranhamento destilável* toma a rota inversa de  $E_C$ : queremos saber quantos pares de singletos podem ser extraídos (destilados) de  $n$  pares do estado  $\rho_{AB}$  (novamente no limite assintótico), usando somente LOCC. Então o emara-

---

<sup>4</sup>Do inglês entanglement bit - bit de emaranhamento.

nhamento que pode ser destilado de  $\rho_{AB}$  é

$$E_D(\rho_{AB}) = \sup_{\Lambda_{LOCC}} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{m}{n}, \quad (2.19)$$

caso  $m$  pares EPR possam obtidos por LOCC.

Com isso temos uma forma de quantificar o emaranhamento existente em um estado  $\rho$ , dada por  $E_C(\rho)$ , e uma quantidade que indica quanto desse emaranhamento pode ser extraído desse estado, dada por  $E_D(\rho)$ . E então nos perguntamos se essas quantidades são iguais, ou seja, se todo o emaranhamento contido no estado pode ser extraído. Curiosamente existem estados que possuem emaranhamento que não podem ser destilados, conhecido como "bound entanglement" (citado em **Cr terio PPT**), ou seja,  $E_C \geq E_D$ .

### Quantifica o axiom tica

Uma outra forma de definir um quantificador de emaranhamento   listar uma s rie de condi es que tal fun o deva ter. Portanto, um bom quantificador de emaranhamento precisa ter as seguintes caracter sticas:

- 1) Se  $\rho$    separ vel, ent o  $E(\rho) = 0$ .
- 2) Normaliza o: O emaranhamento do estado  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{d}} \sum_{j=0}^{d-1} |j, j\rangle$ <sup>5</sup>  <sup>6</sup>

$$E(|\psi\rangle\langle\psi|) = \log d. \quad (2.20)$$

- 3) N o-crescente por LOCC: Seja  $\Lambda_{LOCC}$  uma opera o realizada por LOCC, ent o

$$E(\Lambda_{LOCC}(\rho)) \leq E(\rho). \quad (2.21)$$

<sup>5</sup>Estado maximamente emaranhado.

<sup>6</sup>Se definirmos o logaritmo na base  $d$  (dimens o do espa o de Hilbert dos subsistemas), teremos que  $E(|\psi\rangle\langle\psi|) = 1$ .

4) Continuidade:  $E$  deve ser uma função contínua de  $\rho$ , i.e.

$$E(\rho) - E(\sigma) \rightarrow 0 \text{ para } \|\rho - \sigma\| \rightarrow 0. \quad (2.22)$$

5) Aditividade parcial :  $n$  cópias idênticas do estado  $\rho$  contém  $n$  vezes o emaranhamento de  $\rho$ ,

$$E(\rho^{\otimes n}) = nE(\rho). \quad (2.23)$$

6) Subaditividade: Para sistemas independentes,  $\rho$  e  $\sigma$ , dizemos que o sistema global é descrito por  $\rho \otimes \sigma$  e os quantificadores  $E$  devem obedecer:

$$E(\rho \otimes \sigma) \leq E(\rho) + E(\sigma). \quad (2.24)$$

7) Convexidade:  $E$  deve ser uma função convexa no espaço dos operadores, i.e.

$$E\left(\sum_i p_i \rho_i\right) \leq \sum_i p_i E(\rho_i), \quad (2.25)$$

onde  $p_i \geq 0$  e  $\sum_i p_i = 1$ .

A condição 1 é a exigência natural que apenas estados não-separáveis possuam alguma quantidade de emaranhamento. A condição 2 é uma normalização conveniente, que escolhe como “unidade de emaranhamento” um estado maximamente emaranhado, e define este como a quantidade de emaranhamento presente no estado singleto. A condição 3 é fundamental porque não podemos criar emaranhamento usando LOCC. A condição 4 é desejável, pois como usualmente acontece em física, as grandezas não podem ser conhecidas com precisão arbitrária. Visto de outra forma, quer-se que operações infinitesimais gerem, ou destruam, quantidade infinitesimais de emaranhamento. A condição 5 pede apenas que  $n$  cópias independentes de um estado  $\rho$  tenham  $n$  vezes a quantidade de emaranhamento de cada cópia. A condição seguinte, 6, diz que, para estados diferentes,  $\rho$  e  $\sigma$ ,

a aditividade pode ser relaxada, podendo haver menos emaranhamento em ter os dois estados do que em cada um deles, separadamente. A última condição, 7, é compatível com a noção de que combinações convexas possuem grau de pureza menor que seus estados extremais (ver entropia de von Neumann), levando a perda do emaranhamento em média.

Tendo visto as duas formas de se definir funções quantifiquem emaranhamento, vamos a elas:

### Entropia de von Neumann

Como visto anteriormente no texto sobre decomposição de Schmidt, caso um sistema puro de duas partes tenha seus estados reduzidos mistos, necessariamente há emaranhamento entre suas partes. Nesse caso temos um estado global puro, onde temos conhecimento completo sobre o sistema, mas possuímos somente conhecimento parcial dos subsistemas  $\rho_A$  e  $\rho_B$ . Logo um bom quantificador dessa ignorância sobre as partes deve estar relacionado ao grau de emaranhamento. Um bom quantificador de ignorância é a entropia de von Neumann (análogo quântico da entropia de Shannon).

A entropia de von Neumann não apenas possui uma motivação que é bem apropriada como também obedece aos critérios de quantificação axiomática descritos anteriormente, sendo isto suficiente para torná-la um quantificador de emaranhamento.

Dado  $|\psi\rangle \in \mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ , a entropia de von Neumann para os estados reduzidos de  $|\psi\rangle$  (Eq. (2.10)) é definida como

$$S_{A(B)} = \text{Tr}(\rho_{A(B)} \log \rho_{A(B)}). \quad (2.26)$$

Sejam  $\{\omega_1^{A(B)}, \dots, \omega_d^{A(B)}\}$  os autovalores de  $\rho_{A(B)}$ , a Eq. (2.26) pode ser re-

escrita como

$$S_{A(B)} = \sum_{k=1}^d \omega_k^{A(B)} \log \omega_k^{A(B)}. \quad (2.27)$$

Mas como vimos no texto sobre decomposição de Schmidt, os autovalores das matrizes reduzidas de um estado puro  $|\psi\rangle$  de duas partes são iguais aos módulos quadrados dos coeficientes de Schmidt, ou seja,  $\omega_k^{A(B)} = \omega_k = |\lambda_k|^2$ . Assim temos que a entropia de von Neumann dos subsistemas são iguais, i.e.

$$S_A = S_B = S = \sum_{k=1}^d \omega_k \log \omega_k, \quad (2.28)$$

que varia de 0, para  $A(B)$  puro, a  $\log d$ , para  $A(B)$  do tipo Eq. (2.20) (que são maximamente mistos, ou maximamente desconhecidos).

Além de obedecer aos critérios de quantificação axiomática, a entropia de von Neumann também possui uma interpretação operacional como quantificador. O valor da entropia de von Neumann de uma das partes do singlete é  $S(|S\rangle) = \log 2$ ; de modo que se definirmos a base do logaritmo como 2 teremos  $S(|S\rangle) = 1$ , classificando o singlete como maximamente emaranhado, como no emaranhamento de custo. E se tentarmos converter  $n$  cópias de um estado  $|\psi\rangle$  em  $m$  cópias de um estado  $|\phi\rangle$ , no limite assintótico de  $n \rightarrow \infty$ , só conseguimos se<sup>7</sup>

$$nS(|\psi\rangle) \geq mS(|\phi\rangle). \quad (2.29)$$

Caso haja uma igualdade em Eq. (2.29), este processo pode ser reversível.

Note que a entropia de von Neumann só é capaz de quantificar o emaranhamento entre duas partes de um estado global puro. Isto porque se o estado global não for puro nós não teremos conhecimento total do estado global e essa ignorância pode ser transmitida para os subsistemas, de modo que essa ignorância

---

<sup>7</sup>Lembrando que  $S(|\psi\rangle^{\otimes n}) = nS(|\psi\rangle)$ , condição 5 da quantificação axiomática.

dos subsistemas não necessariamente esteja ligada ao emaranhamento entre os mesmos.

Desta forma concluímos que para quantificar o emaranhamento de um estado puro composto por duas partes basta calcular a entropia de von Neumann de um dos subsistemas. Mas como quantificar o emaranhamento de estados mistos? Vamos a resposta:

### **Emaranhamento de formação e concorrência**

O emaranhamento de formação, como o próprio nome sugere, seria o emaranhamento necessário para construir estados quânticos. Qualquer estado quântico pode ser escrito como uma soma convexa de estados puros, i.e.

$$\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|, \quad (2.30)$$

onde  $\{p_i\}$  é uma distribuição de probabilidades. Então podemos calcular o emaranhamento de cada estado puro dessa decomposição de  $\rho$  e tomar a média destes emaranhamentos, a partir de  $E_E$  (entropia de emaranhamento), dada pelas probabilidades  $\{p_i\}$ :

$$\bar{E}(\{p_i, |\psi_i\rangle\}) = \sum_i p_i E_E(\psi_i). \quad (2.31)$$

Um estado pode ser escrito como diferentes combinações de estados puros e diferentes distribuições de probabilidades Eq. (2.30), de modo que diferentes distribuições  $\{p_i\}$  e estados  $|\psi_i\rangle$  geram diferentes valores na Eq. (2.31). Então o emaranhamento de formação fica definido como a minimização de  $\bar{E}$  sobre todas as possíveis escolhas  $\{p_i, |\psi_i\rangle\}$ :

$$E_F(\rho) = \inf_{\{p_i, |\psi_i\rangle\}} \bar{E}(\{p_i, |\psi_i\rangle\}). \quad (2.32)$$

Hayden e colaboradores [17] mostraram que a versão regularizada de  $E_F$  é igual ao custo de emaranhamento, ou seja

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E_F(\rho^{\otimes n})}{n} = E_C(\rho), \quad (2.33)$$

o que mostra que  $E_F$  tem o significado operacional de quantificar o emaranhamento existente em  $\rho$ .

No entanto, o processo de minimização envolvido em sua definição torna o cálculo de  $E_F$  inviável na maioria dos casos. Foi então que Hill e Wootters [18] (para estados de 2 qubits de posto 2) e posteriormente Wootters [19] (para qualquer estado de 2 qubits) definiram uma função, conhecida como concorrência, para auxiliar nesse cálculo.

A concorrência é definida a partir da inversão temporal do estado, que para dois qubits acaba sendo apenas a transformação de "spin flip"

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y) \rho^* (\sigma_y \otimes \sigma_y), \quad (2.34)$$

onde  $\rho^*$  é o complexo conjugado de  $\rho$ . Assim a concorrência fica definida como

$$\mathcal{C}(\rho) = \max \left\{ 0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4} \right\}, \quad (2.35)$$

onde  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$  são os autovalores de  $\rho \tilde{\rho}$ .

Então, com o auxílio da concorrência,  $E_F$  passa a ter a expressão analítica, para estados de dois qubits, que é:

$$E_F(\rho) = H_2 \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{1 - \mathcal{C}^2(\rho)} \right), \quad (2.36)$$

onde  $H_2(x) = -x \log x - (1 - x) \log(1 - x)$ , assumindo que  $0 \log 0 = 0$ .

É importante mencionar que a concorrência não é uma medida de emara-

nhamento, ela é apenas uma função que nos auxilia no cálculo do emaranhamento de formação (sendo esta a função que mede e quantifica emaranhamento). Mas como  $E_F(C(\rho))$  é monotonicamente crescente para  $0 \leq C(\rho) \leq 1$  e  $E_F(0) = 0$  e  $E_F(1) = 1$  a concorrência acaba sendo usada como um quantificador.

## 2.2 Desigualdades de Bell

Após EPR questionarem a completeza da Mecânica Quântica e D. Bohm desenvolver a ideia de uma teoria de variáveis ocultas<sup>8</sup> para completá-la [20, 21], foi a vez de J. S. Bell [2] dar a sua contribuição. Bell criou uma desigualdade que toda teoria local e realista deve obedecer, e que pode ser testada experimentalmente. Assim, a questão deixa de ser apenas filosófica e passa a ser objetiva, podendo ser discutida com resultados experimentais.

Bell se baseou em duas hipóteses que são bem intuitivas, pelo menos classicamente, e que estavam sendo amplamente discutidas, que seriam: dado um sistema composto existem elementos de realidade atribuídos a cada observável (variáveis ocultas) e os subsistemas interagem de forma local. Assim ele criou uma desigualdade, baseada em correlações entre os subsistemas, que deve ser obedecida. Se essa desigualdade for violada podemos concluir que uma das duas, ou as duas, hipóteses não é válida, no caso realismo ou localidade.

Posteriormente foram criadas várias outras desigualdades para testar essas duas hipóteses, e todas elas são conhecidas como desigualdades tipo Bell.

Já se sabe que existem relações entre as desigualdades de Bell e o emaranhamento, que seriam: o estado ser separável é condição suficiente para que ele não viole Bell, sendo condição necessária e suficiente apenas para estados puros.

---

<sup>8</sup>A ideia por trás das variáveis ocultas é argumentar que a mecânica quântica parece não ser completa porque não estamos considerando algumas variáveis que estariam ocultas (daí o nome) nas teorias. Assim, graças a essas variáveis, os elementos de realidades poderiam ser representados nas teorias.

Esses estados mistos emaranhados que não violam Bell são bem intrigantes e inesperados, uma vez que esses dois conceitos são equivalentes para estados puros. A fim de unificar esses dois conceitos para estados mistos, tem-se estudado várias outras desigualdades para descobrir se alguma delas é violada, e consequentemente eliminaria esse *gap* entre esses conceitos. No Apêndice A temos o exemplo de um estado com essas características, que é o famoso estado de Werner.

A seguir vamos discutir um pouco sobre essas duas hipóteses fundamentais das desigualdades de Bell, que são o realismo e a localidade, e falar sobre a desigualdade CHSH que é amplamente utilizada, inclusive neste trabalho.

### 2.2.1 Realismo e Localidade

Imaginemos o seguinte cenário: Uma fonte envia uma partícula para Bob e outra para Alice, estando ambos suficientemente distantes um do outro e da fonte. Assim, para testar se esse sistema exibirá localidade Alice utilizará um aparato onde ela poderá realizar uma operação  $X$  e com isso obter o resultado  $a$ , e Bob usará um aparato com as mesmas propriedades onde realizará a operação  $Y$  com resultado  $b$ , onde vamos supor que essas partículas estão correlacionadas e que essa correlação vem de uma variável oculta  $\lambda$  comum as partículas (i.e., possui realismo) que gera estratégias<sup>9</sup> para correlacioná-las.

Seja  $P(a|X\lambda)$  a probabilidade de Alice obter o resultado  $a$  ao realizar a operação  $X$  dado a estratégia  $\lambda$  e  $P(b|X\lambda)$  a probabilidade de Bob obter o resultado  $b$  ao realizar a operação  $Y$  dado a mesma estratégia  $\lambda$ . Como eles estão suficientemente distantes um do outro, operações feitas por Alice em sua partícula não devem afetar a partícula de Bob, e vice-versa, i.e., probabilidades independentes são fatoráveis. Assim, se cada estratégia  $\lambda$  for utilizada com peso  $P(\lambda)$ , ao somar

---

<sup>9</sup>Uma possível estratégia da fonte poderia ser, por exemplo: a fonte joga uma moeda e se der cara ele gera um estado singlete, se der coroa ele gera um estado separável.

sobre todas as estratégias possíveis teríamos que a probabilidade de Alice obter o resultado  $a$  ao realizar a operação  $X$  e Bob obter o resultado  $b$  ao realizar a operação  $Y$  seria

$$P_L(ab|XY) = \sum_{\lambda} P(\lambda)P(a|X\lambda)P(b|Y\lambda). \quad (2.37)$$

Ou seja, ao dizermos que operações feitas por Alice não afetam Bob estamos assumindo que esse sistema é local. Se não pudermos escrever  $P(ab|XY) = P_L(ab|XY)$  o sistema é não local.

Indo um pouco além, se o sistema é local para qualquer  $a, b, X, Y$ , então uma desigualdade de Bell geral [22, 23] é definida como

$$Bell = \sum_{abXY} C_{ab}^{XY} P_L(ab|XY) \leq K_L, \quad (2.38)$$

ou seja, temos um limite para uma configuração de correlações locais. Como a desigualdade da Eq. (2.38) é baseada em argumentos locais, assumindo o realismo, se ela for violada o sistema será não local ou não realista.

Portanto, cada desigualdade fica definida pelas constantes  $C_{ab}^{XY}$  e  $K_L$ , onde  $K_L$  surge em função dos  $C_{ab}^{XY}$  ao maximizarmos o lado esquerdo da Eq. (2.38). Classicamente toda teoria é local: dois corpos suficientemente distantes um do outro, de modo a não haver interação entre eles, não interferem em nada um no outro; e realista: existem elementos de realidade nas teorias, isto é, podemos, por exemplo, medir a posição de uma partícula (clássica) sem perturbar o sistema. Já que toda teoria clássica não viola a Eq. (2.38), surge a pergunta: que teoria é capaz de violar a Eq. (2.38)? Mas antes de responder essa pergunta, vamos ver como a mecânica quântica, que é uma teoria dita incompleta (EPR [1]), se encaixa nessa discussão.

Na mecânica quântica a probabilidade de um resultado  $a$  ser obtido ao re-

alizer a operação  $X$  é dada pelo operador de medida  $M_a^X$  como sendo  $P(a|X) = \langle M_a^X \rangle = \text{Tr}(M_a^X \rho)$ . Assim a probabilidade  $P(ab|XY)$  será

$$P(ab|XY) = \text{Tr}(M_a^X \otimes M_b^Y \rho). \quad (2.39)$$

Esses operadores de medida podem ser reescritos como observáveis:  $A_X$  ( $B_Y$ ), observáveis de Alice (Bob) ao realizar a operação  $X$  ( $Y$ ).

Então, respondendo a questão acima, já se sabe que existem sistemas descrito pela mecânica quântica que violam alguma(s) desigualdade(s) de Bell, um exemplo é o próprio singlete estudado no paradoxo EPR. Com isso a relação estabelecida entre as desigualdades de Bell e a mecânica quântica é:

a) Estados separáveis são locais (não violam Bell).

Substituindo  $\rho = \sum_k p_k \rho_A^{(k)} \otimes \rho_B^{(k)}$  na Eq. (2.39) temos

$$P(ab|XY) = \text{Tr} \left( M_a^X \otimes M_b^Y \left( \sum_k p_k \rho_A^{(k)} \otimes \rho_B^{(k)} \right) \right)$$

$$P(ab|XY) = \sum_k p_k \left( \text{Tr} \left( M_a^X \rho_A^{(k)} \right) \right) \left( \text{Tr} \left( M_b^Y \rho_B^{(k)} \right) \right). \quad (2.40)$$

Comparando a Eq. (2.40) com a Eq. (2.37) temos

$$P(ab|XY) = \sum_k p_k P(a|Xk) P(b|Xk) = P_L(ab|XY), \quad (2.41)$$

ou seja, é local.

b) Estados puros emaranhados são não locais (violam Bell).

Esse resultado foi demonstrado primeiramente pelo Gisin [3], para duas partículas, e posteriormente pelo Popescu [4], para  $n$  partículas.

c) Estados mistos emaranhados nem sempre são não locais (nem sempre violam Bell).

Seguindo a ideia dos estados puros, esperávamos que os estados mistos emaranhados também fossem não locais. Porém, Werner mostrou que existem estados (os famosos estados de Werner, Apêndice A) que podem ser emaranhados mas não violar a desigualdade CHSH (que é uma desigualdade de Bell que será discutida a seguir), ou seja, a princípio seriam locais.

Essas discussões podem ser vistas em [24, 25].

## 2.2.2 Desigualdade CHSH

A desigualdade CHSH (Clauser, Horne, Shimony e Holt) é um tipo de desigualdade de Bell<sup>10</sup> que é bem parecida com a própria desigualdade que Bell criou, a diferença mais relevante é que a CHSH é mais fácil de ser testada experimentalmente.

A desigualdade CHSH é um caso particular da Eq. (2.38) em que  $\{a, b, X, Y\} = \{0, 1\}$ ,  $a(b) = 0$  significa medir  $+1$  e  $a(b) = 1$  significa medir  $-1$ , escolhemos  $C_{ab}^{XY} = (-1)^{a+b+XY}$  [22] e ao maximizarmos o lado esquerdo dessa equação encontramos  $K_L = 2$ . Fazendo a ligação com a mecânica quântica os observáveis a serem medidos no laboratório, como dito antes, podem ser reescritos em função dos operadores de medida, para medidas dicotômicas, como  $A_X = M_0^X - M_1^X$  e  $B_Y = M_0^Y - M_1^Y$  [23].

Nessa desigualdade utilizamos um sistema de duas partículas de spin- $\frac{1}{2}$  em que mandamos uma para Alice e a outra para Bob, onde ambos estão suficientemente distantes um do outro e da fonte. Ilustrando esse problema em função dos observáveis, cada um escolhe duas direções  $\hat{a}_i$  e  $\hat{b}_j$  e medem, simultaneamente e independentemente, os observáveis  $A_i = \hat{a}_i \cdot \vec{\sigma}$  e  $B_j = \hat{b}_j \cdot \vec{\sigma}$  ( $\vec{\sigma} = (\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z)$ ).

---

<sup>10</sup>A única desigualdade de Bell que usamos nesse trabalho foi a CHSH, então toda vez que surgir o termo desigualdade de Bell entende-se como desigualdade CHSH.

Então, chegamos a definição do operador de Bell, que é:

$$B_{CHSH} = A_1 \otimes B_1 + A_1 \otimes B_2 + A_2 \otimes B_1 - A_2 \otimes B_2, \quad (2.42)$$

onde a desigualdade será

$$|\langle B_{CHSH} \rangle| \leq 2, \quad (2.43)$$

de modo que se ela for violada teremos que abrir mão do realismo ou da localidade.

Outra característica importante da CHSH é que ela não só estabelece um limite para correlações clássicas, ou locais, como também estabelece um limite para as correlações quânticas, ou não locais. Esse limite quântico, dado pela cota de Tsirelson [26], é:

$$|\langle B_{CHSH} \rangle|_{MQ} \leq 2\sqrt{2}, \quad (2.44)$$

que representa a máxima violação de CHSH, que é onde o sistema é mais não local<sup>11</sup>.

No entanto,  $\langle B_{CHSH} \rangle$  depende tanto do estado quanto das direções escolhidas e para afirmar se o sistema viola a Eq. (2.42) temos que, para um dado estado, maximizar as direções escolhidas, assim definindo o que chamamos de medida de Bell

$$\mathcal{B} = \max_{\{\hat{a}_i, \hat{b}_j\}} |\langle B_{CHSH} \rangle|, \quad (2.45)$$

que continua sendo violada para  $\mathcal{B} > 2$ .

Determinar o valor da medida de Bell pode ser uma tarefa complicada, devido as maximizações, mas graças ao critério dos Horodecki's [27] obtemos uma

---

<sup>11</sup>Estados que violam maximamente CHSH são os estados de Bell (o singleto e outros três estados), e também os denominados como estados maximamente emaranhados.

expressão analítica. Primeiro vamos escrever o estado de dois qubits

$$\rho = \frac{1}{4} \left[ \mathbb{I} \otimes \mathbb{I} + \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \vec{q} \cdot \vec{\sigma} + \sum_{u,v} t_{uv} \sigma_u \otimes \sigma_v \right], \quad (2.46)$$

para identificarmos as magnetizações e correlações, onde  $\vec{p} = \langle \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I} \rangle$  e  $\vec{q} = \langle \mathbb{I} \otimes \vec{\sigma} \rangle$  são as magnetizações, e  $t_{uv} = \langle \sigma_u \otimes \sigma_v \rangle$  ( $u, v = x, y, z$ ) são as correlações. Depois definimos a matriz  $U = T^T T$ , onde  $T$  é a matriz com coeficientes  $t_{uv}$ . Em seguida definimos

$$M = u + u', \quad (2.47)$$

onde  $u$  e  $u'$  são os dois maiores autovalores de  $U$ . Com isso os Horodecki's demonstraram que a medida de Bell pode ser escrita como

$$\mathcal{B} = 2\sqrt{M}, \quad (2.48)$$

facilitando bastante os cálculos da Eq. (2.45).

### 2.2.3 Teorema de Bell sem Desigualdade

A questão do realismo, discutida quando há violação de uma desigualdade de Bell, pode ser vista na experiência mental, em princípio realizável, proposta por D.M. Greenberger, M. Horne e A. Zeilinger [28].

Esse experimento mental atualmente é conhecido como uma desigualdade sem desigualdade, onde podemos ver contradições nas relações de comutação sem precisar de uma desigualdade.

Consideremos um sistema de três partículas de spin  $\frac{1}{2}$  que se desintegra, por um processo em que o spin total se conserve e que as três partículas resultantes descrevam trajetórias coplanares, num plano que tomamos como  $yz$ .

Dado  $\sigma_a^j$  ( $a = x, y, z; j = 1, 2, 3$ ) os operadores de spin de Pauli das três

partículas, temos:

$$\sigma_a^j \sigma_b^j = -\sigma_b^j \sigma_a^j \quad (a \neq b); \quad (\sigma_a^j)^2 = 1$$

$$\sigma_a^i \sigma_b^j = \sigma_b^j \sigma_a^i \quad (i \neq j)$$

Sejam:

$$I_1 = \sigma_x^1 \sigma_y^2 \sigma_z^3; \quad I_2 = \sigma_y^1 \sigma_x^2 \sigma_z^3; \quad I_3 = \sigma_y^1 \sigma_y^2 \sigma_x^3, \quad (2.49)$$

onde  $I_i^\dagger = I_i$  e  $\sigma_a^1 \sigma_b^2 \sigma_c^3 = \sigma_a^1 \otimes \sigma_b^2 \otimes \sigma_c^3$ , temos que

$$I_1 I_2 = \sigma_x^1 \sigma_y^2 \sigma_y^3 \sigma_y^1 \sigma_x^2 \sigma_y^3 = \sigma_x^1 \sigma_y^2 \sigma_y^1 \sigma_x^2 (\sigma_y^3)^2 = \sigma_x^1 \sigma_y^1 \sigma_x^2 \sigma_y^2$$

$$I_2 I_1 = \sigma_y^1 \sigma_x^2 \sigma_y^3 \sigma_x^1 \sigma_y^2 \sigma_y^3 = \sigma_y^1 \sigma_x^2 \sigma_x^1 \sigma_y^2 (\sigma_y^3)^2 = \sigma_x^1 \sigma_y^1 \sigma_x^2 \sigma_y^2$$

ou seja

$$I_1 I_2 = I_2 I_1 \iff [I_1, I_2] = 0$$

Analogamente para  $I_1 I_3$  e  $I_2 I_3$  temos:

$$[I_1, I_2] = [I_1, I_3] = [I_2, I_3] = 0. \quad (2.50)$$

Por outro lado

$$I_i^2 = 1 \quad (2.51)$$

de modo que  $I_i$  tem autovalores  $\pm 1$ .

Como os três  $I_i$  comutam entre si, podemos construir autovalores simultâneos dos mesmos. Vamos tomar como estado inicial na desintegração o estado  $|\psi\rangle = |I_1 = 1, I_2 = 1, I_3 = 1\rangle$ , que será dado por

$$|\psi\rangle = \frac{|000\rangle - |111\rangle}{\sqrt{2}}, \quad (2.52)$$

de modo que

$$I_i|\psi\rangle = |\psi\rangle.$$

Como as componentes de spin de partículas diferentes comutam, podemos medir simultaneamente a componente  $x$  para uma partícula e as componentes  $y$  para as outras duas em três regiões assintóticas das trajetórias das partículas tão afastadas umas das outras quanto quisermos.

No estado  $|\psi\rangle$ , autoestado de  $I_1, I_2, I_3$ , o produto da componente  $x$  de uma partícula pela  $y$  das outras duas é  $I_i = 1$ . Assim, se medirmos as componentes para duas das partículas, tão longe quanto quisermos da terceira, podemos prever com certeza a componente restante da terceira (exemplo: se  $\sigma_x^1\sigma_y^2 = -1$  obtemos  $\sigma_y^3 = -1$ ; se  $\sigma_y^1\sigma_y^2 = 1$  obtemos  $\sigma_x^3 = 1$ ).

Logo, pelo critério EPR, deveriam existir "elementos de realidade" ( $m_a^j, a = x, y, z, j = 1, 2, 3$ ; com valores  $\pm 1$ ) para as três partículas simultaneamente, de tal forma que  $m_a^1 m_b^2 m_c^3$  é o resultado da medida de  $\sigma_a^1 \sigma_b^2 \sigma_c^3$  ( $a, b, c = x, y$ ). Resulta que<sup>12</sup>

$$m_x^1 m_y^2 m_y^3 = 1 \quad (2.53)$$

$$m_y^1 m_x^2 m_y^3 = 1 \quad (2.54)$$

$$m_y^1 m_y^2 m_x^3 = 1 \quad (2.55)$$

Tomando o produto das Eq. (2.53), Eq. (2.54) e Eq. (2.55) temos

$$m_x^1 m_y^2 m_y^3 m_y^1 m_x^2 m_y^3 m_y^1 m_y^2 m_x^3 = m_x^1 (m_y^1)^2 m_x^2 (m_y^2)^2 m_x^3 (m_y^3)^2 = 1,$$

ou seja,

$$m_x^1 m_x^2 m_x^3 = 1 \quad (2.56)$$

---

<sup>12</sup>Note que  $m_a^j$  são números, e não operadores, portanto comutam.

o que deveria ser o resultado da medida de  $\sigma_x^1 \sigma_x^2 \sigma_x^3$  no estado  $|\psi\rangle$ . Mas da Eq. (2.49) resulta que

$$I_1 I_2 I_3 = (\sigma_x^1 \sigma_y^2 \sigma_y^3)(\sigma_y^1 \sigma_x^2 \sigma_y^3)(\sigma_y^1 \sigma_y^2 \sigma_x^3) = \sigma_x^1 (\sigma_y^2)^2 (\sigma_y^3)^2 (\sigma_y^1)^2 \sigma_x^2 \sigma_x^3$$

$$I_1 I_2 I_3 = -\sigma_x^1 \sigma_x^2 \sigma_x^3. \quad (2.57)$$

Como o autovalor de  $I_1 I_2 I_3$  no estado  $|\psi\rangle$  é  $+1$ , resulta que

$$\sigma_x^1 \sigma_x^2 \sigma_x^3 |\psi\rangle = -|\psi\rangle. \quad (2.58)$$

Assim resulta da Mecânica Quântica (devido à anti-comutação entre os operadores  $\sigma_a$ ) que o resultado da medida de  $\sigma_x^1 \sigma_x^2 \sigma_x^3$  no estado  $|\psi\rangle$  é sempre  $-1$ , ao passo que se existissem "elementos de realidade" teríamos sempre  $m_x^1 m_x^2 m_x^3 = +1$ . Esse resultado ilustra um sistema que viola o realismo.

## Capítulo 3

### Noções de Transição de Fase

Uma transição de fase é caracterizada por uma mudança brusca nas propriedades termodinâmicas do sistema como resposta a variações de parâmetros externos aplicados, como temperatura, pressão ou campo magnético. E além dessa mudança brusca, que já é uma característica marcante, as transições de fase são divididas em diferentes ordens, onde cada ordem possui características diferentes. Como exemplo temos as transições de primeira ordem (ou descontínuas) que ocorrem descontinuamente em função do parâmetro externo, havendo coexistência entre as fases em questão durante a transição, e as de segunda ordem (ou contínuas) que ocorrem continuamente em função do parâmetro externo.

Uma outra característica marcante é que as transições segunda ordem exibem um comportamento universal próximo da transição. Assim, estudos sobre transições de fase são um assunto bem rico e interessante, que vem crescendo ao longo do tempo. E como esse assunto será necessário ao apresentarmos os resultados dessa dissertação, se faz necessária uma breve revisão de alguns conceitos envolvendo Transições de Fase, Transições de Fase Quânticas e Quebra Espontânea de Simetria. Além desses conceitos vamos fazer uma ligação entre emaranhamento e Transições de Fase Quânticas, mostrando que medidas de

emaranhamento podem identificar Transições de Fase Quânticas.

Todo esse capítulo foi fortemente baseado no trabalho [16], onde se encontram todos os tópicos a seguir, logo não indicaremos essa referência ao longo do texto. Outra referência que também foi bastante utilizada é o livro do Stanley [29]. Demais referências serão indicadas no texto quando forem necessárias.

### 3.1 Transição de fase

É conhecimento popular que uma substância possui três fases distintas: sólida, líquida e gasosa; e entre essas fases temos o que chamamos de Transição de Fase (TF). Sabemos do dia-a-dia que a água, que é uma das substâncias mais conhecidas, possui uma TF sólido-líquido a  $T = 0^\circ\text{C}$  e  $P = 1\text{atm}$ , e permanece nessa temperatura com coexistência das fases até que toda energia gasta (ou recebida) elimine uma das fases por completo; i.e., todo gelo vira água, ou vice-versa; e aí sim uma variação na energia começa a variar a temperatura. Em  $T = 100^\circ\text{C}$  e  $P = 1\text{atm}$  a água passa por uma TF líquido-gás com as mesmas características da TF sólido-líquido, com a diferença que agora a água vira gás, ou vice-versa. Porém, indo mais a fundo sabemos que as substâncias possuem mais fases além dessas três (por exemplo as fases magnéticas: ferromagnética, anti-ferromagnética, paramagnética e diamagnética), tornando ainda mais complicado os estudos das TF's.

O espaço de fase  $PT$  (Pressão, Temperatura) da Fig. (3.1) mostra como se distribuem as fases sólida, líquida e gasosa em função desses parâmetros externos. Podemos destacar que as curvas nomeadas são curvas de Transição de Fase de 1ª ordem (TF1), onde há coexistência entre as fases, sendo necessário fornecer (ou receber, dependendo da transição) energia, conhecida como calor latente, para completar a transição. Já o ponto  $(T_c, P_c)$  é conhecido como ponto crítico, que

indica uma Transição de Fase de 2ª ordem (TF2), que é uma TF contínua. Uma outra característica a ser comentada é que as fases líquida e gasosa não possuem diferença de simetria, o que possibilita ir de uma fase a outra sem uma TF ao contornar o ponto crítico (trajetória tracejada).

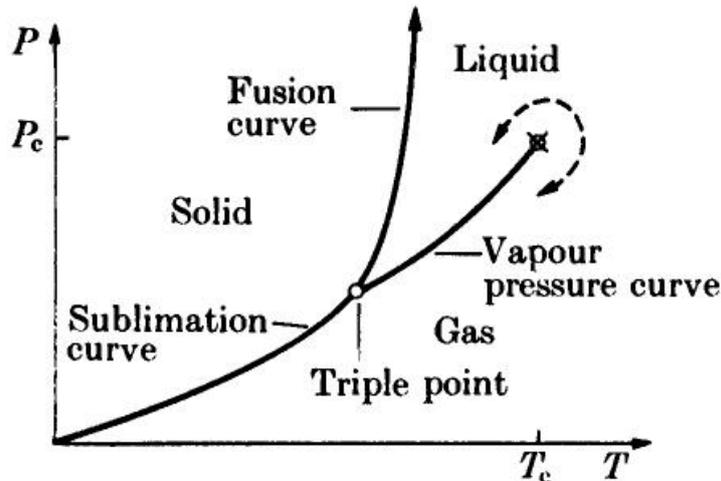


Figura 3.1: Retirada de [29]. Espaço de fase  $PT$ .

Outro exemplo de TF é a magnética da Fig. (3.2), onde apresentamos o espaço de fase  $HT$  (Campo magnético, Temperatura), sendo  $H$  o análogo magnético de  $P$ . O ponto  $(0, T_c)$  representa um ponto crítico de TF2. Para  $T < T_c$  o sistema se encontrará na fase ferromagnética, onde surge uma magnetização espontânea (sem aplicação de  $H$ ), de modo que a linha escura (que está entre  $T = 0$  e  $T = T_c$ , para  $H = 0$ ) representa uma TF1 entre o estado ferromagnético com magnetização positiva e negativa. Para  $T > T_c$  teremos uma fase paramagnética, onde a magnetização surge somente ao aplicarmos  $H$ , acompanhando o sentido do mesmo. Aqui também podemos destacar que ambas as fases ferromagnéticas possuem a mesma simetria, o que possibilita ir de uma fase a outra sem uma TF ao contornar o ponto crítico (trajetória tracejada).

Tendo ideia da importância da ordem das TF's, uma forma de identificar essa

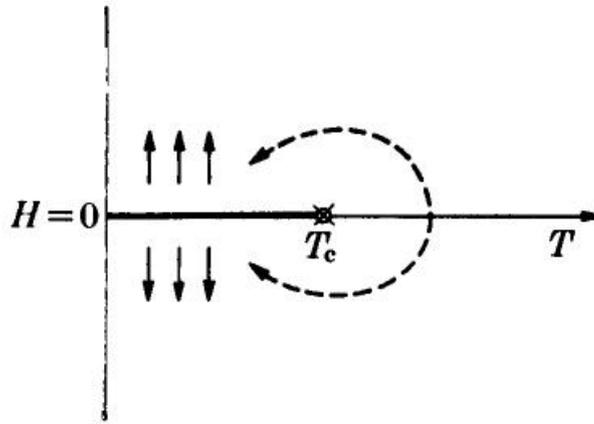


Figura 3.2: Retirada de [29]. Espaço de fase  $HT$ .

ordem se faz necessária e é aí que entra Ehrenfest. Segundo ele uma TF de ordem  $N$  surge quando a  $N$ -ésima derivada da energia livre com relação a um parâmetro externo apresenta uma descontinuidade. Atualmente sabe-se que TF2 apresentam uma divergência nas derivadas segundas e não uma descontinuidade, reformulando o que foi proposto por Ehrenfest.

Outra característica importante das TF's é o surgimento do que chamamos de parâmetro de ordem, que é um conceito central na teoria de Landau das TF's. O parâmetro de ordem de um sistema é uma variável que é nula na fase desordenada e não-nula na fase ordenada, podendo ser um escalar, um vetor ou até mesmo um tensor, além disso, pode ser real ou complexo. Para cada sistema é definido de uma forma, sendo a sua identificação nem sempre trivial. Na Fig. (3.3) ilustramos alguns sistemas e os respectivos parâmetros de ordem.

A seguir faremos uma breve discussão sobre expoentes críticos e a universalidade dos mesmos, que é mais um conceito importantíssimo nas TF2.

Sistema	Transição	Parâmetro de ordem
Líquido-gás	Condensação/evaporação	Diferença de densidade $\Delta\rho = \rho_l - \rho_g$
Sólido magnético	Ferromagnético	Magnetização espontânea por spin $m$
	Antiferromagnético	Magnetização de sub-rede por spin $m_s$
Sólido Dielétrico	Ferroelétrico	Polarização $P$
	Antiferroelétrico	Polarização de sub-rede $P_s$

Figura 3.3: Retirada de [30]. Parâmetro de ordem de alguns sistemas.

### 3.1.1 Expoentes Críticos e Universalidade

Através de anos de estudo foi observado que, para temperaturas próximas de um ponto crítico de uma TF2, certas quantidades termodinâmicas divergem por uma lei de potência, dando origem aos expoentes críticos. Esse comportamento é ilustrado, por exemplo, no calor específico:

$$C(T) \sim t^{-\alpha}, \quad (3.1)$$

ou na susceptibilidade:

$$\chi(T) \sim t^{-\gamma}, \quad (3.2)$$

ou na magnetização:

$$M(T) \sim t^{-\beta}, \quad (3.3)$$

entre outros, onde  $t = \left|1 - \frac{T}{T_c}\right|$ .

Além das grandezas termodinâmicas a função de correlação entre duas partículas também define um expoente crítico. No caso de uma transição magnética é a função de correlação conectada entre dois spins

$$G(r = i - j) = \langle (S_i^z - \langle S_i^z \rangle)(S_j^z - \langle S_j^z \rangle) \rangle = \langle S_i^z S_j^z \rangle - \langle S_i^z \rangle \langle S_j^z \rangle, \quad (3.4)$$

que define um expoente crítico, e não a função de correlação. A função de

correlação conectada mede a correlação entre spins distantes de  $r$ , será

$$G(r) \sim \frac{1}{\xi^{d-2}} \frac{e^{-r/\xi(t)}}{\left(\frac{r}{\xi}\right)^{(d-1)/2}}, \quad r \gg \xi \text{ e } T \neq T_c, \quad (3.5)$$

onde  $d$  é a dimensão do sistema e  $\xi$  é o comprimento de correlação. Podemos observar que a função de correlação conectada decai exponencialmente com a distância próxima do ponto crítico. No ponto crítico ( $T = T_c$ ) a função de correlação se torna

$$G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}, \quad (3.6)$$

que decai com uma lei de potência, sendo  $\eta$  um outro expoente crítico. Em torno do ponto crítico a função de correlação deixa de depender do comprimento de correlação, surgindo mais um expoente crítico

$$\xi \sim t^{-\nu}. \quad (3.7)$$

Assim, o comprimento de correlação diverge no ponto crítico, de modo que toda a cadeia estará correlacionada nesse ponto.

Esses expoentes críticos são tão importantes ao se estudar TF2 porque eles exibem um comportamento universal, i.e., grandezas análogas de diferentes substâncias possuem o mesmo expoente crítico, criando classes de universalidade<sup>1</sup>. Assim consegue-se simplificar o estudo dos fenômenos críticos, pois pode-se inferir os expoentes críticos para sistemas complexos a partir de resultados obtidos do estudo de transição de fase para sistemas simples da mesma classe de universalidade. A Fig. (3.4) contém dados do calor específico de várias substâncias diferentes, onde podemos observar um acordo entre esses dados e a curva, ilustrando a universalidade do expoente  $\beta = \frac{1}{3}$  para os fluidos.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Note que esse comportamento universal dos expoentes críticos só é válido em TF2.

<sup>2</sup>É importante comentar que não surge nenhuma TF2 nos resultados desse trabalho (capítulo

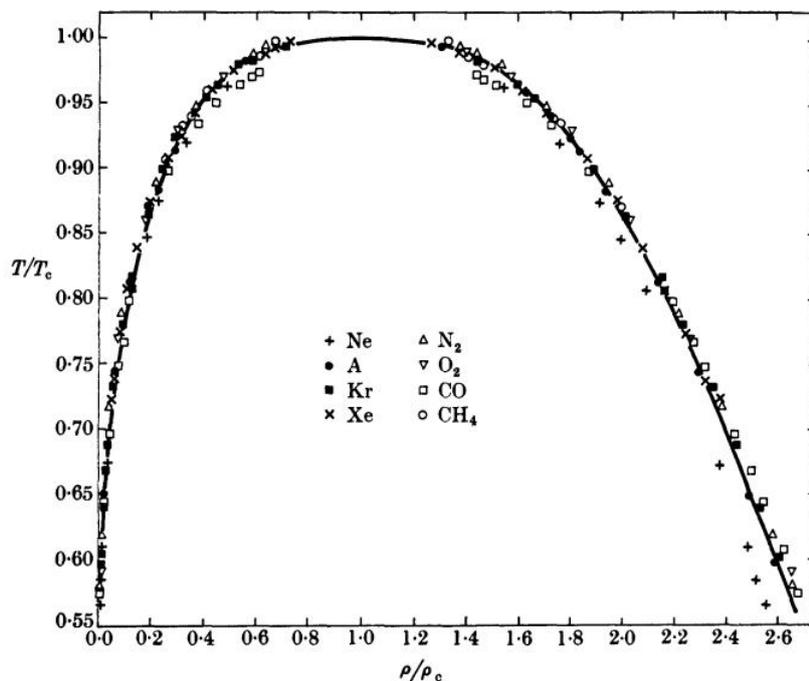


Figura 3.4: Retirada de [29]. Espaço de fase  $\rho T$  para oito fluidos diferentes com a curva sendo uma equação cúbica, i.e.,  $\beta = \frac{1}{3}$ .

## 3.2 Transição de Fase Quântica

Diferentemente de uma TF clássica, que ocorre a  $T \neq 0$  e é mediada por flutuações térmicas, a Transição de Fase Quântica (TFQ) ocorre a temperatura nula e é mediada por flutuações quânticas no sistema. Como na TFQ lidamos com  $T = 0$ , todo seu estudo é realizado em termos do estado fundamental do sistema, sendo a energia livre igual à energia fundamental.

Considere  $H(g)$  o hamiltoniano que descreve um sistema de  $N$  átomos, ou sítios, que varia em função de uma constante de acoplamento  $g$ . Em geral, as propriedades físicas do estado fundamental do sistema variam suavemente conforme variamos  $g$ , mas dependendo da forma do hamiltoniano pode ocorrer cruzamento

---

5). Mas assim mesmo TF2 será importante nesse trabalho, pois ela motiva a aplicação de medidas de emaranhamento como indicadores de TFQ.

de níveis entre os estados fundamental e primeiro excitado. Em outras palavras, pode existir um ponto  $g = g_c$  em que o primeiro estado excitado se torna o estado fundamental do sistema, gerando um comportamento não analítico da energia do estado fundamental nesse ponto. Note que esse cruzamento de níveis pode ocorrer mesmo para sistemas finitos e frequentemente gera uma Transição de Fase Quântica de Primeira Ordem (TFQ1). Uma segunda possibilidade é a existência de um *gap* de energia que tende a zero no limite termodinâmico gerando uma não analiticidade na energia fundamental em  $g = g_c$ , que em geral representa uma Transição de Fase Quântica de Segunda Ordem (TFQ2). Podemos observar esses dois casos da energia ilustrados na Fig. (3.5).

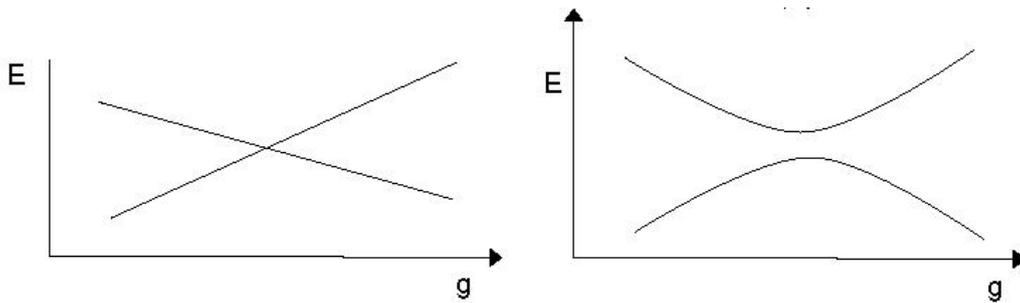


Figura 3.5: Retirada de [16]. Dois possíveis cenários para a ocorrência de uma não analiticidade na energia do estado fundamental, conforme um parâmetro  $g$  que ajusta a transição é variado. No lado esquerdo ocorre um cruzamento de níveis, gerando, em grande parte dos casos, uma transição de primeira ordem, que pode ocorrer em sistemas finitos. No caso onde este cruzamento é evitado por um *gap* que tende a zero no limite termodinâmico ocorre uma não analiticidade, na derivada segunda da energia. Esta última situação está ilustrada no lado direito da figura.

O grande questionamento que pode (e deve) ser feito aqui é com respeito a inacessibilidade experimental da temperatura nula. Quando é que a mecânica quântica é importante e o que acontece com o ponto crítico a temperatura não nula?

Inicialmente é preciso distinguir as flutuações térmicas das quânticas. Para fazer isso basta comparar a escala de energia térmica  $k_B T$  com a escala de ener-

gia quântica  $\hbar\omega_c$ , sendo  $\omega_c$  a frequência na qual as flutuações quânticas ocorrem. Flutuações quânticas serão importantes enquanto  $\hbar\omega_c > k_B T$ .

Na Fig. (3.6) temos duas possibilidades de diagrama de fase: a singularidade (e fase ordenada) está presente somente a  $T = 0$  (lado direito da figura), ou há uma linha de TF a  $T > 0$  que termina em um ponto crítico quântico  $B_c$  (lado esquerdo da figura). Na região acinzentada delimitada por curvas tracejadas é onde as flutuações térmicas são equiparáveis às quânticas, na região branca para  $B < B_c$  as flutuações térmicas são maiores, e na região branca para  $B > B_c$  as flutuações quânticas são maiores.

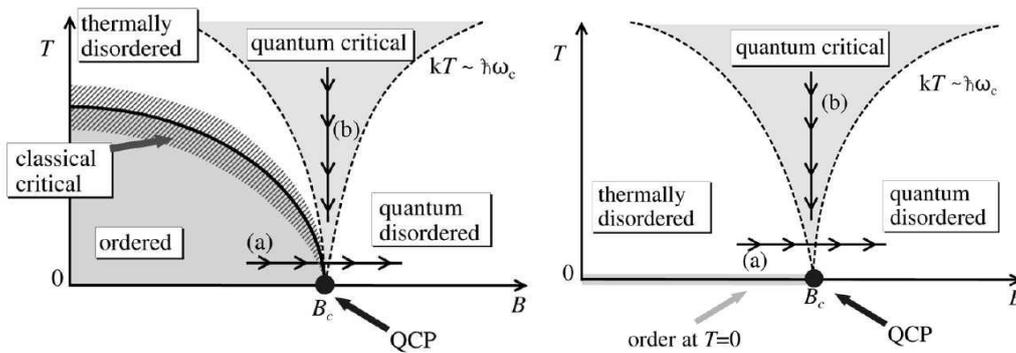


Figura 3.6: Retirada de [16]. Diagrama de fase numa situação onde a fase ordenada persiste a temperatura finita (esquerda) e no caso onde a transição só ocorre a  $T = 0$  (direita). Na figura do lado esquerdo a linha sólida demarca a fronteira entre as fases ordenada e desordenada, enquanto que entre as linhas tracejadas temos a região onde as flutuações térmicas e quânticas são equiparáveis, definindo a fase desordenada em três regiões. A região acinzentada e hachurada em torno da linha sólida marca a zona crítica onde o comportamento crítico (lei de potência) pode ser descrito classicamente. Note que tanto a fronteira de comportamento crítico como a que separa a região clássica da quântica não são bem demarcadas, ou seja, temos uma passagem suave (“crossover”) entre os dois comportamento distintos.

No caso em que há uma linha de TF, existe uma região ao redor da linha de transição (delimitada pela zona acinzentada e hachurada), onde a descrição desses graus de liberdade é clássica (ou térmica). Para  $B \sim B_c$  (caminho (a), por exemplo) há um cruzamento entre essa linha e a região *quantum critical*, de

modo que a descrição do comportamento crítico perto da transição, que é clássica, se confunda entre clássica e quântica, sendo bastante difícil diferenciar qual dos comportamentos ocorre experimentalmente.

### 3.3 Quebra Espontânea de Simetria

Dado um sistema descrito por uma hamiltoniana  $H$  que contém uma simetria  $S$ , se o estado fundamental desse sistema não possui a mesma simetria de  $H$ , dizemos que a simetria foi quebrada espontaneamente (daí o termo Quebra Espontânea de Simetria - QES). A QES é um fenômeno bastante geral tanto em física de altas energias quanto em física da matéria condensada. Ela ocorre em uma TF, dando origem ao parâmetro de ordem na fase que houve QES.

No caso magnético, a QES é definida como: um sistema tem a QES se ele sustenta uma magnetização  $M$  finita no limite termodinâmico mesmo quando fazemos o campo magnético  $h$  ir de um valor finito (positivo, por exemplo) para zero, i.e.

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} M(h, N, T) \neq 0, \quad (3.8)$$

sendo importante a ordem dos limites.

Um importante resultado sobre QES é o teorema de Mermin–Wagner (também conhecido como teorema de Mermin–Wagner-Hohenberg) [31, 32], que diz que não há QES contínua para temperaturas finitas ( $T \neq 0$ ) em sistemas com dimensões  $d \leq 2$ . Em uma dimensão e  $T = 0$  o análogo desse teorema é o teorema de Coleman [33].

No nosso caso de interesse, que é o modelo magnético descrito pelo modelo XXZ (capítulo 4), a QES gera uma magnetização (magnetização por sub-rede) na fase ferromagnética (antiferromagnética), e utilizando o teorema de Coleman vemos que as possíveis simetrias quebradas nesse processo são discretas.

### 3.4 Emaranhamento e Transição de Fase Quântica

O estudo do emaranhamento como uma ferramenta para TFQ é algo que teve início em 2002, tendo como pioneiros Osterloh e colaboradores [34], Osborne e Nielsen [35] e Vidal e colaboradores [36, 37], e está ganhando cada vez mais espaço na área de matéria condensada. A motivação para estudar emaranhamento na TFQ surge ao lembrarmos que ele seria uma correlação quântica não local, e da mesma forma que sistemas físicos possuem um comprimento de correlação que diverge em uma TF2 nossa intuição nos diria que o emaranhamento devesse ser máximo em uma TFQ, pelo menos em uma TFQ2.

Ambos os trabalhos de Osterloh e colaboradores e de Osborne e Nielsen utilizaram o modelo  $XY$  unidimensional com um campo magnético transversal. Eles encontraram que o emaranhamento bipartite, medido pela concorrência, não era máximo no ponto crítico, ao contrário do que se esperava devido ao fato das correlações entre os spins se estenderem por toda a cadeia nesse ponto, mas sim ao redor deste. Ainda mais surpreendente foi o fato de o emaranhamento entre dois spins separados por dois ou mais sítios ser nulo nesse ponto para o modelo de Ising<sup>3</sup>.

Apesar dos resultados inesperados, Osterloh e colaboradores [34] prosseguiram no estudo da derivada da concorrência entre primeiros vizinhos no modelo  $XY$  ( $\mathcal{C}_1$ ) encontrando que esta divergia no ponto crítico de forma logarítmica,

$$\frac{\partial \mathcal{C}_1}{\partial \lambda} = \frac{8}{3\pi^2} \ln |\lambda - \lambda_c| + const, \quad (3.9)$$

conforme mostra a Fig. (3.7), evidenciando assim que o emaranhamento tem um comportamento não analítico na vizinhança da transição e pode ser capaz de sinalizar uma TFQ. Também obtiveram que o emaranhamento entre segundos

---

<sup>3</sup>Esse fato também ocorre no modelo  $XXZ$ , e poderemos observá-lo no capítulo 5.

vizinhos era máximo no ponto crítico com sua derivada segunda divergindo logaritmicamente.

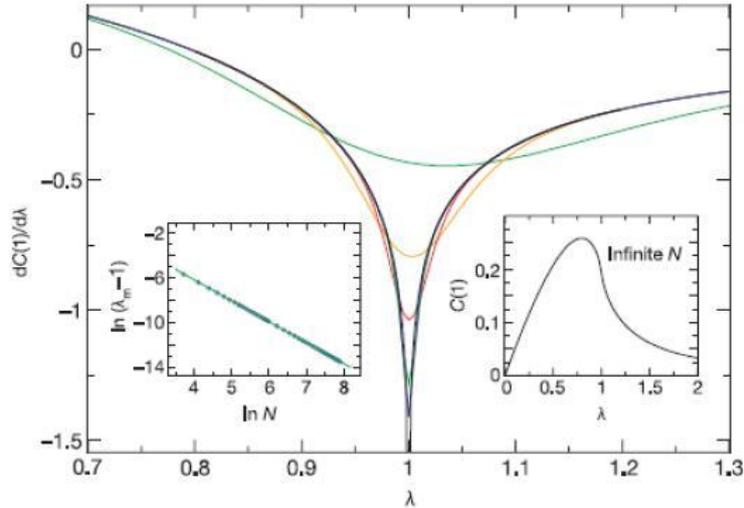


Figura 3.7: Retirada de [34]. Análise da derivada primeira da concorrência entre spins primeiros vizinhos na região crítica. As diferentes curvas correspondem a diferentes tamanhos para a cadeia:  $N = 11, 41, 101, 251, 401, \infty$ . O inset à direita mostra o comportamento da concorrência entre primeiros vizinhos para um sistema infinito.

Paralelamente, Osborne e Nielsen [35] mostraram que o emaranhamento entre um spin e o resto da cadeia, dado pela Entropia de Emaranhamento, era máximo no ponto crítico. Contudo este emaranhamento seria formado pelas contribuições do emaranhamento do sítio com todos os outros spins da cadeia, não mostrando como esse emaranhamento é distribuído; tal spin poderia estar emaranhado somente com seu primeiro vizinho ou com todos os outros.

Já Vidal e colaboradores [36, 37] analisaram o emaranhamento entre uma parte de uma cadeia de spins (um bloco de  $L$  spins) e o resto usando a Entropia de Emaranhamento, mostrando que para alguns modelos de spins- $\frac{1}{2}$  o emaranhamento aumentava logaritmicamente com  $L$  no ponto crítico, enquanto que fora do ponto crítico saturava para  $L$  grandes. Posteriormente esse resultado de Vidal e colaboradores foi estendido para qualquer modelo crítico em uma dimensão por

Korepin [38] com o auxílio da teoria de campo conforme.

A partir daí surgiram vários estudos (uma revisão em [39]) tentando generalizar essa conexão, e obter uma medida de emaranhamento que consiga indicar uma TFQ. Tal generalização apareceu em 2004 com Wu e colaboradores [7]. Neste trabalho se mostrou que tanto a concorrência quanto a negatividade são capazes de indicar TFQ1 e TFQ2. E é essa característica da concorrência que será discutida a seguir.

### 3.4.1 Concorrência

Como mencionado acima, em 2004 Wu e colaboradores [7] demonstraram, que para sistemas de partículas descritos por um hamiltoniano com interações de até dois corpos e satisfazendo algumas hipóteses: uma descontinuidade na concorrência é condição necessária e suficiente para indicar uma TFQ1, enquanto que uma descontinuidade ou divergência na derivada primeira da concorrência é condição necessária e suficiente para indicar uma TFQ2.

Para provar tal afirmação os autores fazem uso do fato de que tanto a energia por partícula ( $\varepsilon = E/N$ ) como a concorrência, e portanto suas derivadas, dependem da matriz densidade reduzida de dois spins, e que as não analiticidades que determinam as TFQ estariam nessa matriz.

Considerando o hamiltoniano da forma

$$H = \sum_{ij} U_{ij}, \quad (3.10)$$

onde  $U_{ij}$  representa todos os termos de um e dois corpos do hamiltoniano associados com as partículas  $i$  e  $j$ , a energia  $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$  é função da matriz densidade

reduzida de duas partículas

$$E(\rho_{ij}) = \sum_{ij} Tr[U_{ij}\rho_{ij}]. \quad (3.11)$$

De fato o valor esperado de qualquer operador de dois corpos é uma função linear dos elementos de matriz do operador densidade reduzido de duas partículas, e logo as derivadas da densidade de energia  $\varepsilon$  também serão. Dado um autoestado do hamiltoniano,  $|\psi\rangle$ , que depende de um conjunto de parâmetro  $\{\lambda_k\}$ , então

$$\partial_\lambda(\langle\psi|\psi\rangle) = (\partial_\lambda\langle\psi|)|\psi\rangle + \langle\psi|(\partial_\lambda|\psi\rangle) = 0. \quad (3.12)$$

Assim temos que

$$\begin{aligned} \partial_\lambda E &= (\partial_\lambda\langle\psi|)H|\psi\rangle + \langle\psi|(\partial_\lambda H)|\psi\rangle + \langle\psi|H(\partial_\lambda|\psi\rangle), \\ \partial_\lambda E &= E(\partial_\lambda\langle\psi|)|\psi\rangle + E\langle\psi|(\partial_\lambda|\psi\rangle) + \langle\psi|(\partial_\lambda H)|\psi\rangle, \\ \partial_\lambda E &= \langle\psi|(\partial_\lambda H)|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Conseqüentemente podemos escrever

$$\partial_\lambda \varepsilon = \frac{1}{N} \sum_{ij} Tr[(\partial_\lambda U_{ij})\rho_{ij}], \quad e \quad (3.14)$$

$$\partial_\lambda^2 \varepsilon = \frac{1}{N} \sum_{ij} Tr[(\partial_\lambda^2 U_{ij})\rho_{ij} + (\partial_\lambda U_{ij})(\partial_\lambda \rho_{ij})]. \quad (3.15)$$

Assumindo que  $U_{ij}$  é uma função suave dos parâmetros do hamiltoniano e que  $\rho_{ij}$  é finito no ponto crítico, a origem de uma descontinuidade na derivada primeira da energia (descontinuidade ou divergência na derivada segunda da energia) está no fato de que um ou mais elementos de  $\rho_{ij}$  ( $\partial_\lambda \rho_{ij}$ ) serem descontínuos

(descontínuos ou divergente) no ponto crítico,  $\lambda = \lambda_c$ .

Da mesma forma que as derivadas da energia dependem de  $\rho_{ij}$ , a concorrência é uma função (não linear) dos elementos de  $\rho_{ij}$ . Logo, podemos relacionar as descontinuidades/divergências na concorrência (derivada primeira da concorrência) com descontinuidades/divergências da energia (derivada primeira da energia) e vice-versa.

Note que a maximização, na definição da concorrência, ou os módulos, que venham a surgir pela definição da concorrência, podem criar não analiticidades na mesma que não vem de não analiticidades de  $\rho_{ij}$  ou de  $\partial_\lambda \rho_{ij}$ , sendo essas não analiticidades chamadas de acidentais. Portanto, não analiticidades acidentais não indicam TFQ, de modo que a condição necessária e suficiente para a concorrência indicar TFQ exclui essas não analiticidades acidentais.

# Capítulo 4

## Modelo XXZ

Neste capítulo iremos discutir uma cadeia unidimensional infinita de spins, mais especificamente, o modelo XXZ. Esse modelo é bem rico e interessante por conseguir explicar o magnetismo de materiais, como por exemplo o  $Yb_4As_3$  [40], que a mecânica clássica não é capaz explicar e por ser um modelo teórico conceitualmente importante. Nele conseguimos observar três fases: ferromagnética, anti-ferromagnética e uma fase sem gap; ou seja, ele possui duas transições de fase, além de possuir simetrias, que o torna relativamente mais simples que outros modelos.

A seguir descreveremos brevemente o hamiltoniano do modelo; depois discutiremos um pouco sobre suas simetrias; e por fim obteremos a energia do estado fundamental, as correlações entre primeiros, segundos e terceiros vizinhos e a concorrência e a medida de Bell para o modelo.

### 4.1 Hamiltoniano

É natural imaginar que as propriedades magnéticas dos materiais se devam a interações magnéticas entre os átomos do mesmo. No entanto o caráter magnético

se deve, em sua maior parte, às interações coulombianas entre elétrons e ao princípio de exclusão de Pauli, que juntos dão origem ao surgimento de uma interação entre os spins dos elétrons.

A energia de interação dipolar direta entre dois dipolos magnéticos  $\mathbf{m}_1$  e  $\mathbf{m}_2$  separados por uma distância  $r$  é dada por

$$U = \frac{1}{r^3} [\mathbf{m}_1 \cdot \mathbf{m}_2 - 3(\mathbf{m}_1 \cdot \hat{r})(\mathbf{m}_2 \cdot \hat{r})]. \quad (4.1)$$

Os momentos dipolares magnéticos atômicos têm magnitude  $m_1 \approx m_2 \approx g\mu_B \approx \frac{e\hbar}{mc}$ . Portanto, a ordem de grandeza de  $U$  deverá ser

$$U \approx \frac{(g\mu_B)^2}{r^3} \approx \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 \left(\frac{a_0}{r}\right)^3 \left(\frac{e^2}{a_0}\right) \approx \frac{1}{(137)^2} \left(\frac{a_0}{r}\right)^3 \left(\frac{e^2}{a_0}\right). \quad (4.2)$$

Como em sólidos magnéticos os momentos magnéticos estão separados tipicamente por  $2\text{\AA}$ ,  $U$  não é maior que  $10^{-4}eV$ . Isso é muito pequeno comparado com diferenças de energia eletrostáticas entre estados atômicos, que são frações de  $1eV$ . Esta estimativa já sugere que as interações de origem magnéticas contribuem pouco para o magnetismo do material.

Uma boa aproximação para modelos magnéticos é considerar somente os spins dos átomos. O Hamiltoniano que descreve um sólido magnético composto por  $N$  átomos pode ser escrito como [30]

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle}^N \mathbf{S}^i \cdot \mathbf{S}^j, \quad (4.3)$$

onde  $S_a^i S_a^j = S_a^i \otimes S_a^j$ . Esse termo é a interação de troca, sendo o valor de  $J$ , denominado de integral de troca, maior que zero para um ferromagneto e menor que zero para um antiferromagneto. O símbolo  $\langle i, j \rangle$  significa somas sobre primeiros vizinhos.

Certos materiais possuem uma direção preferencial de alinhamento dos spins, dando origem a uma anisotropia. No caso do modelo XXZ, que possui anisotropia na direção  $z$ , temos que  $J_y = J_x = J$  e  $\frac{J_z}{J} = \Delta$ , de modo que a Eq. (4.3) passa a ser

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle}^N (S_x^i S_x^j + S_y^i S_y^j + \Delta S_z^i S_z^j). \quad (4.4)$$

Para o caso unidimensional a Eq. (4.4) se torna

$$H = J \sum_{i=1}^N (S_x^i S_x^{i+1} + S_y^i S_y^{i+1} + \Delta S_z^i S_z^{i+1}), \quad (4.5)$$

onde usaremos um cadeia cíclica, i.e.,  $S_a^{i+N} = S_a^i$ . Se as partículas tiverem spin- $\frac{1}{2}$  ( $S_a = \frac{1}{2}\sigma_a$ ) e a cadeia for infinita ( $N \rightarrow \infty$ ) teremos

$$H = \frac{J}{4} \sum_{i=1}^{\infty} (\sigma_x^i \sigma_x^{i+1} + \sigma_y^i \sigma_y^{i+1} + \Delta \sigma_z^i \sigma_z^{i+1}), \quad (4.6)$$

que é o caso de interesse.

Algo importante a ser comentado é que a constante de acoplamento  $J$  possui origem diferente para o ferromagnetismo e antiferromagnetismo [41]. Quando dois elétrons estão localizados em orbitais energeticamente próximos e interagem repulsivamente, o valor de  $J$  será:

- Ferromagnético - se os orbitais são ortogonais, mas ocupam a mesma região do espaço. Esse alinhamento dos spins reduz a energia de interação;
- Antiferromagnético - se os orbitais não são ortogonais, mas estão espacialmente separados. Esse anti-alinhamento dos spins reduz a energia cinética.

A seguir discutiremos as simetrias do modelo XXZ.

## 4.2 Simetrias

As simetrias de um sistema são de grande utilidade, pois permitem simplificar consideravelmente o problema. Devido a essa grande utilidade vamos discutir um pouco sobre as simetrias do modelo XXZ.

Primeiro escrevemos o estado de duas partículas  $i$  e  $j$  de spin- $\frac{1}{2}$  a ser utilizado, que na forma geral será

$$\rho_{ij} = \frac{1}{4} \left[ \mathbb{I}^i \mathbb{I}^j + \vec{p} \cdot \vec{\sigma}^i \mathbb{I}^j + \mathbb{I}^i \vec{q} \cdot \vec{\sigma}^j + \sum_{u,v} t_{uv}^{ij} \sigma_u^i \sigma_v^j \right], \quad (4.7)$$

onde  $\vec{p}(\vec{q})$  é o vetor magnetização do sítio  $i(j)$  e  $t_{uv}^{ij}$  são as correlações entre as direções  $u$  da partícula  $i$  e  $v$  da partícula  $j$ . Podemos escrever  $\rho_{ij}$  na forma matricial, para auxiliar nos cálculos futuros, que será

$$\rho_{ij} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} a & b & c & d \\ b^* & e & f & g \\ c^* & f^* & h & m \\ d^* & g^* & m^* & n \end{bmatrix}, \quad (4.8)$$

onde os coeficientes são

$$\begin{aligned} a &= (1 + t_{zz}^{ij}) + (p_z + q_z), & b &= (q_x + t_{zx}^{ij}) - i(q_y + t_{zy}^{ij}), \\ c &= (p_x + t_{xz}^{ij}) - i(p_y + t_{yz}^{ij}), & d &= (t_{xx}^{ij} - t_{yy}^{ij}) - i(t_{yx}^{ij} + t_{xy}^{ij}), \\ e &= (1 - t_{zz}^{ij}) + (p_z - q_z), & f &= (t_{xx}^{ij} + t_{yy}^{ij}) - i(t_{yx}^{ij} - t_{xy}^{ij}), \\ g &= (p_x - t_{xz}^{ij}) - i(p_y - t_{yz}^{ij}), & h &= (1 - t_{zz}^{ij}) - (p_z - q_z), \\ m &= (q_x - t_{zx}^{ij}) - i(q_y - t_{zy}^{ij}), & n &= (1 + t_{zz}^{ij}) - (p_z + q_z). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Para aplicar as simetrias no estado  $\rho_{ij}$  vamos assumir que ele possui as mesmas simetrias do hamiltoniano  $H$ , uma vez que é função do estado fundamental de  $H$

( $\rho_{ij} = \text{Tr}_{(N-\{i,j\})}(|\psi\rangle\langle\psi|)$  e  $H|\psi\rangle = E_0|\psi\rangle$ ). Ou seja, vamos assumir que

$$[\rho_{ij}, H] = 0, \quad (4.10)$$

de modo a interpretar  $\rho_{ij} = f(H)$ , sabendo que  $[f(H), H] = 0$ . Assim assumimos que todo operador que comuta com  $H$  também comuta com  $\rho_{ij}$ , possuindo as mesmas simetrias, lembrando que o hamiltoniano a ser usado daqui para frente será

$$H = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{\infty} (\sigma_x^i \sigma_x^{i+1} + \sigma_y^i \sigma_y^{i+1} + \Delta \sigma_z^i \sigma_z^{i+1}). \quad (4.11)$$

Um último dado importante, antes de descrever as simetrias, são as relações entre as matrizes de Pauli:

$$\sigma_a^i \sigma_b^j = \delta_{ij} \sigma_a^i \sigma_b^i = \delta_{ij} (i \varepsilon_{abc} \sigma_c^i + \delta_{ab} \mathbb{1}^i), \quad (4.12)$$

onde  $i$  e  $j$  indicam em qual sítio a partícula se encontra.

### 4.2.1 Simetria Contínua - $SU(2)$ e $U(1)$

O grupo de simetria contínua  $SU(2)$  é composto pelos geradores  $S_\alpha$ 's ( $\alpha = \{x, y, z\}$ ) [42]. A seguir mostraremos que o hamiltoniano do modelo XXZ possui simetria contínua  $U(1)$ , subgrupo de  $SU(2)$ , através de  $S_z$  ( $[S_z, H] = 0$ ), portanto  $[S_z, \rho] = 0$ ; e que esse modelo só possui simetria  $SU(2)$  ( $[S_\alpha, \rho] = 0$ ) no caso isotrópico, i.e.,  $\Delta = 1$ .

Para mostrar os resultados acima, primeiro vamos calcular  $[S_\alpha, H] = 0$ , onde

$$S_\alpha = \frac{1}{2} \sigma_\alpha = \frac{1}{2} \sum_k \sigma_\alpha^k. \quad (4.13)$$

Começando pelo cálculo de  $\sigma_\alpha H$  temos

$$\begin{aligned}\sigma_\alpha H &= \left( \sum_k \sigma_\alpha^k \right) \left\{ \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] \sigma_u^i \sigma_u^{i+1} \right\} \\ \sigma_\alpha H &= \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] (\sigma_\alpha^i \sigma_u^i \sigma_u^{i+1} + \sigma_u^i \sigma_\alpha^{i+1} \sigma_u^{i+1}) + \sum_{k \neq i, i+1} \sigma_\alpha^k H \\ &= \sum_{k \neq i, i+1} \sigma_\alpha^k H \\ &+ \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] [(i \varepsilon_{\alpha u a} \sigma_a^i + \delta_{\alpha u} \mathbb{1}^i) \sigma_u^{i+1} + \sigma_u^i (i \varepsilon_{\alpha u a} \sigma_a^{i+1} + \delta_{\alpha u} \mathbb{1}^{i+1})] \\ &= \sum_{k \neq i, i+1} \sigma_\alpha^k H \\ &+ \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] [i \varepsilon_{\alpha u a} (\sigma_a^i \sigma_u^{i+1} + \sigma_u^i \sigma_a^{i+1}) + \delta_{\alpha u} (\mathbb{1}^i \sigma_u^{i+1} + \sigma_u^i \mathbb{1}^{i+1})].\end{aligned}\tag{4.14}$$

Se fizermos o cálculo análogo para  $H \sigma_\alpha$  veremos que é só trocar o sinal de  $\varepsilon_{\alpha u a}$  em  $\sigma_\alpha H$ . Assim encontramos

$$\begin{aligned}H \sigma_\alpha &= \sum_{k \neq i, i+1} \sigma_\alpha^k H \\ &+ \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] [-i \varepsilon_{\alpha u a} (\sigma_a^i \sigma_u^{i+1} + \sigma_u^i \sigma_a^{i+1}) + \delta_{\alpha u} (\mathbb{1}^i \sigma_u^{i+1} + \sigma_u^i \mathbb{1}^{i+1})],\end{aligned}\tag{4.15}$$

e o comutador  $[S_\alpha, H] = \frac{1}{2}[\sigma_\alpha, H]$  será

$$[S_\alpha, H] = i \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] \varepsilon_{\alpha u a} (\sigma_a^i \sigma_u^{i+1} + \sigma_u^i \sigma_a^{i+1}).\tag{4.16}$$

Agora vamos testar cada um dos geradores na Eq. (4.16) e descobrir quais deles comutam com  $H$ .

### Caso anisotrópico - modelo XXZ

No caso anisotrópico, o único gerador de simetria contínua é o operador de spin total na direção  $z$  ( $S_z$ ), i.e., resolvendo a Eq. (4.16) para  $\alpha = z$  encontramos

$$[S_z, H] = 0, \quad (4.17)$$

Como  $\rho_{ij}$  só possui duas partículas, as únicas parcelas de  $\sigma_z$  que são relevantes no cálculo do comutador são  $\mathbb{1}^i \sigma_z^j$  e  $\sigma_z^i \mathbb{1}^j$ . Escrevendo esses dois operadores na forma matricial temos

$$\mathbb{1}^i \sigma_z^j = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad e \quad \sigma_z^i \mathbb{1}^j = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (4.18)$$

e aplicando a simetria  $[S_z, \rho_{ij}] = [(\mathbb{1}^i \sigma_z^j + \sigma_z^i \mathbb{1}^j), \rho_{ij}] = 0$  encontramos

$$\begin{bmatrix} 0 & b & c & 2d \\ -b^* & 0 & 0 & g \\ -c^* & 0 & 0 & m \\ -2d^* & -g^* & -m^* & 0 \end{bmatrix} = 0, \quad (4.19)$$

o que significa que várias correlações (todas as que não forem citadas) devem ser iguais a zero. Em especial  $d = 0$  implica em

$$t_{yy}^{ij} = t_{xx}^{ij} \quad e \quad t_{yx}^{ij} = -t_{xy}^{ij}, \quad (4.20)$$

e com isso teremos

$$f(d=0) = F = 2t_{xx}^{ij} + 2it_{xy}^{ij}, \quad (4.21)$$

e a Eq. (4.8) passa a ser escrita, de forma bem mais simples, como

$$\rho_{ij} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e & F & 0 \\ 0 & F^* & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & n \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

Essa equação (Eq. (4.22)) passa a ser o ponto de partida para as simetrias e resultados posteriores, uma vez que essa simetria não pode ser quebrada em uma dimensão (ver seção Quebra Espontânea de Simetria no Capítulo 3).

Resolvendo a Eq. (4.16) para  $\alpha = \{x, y\}$  encontramos

$$[S_x, H] = i(1 - \Delta) \sum_i (\sigma_z^i \sigma_y^{i+1} + \sigma_y^i \sigma_z^{i+1}), \quad (4.23)$$

$$[S_y, H] = -i(1 - \Delta) \sum_i (\sigma_z^i \sigma_x^{i+1} + \sigma_x^i \sigma_z^{i+1}), \quad (4.24)$$

ou seja, o modelo só possui essas simetrias no caso isotrópico.

### Caso isotrópico - modelo XXX

O caso isotrópico ( $\Delta = 1$ ), também conhecido como modelo XXX, possui simetria com relação a todos os geradores de simetria contínua, i.e.,  $[S_\alpha, H] = 0$ .

Escrevendo na  $\mathbb{1}^i \sigma_x^j$  e  $\sigma_x^i \mathbb{1}^j$  forma matricial temos

$$\mathbb{1}^i \sigma_x^j = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} e \sigma_x^i \mathbb{1}^j = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (4.25)$$

Fazendo um cálculo análogo ao realizado no caso anisotrópico e aplicando a

simetria  $S_x$ , i.e.,  $[S_x, \rho_{ij}] = [(\mathbf{1}^i \sigma_x^j + \sigma_x^i \mathbf{1}^j), \rho_{ij}] = 0$  encontramos

$$\begin{bmatrix} 0 & (e + F^*) - a & (F + h) - a & 0 \\ a - (e + F) & 0 & 0 & n - (e + F) \\ a - (F^* + h) & 0 & 0 & n - (F^* + h) \\ 0 & (e + F^*) - n & (F + h) - n & 0 \end{bmatrix} = 0, \quad (4.26)$$

e resolvendo esse sistema encontramos

$$q_z = p_z = 0, \quad t_{xy}^{ij} = 0 \text{ e } t_{zz}^{ij} = t_{xx}^{ij}. \quad (4.27)$$

Assim, a Eq. (4.22) para o caso isotrópico será

$$\rho_{ij} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 + t_{xx}^{ij} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - t_{xx}^{ij} & 2t_{xx}^{ij} & 0 \\ 0 & 2t_{xx}^{ij} & 1 - t_{xx}^{ij} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 + t_{xx}^{ij} \end{bmatrix}. \quad (4.28)$$

Fazendo um cálculo análogo ao para  $S_y$  encontramos o mesmo estado da Eq. (4.28), ou seja, não gera nenhuma informação extra.

## 4.2.2 Simetrias Discretas

A seguir apresentaremos algumas simetrias discretas do modelo XXZ, a fim de descobrir qual delas será quebrada nas fases ordenadas. Cada simetria a seguir tomará como referência o estado da Eq. (4.22), que é o estado com simetria contínua.

### Simetria $Z_2$

O  $Z_2$  é um sub-grupo de  $SU_2$  formado pelos operadores  $Q_\alpha = \sigma_\alpha^{\otimes N}$  ( $\alpha = x, y, z$ ) [42] que gera uma simetria discreta. Então vamos testar, e comprovar, que  $H$  possui essa simetria e conseqüentemente  $\rho_{ij}$  a terá.

Vamos a prova:

$$Q_\alpha H = (\sigma_\alpha^{\otimes N}) \left\{ \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] \sigma_u^i \sigma_u^{i+1} \right\}$$

$$Q_\alpha H = \sum_i \sigma_\alpha^1 \dots \left\{ \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] \sigma_\alpha^i \sigma_u^i \sigma_\alpha^{i+1} \sigma_u^{i+1} \right\} \dots \sigma_\alpha^N,$$

onde vamos omitir os termos  $\sigma_\alpha^j$  com  $j \neq \{i, i+1\}$  por não serem relevantes nos cálculos. Continuando

$$Q_\alpha H = \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] (i\varepsilon_{\alpha ua} \sigma_a^i + \delta_{\alpha u} \mathbb{1}^i) (i\varepsilon_{\alpha ua} \sigma_a^{i+1} + \delta_{\alpha u} \mathbb{1}^{i+1})$$

$$Q_\alpha H = \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] \{ [-(\varepsilon_{\alpha ua})^2 \sigma_a^i \sigma_a^{i+1} + (\delta_{\alpha u})^2 \mathbb{1}^i \mathbb{1}^{i+1}] \\ + i\varepsilon_{\alpha ua} \delta_{\alpha u} (\sigma_a^i \mathbb{1}^{i+1} + \mathbb{1}^i \sigma_a^{i+1}) \},$$

como  $\varepsilon_{\alpha ua} \delta_{\alpha u} = 0$  temos que

$$Q_\alpha H = \sum_i \sum_u [1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)] \{ [(\delta_{\alpha u})^2 \mathbb{1}^i \mathbb{1}^{i+1} - (\varepsilon_{\alpha ua})^2 \sigma_a^i \sigma_a^{i+1}] \}. \quad (4.29)$$

Fazendo o cálculo análogo para  $HQ_\alpha$  veremos que é só trocar o sinal de  $\varepsilon_{\alpha ua}$  em  $Q_\alpha H$ , o que leva em  $HQ_\alpha = Q_\alpha H$ . Assim encontramos

$$[Q_\alpha, H] = 0. \quad (4.30)$$

Agora que sabemos que  $[Q_\alpha, H] = 0$  podemos aplicar essa simetria em  $\rho_{ij}$ ,

i.e.,  $[Q_\alpha, \rho_{ij}] = 0$ , obtendo (através de cálculos análogos aos anteriores)  $q_z = p_z = 0$  e  $t_{xy}^{ij} = 0$ . Assim a Eq. (4.22) passa a ser reescrita como

$$\rho_{ij} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 + t_{zz}^{ij} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - t_{zz}^{ij} & 2t_{xx}^{ij} & 0 \\ 0 & 2t_{xx}^{ij} & 1 - t_{zz}^{ij} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 + t_{zz}^{ij} \end{bmatrix}. \quad (4.31)$$

### Simetria de translação

Ao impor condições periódicas cíclicas ( $\sigma_a^{i+N} = \sigma_a^i$ ) surge uma invariância translacional  $T$  por sítio. Se transladarmos  $N$  vezes um sítio ele volta para o mesmo lugar, i.e.,  $T^N = 1$ . Com isso os autovalores de  $T$  serão apenas uma fase, descrita por  $e^{2\pi in/N}$ , onde  $n = 0, 1, 2, \dots, N - 1$ , justificando a invariância translacional (ver [43]).

Para observar o efeito dessa simetria precisamos da expressão para  $T$ , que surge através dos operadores de permutação

$$P_{ij} = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}^i \cdot \vec{\sigma}^j + \mathbb{I}^i \mathbb{I}^j) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (4.32)$$

que será descrito por

$$T = \prod_j P_{j(j+1)}. \quad (4.33)$$

Assim podemos confirmar essa simetria através do comutador

$$[T, H] = \sum_i \sum_u \prod_j \{1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)\} [P_{j(j+1)}, \sigma_u^i \sigma_u^{i+1}],$$

$$[T, H] = \sum_u \prod_i \{1 + \delta_{uz}(\Delta - 1)\} [P_{i(i+1)}, \sigma_u^i \sigma_u^{i+1}], \quad (4.34)$$

e utilizando o mesmo método das seções anteriores obtemos que

$$[P_{i(i+1)}, \sigma_u^i \sigma_u^{i+1}] = 0 \rightarrow [T, H] = 0. \quad (4.35)$$

Aplicando essa simetria para primeiros vizinhos (i.e.,  $[T, \rho_{i(i+1)}] \rightarrow [P_{i(i+1)}, \rho_{i(i+1)}] = 0$ ) temos

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -(F - F^*) & -(e - h) & 0 \\ 0 & e - h & (F - F^*) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = 0, \quad (4.36)$$

onde encontramos  $q_z^{i+1} = p_z^i$  e  $t_{xy}^{i(i+1)} = 0$ . Para outros vizinhos essa relação não é facilmente verificada, então vamos assumir que essa relação se mantenha, uma vez que  $[T, H] = 0$  para todos os vizinhos. Assim temos que  $q_z = p_z$  e  $t_{xy}^{ij} = 0$  e a Eq. (4.22) passa a ser escrita como

$$\rho_{ij} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 + t_{zz}^{ij} + 2p_z & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - t_{zz}^{ij} & 2t_{xx}^{ij} & 0 \\ 0 & 2t_{xx}^{ij} & 1 - t_{zz}^{ij} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 + t_{zz}^{ij} - 2p_z \end{bmatrix}. \quad (4.37)$$

### Hamiltoniano real

Outra característica do modelo XXZ é que seu hamiltoniano é real. Dessa forma podemos argumentar que o estado também é, e assim eliminar todas as correlações e magnetizações que formam a parte imaginária de  $\rho_{ij}$  (Eq. (4.8)). Com isso temos que  $t_{xy}^{ij} = 0$  na Eq. (4.22), que é o ponto de partida, e o estado

passa a ser

$$\rho_{ij} = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e & 2t_{xx}^{ij} & 0 \\ 0 & 2t_{xx}^{ij} & h & 0 \\ 0 & 0 & 0 & n \end{bmatrix}. \quad (4.38)$$

### 4.3 Solução do modelo XXZ

O modelo XXZ é totalmente solúvel, sendo seu espectro de energia obtido pelo ansatz de Bethe. Assim vários trabalhos foram desenvolvidos para obter e simplificar as expressões que surgem desse ansatz para a energia fundamental por partícula e também para as funções de correlação. Um exemplo é o importante trabalho dos Yang's [44] (de onde tiramos o valor da energia fundamental por partícula para  $\Delta \leq -1$ ), e outro exemplo é [45] (de onde tiramos os outros intervalos da energia fundamental por partícula), de modo que a energia fundamental por partícula será

$$e_0(\Delta) = \begin{cases} -\frac{\Delta}{4}, & \Delta \leq -1, \\ \frac{\Delta}{4} + \frac{\sin \pi \nu}{2\pi} \int_{-\infty + \frac{i}{2}}^{\infty + \frac{i}{2}} dx \frac{1}{\sinh x} \frac{\cosh \nu x}{\sinh \nu x}, & -1 < \Delta < 1, \\ \frac{1}{4} - \ln 2, & \Delta = 1, \end{cases} \quad (4.39)$$

onde  $\Delta = \cos \pi \nu$ , e para  $\Delta > 1$  deve-se usar  $\nu = i\phi$ . As funções de correlação estão no Apêndice B.

O modelo possui três fases distintas:

- Fase ferromagnética para  $\Delta \leq -1$  - caracterizada pelo surgimento de uma magnetização espontânea, que persiste mesmo sem campo magnético aplicado, devido ao alinhamento de todos os spins em uma mesma direção ( $z$ ). Essa fase

quebra a simetria  $Z_2$ , de modo que a magnetização por sítio será

$$q_z = p_z = \frac{M}{N} = m. \quad (4.40)$$

Também podemos destacar que, devido a esse alinhamento perfeito, as correlações na direção  $z$  serão:  $\langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+r} \rangle = 1$ , e na direção  $x$  ( $y$ ) serão:  $\langle \sigma_x^i \sigma_x^{i+r} \rangle = 0$ . Isso gera uma magnetização  $m = \pm 1$ ;

- Fase sem gap para  $-1 < \Delta < 1$  - possui ordem de quase longo alcance, i.e., para grandes distâncias ( $r \rightarrow \infty$ ) suas correlações decaem como uma lei de potência:  $\langle \sigma_u^i \sigma_u^{i+r} \rangle \sim r^{-a}$ . Esse comportamento está entre  $\langle \sigma_u^i \sigma_u^{i+r} \rangle \sim C$  (ordem de longo alcance) e  $\langle \sigma_u^i \sigma_u^{i+r} \rangle \sim e^{-r}$  (decaimento exponencial, ou desordem), por isso é chamado de ordem de quase longo alcance. E essa fase preserva todas as simetrias do hamiltoniano;

- Fase antiferromagnética para  $\Delta \geq 1$  - caracterizada pelo surgimento de duas sub-redes, com magnetizações opostas. Essa fase quebra as simetrias  $Z_2$  e de translação, de modo que as magnetizações por sítio serão iguais se pertencerem a mesma sub-rede.

Outra característica desse modelo é que as funções de correlação só dependem da distância entre as partículas, devido a invariância translacional, e não da posição das duas na cadeia, ou seja

$$t_{uu}^{ij} = t_{uu}^{i(i+r)} = t_{uu}^r = \langle \sigma_u^i \sigma_u^{i(i+r)} \rangle. \quad (4.41)$$

Assim, a energia fundamental por partícula pode ser relacionada com as funções de correlação entre primeiros vizinhos como sendo

$$e_0 = \frac{1}{4} (2\langle \sigma_x^i \sigma_x^{i+1} \rangle + \Delta \langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} \rangle), \quad (4.42)$$

de modo que

$$\langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} \rangle = 4 \frac{de_0}{d\Delta}, \quad (4.43)$$

$$\langle \sigma_x^i \sigma_x^{i+1} \rangle = 2 \left( e_0 - \Delta \frac{de_0}{d\Delta} \right). \quad (4.44)$$

A seguir apresentaremos a concorrência e a medida de Bell para o modelo XXZ, pois serão utilizadas no Capítulo 5 ao descrevermos os resultados dessa dissertação.

### Concorrência e Medida de Bell

Devido a forma simples de  $\rho_{ij}$  Eq. (4.31), a concorrência para o modelo XXZ pode ser facilmente calculada, obtendo

$$\mathcal{C}_r = \frac{1}{2} \max\{0, 2|t_{xx}^r| - (1 + t_{zz}^r)\}. \quad (4.45)$$

Nas fases em que há QES a concorrência tem uma expressão um pouco mais complicada:

$$\mathcal{C}_r^{QES} = \frac{1}{2} \max\left\{0, 2|t_{xx}^r| - \sqrt{(1 + t_{zz}^r)^2 - (p_z + q_z)^2}\right\}. \quad (4.46)$$

Apesar de ter expressões distintas, a concorrência não tem seu valor alterado pela QES no modelo XXZ, i.e., as Eq. (4.45) e Eq. (4.46) fornecem valores iguais mesmo para  $p_z$  e  $q_z$  diferentes de zero, como discutido em [46]. Mas mesmo sem alterar nada a Eq. (4.46) será importante nos resultados, no Capítulo 5.

Para terminar calculamos a expressão da medida de Bell para o modelo XXZ:

$$\mathcal{B}_r = 2 \max\left\{\sqrt{2}|t_{xx}^r|, \sqrt{(t_{xx}^r)^2 + (t_{xx}^r)^2}\right\}. \quad (4.47)$$

Note que a QES não afeta a expressão da medida de Bell, uma vez que no modelo

XXZ a QES gera somente magnetizações, não alterando o valor das funções de correlação.

## Capítulo 5

# Emaranhamento e desigualdade de Bell no modelo XXZ

Esse capítulo tem como finalidade apresentar os resultados e discussões desenvolvidos na dissertação e no trabalho [47].

Nosso primeiro resultado é observado na Fig. (5.4): a existência de regiões em que o sistema está emaranhado, mas não viola Bell. Um resultado inesperado, a princípio, uma vez que violar Bell é um indício de emaranhamento e esperamos que, em geral, a volta seja verdade (como é para estados puros). Esse fenômeno já é conhecido em alguns estados, como os de Werner (Apêndice A), e parece ser mais geral e presente também em materiais descritos pelo modelo XXZ.

Nosso segundo resultado obtido vem da análise do gráfico da medida de Bell, também na Fig. (5.4). Podemos observar não analiticidades tanto na TFQ1 quanto na TFQ de ordem infinita, enquanto a concorrência só apresenta não analiticidade na TFQ1. Esse resultado sugere<sup>1</sup> que a medida de Bell pode ser capaz de determinar TFQ's.

---

<sup>1</sup>Sugere porque a medida de Bell depende da matriz densidade reduzida  $\rho_{ij}$  do sistema, assim como  $e_0$  e a concorrência, e assim ela também poderia indicar TFQ.

## 5.1 Discussões

A energia fundamental por partícula é capaz de determinar uma transição de ordem  $N$  através de uma descontinuidade ou divergência na sua  $N$ -ésima derivada. Na Fig. (5.1) podemos observar uma não analiticidade em  $\Delta = -1$ . A Fig. (5.3) mostra de fato que a derivada primeira de  $e_0$  ( $\frac{de_0}{d\Delta} = \frac{\langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} \rangle}{4}$ ) é descontínua, indicando uma TFQ1. A transição em  $\Delta = 1$  é de ordem infinita; nenhuma derivada finita da energia apresenta não analiticidade. Essa transição é conhecida como de Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT).

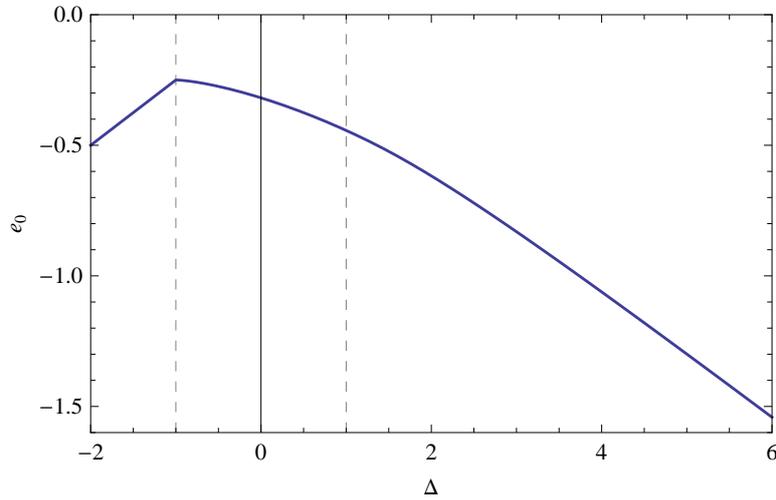


Figura 5.1: Energia fundamental por sítio do modelo XXZ. A TFQ em  $\Delta = -1$  é determinado por essa curva, enquanto que em  $\Delta = 1$  tem uma TFQ do tipo BKT que não pode ser identificada.

As correlações  $\langle \sigma_x^i \sigma_x^{i+r} \rangle$  e  $\langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+r} \rangle$ , Fig. (5.2) e Fig. (5.3) respectivamente, também indicam a transição em  $\Delta = -1$ . Porém as funções de correlação por si só não necessariamente indicam uma TFQ.

Uma outra maneira de encontrar as TFQ's, como discutido no capítulo 2, é analisando a concorrência ou sua derivada primeira. Segundo Wu e colaboradores [7] uma descontinuidade ou divergência na concorrência (ou em sua derivada primeira) é condição necessária e suficiente para indicar uma TFQ1 (ou TFQ2).

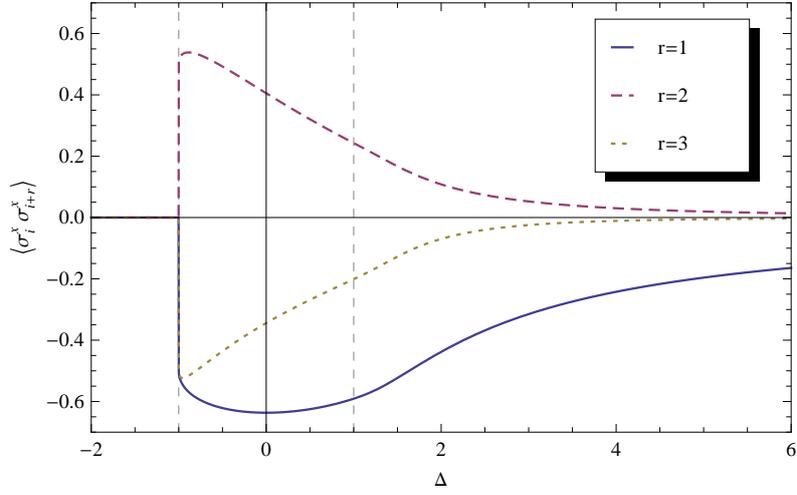


Figura 5.2: Função de correlação na direção  $x$  para primeiros, segundos e terceiros vizinhos do modelo XXZ. Observa-se que essa correlação indica a TFQ em  $\Delta = -1$ , mas não indica a TF em  $\Delta = 1$ .

No entanto a concorrência do modelo XXZ (Fig. (5.4)) só apresenta não analiticidade em  $\Delta = -1$ , sendo sua derivada primeira descontínua um indicador de TFQ2 (ao invés de indicar uma TFQ1, como deveria ser, pois a derivada primeira de  $e_0$  é descontínua).

Já em  $\Delta = 1$  a concorrência é máxima para primeiros vizinhos, o que poderia ser considerado um indicador de TFQ. No entanto não há nenhuma prova de que um máximo na concorrência indique uma TFQ, ou seja, seria uma característica particular do modelo XXZ. Para segundos e terceiros vizinhos observamos uma não analiticidade para  $-1 < \Delta < 1$ , sendo essa uma não analiticidade acidental criada pela maximização na definição da concorrência, não correspondendo a TFQ's.

A medida de Bell para primeiros, segundos e terceiros vizinhos também pode ser vista na Fig. (5.4). Observamos que mesmo quando o sistema está emaranhado, inesperadamente ele nunca viola Bell. Isto mostra que o modelo XXZ possui um tipo de emaranhamento "oculto" que não pode ser revelado pela de-

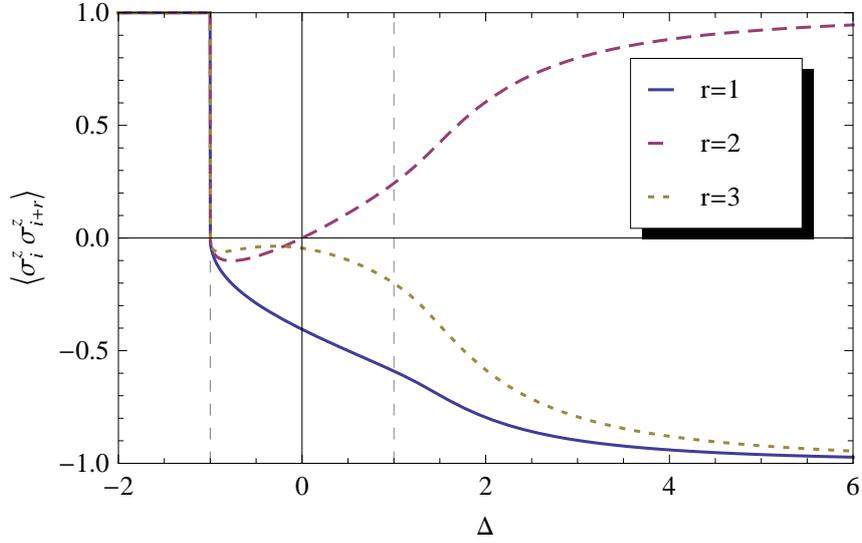


Figura 5.3: Função de correlação na direção  $z$  para primeiros ( $\langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} \rangle = 4 \frac{de_0}{d\Delta}$ ), segundos e terceiros vizinhos do modelo XXZ. Observa-se que essa correlação indica a TFQ em  $\Delta = -1$ , mas não indica a TFQ em  $\Delta = 1$ .

sigualdade de Bell.

Apesar da medida de Bell não indicar não-localidade, ela sinaliza tanto a TFQ1 em  $\Delta = -1$ , através de uma descontinuidade, quanto a TFQ de ordem infinita, através de uma descontinuidade na derivada primeira. Note que tanto a energia quanto a concorrência são incapazes de identificar a TFQ de ordem infinita.

Esse comportamento, junto com o fato do sistema estar emaranhado e não violar Bell, também foi observado no modelo XY com campo transversal em [8]. Isso sugere que a medida de Bell seja capaz de indicar uma TFQ e que o tipo de emaranhamento que é relevante na TFQ não é trivial, uma vez que ele não é revelado pela desigualdade de Bell.

Uma discussão qualitativa do que acontece na TFQ em  $\Delta = 1$  seria o fato de que para  $\Delta > -1$  a correlação em  $x$  é maior (em módulo) que em  $z$  (em módulo) e essa diferença diminui a medida que  $\Delta$  aumenta. Em  $\Delta = 1$  a correlação em  $z$

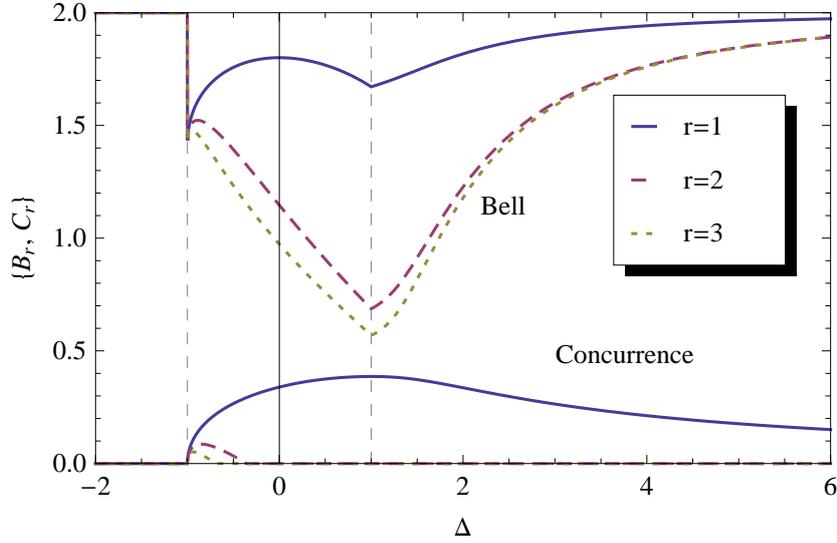


Figura 5.4: Medida de Bell (as três curvas superiores) e concorrência (as três curvas inferiores) para primeiros, segundos e terceiros vizinhos do modelo XXZ. Observa-se que a desigualdade de Bell nunca é violada, mesmo em regiões onde há emaranhamento. Enquanto ambas as medidas são capazes de indicar a TFQ1 em  $\Delta = -1$ , apenas a medida de Bell é capaz de indicar a transição de ordem infinita em  $\Delta = 1$ .

se iguala a de  $x$  e para  $\Delta > 1$  a correlação em  $z$  passa a ser maior (em módulo) que em  $x$  (em módulo), dando origem a magnetização espontânea em  $z$  na fase antiferromagnética. Assim podemos pensar que a correlação em  $x$  está gerando uma espécie de desordem no sistema, uma vez que o sistema tende a se alinhar na direção  $z$  e a correlação em  $x$  está destruindo esse alinhamento, de modo que o sistema passa a gerar magnetização espontânea quando a correlação em  $z$  supera esse desornamento. Note que a medida de Bell<sup>2</sup> consegue indicar essa TFQ porque ela captura esse fato que acabamos de descrever, devido a maximização em sua definição.

Por último apresentamos uma visão geométrica na Fig. (5.5), que é o espaço de parâmetros de uma matriz densidade que possui as mesmas simetrias do modelo

<sup>2</sup>Lembrando que  $B_r = 2 \max \left\{ \sqrt{2} |\langle \sigma_x^i \sigma_x^{i+r} \rangle|, \sqrt{\langle \sigma_x^i \sigma_x^{i+r} \rangle + \langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+r} \rangle} \right\}$ .

XXZ. O triângulo maior que define os estados físicos foi obtido usando a positividade de uma matriz densidade (autovalores positivos). A região onde os estados estão emaranhados foi definida pela concorrência, de modo que as linhas parale-

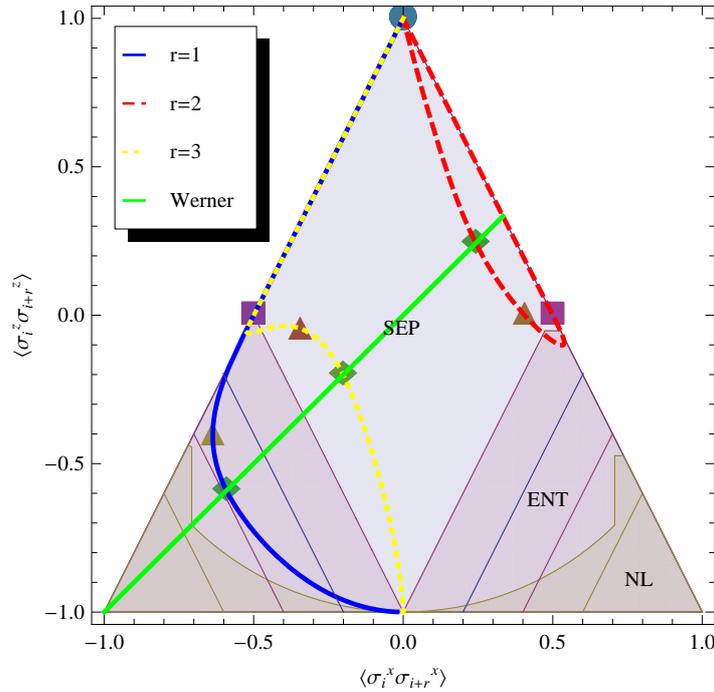


Figura 5.5: Espaço de parâmetro de uma matriz densidade de dois spins- $\frac{1}{2}$  com as simetrias do modelo XXZ. O triângulo maior define os estados físicos, no diamante interno estão os estados separáveis (SEP), nos dois triângulos menores nos vértices inferiores estão os estados emaranhados (ENT) e nas duas regiões menores também nos vértices inferiores estão os estados que violam a desigualdade de Bell (NL). As linhas paralelas a borda da região emaranhada são linhas de contorno da concorrência. As curvas são trajetórias do estado fundamental do modelo XXZ para primeiros, segundos e terceiros vizinhos e a trajetória do estado de Werner. Também marcamos os pontos  $\Delta = -1$  (círculo),  $0,999$  (quadrado),  $0$  (triângulo) e  $1$  (diamante).

las a borda dessa região são linhas de contorno da mesma, e esse emaranhamento aumenta quando nos aproximamos dos vértices inferiores do triângulo maior. A região não local é onde os estados violam a desigualdade de Bell, sendo que essa violação aumenta quando nos aproximamos dos vértices inferiores do triângulo maior, assim como o emaranhamento. E a região separável são os estados não

emaranhados, definidos pela concorrência.

Ainda na Fig. (5.5), podemos destacar que a fase ferromagnética se encontra, toda ela, no vértice superior do triângulo; depois há um salto para a fase sem gap, iniciando no quadrado; e segue até chegar na fase anti-ferromagnética, iniciando no diamante. A curva verde (trajetória de um estado de Werner) é onde todos os  $r$  vizinhos deverão permanecer para  $\Delta = 1$ .

## 5.2 Discussões complementares

A partir de agora vamos analisar apenas as fases ferromagnéticas e sem gap, devido ao fato das magnetizações da fase anti-ferromagnética não serem tão simples de obter ou porque as discussões a seguir não se encaixam nessa fase. Primeiro vamos discutir a validade da concorrência como um indicador da transição de fase em  $\Delta = -1$ .

Ao traçarmos o gráfico de  $\tilde{\mathcal{C}}_r$ , onde  $\mathcal{C}_r = \max\{0, \tilde{\mathcal{C}}_r\}^3$ , (Fig. (5.6)) observamos que a não analiticidade em  $\Delta = -1$  é acidental; devido a maximização. Por outro lado, se utilizarmos a desigualdade de Schwarz<sup>4</sup>, sabendo que  $|\langle \sigma_z^i \sigma_z^j \rangle| \leq 1$ , obtemos que  $m = \pm 1$  na fase ferromagnética. Ao incluirmos essa magnetização na expressão de  $\tilde{\mathcal{C}}_r$  obtemos que este é zero na fase ferromagnética, ou seja, a concorrência é zero independente de maximização, tornando a não analiticidade em  $\Delta = -1$  não acidental.

Sabemos que a QES não altera o emaranhamento do modelo XXZ [46]. Mas incluir a magnetização da fase ferromagnética altera a origem da não analiticidade, que deixa de ser acidental.

Uma discussão sobre a concorrência e não analiticidades acidentais em TFQ

---

<sup>3</sup>Lembrando que  $\tilde{\mathcal{C}}_r = \frac{1}{2} \left( 2|\langle \sigma_x^i \sigma_x^{i+r} \rangle| - \sqrt{(1 + \langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+r} \rangle)^2 - (p_z + q_z)^2} \right)$ , onde  $p_z = q_z = m$  na fase ferromagnética e  $p_z = q_z = 0$  na fase sem gap.

<sup>4</sup> $|\langle A^\dagger B \rangle| \leq \sqrt{\langle A^\dagger A \rangle} \sqrt{\langle B^\dagger B \rangle}$ .

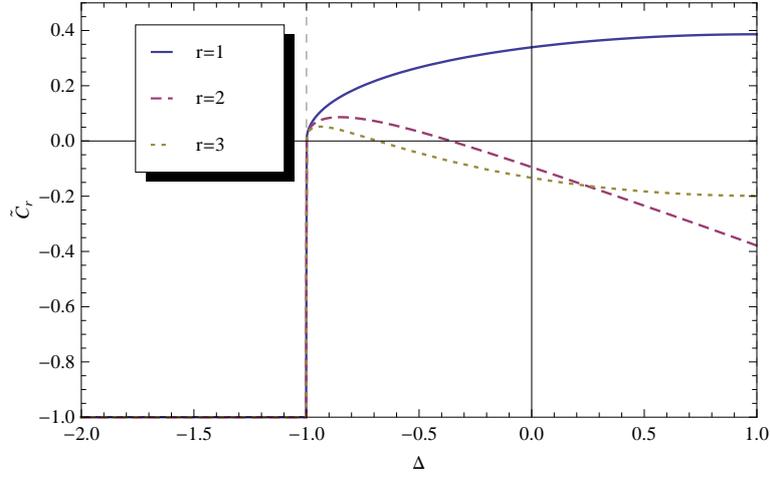


Figura 5.6: ”Concorrência” antes da maximização para primeiros, segundos e terceiros vizinhos. Observa-se que a não analiticidade na concorrência em  $\Delta = -1$  é acidental, devido a maximização, se não levarmos em conta a QES.

foi feita em [48]. Se mostrou que a concorrência não é um bom indicador de TFQ por causa de não analiticidades acidentais (devido a maximização e ao módulo na definição da mesma) e porque ela indica erroneamente uma TFQ2 em  $\Delta = -1$  no modelo XXZ (sendo essa uma TFQ1). Mas esse trabalho não discute o fato da não analiticidade em  $\Delta = -1$  não ser acidental quando levamos em conta a QES.

Também podemos calcular entropia de von Neumann do sítio  $i$ <sup>5</sup>, que indica o emaranhamento entre o sítio  $i$  e o resto da cadeia (Fig. (5.7)). Considerando a QES essa medida mostra que a fase ferromagnética é separável<sup>6</sup>, e que na fase sem gap a partícula  $i$  está totalmente emaranhada com o resto da cadeia. Note que essa medida é capaz de indicar TF em  $\Delta = -1$  através de uma descontinuidade na mesma.

Um último fato a ser comentado, citado no Capítulo 3, é que o emaranhamento bipartite está concentrado entre primeiros vizinhos. Isso pode ser observado na

<sup>5</sup>Lembrando que  $\rho_i = \frac{1}{2} (\mathbb{1}^i + p_z \sigma_z^i)$ , sendo seu autovalores  $\lambda_{\pm} = \frac{1 \pm p_z}{2}$  onde  $p_z = q_z = m$  na fase ferromagnética e  $p_z = q_z = 0$  na fase sem gap. Assim sua entropia será:  $S_i = \sum_k \lambda_k \log_2 \lambda_k$ .

<sup>6</sup>Se não levamos em conta a QES a entropia na fase ferromagnética vai reproduzir o mesmo resultado da fase sem gap.

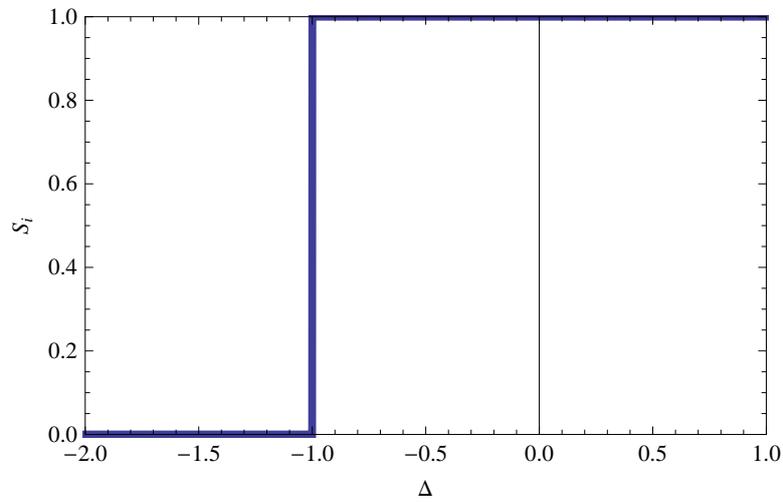


Figura 5.7: Entropia de von Neumann da partícula  $i$ , que representa o emaranhamento entre a partícula  $i$  e o resto da cadeia. Observa-se que essa medida indica uma TFQ em  $\Delta = -1$ .

Fig. (5.4) quando vemos que o emaranhamento para primeiros vizinhos começa em  $\Delta > -1$  e só acaba em  $\Delta \rightarrow \infty$ , sendo que para segundos vizinhos o emaranhamento morre bem antes de  $\Delta = 1$  e para terceiros vizinhos o emaranhamento morre antes do que para segundos vizinhos, indicando que o emaranhamento bipartite é de curto alcance.

# Capítulo 6

## Conclusão e Perspectivas Futuras

Apresentamos nessa dissertação um estudo da relação entre emaranhamento (concorrência), desigualdade de Bell (medida de Bell) e TFQ em uma cadeia de spin- $\frac{1}{2}$  unidimensional e infinita, descrita pelo modelo XXZ. Assim obtivemos nossos resultados, que são:

i) Esse modelo não viola Bell, mesmo em regiões onde está emaranhado, indicando um tipo de emaranhamento “oculto”. No caso isotrópico ( $\Delta = 1$ ) esse estado é descrito por um estado de Werner;

ii) A medida de Bell é capaz de identificar as TFQ's do modelo, enquanto que a concorrência só é capaz de identificar a TFQ1 em  $\Delta = -1$  (nesse caso o critério de Wu e colaboradores indicaria, erradamente, uma TFQ2). A medida de Bell mostrou uma descontinuidade em  $\Delta = -1$ , sendo esta uma TFQ1, e mostrou uma descontinuidade na derivada primeira em  $\Delta = 1$ , sendo esta uma transição de ordem infinita (BKT);

iii) A não analiticidade em  $\Delta = -1$  da concorrência é acidental, a princípio, mas quando levamos em conta a QES ela deixa de ser acidental. Isso mostra que a QES deve ser observada com mais cuidado.

Esses resultados indicam que estudos sobre desigualdades de Bell e TFQ po-

dem acrescentar bastante no entendimento da natureza das correlações quânticas envolvidas na TFQ. E isso mostra que o tipo de emaranhamento na TFQ não é trivial, uma vez que ele não pode ser revelado pela desigualdade de Bell. Portanto, a medida de Bell é um recurso diferente do emaranhamento e pode ser uma forma alternativa e complementar de caracterizar uma TFQ, até mesmo as de ordem infinita.

Existem vários trabalhos sobre emaranhamento e TFQ (como mencionado no Capítulo 3), uma revisão sobre esses trabalhos pode ser vista em [39]. No entanto, até onde sabemos, estudos da relação entre as desigualdades de Bell e TFQ surgiram em 2010 com Batle e Casas [8], e só conhecemos mais um trabalho além desse, o que foi descrito nessa dissertação [47]. Em fevereiro de 2012 saiu no **arXiv** mais um *review* [49] apresentando os resultados dessa relação entre medidas de emaranhamento e TFQ para alguns modelos de Matéria Condensada, onde nesse trabalho é incluído a medida de Bell como um indicador de TFQ, citando o nosso trabalho [47].

Perspectivas futuras para esse trabalho são: generalizar essa aplicação da medida de Bell, de modo a garantir o seu uso como um indicador de TFQ para qualquer modelo; e estudar outros tipos de desigualdades de Bell (com mais medidas, mais resultados ou mais partículas) nesse modelo e em outros para descobrir se em regiões emaranhadas existe alguma desigualdade que é violada, e se essas desigualdades também são capazes de indicar TFQ's.

# Apêndice A

## Estado de Werner

O estado de Werner é um estado bipartite de dimensão  $d \times d$  que é invariante por operações unitárias locais ( $U \otimes U$ ). Para partículas de spin- $\frac{1}{2}$ , que é o nosso caso de interesse, será definido simplesmente como

$$\rho_{Werner} = x|Bell\rangle\langle Bell| + \frac{(1-x)}{4}\mathbb{I}, \quad (\text{A.1})$$

onde  $|Bell\rangle$  é um dos quatro estados de Bell, sendo a equação acima válida para qualquer um deles.

Note que o estado de Werner (Eq. (A.1)) pode ser interpretado como um ruído no estado de Bell.

Escolhendo o estado  $|\psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$ , o estado de Werner será

$$\rho_W = x|\psi^-\rangle\langle\psi^-| + \frac{(1-x)}{4}\mathbb{I}, \quad (\text{A.2})$$

que pode ser escrito na forma matricial como

$$\rho_W = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1-x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1+x & -2x & 0 \\ 0 & -2x & 1+x & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1-x \end{bmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

Esse estado é importante por ser o primeiro a apresentar regiões onde esta emaranhado, mas não viola Bell (Fig. (A.1)), de modo que pode ser descrito por uma teoria de variáveis ocultas. Para mostrar esse resultado utilizamos a concorrência e a medida de Bell

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2} \max\{0, 3x - 1\} \text{ e } \mathcal{B} = 2\sqrt{2}|x|. \quad (\text{A.4})$$

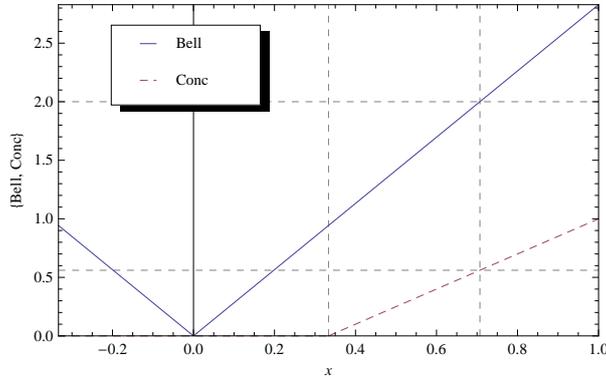


Figura A.1: Emaranhamento e medida de Bell do estado de Werner. O intervalo  $-\frac{1}{3} \leq x \leq 1$  indica a região onde o estado representa um estado físico, na região  $x \leq \frac{1}{3}$  o estado é separável, na região  $\frac{1}{3} < x \leq \frac{1}{\sqrt{2}}$  o estado está emaranhado mas não viola Bell, e na região  $x > \frac{1}{\sqrt{2}}$  o estado está emaranhado e viola Bell.

Se compararmos a Eq. (A.3) com a Eq. (4.28), que é o modelo XXX, observamos que elas são iguais para  $x = -\langle \sigma_x^i \sigma_x^j \rangle$ . Isso justificaria o "emaranhamento oculto" nesse ponto.

## Apêndice B

# Expressões das Funções de Correlação do Modelo XXZ

As correlações para  $\Delta \leq -1$  foram obtidas a partir de [44], e para as outras regiões [45]<sup>1</sup>.

Dado as funções

$$\zeta_\nu(j) = \int_{-\infty - \frac{\pi i}{2}}^{\infty - \frac{\pi i}{2}} dx \frac{1}{\sinh x} \frac{\cosh \nu x}{\sinh^j \nu x} \quad (\text{B.1})$$

$$\zeta'_\nu(j) = \int_{-\infty - \frac{\pi i}{2}}^{\infty - \frac{\pi i}{2}} dx \frac{1}{\sinh x} \frac{\partial}{\partial \nu} \frac{\cosh \nu x}{\sinh^j \nu x} \quad (\text{B.2})$$

e

$$c_j = \cos \pi j \nu, \quad s_j = \sin \pi j \nu, \quad (\text{B.3})$$

as funções de correlação serão:

---

<sup>1</sup>Note que há erro de digitação nas Eqs. (19) e (20) de [45]. Na (19) ( $\langle S_j^z S_{j+2}^z \rangle$ ) faltou somar o termo  $-\frac{c_1}{\pi s_1} \zeta_\nu(1)$ , que pode ser encontrado usando a EFP  $P(3)$  com a Eq. (17) do próprio artigo. Na (20) ( $\langle S_j^x S_{j+3}^x \rangle$ ) temos que recorrer a [50] (note que a Eq. (5.4) possui o mesmo erro) e usar as Eqs. (5.10), (B.11) e (B.12) para calcular e encontrar o erro em  $\langle S_j^x S_{j+3}^x \rangle$ .

## B.1 $\Delta \leq -1$

Nessa região temos a fase ferromagnética, que é caracterizada pelo alinhamento de todos os spins na mesma direção ( $z$ ) e sentido, de modo que a correlação entre quaisquer vizinhos será a mesma que entre primeiros vizinhos. Utilizando as equações Eq. (4.39), Eq. (4.43) e Eq. (4.44) obtemos

$$\langle \sigma_x^i \sigma_x^{i+1} \rangle = 0, \quad (\text{B.4})$$

$$\langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+1} \rangle = 1. \quad (\text{B.5})$$

Uma discussão qualitativa do que acontece com as correlações nessa fase seria o fato dos primeiros vizinhos estarem maximamente correlacionados na direção  $z$ , i.e.,  $\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle = 1$ . Isso indica que os primeiros vizinhos apontam na mesma direção e sentido, e assim a correlação entre quaisquer vizinhos nessa direção será máxima. Com isso obtemos

$$\langle \sigma_x^i \sigma_x^{i+r} \rangle = 0, \quad (\text{B.6})$$

$$\langle \sigma_z^i \sigma_z^{i+r} \rangle = 1. \quad (\text{B.7})$$

## B.2 $-1 < \Delta < 1$

Nessa região (fase sem gap) as funções de correlação serão:

Primeiros vizinhos:

$$\langle S_i^x S_{i+1}^x \rangle = \frac{1}{4\pi s_1} \zeta_\nu(1) + \frac{c_1}{4\pi^2} \zeta'_\nu(1), \quad (\text{B.8})$$

$$\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle = \frac{1}{4} - \frac{c_1}{2\pi s_1} \zeta_\nu(1) - \frac{1}{2\pi^2} \zeta'_\nu(1). \quad (\text{B.9})$$

Segundos vizinhos:

$$\langle S_i^x S_{i+2}^x \rangle = \frac{1}{2\pi s_2} \zeta_\nu(1) + \frac{c_2}{4\pi^2} \zeta'_\nu(1) - \frac{3(1-c_2)c_2}{8\pi s_2} \zeta_\nu(3) - \frac{s_1^2}{8\pi^2} \zeta'_\nu(3), \quad (\text{B.10})$$

$$\langle S_i^z S_{i+2}^z \rangle = \frac{1}{4} - \left( \frac{1+2c_2}{\pi s_2} - \frac{c_1}{\pi s_1} \right) \zeta_\nu(1) - \frac{1}{2\pi^2} \zeta'_\nu(1) + \frac{3s_1}{4\pi c_1} \zeta_\nu(3) + \frac{1-c_2}{8\pi^2} \zeta'_\nu(3). \quad (\text{B.11})$$

Terceiros vizinhos:

$$\begin{aligned} \langle S_i^x S_{i+3}^x \rangle &= \frac{3}{4\pi s_3} \zeta_\nu(1) + \frac{c_1(-1+2c_2)}{4\pi^2} \zeta'_\nu(1) + \frac{(15-12c_2-12c_2^2+5c_4+4c_6)}{8\pi s_3} \zeta_\nu(3) \\ &\quad - \frac{c_1 s_1^2}{2\pi^2} \zeta'_\nu(3) + \frac{5(2-3c_2+c_6)}{16\pi s_3} \zeta_\nu(5) + \frac{c_1(1-2c_2+c_4)}{16\pi^2} \zeta'_\nu(5) \\ &\quad + \frac{c_1(28-39c_2+18c_4-7c_6)}{16\pi^2 s_1 s_3} \zeta_\nu(1) \zeta_\nu(3) + \frac{(9-7c_2-c_4-c_6)}{32\pi^3 s_1} \zeta'_\nu(1) \zeta_\nu(3) \\ &\quad + \frac{(-5+8c_2-3c_4)}{32\pi^3 s_1} \zeta_\nu(1) \zeta'_\nu(3) + \frac{c_1^3 s_1^2}{4\pi^4} \zeta'_\nu(1) \zeta'_\nu(3) + \frac{5c_1(14-15c_2+6c_4-5c_6)}{32\pi^2 s_1 s_3} \zeta_\nu(1) \zeta_\nu(5) \\ &\quad + \frac{5c_1^2(3-2c_2-c_4)}{16\pi^3 s_1} \zeta'_\nu(1) \zeta_\nu(5) + \frac{c_1^2(3-2c_2-c_4)}{16\pi^3 s_1} \zeta_\nu(1) \zeta'_\nu(5) + \frac{3c_1^3 s_1^2}{4\pi^4} \zeta'_\nu(1) \zeta'_\nu(5) \\ &\quad - \frac{3c_1(14-15c_2+6c_4-5c_6)}{64\pi^2 s_1 s_3} \zeta_\nu(3)^2 - \frac{c_1^2(3-2c_2-c_4)}{16\pi^3 s_1} \zeta_\nu(3) \zeta'_\nu(3) - \frac{c_1^3 s_1^2}{8\pi^4} \zeta'_\nu(3)^2, \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned} \langle S_i^z S_{i+3}^z \rangle &= \frac{1}{4} - \frac{3c_1(-1+2c_2)}{2\pi(1+c_2)s_1} \zeta_\nu(1) - \frac{1}{2\pi^2} \zeta'_\nu(1) + \frac{(3+2c_2)(7+c_4)s_1}{4\pi c_1(1+2c_2)} \zeta_\nu(3) \\ &\quad + \frac{c_1^2 s_1^2}{\pi^2} \zeta'_\nu(3) + \frac{5(5+3c_2+3c_4+c_6)s_1}{8\pi c_1(1+2c_2)} \zeta_\nu(5) + \frac{c_2 s_1^2}{2\pi^2} \zeta'_\nu(5) \\ &\quad - \frac{(2+23c_2+4c_4+c_6)}{4\pi^2(1+2c_2)} \zeta_\nu(1) \zeta_\nu(3) - \frac{c_1(4+c_2)s_1}{2\pi^3} \zeta'_\nu(1) \zeta_\nu(3) - \frac{c_1 c_2 s_1}{2\pi^3} \zeta_\nu(1) \zeta'_\nu(3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{c_1^2 s_1^2}{2\pi^4} \zeta'_\nu(1) \zeta'_\nu(3) - \frac{5(8 + 23c_2 + 4c_4 + c_6)}{8\pi^2(1 + 2c_2)} \zeta_\nu(1) \zeta_\nu(5) - \frac{5c_1(2 + c_2)s_1}{2\pi^3} \zeta'_\nu(1) \zeta_\nu(5) \\
& - \frac{c_1(2 + c_2)s_1}{2\pi^3} \zeta_\nu(1) \zeta'_\nu(5) - \frac{3c_1^2 s_1^2}{2\pi^4} \zeta'_\nu(1) \zeta'_\nu(5) + \frac{3(8 + 23c_2 + 4c_4 + c_6)}{16\pi^2(1 + 2c_2)} \zeta_\nu(3)^2 \\
& + \frac{c_1(2 + c_2)s_1}{2\pi^3} \zeta_\nu(3) \zeta'_\nu(3) + \frac{c_1^2 s_1^2}{4\pi^4} \zeta'_\nu(3)^2. \tag{B.13}
\end{aligned}$$

### B.3 $\Delta = 1$

Para  $\Delta = 1$  temos o caso isotrópico, onde  $\langle S_i^x S_{i+r}^x \rangle = \langle S_i^z S_{i+r}^z \rangle$ . Assim temos Primeiros vizinhos:

$$\langle S_i^z S_{i+1}^z \rangle = \frac{1}{12} - \frac{1}{3} \ln 2 = -0.14771572685\dots \tag{B.14}$$

Segundos vizinhos:

$$\langle S_i^x S_{i+2}^x \rangle = \frac{1}{12} - \frac{4}{3} \ln 2 + \frac{3}{4} \zeta(3) = 0.06067976995\dots \tag{B.15}$$

Terceiros vizinhos:

$$\begin{aligned}
\langle S_i^x S_{i+2}^x \rangle &= \frac{1}{12} - 3 \ln 2 + \frac{37}{6} \zeta(3) - \frac{14}{3} \ln 2 \zeta(3) - \frac{3}{2} \zeta(3)^2 - \frac{125}{24} \zeta(5) \\
&+ \frac{25}{3} \ln 2 \zeta(5) = -05024862725\dots \tag{B.16}
\end{aligned}$$

### B.4 $\Delta > 1$

Para encontrar os funções de correlação nessa região (fase antiferromagnética) basta trocar  $\nu = i\phi$  nas correlações da fase sem gap.

# Referências Bibliográficas

- [1] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, *Phys. Rev.* **47**, 777 (1935).
- [2] J. S. Bell, *Physics* **1**, 195 (1964).
- [3] N. Gisin, *Phys. Lett. A* **154**, 201-202 (1991).
- [4] S. Popescu and D. Rohrlich, *Phys. Lett. A* **166**, 293-297 (1992).
- [5] R. F. Werner, *Phys. Rev. A* **40**, 4277 (1989).
- [6] Daniel Collins and Nicolas Gisin, *J. Phys. A: Math. Gen.* **37**, 1775-1787 (2004).
- [7] L.-A. Wu, M. S. Sarandy, and D. A. Lidar, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 250404 (2004).
- [8] J. Batle and M. Casas, *Phys. Rev. A* **82**, 062101 (2010).
- [9] D. Bohm, *Quantum Theory*, New York: Prentice Hall (1951).  
Reprint, New York: Dover, ISBN 0-486-65969-0 (1989).
- [10] M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information*, Cambridge University Press (2000).
- [11] Ingo Peschel, arXiv:1109.0159v1 (2011).

- [12] Bárbara Lopes Amaral, Dissertação de Mestrado, [www.mat.ufmg.br/~tcunha/DisBarbara.pdf](http://www.mat.ufmg.br/~tcunha/DisBarbara.pdf) (2010).
- [13] Asher Peres, Phys. Rev. Lett. **77**, 1413 (1996).
- [14] M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki, Phys. Lett. A **223**, 1 (1996).
- [15] Daniel Cavalcanti Santos, Dissertação de Mestrado, [www.mat.ufmg.br/~tcunha/DisDaniel.pdf](http://www.mat.ufmg.br/~tcunha/DisDaniel.pdf) (2006).
- [16] Thiago Rodrigues de Oliveira, Tese de Doutorado, [webbif.ifi.unicamp.br/tesesOnline/teses/IF115.pdf](http://webbif.ifi.unicamp.br/tesesOnline/teses/IF115.pdf) (2007).
- [17] P.M. Hayden, M. Horodecki e B.M. Terhal, J. Phys. A: Math. Gen **34**, 6891 (2001).
- [18] Scott Hill and William K. Wootters, Phys. Rev. Lett. **78**, 5022-5025 (1997).
- [19] William K. Wootters, Phys. Rev. Lett. **80**, 2245-2248 (1998).
- [20] D. Bohm, Phys. Rev. **85**, 166 (1952).
- [21] D. Bohm, Phys. Rev. **85**, 180 (1952).
- [22] Lluís Masanes, Stefano Pironio, Antonio Acín, arXiv:1009.1567v2 (2010).
- [23] Antonio Acín, Serge Massar and Stefano Pironio, Phys. Rev. Lett. **108**, 100402 (2012).
- [24] Valerio Scarani, arXiv:0910.4222v1 (2009).

- [25] Reinhard F. Werner and Michael M. Wolf, arXiv:quant-ph/0107093v2 (2001).
- [26] Marco Túlio Coelho Quintino e Mateus Araújo Santos, <http://www.mat.ufmg.br/~tcunha/Bell-Mateus-MTulio.pdf> (2011).
- [27] R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, Phys. Lett. A **200** 340-344 (1995).
- [28] D. M. Greenberger, M. A. Horne, A. Shimony, and A. Zeilinger, American Journal of Physics **58** (12), 1131-1143 (1990).
- [29] H. Eugene Stanley, *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Oxford University Press (1971).
- [30] Júlio César Siqueira Rocha, Dissertação de Mestrado, [http://www.bibliotecadigital.ufmg.br/dspace/bitstream/1843/ESCZ-7AWGG4/1/julio\\_cesar\\_s.\\_rocha\\_dis..pdf](http://www.bibliotecadigital.ufmg.br/dspace/bitstream/1843/ESCZ-7AWGG4/1/julio_cesar_s._rocha_dis..pdf) (2007).
- [31] N.D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133–1136 (1966).
- [32] P.C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
- [33] Sidney Coleman, Comm. Math. Phys. **31**, 259 (1973).
- [34] A. Osterloh, L. Amico, G. Falci, and R. Fazio, Nature **416**, 608 (2002).
- [35] Tobias J. Osborne and Michael A. Nielsen., *Entanglement, quantum phase transitions, and density matrix renormalization* Quantum Information Processing **1**, 45-53 (2002).
- [36] G. Vidal, J. I. Latorre, E. Rico, and A. Kitaev., Phys. Rev. Lett. **90**, 227902 (2003).

- [37] J. I. Latorre, E. Rico, and G. Vidal. *Ground state entanglement in quantum spin chains*, Quantum Inf. Comput. **4**, 48 (2004).
- [38] V. E. Korepin, Phys. Rev. Lett. **92**, 096402 (2004).
- [39] Luigi Amico, Rosario Fazio, Andreas Osterloh and Vlatko Vedral, Rev. Mod. Phys. **80**, 517-576 (2008).
- [40] D. V. Dmitriev, V. Ya. Krivnov, A. A. Ovchinnikov and A. Langari, Journal of Experimental and Theoretical Physics **95**, No. 3 (2002), pp. 538–549.
- [41] Assa Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer-Verlag New York, Inc. (1994).
- [42] X. Wang and P. Zanardi, Phys. Lett. A **301**, 1–6 (2002).
- [43] Bill Sutherland, *Beautiful Models: 70 Years of Exactly Solved Quantum Many-Body Problems*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2004). Reprint, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. (2005).
- [44] C. N. Yang and C. P. Yang, Phys. Rev. **150**, 1 (1966) 321-327; **150**, 1 (1966) 327-339.
- [45] M. Shiroishi and M. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **74** Suppl. pp. 47–52 (2005).
- [46] O. F. Syljuasen, Phys. Rev. A **68**, 060301(R) (2003).
- [47] L. Justino and Thiago R. de Oliveira, arXiv:1110.0787v1 (2011).
- [48] M.-F. Yang, Phys. Rev. A **71**, 030302(R) (2005).

- [49] Ferdi Altintas and Resul Eryigit, arXiv:1202.1495v1 (2012).
- [50] G. Kato, M. Shiroishi, M. Takahashi and K. Sakai, J. Phys. A: Math. Gen. **37** 5097–5123 (2004).
- [51] M. S. Sarandy, Phys. Rev. A **80**, 022108 (2009).
- [52] Tobias J. Osborne, and Michael A. Nielsen, Phys. Rev. A **66**, 032110 (2002).
- [53] T. Werlang, C. Trippe, G. A. P. Ribeiro, and Gustavo Rigolin, Phys. Rev. Lett. **105**, 095702 (2010).
- [54] R. Dillenschneider, Phys. Rev. B **78**, 224413 (2008).
- [55] A. A. Methot, V. Scarani, Quantum Information and Computation **7**, 1, 157-170. arXiv:quant-ph/0601210v1 (2007).
- [56] Clauser J. F., Horne M. A., Shimony A. and Holt R. A., Phys. Rev. Lett. **23**, 880 (1969).
- [57] Sandu Popescu, Phys. Rev. Lett. **74**, 2619 (1995).
- [58] Yeong-Cherng Liang, PhD Thesis, arXiv:0810.5400v1 (2008).
- [59] Luigi Amico, Rosario Fazio, Andreas Osterloh and Vlatko Vedral, Rev. Mod. Phys. **80**, 517 (2008).
- [60] Thiago R. de Oliveira, Gustavo Rigolin, Marcos C. de Oliveira, and E. Miranda, Phys. Rev. A **77**, 032325 (2008).
- [61] Andreas Osterloh, Guillaume Palacios, and Simone Montangero, Phys. Rev. Lett. **97**, 257201 (2006).

[62] Ryszard Horodecki, Pawel Horodecki, Michal Horodecki, and Karol Horodecki, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 865 (2009).