



**MARCOS PAULO RIBEIRO DE FREITAS**

**OS EFEITOS DE UMA IMPUREZA EM UMA CADEIA TIPO  
DIAMANTE ISING-XXZ NO EMARANHAMENTO TÉRMICO,  
NA COERÊNCIA QUÂNTICA E NO TELETRANSPORTE  
QUÂNTICO**

**LAVRAS – MG**

**2020**

**MARCOS PAULO RIBEIRO DE FREITAS**

**OS EFEITOS DE UMA IMPUREZA EM UMA CADEIA TIPO DIAMANTE  
ISING- $XXZ$  NO EMARANHAMENTO TÉRMICO, NA COERÊNCIA QUÂNTICA E  
NO TELETRANSPORTE QUÂNTICO**

Dissertação apresentada à Universidade Federal  
de Lavras, como parte das exigências do  
Programa de Pós-Graduação em Física.

Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva

Orientador

Prof. Dr. Cleverson Filgueiras

Coorientador

**LAVRAS – MG**

**2020**

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca  
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Freitas, Marcos Paulo Ribeiro de

Os Efeitos de uma Impureza em uma Cadeia tipo Diamante Ising- $XXZ$  no Emaranhamento Térmico, na Coerência Quântica e no Teletransporte Quântico / Marcos Paulo Ribeiro de Freitas. – Lavras : UFLA, 2020.

95 p. : il.

Dissertação–Universidade Federal de Lavras, 2020.

Orientador: Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva.

Bibliografia.

1. Emaranhamento Térmico. 2. Coerência Quântica. 3. Teletransporte Quântico. I. Leyva, Moisés Porfírio Rojas. II. Filgueiras, Cleverson. III. Título.

**MARCOS PAULO RIBEIRO DE FREITAS**

**OS EFEITOS DE UMA IMPUREZA EM UMA CADEIA TIPO DIAMANTE  
ISING-XXZ NO EMARANHAMENTO TÉRMICO, NA COERÊNCIA QUÂNTICA E  
NO TELETRANSPORTE QUÂNTICO**

Dissertação apresentada à Universidade Federal  
de Lavras, como parte das exigências do  
Programa de Pós-Graduação em Física.

APROVADA em 21 de Fevereiro de 2020.

Prof. Dr. Igor Saulo Santos de Oliveira UFLA  
Prof. Dra. Angélica Sousa da Mata UFLA  
Prof. Dr. Saulo Luis Lima da Silva CEFET-MG



Prof. Dr. Moisés Porfírio Rojas Leyva  
Orientador



Prof. Dr. Cleverson Filgueiras  
Co-Orientador

**LAVRAS – MG  
2020**

*Dedico este trabalho a minha mãe do coração  
Ana Cecília Barbosa Borges (in memoriam), que me  
adotou como filho e foi a propulsora da minha vida  
acadêmica, a senhora sempre será minha inspiração.*

## **AGRADECIMENTOS**

Primeiramente, agradeço a Deus por toda benção e proteção que me concedeu para que eu pudesse permanecer perseverante e concluir mais esta etapa da minha vida. Por conseguinte, agradeço a instituição UFLA (Universidade Federal de Lavras) e ao DFI (Departamento de Física) pela oportunidade. O presente trabalho foi realizado com o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoas de Nível superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Agradeço a todas as pessoas do DFI - UFLA que fizeram parte de meu cotidiano, aos professores que contribuíram significativamente para meu conhecimento, em particular, ao Prof. Dr. Sérgio de Souza que tanto me auxiliou e se disponibilizou para me esclarecer conceitos sobre os quais estudamos, ao Prof. Dr. Cleverson Filgueiras que viabilizou a publicação do nosso trabalho, ao Prof. Dr. Moisés Rojas por sua excelente orientação, por todo conhecimento transmitido, por ter me mantido motivado e por sempre me indicar as possibilidades para prosseguir com a pesquisa. Também agradeço aos membros da banca Prof. Dr. Saulo da Silva, Prof. Dr. Igor de Oliveira e Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Angélica da Mata por tudo que contribuíram.

Um agradecimento especial dedico ao meu orientador da graduação Prof. Dr. Andrey Martins que tanto me ajudou nesse mestrado, mesmo a distância. Agradeço especialmente a todos meus familiares e amigos que me acompanharam nessa caminhada, que não me permitiram desistir. Nesse sentido, agradeço aos meus pais Marco Freitas e Adriana Ribeiro, aos meus amigos/irmãos Leandro Reis, Cássio Santos, Alexandre Ribeiro, Ramon Alfaia, Tarciso Júnior, Rony Fonseca e Carlos Lopes.

Agradeço imensamente a todos meus companheiros de sofrimentos/alegrias desse DFI - UFLA, José Romão, Juliana Gonçalves, João Marcelo, Nayara Ferreira e Dimas Jackson. Um agradecimento especial para Paulo André V. Ferreira que se tornou um grande amigo, me acompanhou desde o início nessa jornada, vivenciamos juntos momentos de grande sofrimento, obrigado por tudo. Também agradeço a Eloá, tia Ângela, Seu Totonhio, tia Conceição e, principalmente, ao Diego Menez e Daniel Kalambayi pelo acolhimento e amizade. Por fim, porém, não menos importante, agradeço a minha noiva Bárbara Sousa por todo seu companheirismo, amor, apoio e amizade. Obrigado por me manter firme nessa caminhada.

## RESUMO

O emaranhamento não é apenas um conceito fundamental na Mecânica Quântica, mas, também é uma ferramenta extremamente importante para informação quântica, sendo bastante sensível principalmente as variações de campo magnético, temperatura e dos parâmetros de interação de uma cadeia. Por outro lado, a coerência quântica também é um importante recurso quântico, enquanto que o teletransporte quântico é um impressionante processo de informação que utiliza canais emaranhados. Neste trabalho é proposto o estudo dos efeitos de uma impureza na cadeia Ising- $XXZ$  tipo diamante na medição de algumas correlações quânticas (emaranhamento), na coerência quântica e, também, os efeitos sobre o teletransporte quântico de informação. Neste modelo, a plaqueta fundamental da cadeia de spin-1/2 Ising- $XXZ$  tipo diamante é formada pela interação  $XXZ$  entre os dímeros de Heisenberg intersticiais e o acoplamento de Ising entre os spins nodais e intersticiais, respectivamente. A impureza em nosso modelo é uma plaqueta com todos os parâmetros de interação diferentes do resto da cadeia. Nós obtemos a solução exata do modelo usando o método da matriz de transferência. Demonstramos que o emaranhamento quântico pode ser controlado e ajustado variando-se os parâmetros de impureza. Nossos resultados mostram que o emaranhamento térmico do modelo exibe uma clara melhoria de desempenho quando controlamos e manipulamos as impurezas em comparação com o modelo original anisotrópico. Além disso, verificamos que os efeitos da impureza geram ganhos na coerência quântica e aumenta fortemente a eficiência do teletransporte quântico.

**Palavras-chave:** Emaranhamento Térmico; Coerência Quântica; Teletransporte Quântico; Impurezas.

## ABSTRACT

Entanglement is not only a fundamental concept in Quantum Mechanics, but it is also an extremely important tool for quantum information, being quite sensitive mainly to variations in the magnetic field, temperature and the interaction parameters of a chain. On the other hand, quantum coherence is also an important quantum resource, while quantum teleportation is an impressive information process that uses entangled channels. In this work it is proposed the study of effects of an impurity in an Ising- $XXZ$  diamond type chain in the measurement of some quantum correlations (entanglement), in quantum coherence and, also, the effects on quantum information teleportation. In this model, the fundamental platelet of the Ising- $XXZ$  spin-1/2 diamond type chain is formed by the  $XXZ$  interaction between the interstitial Heisenberg dimers and the Ising coupling between the nodal and interstitial spins, respectively. The impurity in our model is a tag with all the interaction parameters different from the rest of the chain. We obtain the exact solution of the model using the transfer matrix method. We demonstrate that quantum entanglement can be controlled and adjusted by varying the impurity parameters. Our results show that the thermal entanglement of the model exhibits a clear improvement in performance when we control and manipulate impurities in comparison with the original anisotropic model. In addition, we found that the effects of impurity generate gains in quantum coherence and greatly increase the quantum teleportation efficiency

**Keywords:** Thermal Entanglement; Quantum Coherence; Quantum Teleportation; Impurities.



## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Configuração clássica do momento dipolo magnético (a esquerda) e o momento magnético gerado por uma carga em movimento circular (a direita).	15
Figura 2.2 – Configuração clássica do dipolo orbital do elétron. . . . .	16
Figura 2.3 – Configuração clássica do <i>spin up</i> (a esquerda) e <i>spin down</i> (a direita) do elétron. . . . .	17
Figura 2.4 – Interpretação clássica do princípio de exclusão de Pauli com os elétrons se agrupando aos pares no mesmo orbital e movimentando-se em sentidos opostos. Os momentos magnéticos orbitais $\vec{\mu}_{L_1}$ e $\vec{\mu}_{L_2}$ são devido ao movimento do elétron $e_1^-$ e $e_2^-$ , respectivamente. No lado direito o campo magnético externo $\vec{B}$ é numo e no lado direito $\vec{B}$ é diferente de zero. . . . .	19
Figura 2.5 – Configuração esquemática dos momentos magnéticos de um material paramagnético. . . . .	20
Figura 2.6 – Configuração dos domínios magnéticos dos materiais ferromagnéticos . . .	21
Figura 2.7 – Configuração esquemática dos spins dos materiais antiferromagnéticos . .	22
Figura 2.8 – Configuração esquemática dos momentos magnéticos dos materiais ferrimagnéticos . . . . .	22
Figura 3.1 – Cadeia cíclica com $N$ sítios com interação tipo Ising entre os primeiros vizinhos . . . . .	24
Figura 3.2 – Cadeia linear de Heisenberg com spins $S_i$ localizados e parâmetro de interação $J$ . . . . .	27
Figura 4.1 – Representação esquemática do protocolo original de teletransporte de informação. A linha vermelha refere-se ao canal quântico emaranhado, enquanto as casa azul e vermelha representam, respectivamente, Bob e Alice. Os qubits de Bob e Alice também estão em destaque nessa ordem de cores. . . . .	37

- Figura 4.2 – Representação esquemática das operações realizadas por Alice (lado esquerdo) e Bob (lado direito). As bolinhas amarela e vermelha são os qubits de Alice, em que a amarela é a informação original  $|\phi\rangle$  e a vermelha forma o canal quântico com o qubit de Bob (bolinha azul). Em (a) Alice faz uma medida em seus qubits, em (b) Alice envia classicamente a informação obtida para Bob e em (c) Bob realiza a operação local em seu qubit após receber a informação clássica de Alice, recuperando a informação original. 38
- Figura 5.1 – Configuração esquemática do composto heterotrimetalico com interação Ising-XXZ.  $J_1$  representa a interação Ising entre os íons de *Fe* e *Mn*, enquanto  $J_2$  representa a interação Heisenberg entre os íons *Cu* e *Mn*. . . . 44
- Figura 5.2 – Representação da estrutura tipo diamante com interação tipo Ising-XYZ. Os parâmetros  $J_0$ ,  $J_1$  e  $J_2$  representam a interação tipo Ising, por outro lado, o parâmetro  $J_z$  representa a interação tipo Heisenberg. . . . . 45
- Figura 5.3 – Configuração da estrutura tipo diamante com interação tipo Ising-XXZ. Os parâmetro  $J_1$  e  $\tilde{J}_1$  representam a interação tipo Ising com e sem impureza, respectivamente, e os parâmetros  $J$  e  $\tilde{J}$  representam a interação tipo Heisenberg com e sem impureza, nessa ordem. . . . . 46
- Figura 5.4 – Representação da cadeia tipo diamante com interação Ising-XXZ.  $J_1$  indica as interações Ising e  $J$  as interações Heisenberg. . . . . 47
- Figura 5.5 – Diagramas de fases à temperatura zero. O estado emaranhado na fase frustrada é indicado por ENT, enquanto que o estado emaranhado na fase ferrimagnética é denotado por ENQ. O estado não emaranhado na fase ferrimagnética é indicado por UFI e o estado ferromagnético não emaranhado é representado por UFM. Em (a)  $h/J = h_0J = 0$ , em (b)  $J_1/J = 1$  e  $h/J = h_0J$  e em (c)  $\Delta = 1$  e  $h/J = h_0J$ . . . . . 49
- Figura 5.6 – Gráfico de densidade de concorrência  $\mathcal{C}$  como função de  $T/J$  e  $\Delta$ . A cor preta corresponde a região maximamente emaranhada, enquanto a cor branca representa a região não emaranhada e a região cinza expressa uma região parcialmente emaranhada. Em (a) exhibe-se a concorrência  $\mathcal{C}$  na ausência do campo magnético  $h$  e em (b) mostra-se  $\mathcal{C}$  para  $h/J = 1$ . . . . . 57

- Figura 5.7 – Concorrência em função da temperatura  $T/J$  para um valor fixo de  $J_1/J = 1$ . Em (a) exibi-se a concorrência para  $\Delta = 2$  e em (b) exibe-se a concorrência para  $\Delta = 0,9$ . . . . . 58
- Figura 6.1 – Representação esquemática da cadeia Ising-XXZ tipo diamante com uma impureza inserida no  $i$ -ésimo bloco da célula unitária primitiva. Os parâmetros  $\Delta$ ,  $J_1$  e  $J$  representam, respectivamente, a anisotropia do sistema, a interação tipo Ising e a interação tipo Heisenberg. Por outro lado,  $\tilde{\Delta}$ ,  $\tilde{J}_1$  e  $\tilde{J}$  indicam esses mesmos parâmetros porém para a plaqueta com a impureza.  $S_{a,i}$  são os spins de Heisenberg e  $\mu_i$  são os spins de Ising. 60
- Figura 6.2 – Gráfico da densidade de concorrência  $\mathcal{C}$  como função de  $T/J$  e  $\Delta$ , enquanto os parâmetros de impureza são fixados  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ . Em (a) exibimos a concorrência  $\mathcal{C}$  na ausência do campo magnético e em (b) expressamos a concorrência  $\mathcal{C}$  para  $h/J = 1$ . . . . . 73
- Figura 6.3 – Concorrência  $\mathcal{C}$  em função de  $T/J$  com  $J_1/J = 1$ . Para o modelo Ising-XXZ sem impurezas (curva sólida), temos  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0$  e  $\eta = 0$ . Por outro lado, quando consideramos a impureza em nosso modelo (curva tracejada), fixamos  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ . (a)  $\Delta = 1,0$ . (b)  $\Delta = 1,3$ . . . . . 74
- Figura 6.4 – A norma- $l_1$  da coerência  $\mathcal{C}_{l_1}$  em função da temperatura  $T/J$  para  $J_1/J = 1,0$  e diferentes valores do campo magnético  $h$ . Em (a)  $\Delta = 1,0$  e em (b)  $\Delta = 1,3$ . Os parâmetros de impureza são definidos como  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ . As curvas sólidas e tracejadas representam o modelo original e com impureza, respectivamente. . . . . 76
- Figura 6.5 – A concorrência  $\mathcal{C}$ , dependendo do parâmetro de anisotropia e da temperatura limiar, quando  $J_1/J = 1$  e  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ . As regiões verde e lilás indicam a região em que o sistema está emaranhado (E), enquanto que a região em branco representa o sistema não emaranhado (D). Em (a)  $h/J = 2,0$  e  $\Delta = 1,0$  (linha azul tracejada), enquanto em (b)  $h/J = 2,2$  e  $\Delta = 1,3$  (linha verde tracejada). . . . . 77
- Figura 6.6 – A representação esquemática para o teletransporte do estado de entrada  $\rho_{in}$  através de um par de dímeros de Heisenberg independentes com impureza (linhas verdes) em uma cadeia Ising-XXZ tipo diamante. O estado de saída teleportado é indicado por  $\tilde{\rho}_{out}$ . . . . . 79

Figura 6.7 – A densidade da fidelidade média  $F_A$  em função de  $\Delta$  e  $T/J$ . Em (a)  $h/J = 0$  e em (b)  $h/J = 1,0$ . Nestas figuras, a curva sólida amarela é o contorno de  $F_A = 2/3$  no modelo com impureza e a branca correspondente ao modelo sem impureza. As regiões preta e branca correspondem a  $F_A = 1$  e  $F_A = 0$ , respectivamente, e as regiões cinza indicam uma fidelidade média  $0 < F_A < 1$ . 83

Figura 6.8 – A fidelidade média do teletransporte é plotada em relação à temperatura  $T/J$ . Consideramos  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$ ,  $\eta = -0,8$  e  $J_1/J = 1,0$ . Em (a)  $\Delta = 2,0$  e em (b)  $h/J = 0$ . A linha tracejada horizontal indica fidelidade média constante  $F_A = 2/3$ . As demais linhas tracejadas representam o modelo com impureza e as linhas solidas representam o modelo original. . . . . 85

Figura 6.9 – A fidelidade média do teletransporte  $F_A$ ,  $f_p$ ,  $f_c$  em função da temperatura  $T/J$  para o modelo original ( $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0$ ,  $\eta = 0$ ) com  $J_1/J = 1,0$ ,  $h = 0$  e  $\Delta = 0,5$ . A linha tracejada vertical magenta indica o mínimo da fidelidade e a linha tracejada vertical marrom vertical indica o mínimo do termo  $f_p$ . . 86

## LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 – Suscetibilidade Magnética de alguns materiais diamagnéticos e paramagnéticos . . . . .	20
Tabela 4.1 – Os possíveis resultados das medidas de Alice, os respectivos qubits de Bob e as correções, operações feitas por Bob. . . . .	40
Tabela 4.2 – Os resultados possíveis das medidas de Alice que definem $E^0$ , os respectivos qubits de Bob $\rho_{out}$ e as correções, operações feitas por Bob. Sendo $\sigma^x \sigma^x = \sigma^y \sigma^y = \sigma^z \sigma^z = \mathbb{1}$ . . . . .	42

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	12
<b>2</b>	<b>MAGNETISMO</b>	15
<b>2.1</b>	<b>Momento Magnético</b>	15
<b>2.2</b>	<b>Magnetização e Suscetibilidade Magnética</b>	17
<b>2.3</b>	<b>Classificação Magnética dos Materiais</b>	18
<b>3</b>	<b>MODELOS MAGNÉTICOS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE</b>	23
<b>3.1</b>	<b>Modelo de Ising</b>	23
<b>3.2</b>	<b>Modelo de Heisenberg</b>	27
<b>4</b>	<b>CORRELAÇÕES QUÂNTICAS</b>	29
<b>4.1</b>	<b>Estados Puros e Estados Misturados</b>	29
<b>4.2</b>	<b>Emaranhamento Quântico</b>	30
<b>4.3</b>	<b>Coerência Quântica</b>	34
<b>4.4</b>	<b>Teletransporte Quântico</b>	36
<b>5</b>	<b>MODELO DE ISING-HEISENBERG</b>	44
<b>5.1</b>	<b>Exemplos de Modelos com Interação Ising-Heisenberg</b>	44
<b>5.2</b>	<b>Cadeia Ising-XXZ com Estrutura tipo Diamante Anisotrópica</b>	46
<b>6</b>	<b>ESTUDO DOS EFEITOS DE UMA IMPUREZA NAS CORRELAÇÕES QUÂNTICAS EM UMA CADEIA ISING-XXZ TIPO DIAMANTE</b>	59
<b>6.1</b>	<b>O Modelo</b>	59
<b>6.2</b>	<b>Função de Partição e Operador Densidade</b>	62
<b>6.3</b>	<b>O Emaranhamento Térmico e a Coerência Quântica da Impureza de Dois Qubits Heisenberg</b>	72
<b>6.4</b>	<b>Teletransporte</b>	78
<b>7</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	87
<b>7.1</b>	<b>Perspectivas</b>	88
	<b>REFERÊNCIAS</b>	89

## 1 INTRODUÇÃO

A origem do magnetismo possui algumas divergências entre os historiadores. Alguns autores defendem que o magnetismo surge com a descoberta da pedra magnetita (quimicamente conhecida hoje como  $Fe_3O_4$ ) pelo grego Magnes, porém, outros autores defendem que o magnetismo surge com chineses (2637-1100 a.C.), os quais deram finalidade prática à magnetita com a criação da bússola, apesar da primeira referência desta aplicação ter sido apenas em 215 a.C. (BASSALO, 1994; RIBEIRO, 2000). Mesmo havendo controvérsias sobre a origem do magnetismo, é inegável que suas propriedades são fascinantes e seria inevitável o estudo científico das propriedades magnéticas dos materiais. Dentre os diversos contribuintes para a consolidação da teoria magnética temos Petrus Peregrinus de Maricourt (1240-?), William Gilbert (1544-1603), Michal Faraday (1791-1867), Hans Christian Oersted (1777-1851), André-Marie Ampère (1775-1836), Jean-Baptiste Biot (1774-1862), Félix Savart (1791-1841) e James Clerk Maxwell (1831-1879), entre outros (BASSALO, 1994; RIBEIRO, 2000; NUSSENZVEIG, 2006).

No entanto, apesar das propriedades magnéticas serem observadas desde a antiguidade, somente com a formulação da Mecânica Quântica foi possível descrever detalhadamente as propriedades magnéticas dos materiais bem como suas propriedades termodinâmicas (SAKURAI, 2013; COEY, 2010). Neste sentido, conhecer estas propriedades (como calor específico, magnetização, por exemplo) são de extrema importância para a ciência, pois, a partir delas pode-se estabelecer a utilidade de cada material e, mais especificamente, com o advento da Física da Matéria Condensada, foi possível modelar diferentes materiais e suas respectivas características, bem como prever suas propriedades magnéticas e termodinâmicas (SALINAS, 1997; COEY, 2010).

Neste contexto, há vários modelos que utilizam a interação entre as partículas atômicas para caracterizar os materiais. Dentre os diversos modelos de caracterização dos materiais, utilizaremos a cadeia de spin-1/2 com interação híbrida Ising-Heisenberg com estrutura tipo diamante (JAŠČUR; STREČKA, 2004; ANANIKIAN; LAZARYAN; NALBANDYAN, 2012), que pode ser tida como um modelo aproximado de representação do mineral natural Azurite ou Azurita (JESCHKE et al., 2011; KANG et al., 2009). Este modelo híbrido engloba a simplicidade do modelo de Ising (ISING, 1925) e a generalidade do modelo de Heisenberg (HEISENBERG, 1928). Além disso, propriedades e efeitos termodinâmicos desse tipo de cadeia foram analisados (ROJAS et al., 2011; GÁLISOVÁ, 2013; ROJAS; SOUZA, 2011),

bem como o emaranhamento térmico (ROJAS et al., 2012; CHENG et al., 2017; TORRICO et al., 2014; TORRICO et al., 2016; ROJAS et al., 2017) e, recentemente, o teletransporte de informação (ROJAS; SOUZA; ROJAS, 2017).

Em particular trabalharemos com a cadeia de spin-1/2 Ising-XXZ tipo diamante com uma única plaqueta impura. Nós comparamos nosso modelo com o modelo original anisotrópico da cadeia de spin-1/2 Ising-XXZ tipo diamante (ROJAS et al., 2012) e publicamos em 2019, na revista *Annalen der Physik*, os efeitos causados por essa impureza no emaranhamento, na coerência quântica e no teletransporte quântico (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019). Quando se trata de "impurezas presentes em cadeias" é comum imaginar que pelo menos um dos elementos pertencentes a cadeia original será substituído por outro elemento, contudo, a impureza sobre a qual tratamos aqui se dá através de pequenas deformações mecânicas na estrutura, com tração e compressão da cadeia de spins, tornando as interações entre os spins "impuros" diferentes das demais interações da cadeia.

Logo, apesar de muitas vezes ser interpretada como substituição de elementos, a impureza pode ser entendida, também, como variações estruturais (até mesmo magnéticas) na cadeia, de modo que podem alterar todas as propriedades dos sistemas quânticos, como a termodinâmica e as correlações quânticas, dessa forma, as cadeias de spin com impureza vem sendo bastante estudadas (FUKUHARA et al., 2013; HUANG; SI; YANG, 2015; XI et al., 2002; APOLLARO et al., 2013; FU; SOLOMON; WANG, 2002; CHENG et al., 2007; LI; XU JING-BO T. K. LIU, 2005) e, mais recentemente, foi investigado o emaranhamento térmico em uma cadeia Ising-XXZ tipo diamante com duas impurezas de origem mecânica intercaladas por um dímero puro, focando no estudo do efeito das impurezas no dímero puro entre elas (CARVALHO et al., 2019).

Por outro lado, o emaranhamento quântico (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935; BELL, 1964) é uma das características quânticas mais fascinantes da Física Moderna por apresentar um tipo particular de correlação não local, com aplicabilidade na informação e computação quântica (BENNETT; DIVINCENZO, 2000; NIELSEN; CHUANG, 2010), sendo considerado um recurso físico essencial nestas áreas, além disso, o emaranhamento está presente em fenômenos biológicos como a fotossíntese (SAROVAR et al., 2010; BRÁDLER et al., 2010; FASSIOLI; OLAYA-CASTRO, 2010). Dessa forma, este trabalho tem como foco inicial estudar o emaranhamento quântico da impureza do nosso modelo. Cabe salientar que nós obtemos a solução exata do modelo e o roteiro para quantificar o emaranhamento



térmico é usar a técnica da matriz de transferência para obter a função de partição (SALINAS, 1997), o operador densidade do sistema (WANG; FU; SOLOMON, 2001), conseqüentemente, calcular a concorrência quântica (WOOTTERS, 1998), bem como a coerência quântica (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014) do nosso modelo e, fundamentalmente, a eficiência do teletransporte quântico de dois qubits através da fidelidade média (BOWEN; BOSE, 2001; JOZSA, 1994; HARDY; SONG, 2001b), utilizando como canal quântico os dímeros de Heisenberg impuros.

A coerência quântica, por sua vez, assim como o emaranhamento, é conseqüência do princípio da superposição da Mecânica Quântica (SAKURAI, 2013; GRIFFITHS, 2011b). Contudo, enquanto o emaranhamento é definido em sistemas interagentes, ou seja, de no mínimo duas parte, a coerência quântica pode ser definida a partir de um sistema simples (um único sistema). Além de funcionar como fronteira de sistemas quânticos, a coerência quântica também é um importante recurso para a computação e informação quântica (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014) e também encontra-se presente na Biologia (ENGEL et al., 2007; COLLINI et al., 2010). Por outro lado, o teletransporte quântico é um processo de teleporte de informações, de estados quânticos através de canais quânticos emaranhados (BENNETT et al., 1993; BOWEN; BOSE, 2001) e a eficiência do teletransporte é obtida através da fidelidade média (JOZSA, 1994; HARDY; SONG, 2001a).

O presente trabalho é dividido da seguinte forma: no capítulo 2 introduzimos o magnetismo através do formalismo da física moderna; no capítulo 3 apresentamos uma breve revisão dos modelos de interação de spin de Ising e Heisenberg; no capítulo 4 apresentamos as correlações quânticas e os quantificadores de emaranhamento, a coerência quântica, o protocolo de teletransporte quântico de informação e a fidelidade desse teletransporte; no capítulo 5 introduzimos o modelo híbrido Ising-Heisenberg, mais especificamente, o modelo original anisotrópico da cadeia de spin-1/2 Ising-XXZ tipo diamante e destacamos a análise do diagrama de fases e do comportamento da concorrência; no capítulo 6 serão apresentados nossos resultados originais e inéditos dos efeitos da introdução de uma única impureza na cadeia de spin-1/2 Ising-XXZ tipo diamante, analisando, inicialmente, o efeito da impureza no emaranhamento térmico, posteriormente, o efeito na coerência quântica e no teletransporte quântico, estes efeitos são expostos e comparado com o modelo original através de gráficos da concorrência, da coerência quântica e da fidelidade média; no capítulo 7 apresentamos a conclusão dos resultados obtidos e as perspectivas do nosso trabalho.

## 2 MAGNETISMO

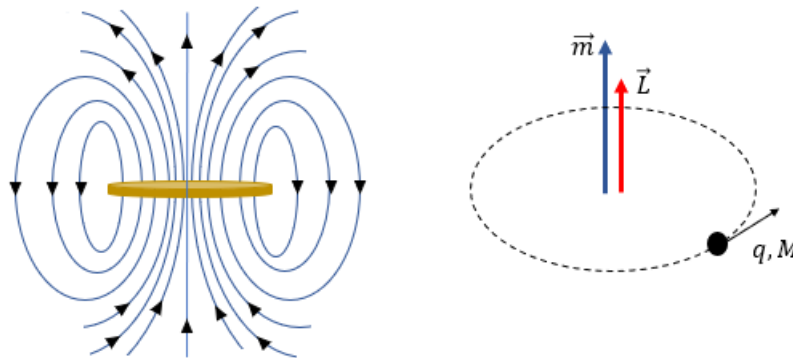
### 2.1 Momento Magnético

Mesmo os fenômenos magnéticos sendo conhecidos desde a antiguidade, sua origem não pôde ser explicada com a física clássica e somente com o advento da mecânica quântica pôde-se ter conhecimento detalhado sobre tais fenômenos. Hoje sabe-se que a característica magnética dos materiais é proveniente das partículas atômicas, do momento magnético do elétron e do núcleo. Este último, apesar de sua utilidade na física nuclear, não influencia as propriedades magnéticas do material devido seu valor insignificante (GRAÇA, 2012).

Dessa forma, auxiliados pela interpretação clássica, temos os elétrons contribuindo para as características magnéticas do material através do seu movimento orbital de translação e do seu movimento de rotação, os quais reproduzem um momento magnético semelhante ao dipolo magnético  $\vec{m}$  de uma carga  $q$ , de massa  $M$  e momento angular  $\vec{L}$  (NUSSENZVEIG, 2006).

$$\vec{m} = \frac{e}{2M} \vec{L} \quad (2.1)$$

Figura 2.1 – Configuração clássica do momento dipolo magnético (a esquerda) e o momento magnético gerado por uma carga em movimento circular (a direita).



Fonte: Adaptado (FERREIRA, 2018)

Na primeira forma de contribuição magnética temos o elétron em movimento ao redor do núcleo atômico, o qual gera uma corrente elétrica que, por sua vez, gera um campo magnético perpendicular ao movimento do elétron (NUSSENZVEIG, 2006). Assim, temos o chamado momento magnético orbital. O momento magnético orbital possui uma dependência com o raio da órbita do elétron de modo que podemos associá-lo com o momento angular do elétron e escrevê-lo em função de  $g$ , chamado de fator- $g$  de Landé ou, simplesmente, fator- $g$  (NUSSENZVEIG, 2006; COEY, 2010)

$$\vec{\mu}_L = -g_L \frac{e}{2m_e} \vec{L} = g_L \gamma \vec{L}, \quad (2.2)$$

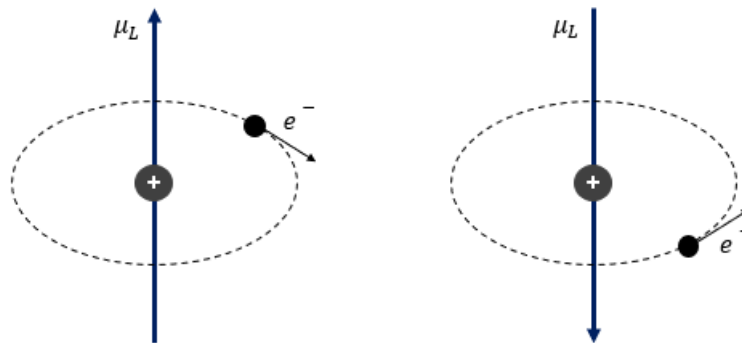
onde  $\vec{\mu}_L$  é o momento magnético orbital,  $\vec{L}$  é o momento angular orbital do elétron,  $\gamma = -\frac{e}{2m_e}$  é o fator giro magnético,  $m_e$  e  $e$  são a massa e o módulo da carga do elétron, respectivamente.

Note que o momento dipolo magnético orbital é antiparalelo ao momento angular do elétron, conforme a figura 2.2. A equação 2.2 pode ser escrita em termos de  $\hbar$  da seguinte forma (NOLTING; RAMAKANTH, 2009)

$$\vec{\mu}_L = -\frac{1}{\hbar} g_L \mu_B \vec{L}, \quad (2.3)$$

onde  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$  é o chamado magneton de Bohr e  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05457168 \cdot 10^{-34} J.s$ , com  $h$  sendo a constante de Planck.

Figura 2.2 – Configuração clássica do dipolo orbital do elétron.



Fonte: Adaptado (GRAÇA, 2012)

Por outro lado, a segunda forma de contribuição do elétron para o momento magnético atômico se dá devido ao seu momento de magnetização intrínseco, chamado de "*spin*" do elétron (veja a figura 2.3). De forma análoga ao  $\vec{\mu}_L$ , o momento magnético intrínseco é dado por (NOLTING; RAMAKANTH, 2009)

$$\vec{\mu}_S = g_s \gamma \vec{S}, \quad (2.4)$$

ou

$$\vec{\mu}_S = -\frac{1}{\hbar} g_s \mu_B \vec{S}, \quad (2.5)$$

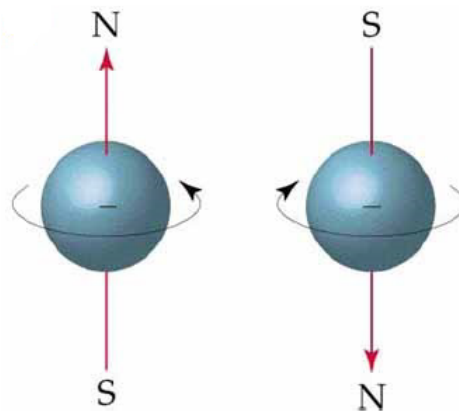
em que  $\vec{\mu}_S$  é o momento magnético intrínseco e  $\vec{S}$  é o operador de *spin*, que são definidos da seguinte forma:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \sigma, \quad (2.6)$$

onde  $\sigma$  são as matrizes de Pauli, de modo que as componentes de  $\vec{S}$  são  $S^x = \frac{\hbar}{2} \sigma^x$ ,  $S^y = \frac{\hbar}{2} \sigma^y$  e  $S^z = \frac{\hbar}{2} \sigma^z$ , com

$$\sigma^x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \sigma^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (2.7)$$

Figura 2.3 – Configuração clássica do *spin up* (a esquerda) e *spin down* (a direita) do elétron.



Fonte: (FERREIRA, 2018)

Assim, podemos escrever o momento magnético total da seguinte forma:

$$\vec{\mu} = \vec{\mu}_L + \vec{\mu}_S = g\mu_B\vec{J}, \quad (2.8)$$

em que  $\vec{J}$  é o momento angular eletrônico total e o fator- $g$  é definido conforme a equação 2.9, de modo que  $g = 1$  para o momento magnético orbital e  $g = 2$  para o elétron livre (COEY, 2010; PEREIRA, 2008).

$$g = 1 + \frac{\vec{J}(\vec{J}+1) + \vec{S}(\vec{S}+1) - \vec{L}(\vec{L}+1)}{2\vec{J}(\vec{J}+1)}. \quad (2.9)$$

## 2.2 Magnetização e Suscetibilidade Magnética

Dispondo do que foi visto anteriormente, temos que a característica magnética dos materiais dependerá de como o momento magnético orbital e de spin se organizarão para definir o momento magnético do átomo que, por sua vez, pode interagir com o momento magnético dos átomos vizinhos, originando uma região chamada de domínios magnéticos.

No âmbito macroscópico, a característica magnética do material é representada pela *magnetização*  $\vec{M}$ , definida como momento magnético por unidade de volume (NOLTING; RAMAKANTH, 2009),

$$\vec{M} = \frac{1}{V} \sum_i \vec{\mu}_i, \quad (2.10)$$

onde  $\mu_i$  é o momento magnético total do átomo  $i$ . Em uma outra configuração temos os momentos magnéticos dos materiais interagindo com um campo magnético externo  $\vec{B}$ , de modo que podemos escrever a magnetização da seguinte forma (GRIFFITHS, 2011a)

$$\vec{M} = \chi_m \vec{H}, \quad (2.11)$$

onde  $\chi_m$  é chamada de *suscetibilidade magnética* e  $\vec{H}$  é o campo auxiliar, que se relaciona com o campo magnético externo da seguinte maneira (GRIFFITHS, 2011a)

$$\vec{B} = \mu_0(1 + \chi_m)\vec{H} = \mu\vec{H}, \quad (2.12)$$

em que  $\mu = \mu_0(1 + \chi_m)$  é definido como a permeabilidade do material, de modo que, no vácuo,  $\mu = \mu_0$  pois  $\chi_m \equiv 0$ , assim,  $\mu_0$  é conhecido como permeabilidade do vácuo (GRIFFITHS, 2011a).

De posse dessas informações micro e macroscópicas, podemos agora explicar de forma conceitual as diversas configurações magnéticas que definem cada material. Tais configurações classificam o comportamento do material como: diamagnético; paramagnético; ferromagnético; ferrimagnético e antiferromagnético.

### 2.3 Classificação Magnética dos Materiais

Apesar de geralmente serem classificados por suas características visuais de atração ou não atração, todo material possui um comportamento magnético quando submetidos a um campo magnético externo, mesmo que seu momento magnético total seja nulo, devido principalmente ao torque que o campo externo exerce sobre o momento magnético dos materiais (GRIFFITHS, 2011a; NUSSENZVEIG, 2006). Veremos a seguir uma breve descrição desses comportamentos e suas respectivas suscetibilidades magnéticas que identifica a classificação dos materiais.

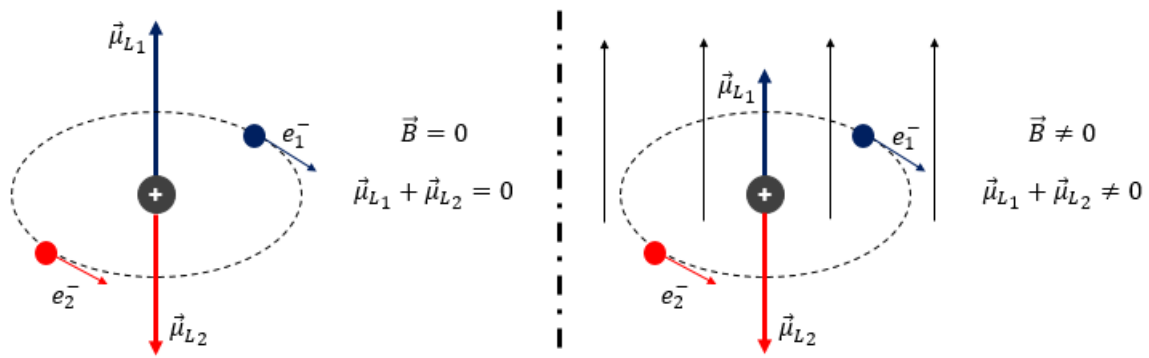
### • *Diamagnetismo*

Presente em todo material, o diamagnetismo é uma forma magnética muito fraca. Os materiais diamagnéticos apresentam suscetibilidade magnética independente da temperatura e negativa (ver tabela 2.1), devido a tendência dos momentos magnéticos orbitais se alinharem no sentido oposto do campo externo aplicado (COEY, 2010).

Este antiparalelismo dos momentos magnéticos orbitais com o campo externo pode ser entendido conforme a Lei de Lenz do eletromagnetismo, a qual estabelece que quando há uma variação do campo magnético em uma circunferência cria-se uma corrente induzida de forma que o fluxo do campo gerado por esta corrente é oposto ao fluxo do campo original (NUSSENZVEIG, 2006; GRIFFITHS, 2011a).

Por outro lado, os argumentos da Mecânica Quântica podem esclarecer este fenômeno através do princípio de exclusão de Pauli, que permite que dois elétrons de spin contrário ocupem o mesmo estado, conforme a figura 2.4 a seguir (SAKURAI, 2013; GRIFFITHS, 2011b; GRIFFITHS, 2011a).

Figura 2.4 – Interpretação clássica do princípio de exclusão de Pauli com os elétrons se agrupando aos pares no mesmo orbital e movimentando-se em sentidos opostos. Os momentos magnéticos orbitais  $\vec{\mu}_{L_1}$  e  $\vec{\mu}_{L_2}$  são devido ao movimento do elétron  $e_1^-$  e  $e_2^-$ , respectivamente. No lado direito o campo magnético externo  $\vec{B}$  é nulo e no lado direito  $\vec{B}$  é diferente de zero.



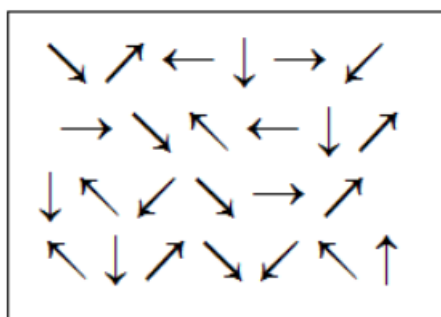
Fonte: Adaptado (GRAÇA, 2012)

Na ausência do campo magnético externo o momento magnético é nulo. Enquanto que na presença de campo magnético externo altera a frequência de rotação dos elétrons, acrescentando em um e decrescendo no outro elétron (GRAÇA, 2012). Portanto, teremos que os materiais diamagnéticos não têm magnetização permanente e sua magnetização ocorre no sentido oposto do campo magnético externo.

### • Paramagnetismo

Vimos com exemplo acima, figura 2.4, que os elétrons de spin contrários tendem a se agrupar em pares, de modo que a magnetização total seja nula. Portanto, em átomos que possuem número ímpar de elétrons, o elétron sem par definirá o momento magnético atômico e irá interagir com o campo magnético externo (GRIFFITHS, 2011a). Assim, os materiais paramagnéticos possuem átomos com momento magnético permanente. Porém, devido à disposição desordenada dos momentos magnético atômicos na ausência de um campo magnético externo esses materiais têm momento magnético nulo (figura 2.5).

Figura 2.5 – Configuração esquemática dos momentos magnéticos de um material paramagnético.



Fonte: (FERREIRA, 2018)

A presença do campo magnético externo gera um torque nesses momentos magnéticos que tendem a se alinhar com o campo. Entretanto, este alinhamento não é perfeito devido a temperatura. Os materiais paramagnéticos têm uma suscetibilidade magnética pequena, positiva e dependente da temperatura. Esta dependência com a temperatura é chamada de *Lei de Curie* (NUSSENZVEIG, 2006). Vejamos, na tabela 2.1, a suscetibilidade magnética de alguns materiais diamagnéticos e paramagnéticos.

Tabela 2.1 – Suscetibilidade Magnética de alguns materiais diamagnéticos e paramagnéticos

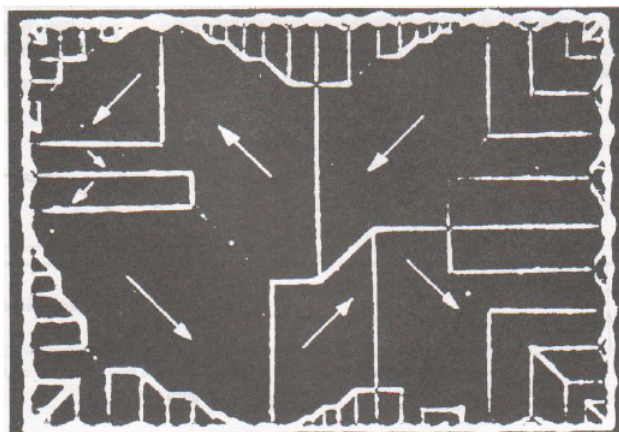
Material	Suscetibilidade	Material	Suscetibilidade
<i>Diamagnéticos:</i>		<i>Paramagnéticos</i>	
Bismuto	$-1,6 \cdot 10^{-4}$	Oxigênio	$1,9 \cdot 10^{-6}$
Ouro	$-3,4 \cdot 10^{-5}$	Sódio	$8,5 \cdot 10^{-6}$
Prata	$-2,4 \cdot 10^{-5}$	Alumínio	$2,1 \cdot 10^{-5}$
Cobre	$-9,7 \cdot 10^{-6}$	Tungstênio	$7,8 \cdot 10^{-5}$
Água	$-9,0 \cdot 10^{-6}$	Platina	$2,8 \cdot 10^{-4}$
Dióxido de Carbono	$-1,2 \cdot 10^{-8}$	Oxigênio Líquido ( $-200^{\circ}\text{C}$ )	$3,9 \cdot 10^{-3}$
Hidrogênio	$-2,2 \cdot 10^{-9}$	Gadolínio	$4,8 \cdot 10^{-1}$

Fonte: (GRIFFITHS, 2011a)

- ***Ferromagnético***

Materiais ferromagnéticos possuem magnetização atômica permanente, assim como os paramagnéticos. O que os difere é o fato de que os momentos magnéticos atômicos dos materiais ferromagnéticos interagem com seus vizinhos de modo que tendem a se alinhar, formando pequenas regiões chamadas de domínios magnéticos. Porém, apesar desse alinhamento dos momentos magnéticos atômicos, os domínios magnéticos ficam orientados de forma aleatória (figura 2.6), de modo que não há magnetização na ausência de campo magnético (GRIFFITHS, 2011a).

Figura 2.6 – Configuração dos domínios magnéticos dos materiais ferromagnéticos



Fonte: (GRIFFITHS, 2011a)

Quando submetidos a um campo magnético externo, os domínios magnéticos dos materiais ferromagnéticos tendem a se alinhar com o campo e quanto mais se intensifica este campo, maior será o alinhamento dos domínios magnéticos, até que atinjam a saturação. Entretanto, diferentemente do diamagnetismo e do paramagnetismo nos quais se tem a perda da magnetização quando se retira o campo magnético externo, no ferromagnetismo ao se retirar/desligar o campo magnético externo, os domínios magnéticos continuam alinhados por um determinado tempo (GRIFFITHS, 2011a).

Esta magnetização temporária é consequência do atrito entre as paredes dos domínios magnéticos que tendem a retornar a sua orientação de origem ao se retirar o campo magnético externo, assim mantém-se uma magnetização residual, conhecida como remanência, ocorrendo o chamado *efeito de histerese* (GRAÇA, 2012).

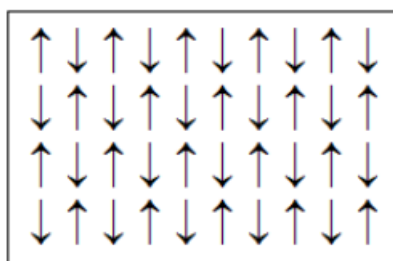


- *Antiferromagnético e Ferrimagnético*

Semelhante aos materiais ferromagnéticos, os materiais antiferromagnéticos e ferrimagnéticos possuem interação entre os spins dos elétrons. Todavia, essa interação acarreta em um ordenamento diferente dos momentos magnéticos desses materiais.

Os materiais antiferromagnéticos, proposto por Néel (NÉEL, 1936; NÉEL, 1952) têm uma organização antiparalela dos momentos magnéticos, como mostra a figura 2.7. Como os momentos magnéticos são iguais e opostos acarreta em uma magnetização nula.

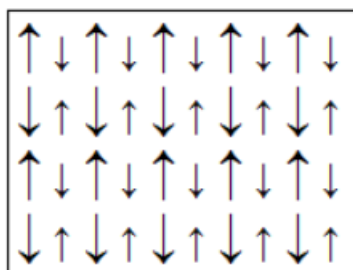
Figura 2.7 – Configuração esquemática dos spins dos materiais antiferromagnéticos



Fonte: (FERREIRA, 2018)

No caso dos materiais ferrimagnéticos, assim como no antiferromagnetismo, os momentos magnéticos estão alinhados antiparalelamente, porém, estes momentos magnéticos não são iguais, como ilustrado na figura 2.8. Dessa forma, tem-se uma magnetização diferente de zero. Esta interpretação também foi proposta por Néel (NÉEL, 1948) para descrever o magnetismo natural.

Figura 2.8 – Configuração esquemática dos momentos magnéticos dos materiais ferrimagnéticos



Fonte: (FERREIRA, 2018)

### 3 MODELOS MAGNÉTICOS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE

#### 3.1 Modelo de Ising

O *Modelo de Ising* foi proposto inicialmente por Wilhelm Lenz para o estudo de fenômenos magnéticos em materiais (ISING et al., 2017). Em 1922, Lenz sugere o problema ao estudante de doutorado Ernst Ising, que resolve este problema para uma única dimensão e publica seus resultados em 1925 (ISING, 1925). O Modelo de Ising Unidimensional consiste em uma cadeia linear de  $N$  sítios equidistantes de spin interagentes entre os primeiros vizinhos. Na presença de um campo magnético, o Hamiltoniano que representa esta cadeia é dado por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(ij)}^N \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (3.1)$$

O primeiro termo aponta que o somatório deve ser feito sob os pares interagentes de vizinhos mais próximos e o segundo termo indica a interação dos spins com o campo magnético externo aplicado à cadeia (SALINAS, 1997), onde  $h$  é o campo magnético externo ao qual a cadeia está submetida;  $\sigma_i$  indica o spin de cada sítio e podem assumir os valores discretos  $+1/2$  (spin up) ou  $-1/2$  (spin down); o parâmetro  $J$  representa a interação entre os spins vizinhos, de modo que  $J < 0$  corresponde a um alinhamento antiparalelo dos momentos magnéticos (antiferromagnetismo), enquanto  $J > 0$  corresponde a um alinhamento no mesmo sentido dos momentos magnéticos (ferromagnetismo).

A resolução do modelo de Ising unidimensional pode ser feita considerando a cadeia cíclica, de modo que  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ , conforme a figura 3.1. Dessa forma, o Hamiltoniano fica<sup>1</sup>:

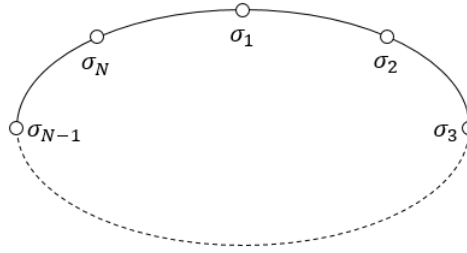
$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}). \quad (3.2)$$

Com a utilização da função de partição do ensemble canônico podemos obter diversas grandezas termodinâmicas do Modelo de Ising (SALINAS, 1997).

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp(-\beta \mathcal{H}), \quad (3.3)$$

<sup>1</sup> note que  $\frac{h}{2} \sum_i^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) = \frac{h}{2} [(\sigma_1 + \sigma_2) + (\sigma_2 + \sigma_3) + \dots + (\sigma_{N-1} + \sigma_N) + (\sigma_N + \sigma_{N+1})]$  e, devido a cadeia ser cíclica, ou seja,  $\sigma_{N+1} = \sigma_1$ , teremos  $\frac{h}{2} \sum_i^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) = \frac{h}{2} (2\sigma_1 + 2\sigma_2 + \dots + 2\sigma_N)$ . Portanto,  $\frac{h}{2} \sum_i^N (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \equiv h \sum_i^N \sigma_i$

Figura 3.1 – Cadeia cíclica com  $N$  sítios com interação tipo Ising entre os primeiros vizinhos



Fonte: Adaptado (HUANG, 1987)

em que  $\beta = 1/k_B T$ , com  $T$  sendo a temperatura absoluta,  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $\{\sigma_i\}$  indica que a soma deve ser feita sobre todos os spins  $(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ , assim,

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \sum_{i=1}^N [-J\sigma_i\sigma_{i+1} - \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})]} = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N e^{\beta [J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})]}. \quad (3.4)$$

Esta equação pode ser escrita da seguinte forma:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N \omega(\sigma_i, \sigma_{i+1}), \quad (3.5)$$

onde o termo  $\omega(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \equiv e^{\beta [J\sigma_i\sigma_{i+1} + \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1})]}$  é conhecido como peso de Boltzmann.

Podemos resolver a equação 3.5 expandindo o somatório (NOLTING; RAMAKANTH, 2009), o que não é muito usual. Outra forma de resolução é adotar a técnica de *matriz de transferência* (BAXTER, 2016; SALINAS, 1997; HUANG, 1987), a qual é mais simples e mais utilizada. Esta técnica será discutida a seguir.

### • *Matriz de Transferência*

A técnica da *matriz de transferência* ( $W$ ) é bastante aplicada em modelos de interação entre spins vizinhos. Os elementos  $w_{ij}$  da matriz de transferência são definidos a partir dos pesos de Boltzmann, de modo que, com base no modelo de Ising unidimensional exposto anteriormente, vamos considerar  $\omega(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \equiv w_{++}$ ,  $\omega(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \equiv w_{+-}$ ,  $\omega(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \equiv w_{-+}$  e  $\omega(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \equiv w_{--}$ . Assim, temos a seguinte forma da matriz de transferência:

$$W = \begin{bmatrix} \omega(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) & \omega(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \\ \omega(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) & \omega(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{++} & w_{+-} \\ w_{-+} & w_{--} \end{bmatrix}. \quad (3.6)$$

Dessa forma, podemos escrever a equação 3.5 como:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma_i\}} \prod_{i=1}^N \langle \sigma_i | W_i | \sigma_{i+1} \rangle = \sum_{\{\sigma_i\}} \langle \sigma_1 | W_1 | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | W_2 | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_N | W_N | \sigma_1 \rangle, \quad (3.7)$$

em que  $\langle \sigma_i |$  e  $| \sigma_{i+1} \rangle$  são os possíveis valores de estado dos spins (1/2 ou -1/2) e  $\langle \sigma_i | W | \sigma_{i+1} \rangle = e^{\beta [J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1})]}$ . Aplicando o somatório e utilizando a propriedade de completeza (ou clausura)  $\sum_{\sigma_i} | \sigma_i \rangle \langle \sigma_i | = 1$ , a equação 3.7 fica

$$Z_N = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1 | W_1 \sum_{\sigma_2} | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | W_2 | \sigma_3 \rangle \cdots \langle \sigma_{N-1} | W_{N-1} \sum_{\sigma_N} | \sigma_N \rangle \langle \sigma_N | W_N | \sigma_1 \rangle, \quad (3.8)$$

$$Z_N = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1 | W_1 \cdot W_2 \cdots W_{N-1} \cdot W_N | \sigma_1 \rangle = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1 | W^N | \sigma_1 \rangle, \quad (3.9)$$

e, portanto,

$$Z_N = \text{Tr}(W^N). \quad (3.10)$$

Consideramos que  $W$  seja uma matriz diagonalizável e que  $U$  seja a matriz que diagonaliza  $W$ , de modo que  $UU^{-1} = \mathbb{1}$ , onde  $U^{-1}$  é a matriz inversa de  $U$  e  $\mathbb{1}$  é a matriz identidade. Logo, temos

$$D = UWU^{-1} = \begin{bmatrix} \Lambda_+ & 0 \\ 0 & \Lambda_- \end{bmatrix}, \quad (3.11)$$

onde  $D$  é a matriz diagonalizada e  $\Lambda_{\pm}$  são os autovalores de  $W$  os quais, para este modelo de Ising, são definidos da seguinte forma

$$\Lambda_{\pm} = \frac{w_{++} + w_{--} \pm \sqrt{(w_{++} + w_{--})^2 - 4(w_{++} \cdot w_{--} - w_{+-}^2)}}{2}, \quad (3.12)$$

ou, de forma explícita

$$\Lambda_{\pm} = e^{\frac{\beta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta h}{2}\right) \pm \left[ e^{-\frac{\beta J}{2}} \cosh^2\left(\frac{\beta h}{2}\right) - 2 \sinh\left(\frac{\beta h}{2}\right) \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (3.13)$$

Portanto, utilizando a propriedade cíclica do traço, a equação 3.10 pode ser escrita como

$$Z_N = \text{Tr}(UU^{-1}W_1UU^{-1}W_2 \cdots UU^{-1}W_NUU^{-1}) = \text{Tr}(D^N) = \Lambda_+^N + \Lambda_-^N, \quad (3.14)$$

agora, tomando o limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$  e sabendo que  $\Lambda_+ > \Lambda_-$ , teremos:

$$Z_N = \Lambda_+^N. \quad (3.15)$$

Assim, com a obtenção da função de partição do sistema, podemos encontrar as grandezas termodinâmicas como a *energia livre de Helmholtz* -  $f$  (equação 3.16) e, por conseguinte, outras grandezas como a magnetização  $M$  (equação 3.17), suscetibilidade magnética  $\chi_m$  (equação 3.18), entre outras (SALINAS, 1997).

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{\ln Z_N}{N} \right), \quad (3.16)$$

$$M = -\frac{\partial f}{\partial h}, \quad (3.17)$$

$$\chi_m = \frac{\partial M}{\partial h} = -\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}. \quad (3.18)$$

Apesar da grande expectativa e simplicidade, Ising não conseguiu obter transição de fase a temperaturas finitas com o seu modelo unidimensional, ao contrário do proposto por Pierre Weiss, o qual indicava transição de fase independentemente da dimensão. Assim, o modelo de Ising entra em desuso, até que em 1936 Peierls apresenta argumentos que dão suporte para o modelo de Ising bi e tridimensional apresentarem transição de fase (PEIERLS, 1936). Após cinco anos, Kramers e Gregory Wannier encontram a temperatura dessa transição (Temperatura de Curie -  $T_C$ ) em uma rede quadrada (KRAMERS; WANNIER, 1941) e Lars Onsager soluciona analiticamente o modelo de Ising bidimensional sem campo magnético externo (ONSAGER, 1944). Dessa forma, o modelo de Ising retoma seu prestígio. Contudo, o modelo bidimensional na presença de campo magnético externo e o tridimensional continuam sem solução analítica.

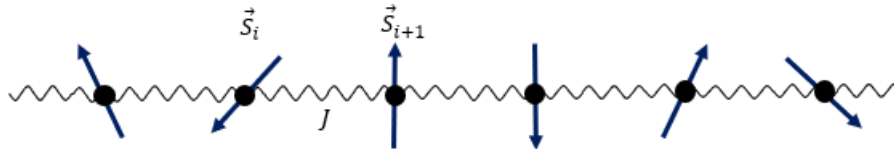
### 3.2 Modelo de Heisenberg

Com o intuito de aperfeiçoar o modelo de Ising, em 1928 Heisenberg propõem um modelo similar, porém a interação leva em consideração os operadores de spin (HEISENBERG, 1928), figura 3.2, ao invés de apenas seus valores discretos como no caso do modelo de Ising. Dessa forma, o *Modelo de Heisenberg* pode ser interpretado como uma generalização do modelo de Ising, o qual apresenta o seguinte Hamiltoniano de interação entre os primeiros vizinhos e na presença de campo magnético externo (SALINAS, 1997)

$$\mathcal{H} = - \sum_{(i,j)}^N J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - g\mu_B \sum_{i=1}^N h \vec{S}_i, \quad (3.19)$$

onde  $h$  é o campo magnético externo atuante em cada spin,  $\mu_B$  é o magneton de Bohr,  $g$  é o fator-g de Landé,  $J$  é o parâmetro de interação entre os spins vizinhos ou parâmetro de interação de troca (COEY, 2010) e  $\vec{S}_i$  é o operador de spin dos elétrons de cada sítio.

Figura 3.2 – Cadeia linear de Heisenberg com spins  $S_i$  localizados e parâmetro de interação  $J$ .



Fonte: Adaptado (NOLTING; RAMAKANTH, 2009)

Os operadores de spin  $\vec{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$  são definidos da seguinte forma para spin-1/2

$$\vec{S}_i = \frac{\hbar}{2} \sigma_i, \quad (3.20)$$

onde  $\sigma_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$  são as matrizes de Pauli (equação 2.7), de modo que as componentes de  $\vec{S}$  são  $S^x = \frac{\hbar}{2} \sigma^x$ ,  $S^y = \frac{\hbar}{2} \sigma^y$  e  $S^z = \frac{\hbar}{2} \sigma^z$ .

Por outro lado, o parâmetro de interação entre os spins podem assumir valores distintos em cada direção, definindo a anisotropia das direções  $x$ ,  $y$  e  $z$ , de forma que  $J = (J_x, J_y, J_z)$ . Assim, podemos escrever a equação 3.19 da seguinte forma

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N (J_x S_i^x \cdot S_{i+1}^x + J_y S_i^y \cdot S_{i+1}^y + J_z S_i^z \cdot S_{i+1}^z) - g\mu_B \sum_{i=1}^N h \vec{S}_i \quad (3.21)$$

Conforme os valores anisotrópicos, o modelo de Heisenberg é comumente chamado de modelo XYZ quando  $J_x \neq J_y \neq J_z$ , cujo Hamiltoniano é dado pela equação 3.21, ou de

modelo  $XXZ$  quando  $J_x = J_y \neq J_z$ , cujo o Hamiltoniano é dado pela equação 3.22, entre outras configurações. Dessa forma, teremos

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N [J_x (S_i^x \cdot S_{i+1}^x + S_i^y \cdot S_{i+1}^y) + J_z S_i^z \cdot S_{i+1}^z] - g\mu_B \sum_{i=1}^N h S_i^z, \quad (3.22)$$

Por conseguinte, podemos escrever o Hamiltoniano do modelo de Heisenberg de forma simplificada conforme a equação 3.23

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N (J \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + h S_i^z), \quad (3.23)$$

em que considerou-se  $g$  e  $\mu_B$  iguais a um, a isotropia do sistema, ou seja  $J_x = J_y = J_z$ , e campo magnético externo atuando na direção  $z$  e igualmente em todos os sítios (CARVALHO, 2018).

## 4 CORRELAÇÕES QUÂNTICAS

### 4.1 Estados Puros e Estados Misturados

Tradicionalmente os estudos iniciais sobre a Mecânica Quântica estão associados a sistemas bem conhecidos, ou seja, sistemas nos quais as partículas quânticas são descritas por um vetor de estado definido. Entretanto, é bastante comum lidar com sistemas quânticos que não possuem vetor de estado perfeitamente conhecido, ou seja, que não podem ser representados por um vetor de estado. Logo, é necessário a utilização de um formalismo mais abrangente para descrever esses sistemas quânticos.

O formalismo em questão é o chamado formalismo *operador densidade* criado por J. Von Neumann em 1927 (SAKURAI, 2013), ou *matriz densidade* (NOVAES; STUDART, 2016). O operador densidade é uma ferramenta matemática capaz de descrever tanto sistemas quânticos com estado bem definido (*estados puros*) quanto os que não podem ser definidos por um vetor de estado (*estados misturados*).

- **Estados Puros**

Sistemas quânticos puros ou estados puros são tidos de forma que podem ser representados como uma função de estado

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i c_i(t) |u_i\rangle, \quad (4.1)$$

em que  $|u_i\rangle$  são vetores que formam uma base ortonormal completa e  $c_i(t)$  obedecem a seguinte condição

$$\sum_i |c_i(t)|^2 = 1. \quad (4.2)$$

Consequentemente,  $\langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 1$

Introduzimos o formalismo operador densidade  $\rho(t)$  para o estado puro, o qual é definido como

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|, \quad (4.3)$$

e os elementos desta matriz densidade na base  $\{|u_i\rangle\}$  são dados por



$$\rho_{i,j}(t) = \langle u_i | \rho(t) | u_j \rangle = c_i^* c_j, \quad (4.4)$$

os elementos da diagonal do operador densidade, ou seja, quando  $i = j$ ,  $\rho_{i,i}(t) = c_i^* c_i = |c_i|^2$ . Dessa forma, conforme a equação 4.2, é notório que

$$Tr[\rho(t)] = \sum_i \rho_{i,i}(t) = 1. \quad (4.5)$$

Outras propriedades importantes de serem salientadas no caso puro são as seguintes:  $\rho(t) = \rho^2(t)$ , ou seja,  $\rho(t) - \rho^2(t) = 0$  ou  $\rho(t)[1 - \rho(t)] = 0$  logo, apenas um autovalor é não nulo, enquanto que os demais são iguais a zero e  $\rho(t)^\dagger = \rho(t)$ . Além disso, o valor esperado de uma certa quantidade  $Q$ , nesse formalismo é dado por:

$$\langle Q \rangle = Tr[\rho(t)Q]. \quad (4.6)$$

#### • *Estados Misturados*

Enquanto os estados puros têm a função de estado bem definida, conforme a equação 4.1, os sistemas quânticos ditos como misturados ou estados misturados não podem ser definidos desta mesma forma. O operador densidade que define estes tipos de estados quânticos é dado por:

$$\rho(t) = \sum_i p_i \rho_i, \quad (4.7)$$

onde  $\rho_i = |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|$ ,  $|\psi_i(t)\rangle$  é cada estado que compõem a mistura quântica e  $p_i$  é a probabilidade de se obter cada um desses estados, de modo que  $\sum_i p_i = 1$ .

Analogamente ao caso puro, neste contexto do operador densidade de estados misturados, o valor esperado de uma quantidade  $Q$  e o traço de  $\rho(t)$  é dada pelas equações 4.6 e 4.5, respectivamente. Além disso,  $\rho(t)^\dagger = \rho(t)$ , entretanto,  $\rho(t) \neq \rho^2(t)$ , o que possibilita autovalores de  $\rho(t)$  entre 0 e 1. Além disso,  $Tr[\rho^2(t)] \leq 1$ .

## 4.2 Emaranhamento Quântico

Apesar da maioria dos postulados ou princípios fundamentais da mecânica quântica estarem bem estabelecidos e conhecidos até a terceira década inicial do século XX, algumas características de sistemas quânticos ainda intrigavam os estudiosos, como é o caso do

*emaranhamento quântico*, uma das características mais fascinante da Mecânica Quântica por apresentar uma impressionante correlação não-local.

Baseando-se na pressuposição de que é impossível transmitir sinais super luminosos (RIGOLIN, 2005), ou seja, de que nenhuma informação se propaga com velocidade maior que a velocidade da luz, conhecido como princípio da localidade (GRIFFITHS, 2011b), Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen (EPR), em 1935 (EINSTEIN; PODOLSKY; ROSEN, 1935), através de argumentos exclusivamente teóricos, defendiam que a teoria da mecânica quântica estaria incompleta, disseminando a ideia de que um sistema quântico deveria ser caracterizado não apenas pela função de onda  $\Psi$  mas, também, por mais uma quantidade  $\lambda$ , a qual é conhecida como variável oculta (GRIFFITHS, 2011b).

Apesar da teoria EPR ser bastante plausível, esta não possui nenhuma predição quantitativa e, em 1964, John S. Bell (BELL, 1964) demonstra uma previsão quantitativa da existência da não-localidade da Mecânica Quântica e, no início de 1980, Alain Aspect e colaboradores (ASPECT; GRANGIER; ROGER, 1981; ASPECT; DALIBARD; ROGER, 1982) obtiveram os resultados empíricos previstos pela teoria de Bell, confirmando que a "própria natureza é fundamentalmente não-local" (GRIFFITHS, 2011b).

Naturalmente encontrado nos sistemas quânticos e sendo consequência da superposição quântica, os estados emaranhados possuem grande importância no âmbito da informação quântica (NIELSEN; CHUANG, 2010), com aplicabilidade nas áreas de computação quântica (BENNETT; DIVINCENZO, 2000), criptografia quântica (EKERT, 1991), teletransporte (BENNETT et al., 1993; YEO, 2003; SANTOS, 2017), estando presente até mesmo na Biologia, como em sistemas de fotossíntese (SAROVAR et al., 2010; BRÁDLER et al., 2010; FASSIOLI; OLAYA-CASTRO, 2010). Dessa forma, torna-se natural estudar quais sistemas são e o quanto estão emaranhados.

A caracterização de estados emaranhados pertencentes ao espaço de Hilbert pode ser realizada através do método de separabilidade. De forma simplificada, um estado é dito como emaranhado (não separável) quando não podemos escrevê-lo na forma de um produto tensorial. Como exemplo, temos os seguintes estados emaranhados

$$|\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle \pm |11\rangle), \quad (4.8)$$

$$|\Psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|01\rangle \pm |10\rangle), \quad (4.9)$$

(nesse caso, os chamados Estados de Bell)<sup>1</sup>. Do contrário, se for possível escrevê-lo na forma de um produto tensorial, dizemos que o estado é não emaranhado (separável), como no exemplo abaixo:

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|00\rangle + |01\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} [|0\rangle \otimes (|0\rangle + |1\rangle)]. \quad (4.10)$$

No contexto do operador densidade, os estados separáveis, ou seja, não emaranhados, são aqueles que podem ser escritos na forma (PERES, 1996)

$$\rho = \sum_i p_i \rho_i^A \otimes \rho_i^B, \quad (4.11)$$

onde  $\sum_i p_i = 1$ , enquanto  $\rho_i^A$  e  $\rho_i^B$  são operadores densidade dos subsistemas  $A$  e  $B$ , respectivamente.

### • Emaranhamento de Formação e Concorrência

Agora, nosso interesse está em quantificar o emaranhamento, ou seja, identificar o quão emaranhado um sistema quântico está. Para isso, há diversos quantificadores de emaranhamento na literatura, como a *Entropia Relativa de Emaranhamento* ( $E_R$ ) (VEDRAL et al., 1997b; VEDRAL et al., 1997a), a *Emaranhamento Destilável* ( $E_D$ ) (BENNETT et al., 1996) e o *Emaranhamento de Formação* ( $EoF$ ) (HILL; WOOTTERS, 1997). Nosso interesse parte da escolha do  $EoF$  como quantificador do emaranhamento, o qual é definido através do mínimo das médias das entropias dos estados puros que compõem o estado misto, conforme equação a seguir (HILL; WOOTTERS, 1997),

$$EoF(\rho) = \min \sum_i p_i E(\psi_i), \quad (4.12)$$

onde  $\rho = \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$  e  $E(\psi_i)$  é a entropia de von Neumann para o estado puro  $\psi_i$ .

<sup>1</sup> Daqui por diante, com o intuito de simplificar a escrita, adotaremos a seguinte notação de produtos tensoriais  $|00\rangle \equiv |0\rangle \otimes |0\rangle$ ,  $|000\rangle \equiv |0\rangle \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle$  e assim sucessivamente.

Note que quando  $\rho$  representa estados puros, o  $E_oF$  reduz-se a entropia de von Neumann  $E(\Psi)$ , a qual também é um quantificador de emaranhamento e definida como (BENNETT et al., 1996)

$$E(\psi) = -Tr[\rho_1 \log_2(\rho_1)] = -Tr[\rho_2 \log_2(\rho_2)], \quad (4.13)$$

onde  $\rho_1 = Tr_2(\rho)$  e  $\rho_2 = Tr_1(\rho)$  são as matrizes densidades reduzidas do sistema bipartite.

A solução analítica desta equação 4.12 pode se tornar inviável devido os diversos estados puros contidos em  $\rho$ . Porém, para sistemas bipartites e cuja dimensão no espaço de Hilbert é  $2 \times 2$ , como o de partículas de spin-1/2, foram obtidas soluções exatas para o  $E_oF$  (WOOTTERS, 1998). Para este caso, o  $E_oF$  é dado por

$$E_oF(\rho) = -x \log_2(x) - (1-x) \log_2(1-x), \quad (4.14)$$

em que

$$x = \frac{1 + \sqrt{1 - \mathcal{C}^2}}{2}, \quad (4.15)$$

onde  $\mathcal{C}$  é conhecido como *concorrência*, a qual é a quantidade geralmente utilizada para quantificar o emaranhamento devido este ser uma função monótona de  $\mathcal{C}$  (equações 4.14 e 4.15). A concorrência é obtida através da matriz  $R$ , definida conforme a equação abaixo

$$R = \rho \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y) \cdot \rho^* \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y), \quad (4.16)$$

onde  $\rho$ ,  $\rho^*$  e  $\sigma^y$  são o operador densidade, seu complexo conjugado e a matriz de Pauli, respectivamente. Dessa forma, a concorrência de sistemas bipartites é dada pela equação (WOOTTERS, 1998)

$$\mathcal{C}(\rho) = \max \left\{ 0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4} \right\}, \quad (4.17)$$

em que  $\lambda_i$  são os valores próprios da matriz  $R$  em ordem decrescente, ou seja, satisfazem a condição  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \lambda_4$ . E, assim, teremos sistemas não emaranhados quando  $\mathcal{C} = 0$ , parcialmente emaranhados quando  $0 < \mathcal{C} < 1$  e maximamente emaranhado quando  $\mathcal{C} = 1$ .

- ***Emaranhamento Térmico***

Cadeias de spin de dois qubits em equilíbrio térmico com um reservatório de temperatura  $T$  (ARNESEN; BOSE; VEDRAL, 2001) podem apresentar emaranhamento térmico. Neste contexto, o emaranhamento térmico pode ser analisado através do operador densidade  $\rho$  dado por (WANG; FU; SOLOMON, 2001)

$$\rho = \frac{e^{-\beta\mathcal{H}}}{Z_N}, \quad (4.18)$$

sendo  $Z_N$  a função de partição do sistema definida pela equação 3.3,  $\mathcal{H}$  é o Hamiltoniano do sistema e  $\beta = 1/k_B T$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura.

É notório que o operador densidade  $\rho$  é uma função de  $T$  e, portanto, o emaranhamento neste caso é conhecido como *emaranhamento térmico*, o qual pode ser quantificado de modo análogo ao que foi exposto anteriormente, de acordo com a equação 4.17.

### 4.3 Coerência Quântica

No contexto da física clássica a coerência está associada a fenômenos ondulatórios de interferência de modo a estabelecer uma correlação entre as fases das ondas envolvidas e de definir as fontes como coerentes, parcialmente coerentes e incoerentes (HALLIDAY; RESNICK; WALKER, 2009).

Por outro lado, a formulação e consolidação da mecânica quântica ampliou ainda mais o conceito da coerência (sendo conhecida como coerência quântica nesse contexto), o fenômeno ocorre quando um sistema quântico existe numa superposição de dois ou mais estados simultâneos. Diferente da Mecânica Clássica, a Mecânica Quântica admite uma superposição contendo mais informações. A correlação quântica e a coerência quântica representam características estruturais da superposição quântica (STRELTSOV et al., 2015; STRELTSOV et al., 2018; STRELTSOV; ADESSO; PLENIO, 2017).

Enquanto a correlação quântica é definida em um sistema que envolve pelo menos duas partes, a coerência quântica pode ser definida para um único sistema. Uma das possíveis correlações quântica é o emaranhamento e uma outra é a discórdia quântica, que pode até existir em um estado separável com emaranhamento nulo. A discórdia quântica (OLLIVIER; ZUREK, 2001) também é um recurso crucial para o desenvolvimento de tecnologias quânticas, como comunicação quântica, computação quântica, entre outras.

Dessa forma, a coerência quântica vem sendo bastante estudada em diversas áreas como a termodinâmica de baixa temperatura (ÅBERG, 2014; NARASIMHACHAR; GOUR, 2015; ĆWIKLIŃSKI et al., 2015; LOSTAGLIO; JENNINGS; RUDOLPH, 2015; LOSTAGLIO et al., 2015) e física em nanoescala (VAZQUEZ et al., 2012; KARLSTRÖM et al., 2011), além de estar presente em ramos da Biologia, sendo até mesmo detectado experimentalmente (ENGEL et al., 2007; COLLINI et al., 2010; ROMERO et al., 2014).

Apesar de a coerência quântica ser conhecida desde o início da formulação da teoria quântica, sua utilidade ainda não está bem definida. Porém, devido a coerência quântica carregar informações sobre a superposição dos sistemas quântico, sobre as correlações quânticas não emaranhadas (discórdia quântica) e sobre o emaranhamento quântico, a coerência quântica e as correlações quânticas são importantes recursos quânticos para a computação quântica e informação quântica.

Neste sentido muito vem sendo feito com o intuito de estabelecer uma rigorosa descrição para a coerência quântica (em analogia ao que se desenvolveu para o emaranhamento). E a primeira tentativa para estabelecer uma teoria de recurso de coerência quântica foi proposta recentemente por Baumgratz, Cramer e Plenio, em 2014, os quais propuseram alguns quantificadores da coerência quântica, entre elas, a da entropia relativa de coerência (BAUMGRATZ; CRAMER; PLENIO, 2014):

$$\mathcal{C}_{ent.rel.}(\hat{\varrho}_{diag}) = S(\hat{\varrho}_{diag}) - S(\hat{\varrho}), \quad (4.19)$$

onde  $S$  é a entropia de von Neumann e  $\hat{\varrho}_{diag}$  expressa a matriz densidade obtida através do operador densidade  $\varrho$  excluindo os elementos fora da diagonal. Além disso, esses autores também definiram outro quantificador, a norma- $l_1$  da coerência quântica

$$\mathcal{C}_{l_1}(\varrho) = \sum_{i \neq j} |\varrho_{i,j}|. \quad (4.20)$$

Aqui a coerência quântica é obtida através da soma dos elementos fora da diagonal da matriz operador densidade  $\varrho$ . Tanto a equação 4.19 quanto a equação 4.20 são medidas de coerência quântica.

#### 4.4 Teletransporte Quântico

Quando se trata de teletransporte (ou teleporte) é inevitável não se deslumbrar com os ideais disseminados pelas literaturas de ficção científica, com a desmaterialização de algo em um determinado local e a materialização deste em outro local, independente da distância (RIGOLIN, 2005). Pelo contrário, para a decepção de alguns idealistas (ou leigos nesse assunto), não é possível teletransportar elementos portadores de massa ou, pelo menos, ainda não é possível (GOMES, 2016). No processo de teletransporte, o que é teleportado são estados quânticos (qubits) ou informações quânticas (no contexto da teoria quântica de informação), sem que haja a necessidade da existência de um meio contínuo entre as partes envolvidas no teletransporte e nem mesmo uma dependência quanto a distância entre essas partes (GOMES, 2012).

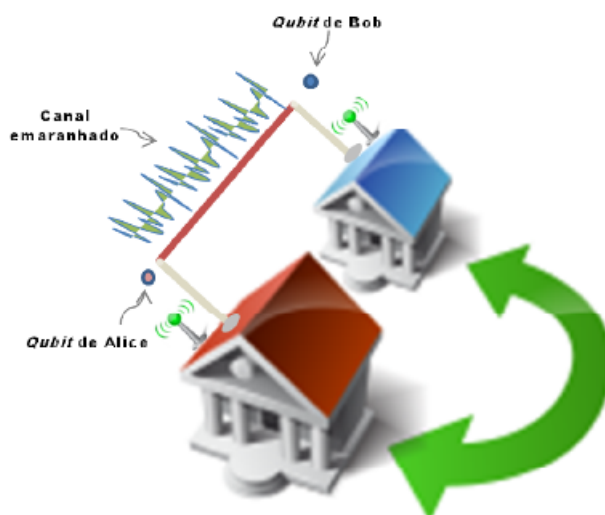
No ano de 1993, Charles Bennet e colabores, publicaram, pela primeira vez, o que hoje conhecemos como *teletransporte quântico*, uma das mais incríveis aplicações da Mecânica Quântica (BENNETT et al., 1993). Basicamente, esses autores mostraram a possibilidade de transmissão de toda informação que um qubit  $|\phi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  contém, através do estado de Bell (o chamado canal EPR), em que uma possível configuração é  $|\Phi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$ , conforme a equação 4.8. O caminho a ser seguido para que haja o sucesso deste teletransporte é chamado de *protocolo original*. Além disso, outros trabalhos foram desenvolvidos quanto ao teleporte de informações, como o *teletransporte quântico utilizando canais parcialmente emaranhados* (BOWEN; BOSE, 2001) e o quantificador de teletransporte, a *fidelidade* (JOZSA, 1994; BOWDREY et al., 2002), bem como a generalização para o caso de  $N$  qubits de informação a ser teleportada (RIGOLIN, 2005).

- ***Protocolo Original***

Como mencionado acima, o protocolo original consiste no teletransporte de um qubit  $|\phi\rangle$  através do canal quântico emaranhado formado pelos estados de Bell (BENNETT et al., 1993). Este teleporte (figura 4.1) está configurado da seguinte forma: um emissor (Alice), de posse do qubit a ser teletransportado ( $|\phi\rangle$ ), utiliza o canal quântico emaranhado ( $|\Phi\rangle$ ) de modo que  $|\phi\rangle$  passa ser descrito como uma mistura estatística no qubit do receptor (Bob).

Apesar desse processo ser instantâneo, a informação ainda não foi transmitida completamente, o protocolo ainda não se concluiu, pois, o estado descrito no espaço de Bob é composto por uma mistura estatística. Para que o protocolo seja finalizado, Alice necessita

Figura 4.1 – Representação esquemática do protocolo original de teletransporte de informação. A linha vermelha refere-se ao canal quântico emaranhado, enquanto as casa azul e vermelha representam, respectivamente, Bob e Alice. Os qubits de Bob e Alice também estão em destaque nessa ordem de cores.



Fonte: (GOMES, 2012)

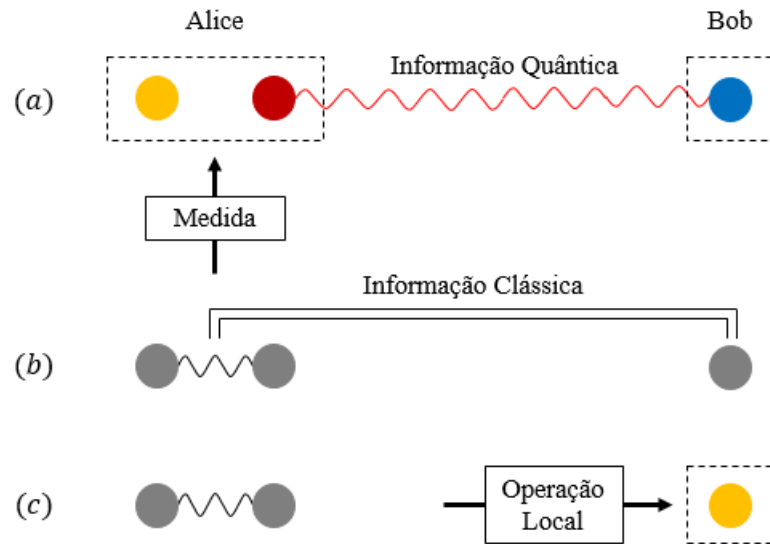
realizar uma medida no sistema e enviar, através de um canal clássico (telefone, e-mail, entre outros) o resultado desta medida para Bob e, como a informação clássica não é transmitida com velocidade maior que a velocidade da luz, se preserva a causalidade relativística. Dessa forma, de posse da informação clássica emitida por Alice, Bob realiza uma operação local no qubit de sua posse, finalizando o protocolo, conforme a figura 4.2 (RIGOLIN, 2005).

Vale ressaltar, também, que o ato de medir acarreta no colapso da função de onda, ou seja, o emaranhamento é destruído, Alice e Bob não mais compartilham estados emaranhados, estes estados são consumidos durante o teletransporte (RIGOLIN, 2005; GOMES, 2016). Essa características da comunicação quântica faz com que esta possua vantagem sobre as comunicações clássicas, pois, apesar de ambas permitirem que a informação seja transmitida, o protocolo quântico não permite que o conteúdo transmitido seja copiado quando submetido a alguma medida externa, ao contrário do protocolo clássico, característica conhecida como teoria da não-clonagem (DIEKS, 1982).

Vamos, agora, descrever o protocolo original explicitamente. A informação original a ser transmitida por Alice é  $|\phi\rangle = \alpha|0\rangle_1 + \beta|1\rangle_1$ , em que  $\alpha$  e  $\beta$  podem assumir valores diversos, desde que a condição  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  seja preservada. Enquanto que o canal quântico é formado pelo estado de Bell, cujas possíveis configurações são, conforme as equações 4.8 e 4.9,



Figura 4.2 – Representação esquemática das operações realizadas por Alice (lado esquerdo) e Bob (lado direito). As bolinhas amarela e vermelha são os qubits de Alice, em que a amarela é a informação original  $|\phi\rangle$  e a vermelha forma o canal quântico com o qubit de Bob (bolinha azul). Em (a) Alice faz uma medida em seus qubits, em (b) Alice envia classicamente a informação obtida para Bob e em (c) Bob realiza a operação local em seu qubit após receber a informação clássica de Alice, recuperando a informação original.



Fonte: Adaptado (RIGOLIN, 2005)

$$|\Phi^+\rangle_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{2,3} + |11\rangle_{2,3}), \quad (4.21)$$

$$|\Phi^-\rangle_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{2,3} - |11\rangle_{2,3}), \quad (4.22)$$

$$|\Psi^+\rangle_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_{2,3} + |10\rangle_{2,3}), \quad (4.23)$$

$$|\Psi^-\rangle_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_{2,3} - |10\rangle_{2,3}), \quad (4.24)$$

aqui, os índices 1, 2 e 3 representam as partículas envolvidas, ou seja, o qubit original a ser teletransportado (1), um dos pares do canal quântico na posse de Alice (2) e o outro par do canal quântico que Bob possui (3).

Definindo o canal quântico como sendo  $|\Phi^+\rangle_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{2,3} + |11\rangle_{2,3})$ , o estado geral do sistema composto pelo qubit original e o canal quântico é expresso pelo produto tensorial

$$|\Theta\rangle = |\phi\rangle_1 \otimes |\Phi^+\rangle_{2,3} = (\alpha|0\rangle_1 + \beta|1\rangle_1) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle_{2,3} + |11\rangle_{2,3}), \quad (4.25)$$

assim,

$$|\Theta\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}}(|000\rangle_{1,2,3} + |011\rangle_{1,2,3}) + \frac{\beta}{\sqrt{2}}(|100\rangle_{1,2,3} + |111\rangle_{1,2,3}). \quad (4.26)$$

Note que, somando as equações 4.21 e 4.22 teremos  $|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi^+\rangle + |\Phi^-\rangle)$ , enquanto que subtraindo essas equações temos  $|11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi^+\rangle - |\Phi^-\rangle)$ . Por outro lado, somando as equações 4.23 e 4.24 tem-se  $|01\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi^+\rangle + |\Psi^-\rangle)$  e, subtraindo-as, se tem  $|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi^+\rangle - |\Psi^-\rangle)$ . Dessa forma, a equação 4.26 fica

$$|\Theta\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{2}} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi^+\rangle_{1,2} + |\Phi^-\rangle_{1,2}) \otimes |0\rangle_3 + \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi^+\rangle_{1,2} + |\Psi^-\rangle_{1,2}) \otimes |1\rangle_3 \right] + \frac{\beta}{\sqrt{2}} \left[ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi^+\rangle_{1,2} - |\Psi^-\rangle_{1,2}) \otimes |0\rangle_3 + \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Phi^+\rangle_{1,2} - |\Phi^-\rangle_{1,2}) \otimes |1\rangle_3 \right], \quad (4.27)$$

ou, ainda,

$$|\Theta\rangle = \frac{\alpha}{2}(|\Phi^+\rangle_{1,2} + |\Phi^-\rangle_{1,2}) \otimes |0\rangle_3 + \frac{\alpha}{2}(|\Psi^+\rangle_{1,2} + |\Psi^-\rangle_{1,2}) \otimes |1\rangle_3 + \frac{\beta}{2}(|\Psi^+\rangle_{1,2} - |\Psi^-\rangle_{1,2}) \otimes |0\rangle_3 + \frac{\beta}{2}(|\Phi^+\rangle_{1,2} - |\Phi^-\rangle_{1,2}) \otimes |1\rangle_3. \quad (4.28)$$

Reescrevendo esta equação de modo que os estados de Bell fiquem em evidência, teremos

$$|\Theta\rangle = \frac{1}{2}|\Phi^+\rangle_{1,2} \otimes (\alpha|0\rangle_3 + \beta|1\rangle_3) + \frac{1}{2}|\Phi^-\rangle_{1,2} \otimes (\alpha|0\rangle_3 - \beta|1\rangle_3) + \frac{1}{2}|\Psi^+\rangle_{1,2} \otimes (\beta|0\rangle_3 + \alpha|1\rangle_3) + \frac{1}{2}|\Psi^-\rangle_{1,2} \otimes (-\beta|0\rangle_3 + \alpha|1\rangle_3), \quad (4.29)$$

É notório que Bob ainda não tem nenhum conhecimento bem definido sobre a informação transmitida, como está evidente na equação 4.29 do estado estado  $|\Theta\rangle$ . Logo, é necessário que Alice realize uma medida (e envie classicamente o resultado a Bob), sobre a qual não tem nenhum controle, afinal, Alice tem a mesma probabilidade (1/4) de obter qualquer um dos quatro estados de Bell (RIGOLIN, 2005; GOMES, 2016).

Finalmente, de posse do resultado da medição feita por Alice, Bob pode realizar a operações locais em seu qubit, resgatando a informação enviada. A tabela a seguir mostra os possíveis resultados de Alice, os respectivos qubits de Bob e as correções, operações feitas por Bob.

Tabela 4.1 – Os possíveis resultados das medidas de Alice, os respectivos qubits de Bob e as correções, operações feitas por Bob.

Resultado de Alice	Qubit de Bob	Correção	Operação Local
$ \Phi^+\rangle$	$\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle$	$\mathbb{1}$	$\mathbb{1}(\alpha 0\rangle + \beta 1\rangle) =  \phi\rangle$
$ \Phi^-\rangle$	$\alpha 0\rangle - \beta 1\rangle$	$\sigma^z$	$\sigma^z(\alpha 0\rangle - \beta 1\rangle) =  \phi\rangle$
$ \Psi^+\rangle$	$\alpha 1\rangle + \beta 0\rangle$	$\sigma^x$	$\sigma^x(\alpha 1\rangle + \beta 0\rangle) =  \phi\rangle$
$ \Psi^-\rangle$	$\alpha 1\rangle - \beta 0\rangle$	$i\sigma^y$ ou $\sigma^z\sigma^x$	$i\sigma^y(\alpha 1\rangle - \beta 0\rangle) =  \phi\rangle$

Fonte: (GOMES, 2012)

Aqui, os seguintes resultados utilizando as matrizes de Pauli (equação 2.7)  $\sigma^x|0\rangle = |1\rangle$ ;  $\sigma^x|1\rangle = |0\rangle$ ;  $\sigma^y|0\rangle = i|1\rangle$ ;  $\sigma^y|1\rangle = -i|0\rangle$ ;  $\sigma^z|0\rangle = |0\rangle$ ;  $\sigma^z|1\rangle = -|1\rangle$  foram considerados.

• **Teletransporte Quânticos através de Canais Parcialmente Emaranhados**

A formulação do protocolo original (BENNETT et al., 1993) proporcionou uma gama de trabalhos envolvendo distintas características do sistema quântico que compõe o processo de teletransporte, como a utilização de canais quânticos parcialmente emaranhados e a transmissão de dois qubits (LI; LI; GUO, 2000; AGRAWAL; PATI, 2002; RIGOLIN, 2009; RIGOLIN, 2005).

Nosso interesse aqui é expor o trabalho de Garry Bowen e Sougato Bose (BOWEN; BOSE, 2001). Neste trabalho os autores propuseram uma forma generalizada do protocolo de teletransporte quântico, de modo que pode-se utilizar um canal quântico arbitrário (puro ou misturado) no processo, bem como qualquer quantidade de qubits (1, 2, ou mais qubits) podem ser teleportados. De forma explícita, temos a seguinte definição (BOWEN; BOSE, 2001):

$$\rho_{out} = \sum_{i=0}^3 Tr[E^i \rho_{ch}] \sigma^i \rho_{in} \sigma^i, \quad (4.30)$$

onde,  $\rho_{out}$  é o operador densidade de saída (a informação transmitida ao final do processo),  $E^i$  são os operadores projeção dos estados de Bell (equações 4.8 e 4.9) definidos a partir das matrizes de Pauli  $\sigma^i$  (equação 2.7), de modo que  $E^i = \sigma^i E^0 \sigma^i$ , em que  $E^0$  é o operador projetor arbitrário definido a partir da medição de Alice, por exemplo,  $E^0 = |\Phi^-\rangle \langle \Phi^-|$ . Além disso,

$\sigma^0 = \mathbb{1}$ ,  $\sigma^1 = \sigma^x$ ,  $\sigma^2 = \sigma^y$  e  $\sigma^3 = \sigma^z$ , enquanto que  $\rho_{ch}$  é o operador densidade do canal quântico e  $\rho_{in}$  o operador densidade de entrada formado pelo estado a ser transmitido.

Tomemos, agora, o protocolo original descrito no tópico anterior como exemplo. Neste protocolo definimos que o qubit a ser teleportado por Alice seria  $|\phi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  (com  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  e, para simplificar,  $\alpha$  e  $\beta$  são reais), logo,  $\rho_{in} = |\phi\rangle\langle\phi|$ . Digamos que o canal quântico seja  $\rho_{ch} = |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|$ . Dessa forma, conforme a equação 4.30, o estado recebido por Bob  $\rho_{out}$  será

$$\begin{aligned} \rho_{out} = & Tr[E^0\rho_{ch}]\sigma^0\rho_{in}\sigma^0 + Tr[E^1\rho_{ch}]\sigma^1\rho_{in}\sigma^1 + \\ & + Tr[E^2\rho_{ch}]\sigma^2\rho_{in}\sigma^2 + Tr[E^3\rho_{ch}]\sigma^3\rho_{in}\sigma^3. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Novamente, Bob nada pode afirmar sobre a informação recebida enquanto Alice não realizar a medida e informá-lo classicamente. Seja, então, a medida de Alice realizada de forma que defina  $E^0 = |\Phi^-\rangle\langle\Phi^-|$ ,  $E^1 = |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|$ ,  $E^2 = |\Psi^+\rangle\langle\Psi^+|$  e  $E^3 = |\Phi^+\rangle\langle\Phi^+|$ . Além do mais, teremos  $Tr[E^0\rho_{ch}] = Tr[E^2\rho_{ch}] = Tr[E^3\rho_{ch}] = 0$  enquanto que  $Tr[E^1\rho_{ch}] = 1$ , logo, a equação 4.31 fica

$$\rho_{out} = \sigma^1\rho_{in}\sigma^1 = \sigma^x\rho_{in}\sigma^x, \quad (4.32)$$

e a operação local feita por Bob para recuperar a informação enviada é operar esta expressão através de  $\sigma^x$ , pois  $\sigma^x\sigma^x = \mathbb{1}$ . Dessa forma,

$$\rho_{out} = \sigma^x\sigma^x\rho_{in}\sigma^x\sigma^x = \rho_{in}. \quad (4.33)$$

A tabela a seguir mostra as possíveis medições de Alice, o qubit de Bob e as correções para o canal quântico  $\rho_{ch} = |\Psi^-\rangle\langle\Psi^-|$ .

Quando se trata da transmissão de dois qubits, que será o caso que iremos adotar no capítulo 6, a equação 4.30 é reescrita na forma (PERES, 1996; YEO, 2002; ZHANG, 2007)

$$\rho_{out} = \sum_{i,j=0}^3 p_i p_j (\sigma^i \otimes \sigma^j) \rho_{in} (\sigma^i \otimes \sigma^j), \quad (4.34)$$

onde,  $p_i = Tr[E^i\rho_{ch}]$ , em que  $E^i = (\sigma^i \otimes \mathbb{1}) E^0 (\sigma^i \otimes \mathbb{1})$ . Podemos escrever estes operadores de projeção  $E^i$  da seguinte forma:  $E^i = (\mathbb{1} \otimes \sigma^i) E^0 (\mathbb{1} \otimes \sigma^i)$ .

Tabela 4.2 – Os resultados possíveis das medidas de Alice que definem  $E^0$ , os respectivos qubits de Bob  $\rho_{out}$  e as correções, operações feitas por Bob. Sendo  $\sigma^x \sigma^x = \sigma^y \sigma^y = \sigma^z \sigma^z = \mathbb{1}$ .

Resultado de Alice	Qubit de Bob	Operação Local
$E^0 =  \Psi^-\rangle \langle \Psi^- $	$\rho_{out} = \sigma^0 \rho_{in} \sigma^0$	$\mathbb{1} \Rightarrow \rho_{out} = \mathbb{1} \sigma^0 \rho_{in} \sigma^0 \mathbb{1} = \rho_{in}$
$E^0 =  \Phi^-\rangle \langle \Phi^- $	$\rho_{out} = \sigma^1 \rho_{in} \sigma^1$	$\sigma^x \Rightarrow \rho_{out} = \sigma^x \sigma^1 \rho_{in} \sigma^1 \sigma^x = \rho_{in}$
$E^0 =  \Phi^+\rangle \langle \Phi^+ $	$\rho_{out} = \sigma^2 \rho_{in} \sigma^2$	$\sigma^y \Rightarrow \rho_{out} = \sigma^y \sigma^2 \rho_{in} \sigma^2 \sigma^y = \rho_{in}$
$E^0 =  \Psi^+\rangle \langle \Psi^+ $	$\rho_{out} = \sigma^3 \rho_{in} \sigma^3$	$\sigma^z \Rightarrow \rho_{out} = \sigma^z \sigma^3 \rho_{in} \sigma^3 \sigma^z = \rho_{in}$

Fonte: (GOMES, 2012)

- **Fidelidade**

Ao que se refere à teoria e aos processos de comunicação, espera-se que toda informação transmitida seja bem sucedida, ou seja, que a informação recebida seja o mais fiel possível a informação enviada. Nesse contexto, basicamente, a fidelidade é o ente físico que carrega a informação sobre a probabilidade do sucesso da transmissão, ou seja, é através da fidelidade que identificamos o quão eficiente é o meio de comunicação. Juntamente a fidelidade tem-se, também, os ruídos (SHANNON; WEAVER, 1998), os quais são interpretados como perturbações que distorcem a mensagem transmitida, interferindo diretamente na fidelidade.

Como a fidelidade  $F$  nos mostra a probabilidade de obter o sucesso de se transmitir informações por um determinado meio de comunicação, teremos  $0 \leq F \leq 1$ . Dessa forma, podemos utilizá-la no contexto do teletransporte quântico. Nesse caso, utilizaremos a quantização da fidelidade introduzida em 1994 por Richard Jozsa, a qual é uma generalização para estados puros ou mistos, e definida como (JOZSA, 1994; SCHUMACHER; NIELSEN, 1996)

$$F = \langle \Psi_{in} | \rho_{out} | \Psi_{in} \rangle. \quad (4.35)$$

Por outro lado, temos a fidelidade média  $F_A$ , a qual deve ser  $2/3 < F_A \leq 1$  para que a transmissão seja efetivada como bem sucedida (HARDY; SONG, 2001b; HARDY; SONG, 2001a) e é definida da seguinte forma

$$F_A = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi F \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \quad (4.36)$$

Note que, utilizando os dados desenvolvidos no t3pico acima sobre o procolo original de teletransporte qu4ntico, teremos  $|\Psi_{in}\rangle = |\phi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$  enquanto que  $\rho_{out} = \rho_{in}$ , conforme a equa33o 4.33. Portanto,  $\rho_{out} = |\phi\rangle\langle\phi| = |\Psi_{in}\rangle\langle\Psi_{in}|$ . Dessa forma, a equa33o 4.35 fica

$$F = \langle\Psi_{in}|\Psi_{in}\rangle\langle\Psi_{in}|\Psi_{in}\rangle = 1, \quad (4.37)$$

e, a equa33o 4.36 fica

$$F_A = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta \, d\theta = 1. \quad (4.38)$$

Logo, toda informa33o teletransportada utilizando protocolo original 3 transmitida sem que haja perda de informa33o, ou seja, este protocolo 3 maximamente eficiente.

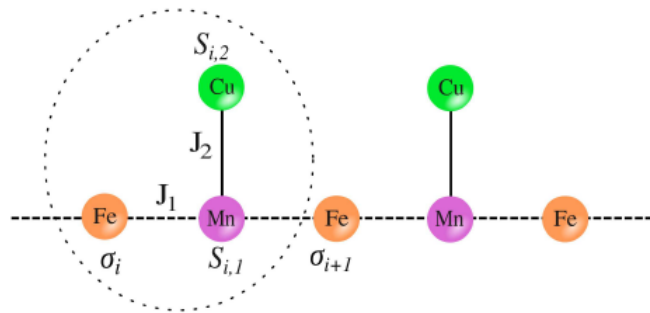
## 5 MODELO DE ISING-HEISENBERG

### 5.1 Exemplos de Modelos com Interação Ising-Heisenberg

Modelos magnéticos de baixa dimensionalidades vêm sendo bastante estudados nas últimas décadas de modo que sejam capazes de explicar as diversas características apresentadas pelos materiais magnéticos. Nesse sentido, os modelos híbridos com interação tipo Ising e Heisenberg ou, simplesmente, *modelo de Ising-Heisenberg* tem grande relevância, pois, além de unir a simplicidade do modelo de Ising com a riqueza do modelo de Heisenberg, este modelo híbrido apresenta resultados que possuem boa aproximação com os dados experimentais, das diversas propriedades térmicas, entre elas, a magnetização e a suscetibilidade magnética.

Dentre os diversos modelos híbridos existentes, citamos aqui, de forma bastante sucinta, alguns exemplos. Primeiramente, o modelo referente ao composto heterotrimetálico cuja fórmula abreviada é *Fe-Mn-Cu* com interação entre os primeiros vizinhos (SOUZA et al., 2019). Neste trabalho os autores utilizaram o método de matriz de transferência para obter a solução exata do modelo heterotrimetálico com interação Ising-XXZ, além disso, esta técnica permitiu quantificar o emaranhamento térmico através da concorrência. Esquematicamente, temos o composto heterotrimetálico na figura 5.1 e o Hamiltoniano do sistema na equação 5.1.

Figura 5.1 – Configuração esquemática do composto heterotrimetálico com interação Ising-XXZ.  $J_1$  representa a interação Ising entre os íons de *Fe* e *Mn*, enquanto  $J_2$  representa a interação Heisenberg entre os íons *Cu* e *Mn*.

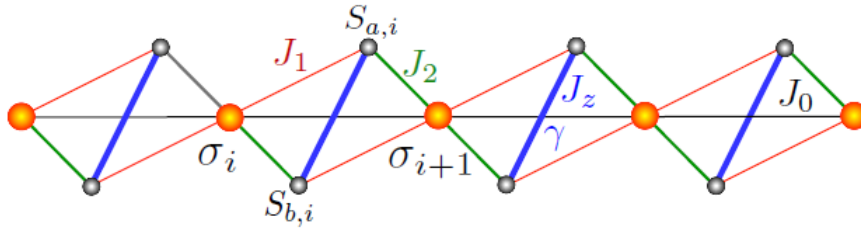


Fonte: (SOUZA et al., 2019)

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -J_1 \sum_{i=1}^N S_{i,1}^z (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) - J_2 \sum_{i=1}^N (\vec{S}_{i,1} \cdot \vec{S}_{i,2})_{\Delta} - \frac{h_1}{2} \sum_{i=1}^N (\sigma_i^z + \sigma_{i+1}^z) \\ & - h_2 \sum_{i=1}^N S_{i,1}^z - h_3 \sum_{i=1}^N S_{i,2}^z. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Outro modelo a ser citado é o referente a estruturas tipo diamante como o mineral azurite, cuja composição é  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ . Num trabalho recentemente publicado (ROJAS et al., 2017), considerou-se interações entre segundos vizinhos e, também fazendo uso da técnica de matriz de transferência, foi analisado o emaranhamento através da concorrência. O Hamiltoniano e a configuração esquemática desse modelo são dados pela equação 5.2 e pela figura 5.2, respectivamente.

Figura 5.2 – Representação da estrutura tipo diamante com interação tipo Ising-XYZ. Os parâmetros  $J_0$ ,  $J_1$  e  $J_2$  representam a interação tipo Ising, por outro lado, o parâmetro  $J_z$  representa a interação tipo Heisenberg.



Fonte: (ROJAS et al., 2017)

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[ J(1 + \gamma) S_{a,i}^x S_{b,i}^x + J(1 - \gamma) S_{a,i}^y S_{b,i}^y + J_z S_{a,i}^z S_{b,i}^z + \sigma_i (J_1 S_{a,i}^z + J_2 S_{b,i}^z) + \sigma_{i+1} (J_2 S_{a,i}^z + J_1 S_{b,i}^z) + J_0 \sigma_i \sigma_{i+1} - h(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) - \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right]. \quad (5.2)$$

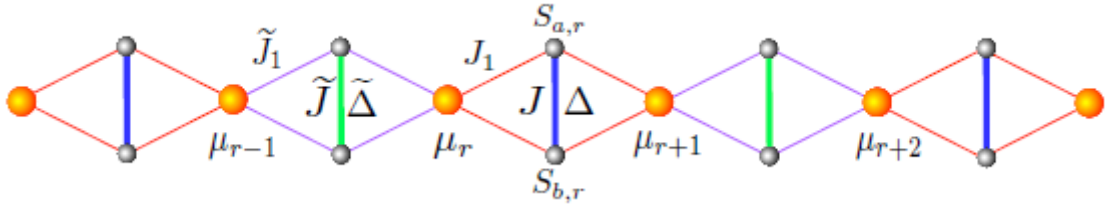
Finalmente, como último exemplo, citaremos o primeiro modelo com impurezas inseridas em uma cadeia Ising-Heisenberg tipo diamante, em particular, a cadeia Ising-XXZ com duas impurezas e um dímero puro isolado entre elas (CARVALHO et al., 2019). Neste trabalho, desenvolvido no Departamento de Física (DFI) da Universidade Federal de Lavras (UFLA), o interesse foi investigar o efeito que a inserção destas impurezas geravam no emaranhamento térmico no dímero puro isolado e, assim como nos exemplos anteriores, basearam-se no método de matriz de transferência para obter as características do emaranhamento térmico através da concorrência. A figura 5.3 representa esquematicamente esse modelo e o seu Hamiltoniano é dado por

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left( H_i^{host} + H_i^{imp} + H_i^{iso} \right), \quad (5.3)$$

onde,



Figura 5.3 – Configuração da estrutura tipo diamante com interação tipo Ising-XXZ. Os parâmetro  $J_1$  e  $\tilde{J}_1$  representam a interação tipo Ising com e sem impureza, respectivamente, e os parâmetros  $J$  e  $\tilde{J}$  representam a interação tipo Heisenberg com e sem impureza, nessa ordem.



Fonte: (CARVALHO et al., 2019)

$$H_i^{host} = J(\vec{S}_{a,i}, \vec{S}_{b,i})_{\Delta} + J_1(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z)(\mu_i + \mu_{i+1}) - h(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) - \frac{h}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (5.4)$$

para  $i = 1, 2, \dots, r-2, r+2, \dots, N$ , além disso,  $(\vec{S}_{a,i}, \vec{S}_{b,i})_{\Delta} = S_{a,i}^x S_{b,i}^x + S_{a,i}^y S_{b,i}^y + \Delta(S_{a,i}^z S_{b,i}^z)$ ,

$$H_i^{imp} = \tilde{J}(\vec{S}_{a,i}, \vec{S}_{b,i})_{\tilde{\Delta}} + \tilde{J}_1(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z)(\mu_i + \mu_{i+1}) - h(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) - \frac{h}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (5.5)$$

para  $i = r-1, r+1$ , em que  $(\vec{S}_{a,i}, \vec{S}_{b,i})_{\tilde{\Delta}} = S_{a,i}^x S_{b,i}^x + S_{a,i}^y S_{b,i}^y + \tilde{\Delta}(S_{a,i}^z S_{b,i}^z)$  e

$$H_i^{iso} = J(\vec{S}_{a,i}, \vec{S}_{b,i})_{\Delta} + J_1(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z)(\mu_i + \mu_{i+1}) - h(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) - \frac{h}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (5.6)$$

para  $i = r$ .

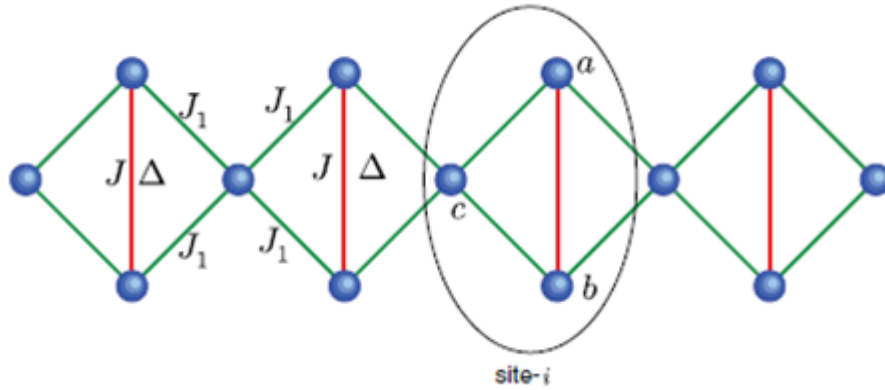
## 5.2 Cadeia Ising-XXZ com Estrutura tipo Diamante Anisotrópica

O azurite, ou azurita, é um mineral natural de coloração azul, de composição química  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$  (UNIVERSIDAD DE MALAGA, 1999) e que pode ser representado em forma aproximada por uma cadeia tipo diamante com interação Ising-Heisenberg. Utilizando este modelo, algumas propriedades desse mineral foram analisadas, como sua dinâmica, termodinâmica, platôs de magnetização e efeito magnetocalórico (HONECKER et al., 2011; PEREIRA; MOURA; LYRA, 2008; PEREIRA; MOURA; LYRA, 2009). Além disso, os resultados teóricos do modelo híbrido Ising-Heisenberg apresentam grande concordância com

os resultados experimentais dos platôs de magnetização, suscetibilidade e calor específico (RULE et al., 2008; KIKUCHI et al., 2005a; KIKUCHI et al., 2005b).

Dentro desse contexto, vamos focar no modelo de uma cadeia de spin-1/2 Ising-XXZ com estrutura tipo diamante (ROJAS et al., 2012). Aqui nós refizemos e apresentamos com mais detalhes os passos que esses autores apresentado em seu trabalho. Os autores consideraram a cadeia tipo diamante com interação tipo Ising entre as partículas nodais e as partículas intersticiais, enquanto que as partículas intersticiais são acopladas através da interação tipo Heisenberg, conforme a figura 5.4, na presença de campo magnético externo.

Figura 5.4 – Representação da cadeia tipo diamante com interação Ising-XXZ.  $J_1$  indica as interações Ising e  $J$  as interações Heisenberg.



Fonte: (ROJAS et al., 2012)

O Hamiltoniano desse modelo pode ser expresso como

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \quad (5.7)$$

onde

$$\mathcal{H}_i = J \left( \vec{S}_{a,i}, \vec{S}_{b,i} \right)_{\Delta} + J_1 \left( S_{a,i}^z + S_{b,i}^z \right) (\mu_i + \mu_{i+1}) - h_0 \left( S_{a,i}^z + S_{b,i}^z \right) - \frac{h}{2} (\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (5.8)$$

aqui temos  $(\vec{S}_{a,i}, \vec{S}_{b,i})_{\Delta} = S_{a,i}^x S_{b,i}^x + S_{a,i}^y S_{b,i}^y + \Delta (S_{a,i}^z S_{b,i}^z)$ . O parâmetro  $\Delta$  corresponde ao fator de anisotropia dos spins de Heisenberg,  $J$  é o parâmetro desta interação, enquanto  $\mu_i$  e  $J_1$  representam os spins e a interação de Ising, respectivamente. Neste Hamiltoniano tem-se, também, a interação dos spins Ising e Heisenberg com o campo magnético externo  $h$  e  $h_0$ , respectivamente, e por simplicidade consideramos  $h_0 = h$ .

Na forma matricial temos

$$(\vec{S}_{a,i}, \vec{S}_{b,i})_{\Delta} = \begin{bmatrix} \frac{\Delta}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{\Delta}{4} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{\Delta}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\Delta}{4} \end{bmatrix}, \quad (5.9)$$

e

$$S_{a,i}^z + S_{b,i}^z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}. \quad (5.10)$$

Consequentemente, via diagonalização, obtém-se os autovalores em função dos valores de spin  $\mu_i$  e  $\mu_{i+1}$

$$\varepsilon_1(\mu_i, \mu_{i+1}) = \frac{J\Delta}{4} + \left(J_1 - \frac{h}{2}\right)(\mu_i + \mu_{i+1}) - h, \quad (5.11)$$

$$\varepsilon_2(\mu_i, \mu_{i+1}) = \frac{J}{2} - \frac{J\Delta}{4} - \frac{h}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (5.12)$$

$$\varepsilon_3(\mu_i, \mu_{i+1}) = -\frac{J}{2} - \frac{J\Delta}{4} - \frac{h}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (5.13)$$

$$\varepsilon_4(\mu_i, \mu_{i+1}) = \frac{J\Delta}{4} - \left(J_1 + \frac{h}{2}\right)(\mu_i + \mu_{i+1}) + h, \quad (5.14)$$

e seus respectivos autovetores, na base  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$ , são dados por

$$|\varphi_1\rangle = |00\rangle, \quad (5.15)$$

$$|\varphi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle), \quad (5.16)$$

$$|\varphi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle), \quad (5.17)$$

$$|\varphi_4\rangle = |11\rangle. \quad (5.18)$$

• **Diagrama de Fases**

O interesse inicial é estudar os diagramas de fases dessa cadeia de Ising-XXZ tipo diamante foi discutido no capítulo 2. A figura 5.5 mostra dois estados (emaranhado e não emaranhado) nos diagramas de fases à temperatura zero. Os estados de mínima energia são expressos como (ROJAS et al., 2012)

$$|ENT\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_3\rangle_i \otimes |\mu\rangle_i, \quad (5.19)$$

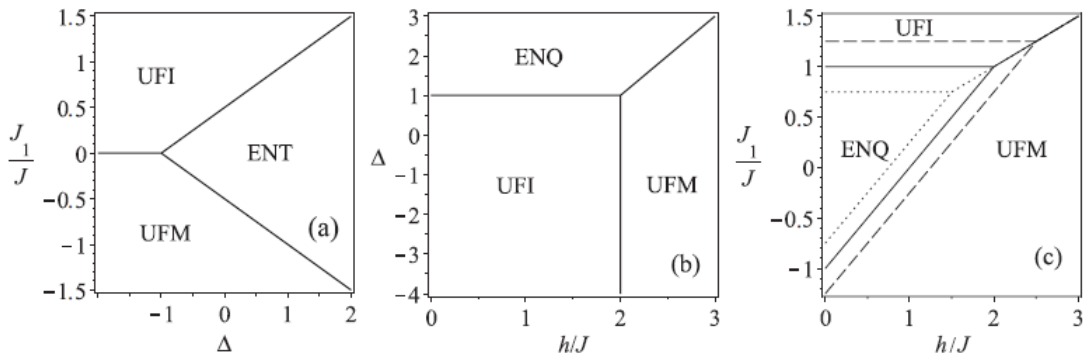
$$|ENQ\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_3\rangle_i \otimes |+\rangle, \quad (5.20)$$

$$|UFI\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_1\rangle_i \otimes |-\rangle, \quad (5.21)$$

$$|UFM\rangle = \prod_{i=1}^N |\varphi_1\rangle_i \otimes |+\rangle, \quad (5.22)$$

onde  $|\mu\rangle_i$  representa os valores  $\pm 1/2$  do  $i$ -ésimo sítio. Além disso, a partir do autovetor da equação 5.17, verifica-se que  $|ENT\rangle$  é um estado emaranhado e frustrado, por outro lado,  $|ENQ\rangle$  é um estado emaranhado ferrimagnético, enquanto que  $|UFI\rangle$  e  $|UFM\rangle$  são estados não emaranhados ferrimagnético e ferromagnético, respectivamente.

Figura 5.5 – Diagramas de fases à temperatura zero. O estado emaranhado na fase frustrada é indicado por ENT, enquanto que o estado emaranhado na fase ferrimagnética é denotado por ENQ. O estado não emaranhado na fase ferrimagnética é indicado por UFI e o estado ferromagnético não emaranhado é representado por UFM. Em (a)  $h/J = h_0J = 0$ , em (b)  $J_1/J = 1$  e  $h/J = h_0J$  e em (c)  $\Delta = 1$  e  $h/J = h_0J$ .



Fonte: (ROJAS et al., 2012)

Na figura 5.5 (a) é plotado o diagrama de fases  $J_1/J$  versus  $\Delta$  para  $h/J = 0$ . A energia do estado fundamental do estado emaranhado  $|ENT\rangle$  é dada por  $E_{ENT} = -1/2 - \Delta/4$ , por outro

lado, para o estado  $|UFI\rangle$  é  $E_{ENT} = -J_1/J + \Delta/4$  e para o estado  $|UFM\rangle$  é  $E_{ENT} = J_1/J + \Delta/4$ . O limite entre as fases UFI e UFM se dá simplesmente para  $J_1/J = 0$ , por outro lado, o limite entre as fases UFI e ENT é expresso por  $J_1/J = \Delta/2 + 1/2$  e o limite entre as fases UFM e ENT é dado por  $J_1/J = -\Delta/2 - 1/2$ .

Agora, na figura 5.5 (b), é ilustrado o diagrama de fases  $\Delta$  versus  $h/J$  para  $J_1/J = 1$ . Nesse caso, a energia mínima dos estados  $|UFM\rangle$ ,  $|ENQ\rangle$  e  $|UFI\rangle$  é, respectivamente,  $E_{UFM} = 1 + \Delta/4 - 3h/2J$ ,  $E_{ENQ} = -1/2 - \Delta/4 - h/2J$  e  $E_{UFI} = -1 + \Delta/4 - h/2J$ . Também temos que o limite entre as fases UFI e UFM é dado por  $h/J = 2$ , enquanto que o limite entre as fases ENQ e UFI é indicado por  $\Delta = 1$ , ao passo que o limite entre as fases ENQ e UFM é expresso por  $\Delta = 2h/J - 3$ .

Por fim, na figura 5.5 (c) é esboçado o diagrama de fases  $J_1/J$  versus  $h/J$  para  $\Delta = 1$  (linha contínua),  $\Delta = 0,5$  (linha pontilhada),  $\Delta = 1,5$  (linha tracejada) e  $h/J = h_0/J$ . Aqui, as energias  $E_{ENQ} = -3/4 - h/2J$ ,  $E_{UFI} = 1/4 - J_1/J - h/2J$  e  $E_{UFM} = 1/4 + J_1/J - 3h/2J$  são as energias mínimas dos estado  $|ENQ\rangle$ ,  $|UFI\rangle$  e  $|UFM\rangle$ , respectivamente. As fases ENQ e UFI são limitadas por  $J_1/J = 1$  quando  $\Delta = 1$  (ou por  $J_1/J = 0,75$  quando  $\Delta = 0,5$ , ou por  $J_1/J = 1,25$  quando  $\Delta = 1$ ), por outro lado, as fases UFI e UFM são limitadas por  $J_1 = h/2$  para qualquer um dos três valores de  $\Delta$ , enquanto que as fases ENQ e UFM são limitadas por  $J_1/J = h/J - 1$  para  $\Delta = 1$  (ou por  $J_1/J = h/J - 0,75$  para  $\Delta = 0,5$ , ou por  $J_1 = h$  para  $\Delta = 1,5$ ).

### • Função de Partição e Operador Densidade

Tendo como foco a análise das grandezas térmicas, primeiramente faz-se necessária a obtenção da função de partição (equação 3.5), a qual é solucionada a partir do método da matriz de transferência (equação 3.6). Os pesos de Boltzmann em função dos spins Ising  $\mu$  e seu primeiro vizinho  $\mu'$  são definidos por

$$\omega(\mu, \mu') = \sum_{i=1}^N e^{-\beta \varepsilon_i(\mu, \mu')}, \quad (5.23)$$

a função de partição da cadeia Ising-XXZ tipo diamante é dada em termos dos pesos de Boltzmann como

$$Z_N = \sum_{\{\mu\}} \omega(\mu_1, \mu_2) \omega(\mu_2, \mu_3) \dots \omega(\mu_N, \mu_1). \quad (5.24)$$

Assim, utilizando a matriz de transferência  $W$ , de acordo com a equação 3.10, teremos  $Z_N = \sum_{\{\mu\}} \langle \mu_1 | W | \mu_2 \rangle \dots \langle \mu_N | W | \mu_1 \rangle = Tr(W^N)$ .

Agora, após diagonalizar  $W$ , conforme a equação 3.14, obtemos

$$Z_N = \text{Tr} \begin{bmatrix} \Lambda_+^N & 0 \\ 0 & \Lambda_-^N \end{bmatrix} = \Lambda_+^N + \Lambda_-^N, \quad (5.25)$$

em que  $\Lambda_+$  e  $\Lambda_-$  são os autovalores da matriz de transferência  $W$  dados por

$$\Lambda_{\pm} = \frac{w_{++} + w_{--} \pm Q}{2}, \quad (5.26)$$

onde  $Q = \left[ (w_{++} - w_{--})^2 + 4w_{+-}^2 \right]^{1/2}$ ,  $w_{++} \equiv \omega\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ ,  $w_{--} \equiv \omega\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$ ,  $w_{+-} \equiv \omega\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$  e  $w_{-+} \equiv \omega\left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$ . Como  $\Lambda_+ > \Lambda_-$ , no limite termodinâmico  $N \rightarrow \infty$ , finalmente a função de partição será

$$Z_N = \Lambda_+^N. \quad (5.27)$$

O próximo objetivo é obter o operador densidade. Para atingir este objetivo, inicialmente é definido o operador  $\varrho(\mu, \mu')$  em função dos spins Ising  $\mu$  e seu vizinho mais próximo  $\mu'$ .

$$\varrho(\mu, \mu') = \sum_{i=1}^N e^{-\beta \varepsilon_i(\mu, \mu')} |\varphi_i\rangle \langle \varphi_i| \quad (5.28)$$

e sua forma matricial é

$$\varrho = \begin{bmatrix} \varrho_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \varrho_{2,2} & \varrho_{2,3} & 0 \\ 0 & \varrho_{3,2} & \varrho_{3,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \varrho_{4,4} \end{bmatrix}, \quad (5.29)$$

aqui, os elementos da matriz são dados por

$$\varrho_{1,1} = e^{-\beta \varepsilon_1(\mu, \mu')}, \quad (5.30)$$

$$\varrho_{2,2} = \frac{1}{2} \left[ e^{-\beta \varepsilon_2(\mu, \mu')} + e^{-\beta \varepsilon_3(\mu, \mu')} \right] = \varrho_{3,3}, \quad (5.31)$$

$$\varrho_{2,3} = \frac{1}{2} \left[ e^{-\beta \varepsilon_2(\mu, \mu')} - e^{-\beta \varepsilon_3(\mu, \mu')} \right] = \varrho_{3,2}, \quad (5.32)$$

$$\varrho_{4,4} = e^{-\beta \varepsilon_4(\mu, \mu')}. \quad (5.33)$$

A seguir, utilizando o valor médio de cada elemento do operador  $\varrho(\mu, \mu')$ , é possível construir o operador densidade reduzida  $\rho$ . Explicitamente, os elementos do operador densidade reduzido para um bloco localizado no  $r$ -ésimo sítio são dados pela seguinte expressão (equação 4.18)

$$\rho_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\mu\}} \omega(\mu_1, \mu_2) \dots \omega(\mu_{r-1}, \mu_r) \varrho_{i,j}(\mu_r, \mu_{r+1}) \omega(\mu_{r+1}, \mu_{r+2}) \dots \omega(\mu_N, \mu_1). \quad (5.34)$$

Semelhantemente ao que se foi feito para a função de partição na seção 3.1, utilizando a técnica da matriz de transferência, chega-se a equação a seguir

$$\rho_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(W^{r-1} P_{i,j} W^{N-r}), \quad (5.35)$$

onde

$$P_{i,j} = \begin{bmatrix} \varrho_{i,j}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) & \varrho_{i,j}(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \\ \varrho_{i,j}(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) & \varrho_{i,j}(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \end{bmatrix}. \quad (5.36)$$

A correspondente matriz  $U$  que diagonaliza a matriz de transferência é dada por

$$U = \begin{bmatrix} \Lambda_+ - w_{--} & \Lambda_- - w_{--} \\ w_{+-} & w_{+-} \end{bmatrix}, \quad (5.37)$$

e sua matriz inversa é

$$U^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{Q} & -\frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \\ -\frac{1}{Q} & \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \end{bmatrix}, \quad (5.38)$$

finalmente a equação 5.35 pode ser escrita da seguinte forma

$$\rho_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(D_1 \dots D_{r-1} U^{-1} P_{i,j} U D_{r+1} \dots D_N) = \frac{1}{Z_N} \text{Tr}(U^{-1} P_{i,j} U D^{N-1}), \quad (5.39)$$

$$\rho_{i,j} = \frac{\text{Tr}\left(U^{-1} P_{i,j} U \begin{bmatrix} \Lambda_+^{N-1} & 0 \\ 0 & \Lambda_-^{N-1} \end{bmatrix}\right)}{\Lambda_+^N + \Lambda_-^N}, \quad (5.40)$$

Vamos, agora, efetuar gradativamente os produtos entre estas matrizes presentes nesta equação 5.40, de modo que, inicialmente, utilizando as equações 5.38 e 5.36 teremos

$$U^{-1}P_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(-+) & \frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(--) \\ -\frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(-+) & -\frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(--) \end{bmatrix}, \quad (5.41)$$

onde denotamos  $\varrho_{i,j}(++) \equiv \varrho_{i,j}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ,  $\varrho_{i,j}(+-) \equiv \varrho_{i,j}(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ ,  $\varrho_{i,j}(-+) \equiv \varrho_{i,j}(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  e  $\varrho_{i,j}(--) \equiv \varrho_{i,j}(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$  agora, utilizando a equação 5.37, obtemos

$$U^{-1}P_{ij}U = \begin{bmatrix} \mathcal{K} & \mathcal{G} \\ \mathcal{O} & \mathcal{L} \end{bmatrix}, \quad (5.42)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{K} = & \left[ \frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(-+) \right] (\Lambda_+ - w_{--}) + \\ & + \left[ \frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(--) \right] w_{+-}, \end{aligned} \quad (5.43)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{G} = & \left[ \frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(-+) \right] (\Lambda_- - w_{--}) + \\ & + \left[ \frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(--) \right] w_{+-}, \end{aligned} \quad (5.44)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{O} = & \left[ -\frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(-+) \right] (\Lambda_+ - w_{--}) + \\ & + \left[ -\frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \tilde{\varrho}_{i,j}(--) \right] w_{+-}, \end{aligned} \quad (5.45)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \left[ -\frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(-+) \right] (\Lambda_- - w_{--}) + \\ & + \left[ -\frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \varrho_{i,j}(--) \right] w_{+-}, \end{aligned} \quad (5.46)$$

substituindo a equação 5.42 na equação 5.40 teremos



$$\rho_{i,j} = \frac{\text{Tr} \left( \begin{bmatrix} \mathcal{K}\Lambda_+^{N-1} & \mathcal{G}\Lambda_-^{N-1} \\ \mathcal{O}\Lambda_+^{N-1} & \mathcal{L}\Lambda_-^{N-1} \end{bmatrix} \right)}{\Lambda_+^N + \Lambda_-^N} = \frac{\mathcal{K}\Lambda_+^{N-1} + \mathcal{L}\Lambda_-^{N-1}}{\Lambda_+^N + \Lambda_-^N}. \quad (5.47)$$

Partindo das devidas álgebras a serem efetuadas nas equações 6.68 e 6.71 para expandirmos os elementos  $\mathcal{K}$  e  $\mathcal{L}$ , respectivamente, obteremos

$$\begin{aligned} \mathcal{K} = & \frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} (\Lambda_+ - w_{--}) - \frac{\varrho_{i,j}(-+)}{Qw_{+-}} (\Lambda_- - w_{--}) (\Lambda_+ - w_{--}) + \\ & + \frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} - \frac{\varrho_{i,j}(--)}{Q} (\Lambda_- - w_{--}), \end{aligned} \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{K} = & \frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2} - \frac{\varrho_{i,j}(-+)}{Qw_{+-}} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2} + \\ & + \frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} - \frac{\varrho_{i,j}(--)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2}, \end{aligned} \quad (5.49)$$

observe que a partir da equação 5.26,  $\Lambda_{\pm} - w_{--} = \frac{w_{++} - w_{--} \pm Q}{2}$  e, dessa forma, teremos

$$\begin{aligned} \mathcal{K} = & \frac{\varrho_{i,j}(++)}{2} + \frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--}}{2} - \frac{\varrho_{i,j}(-+)}{4Qw_{+-}} \left[ (w_{++} - w_{--})^2 - Q^2 \right] + \\ & + \frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} + \frac{\varrho_{i,j}(--)}{2} - \frac{\varrho_{i,j}(--)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--}}{2}, \end{aligned} \quad (5.50)$$

agora, como  $\left[ (w_{++} - w_{--})^2 - Q^2 \right] = -4w_{+-}^2$ ,

$$\begin{aligned} \mathcal{K} = & \frac{\varrho_{i,j}(++) + \varrho_{i,j}(--)}{2} + \frac{2\varrho_{i,j}(+-)w_{+-}}{Q} + \\ & + \frac{[\varrho_{i,j}(++) - \varrho_{i,j}(--)](w_{++} - w_{--})}{2Q}. \end{aligned} \quad (5.51)$$

Analogamente,

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & -\frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} (\Lambda_- - w_{--}) + \frac{\varrho_{i,j}(-+)}{Qw_{+-}} (\Lambda_+ - w_{--}) (\Lambda_- - w_{--}) + \\ & - \frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} + \frac{\varrho_{i,j}(--)}{Q} (\Lambda_+ - w_{--}), \end{aligned} \quad (5.52)$$

$$\mathcal{L} = -\frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2} + \frac{\varrho_{i,j}(-+)}{Qw_{+-}} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2} + \quad (5.53)$$

$$-\frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} + \frac{\varrho_{i,j}(--)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2},$$

$$\mathcal{L} = \frac{\varrho_{i,j}(++)}{2} - \frac{\varrho_{i,j}(++)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--}}{2} + \frac{\varrho_{i,j}(-+)}{4Qw_{+-}} \left[ (w_{++} - w_{--})^2 - Q^2 \right] + \quad (5.54)$$

$$-\frac{\varrho_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} + \frac{\varrho_{i,j}(--)}{2} - \frac{\varrho_{i,j}(--)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--}}{2},$$

$$\mathcal{L} = \frac{\varrho_{i,j}(++) + \varrho_{i,j}(--)}{2} - \frac{2\varrho_{i,j}(+-)w_{+-}}{Q} + \quad (5.55)$$

$$-\frac{[\varrho_{i,j}(++) - \varrho_{i,j}(--)](w_{++} - w_{--})}{2Q}.$$

Logo, após este árduo calculo algébrico e tomando o limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), o valor médio dos elementos do operador densidade reduzidos são dados por, conforme a equação 5.47,

$$\rho_{i,j} = \frac{\mathcal{K}\Lambda^{N-1}}{\Lambda_+^N} = \frac{\mathcal{K}}{\Lambda_+}, \quad (5.56)$$

logo, utilizando a equação 5.51, finalmente teremos

$$\rho_{i,j} = \frac{1}{\Lambda_+} \left\{ \frac{\varrho_{i,j}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) + \varrho_{i,j}(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})}{2} + \frac{2\varrho_{i,j}(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})w_{+-}}{Q} \right. \quad (5.57)$$

$$\left. + \frac{[\varrho_{i,j}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) - \varrho_{i,j}(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})](w_{++} - w_{--})}{2Q} \right\}.$$

Desse modo, o operador densidade reduzido  $\rho$  imerso na cadeia diamante pode ser construído como

$$\rho = \begin{bmatrix} \rho_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{2,2} & \rho_{2,3} & 0 \\ 0 & \rho_{3,2} & \rho_{3,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \rho_{4,4} \end{bmatrix}. \quad (5.58)$$

• **Emaranhamento Térmico**

O próximo objetivo é quantificar o emaranhamento existente na cadeia Ising-XXZ tipo diamante. Para isso, será utilizada a concorrência, a qual é construída através da matriz  $R$  (HILL; WOOTTERS, 1997; WOOTTERS, 1998; ROJAS et al., 2012). A matriz  $R$  definida em equação 4.16 é dada por

$$R = \rho \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y) \cdot \rho^* \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y), \quad (5.59)$$

onde  $\rho$  é o operador densidade,  $\rho^*$  seu complexo conjugado e  $\sigma^y$  a matriz de Pauli. E a concorrência é definida em termos dos autovalores da matriz  $R$  como (equação 4.17)

$$\mathcal{C}(\rho) = \max \left\{ 0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4} \right\}, \quad (5.60)$$

onde  $\lambda_i$  são os valores próprios em ordem decrescente da matriz  $R$ . Como o operador densidade  $\rho$  é uma "matriz tipo  $X$ ", a concorrência pode ser reescrita, em geral, da seguinte forma (WOOTTERS, 1998; TORRICO et al., 2014)

$$\mathcal{C}(\rho) = 2 \max \left\{ 0, |\rho_{1,4}| - \sqrt{\rho_{2,2}\rho_{3,3}}, |\rho_{2,3}| - \sqrt{\rho_{1,1}\rho_{4,4}} \right\}. \quad (5.61)$$

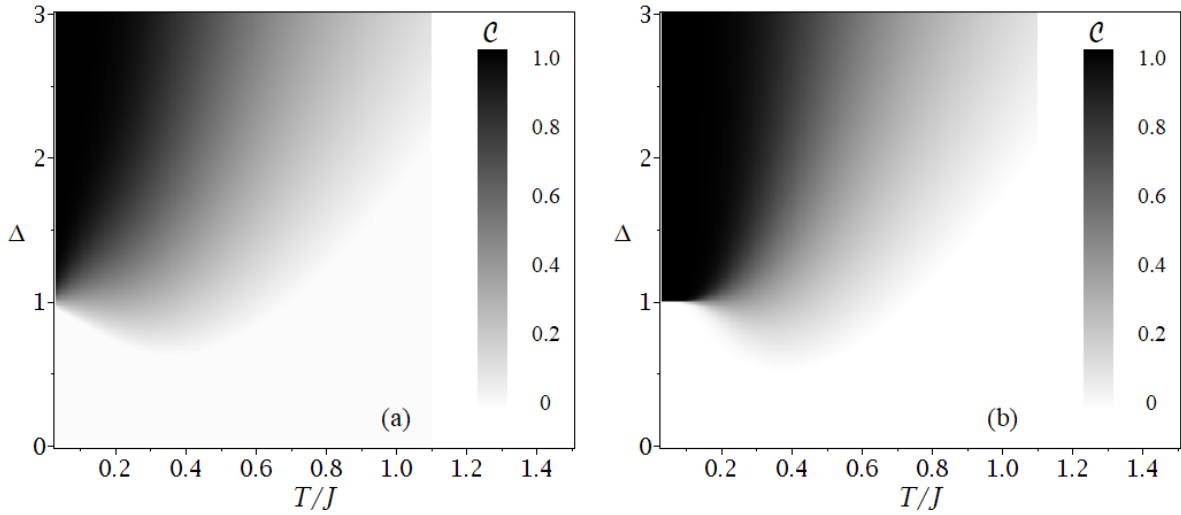
Logo, a correspondente concorrência para o modelo estudado pode ser reduzida a

$$\mathcal{C}(T) = 2 \max \left\{ 0, |\rho_{2,3}| - \sqrt{\rho_{1,1}\rho_{4,4}} \right\}. \quad (5.62)$$

De posse da concorrência é possível plotar diversos gráficos para analisar o comportamento do emaranhamento térmico. Com o intuito de realizar comparações como o mesmo modelo com uma impureza mostrado no capítulo 6, estudaremos os gráficos da densidade da concorrência e da concorrência em função da temperatura  $T/J$  com um valor fixo de  $J_1/J = 1$  e para alguns valores de campo magnético  $h$ , conforme mostrado nas figuras 5.6 e 5.7, respectivamente.

• **Concorrência**

Figura 5.6 – Gráfico de densidade de concorrência  $\mathcal{C}$  como função de  $T/J$  e  $\Delta$ . A cor preta corresponde a região maximamente emaranhada, enquanto a cor branca representa a região não emaranhada e a região cinza expressa uma região parcialmente emaranhada. Em (a) exibe-se a concorrência  $\mathcal{C}$  na ausência do campo magnético  $h$  e em (b) mostra-se  $\mathcal{C}$  para  $h/J = 1$ .

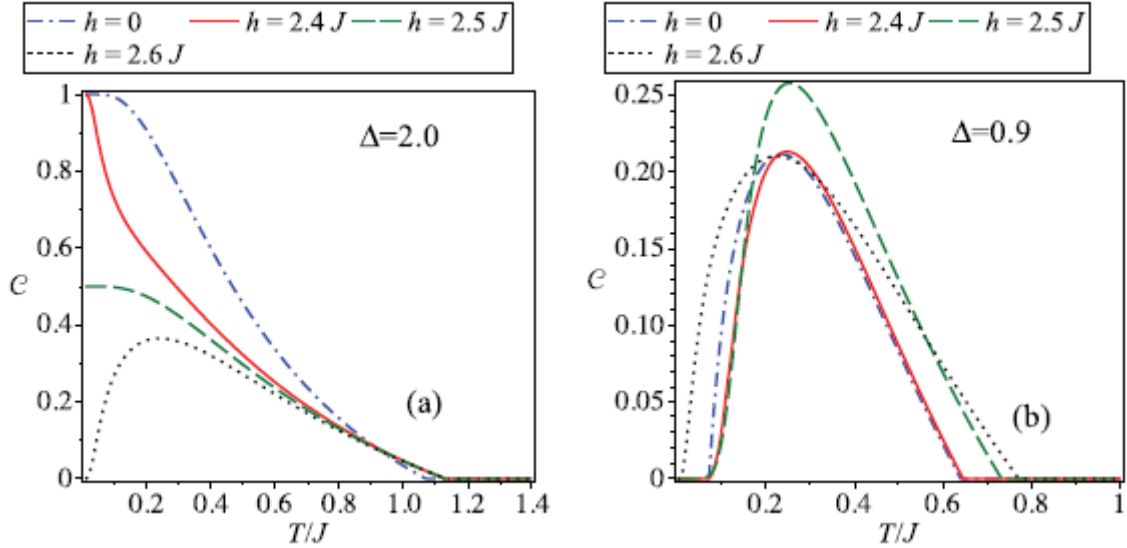


Fonte: Adaptado (ROJAS et al., 2012)

A densidade de concorrência mostrada na figura 5.6 está em função de  $T/J$  e  $\Delta$ , com o valor fixo de  $J_1/J = 1$ . A região em preto sinaliza o emaranhamento máximo ( $\mathcal{C} = 1$ ), enquanto o branco é a região não emaranhada ( $\mathcal{C} = 0$ ) e a região em cinza corresponde aos diferentes graus de emaranhamento ( $0 < \mathcal{C} < 1$ ). Para altas temperaturas a região difusa aumenta, enquanto que para baixas temperatura a fronteira entre a região emaranhada e não emaranhada torna-se mais nítida. Na figura 5.6 (a) mostra-se que o emaranhamento é máximo apenas para  $\Delta \geq 1$ , em  $T = 0$ , na ausência de campo magnético, enquanto que a concorrência é sempre menor que 1 para  $\Delta < 1$  em baixas temperaturas. A concorrência  $\mathcal{C}$  torna-se menor com o aumento da temperatura e o emaranhamento desaparece em altas temperaturas. Agora, a figura 5.6 (b) mostra a concorrência  $\mathcal{C}$  para  $h/J = 1$ , a concorrência tem um comportamento semelhante ao da figura 5.6 (a), exceto que o emaranhamento é máximo para  $\Delta = 1$  até temperaturas  $T/J \approx 0,2$ , isso indica o fortalecimento do emaranhamento na presença do campo magnético.

A concorrência como função da temperatura  $T/J$  para o valor fixo  $J_1/J = 1$  é mostrado na figura 5.7 para vários valores do campo magnético. Na figura 5.7 (a) ilustramos a concorrência para  $\Delta = 2, 0$ , a concorrência atinge o valor máximo  $\mathcal{C} = 1$  para campo magnético nulo em baixas temperaturas, enquanto que em altas temperaturas o emaranhamento desaparece subitamente, a temperatura limiar ocorre em  $T_{lh}/J \approx 1,1$ , como visto na linha tracejada por

Figura 5.7 – Concorrência em função da temperatura  $T/J$  para um valor fixo de  $J_1/J = 1$ . Em (a) exibem-se a concorrência para  $\Delta = 2$  e em (b) exibem-se a concorrência para  $\Delta = 0,9$ .



Fonte: (ROJAS et al., 2012)

pontos. Por outro lado, para campo magnético forte, o emaranhamento diminui e, na maioria dos casos, é menor que na ausência do campo magnético. No caso da linha contínua, onde  $h/J = 2,4$ , a concorrência atinge o valor máximo  $C = 1$  somente em temperaturas muito baixas, embora a temperatura limiar  $T_{th}/J$  seja ligeiramente maior de que na ausência do campo magnético. Para campo magnético  $h/J = 2,5$ , o valor máximo atingido pela concorrência é por volta de  $C = 0,5$  à temperatura nula, como indica a linha tracejada. No caso em que  $h/J = 2,6$ , representado pela linha pontilhada, o sistema é não emaranhado a temperatura zero e, em seguida, a temperatura baixa próxima de  $T/J \approx 0,3$  a concorrência atinge o valor máximo de  $C \approx 0,38$ . Já na figura 5.7 (b) mostra-se o comportamento da concorrência em relação a temperatura  $T/J$  para o valor do parâmetro de anisotropia  $\Delta = 0,9$  e de diferentes valores para o campo magnético. Nesta configuração o sistema é fracamente emaranhado e o pico gira em torno de  $T/J \approx 0,3$ . A temperatura zero tem-se o sistema não emaranhado para todos os valores de campo magnético considerado e a temperatura limiar é de  $T_{th}/J \approx 0,64$  para o intervalo  $0 \leq h/J \lesssim 2,4$ , por outro lado, para campos  $h \gtrsim 2,5$  a temperatura limiar é  $T_{th}/J \approx 0,75$ .

## 6 ESTUDO DOS EFEITOS DE UMA IMPUREZA NAS CORRELAÇÕES QUÂNTICAS EM UMA CADEIA ISING-XXZ TIPO DIAMANTE

As teorias de recursos quânticos (STRELTSOV et al., 2018; STRELTSOV; ADESSO; PLENIO, 2017) desempenham um papel central no processamento de informação quântica. Em particular, o emaranhamento e a coerência quântica são recursos para aplicações em tecnologias quânticas, isto é, comunicação e computação quântica (BENNETT et al., 1993; AMICO et al., 2008). Por outro lado, o emaranhamento quântico é uma das características mais fascinantes da teoria quântica, e este é considerado como um recurso físico essencial para computação quântica e informação quântica. A cadeia de Heisenberg é um dos sistemas quânticos mais simples que exhibe emaranhamento. Por esta razão, os modelos de spin Heisenberg foram extensivamente estudados em sistemas de matéria condensada (KAMTA; STARACE, 2002; ARNESEN; BOSE; VEDRAL, 2001; WANG, 2001; MAZIERO et al., 2010; ÇAKMAK; KARPAT; FANCHINI, 2015).

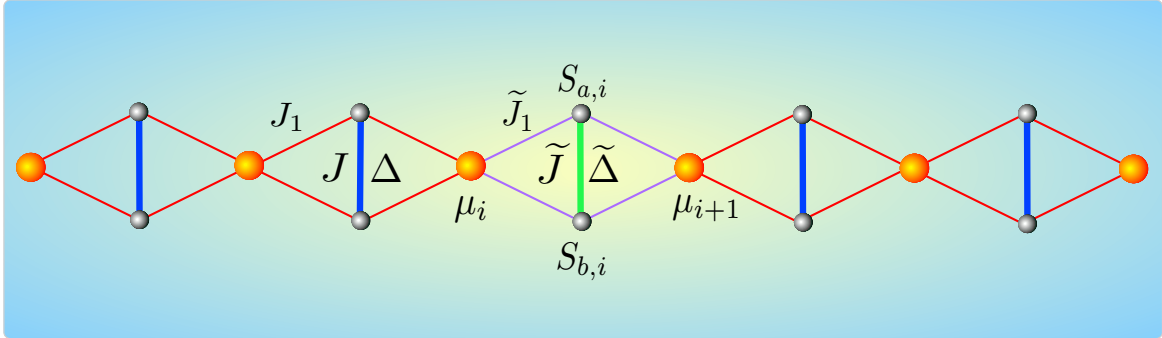
Neste capítulo apresentamos os resultados originais e inéditos da dissertação, a investigação detalhada da influência de uma única impureza inserida na cadeia de spin-1/2 Ising-XXZ com estrutura tipo diamante, resultados que publicamos em 2019 (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019). O spin impuro é definido por uma mudança local nos acoplamentos dos primeiros vizinhos. Nosso estudo abrangerá, inicialmente, o emaranhamento térmico e a coerência quântica. Posteriormente, faremos um estudo sobre o efeito da impureza incorporada na cadeia de spins no teletransporte quântico. Mostraremos que os parâmetros de impurezas incorporados em nosso modelo podem gerar um significativo aumento do emaranhamento e da coerência quântica e do teletransporte quântico quando comparado com o modelo original anisotrópico.

### 6.1 O Modelo

Nesta seção, apresentamos o hamiltoniano do modelo spin-1/2 Ising-XXZ em uma cadeia tipo diamante com uma impureza e sob um campo magnético externo  $h$ . O modelo consiste em spins Heisenberg intersticiais ( $\vec{S}_{a,i}$ ,  $\vec{S}_{b,i}$ ) e spins Ising ( $\mu_i, \mu_{i+1}$ ) nos nodos locais, como mostra a figura 6.1. O hamiltoniano total do modelo pode ser escrito como

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \quad (6.1)$$

Figura 6.1 – Representação esquemática da cadeia Ising-XXZ tipo diamante com uma impureza inserida no  $i$ -ésimo bloco da célula unitária primitiva. Os parâmetros  $\Delta$ ,  $J_1$  e  $J$  representam, respectivamente, a anisotropia do sistema, a interação tipo Ising e a interação tipo Heisenberg. Por outro lado,  $\tilde{\Delta}$ ,  $\tilde{J}_1$  e  $\tilde{J}$  indicam esses mesmos parâmetros porém para a plaqueta com a impureza.  $S_{a,i}$  são os spins de Heisenberg e  $\mu_i$  são os spins de Ising.



Fonte: (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019)

aqui,  $\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_i^{host} + \mathcal{H}_i^{imp}$ , onde  $\mathcal{H}_i^{host}$  é o Hamiltoniano da cadeia hospedeira, o qual pode ser expresso da seguinte forma

$$\mathcal{H}_i^{host} = J(S_{a,i}, S_{b,i})_{\Delta} + J_1 \left( S_{a,i}^z + S_{b,i}^z \right) (\mu_i + \mu_{i+1}) - h \left( S_{a,i}^z + S_{b,i}^z \right) - \frac{h}{2} (\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (6.2)$$

para  $i = 1, 2, \dots, r-1, r+1, \dots, N$ .

Enquanto, o Hamiltoniano que representa a impureza  $\mathcal{H}_i^{imp}$  é definido por

$$\mathcal{H}_i^{imp} = \tilde{J}(S_{a,i}, S_{b,i})_{\tilde{\Delta}} + \tilde{J}_1 \left( S_{a,i}^z + S_{b,i}^z \right) (\mu_i + \mu_{i+1}) - h \left( S_{a,i}^z + S_{b,i}^z \right) - \frac{h}{2} (\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (6.3)$$

aqui fixamos  $i = r$ . Os parâmetros  $J$  e  $\Delta$  denotam a interação XXZ dentro do dímero de Heisenberg, enquanto as interações entre os spins nodais-intersticiais estão representadas pelos parâmetros  $J_1$ . Além disso,  $h$  denota o campo magnético longitudinal na direção  $z$ .

Por outro lado, os parâmetros de impurezas são fornecidos por  $\tilde{J} = J(1 + \alpha)$ ,  $\tilde{\Delta} = \Delta(1 + \gamma)$  e  $\tilde{J}_1 = J_1(1 + \eta)$ , onde  $\alpha$ ,  $\gamma$  e  $\eta$  denotam a intensidade da impureza, de modo que, se  $\alpha = \gamma = \eta = 0$  temos o modelo original visto na seção 5.2. Após cálculo direto, os autovalores para o dímero XXZ do hamiltoniano  $\mathcal{H}_i^{host}$  acima pode ser obtido como

$$\varepsilon_{i1}(\mu_i, \mu_{i+1}) = \frac{J\Delta}{4} + \left(J_1 - \frac{h}{2}\right)(\mu_i + \mu_{i+1}) - h, \quad (6.4)$$

$$\varepsilon_{i2}(\mu_i, \mu_{i+1}) = \frac{J}{2} - \frac{J\Delta}{4} - \frac{h}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (6.5)$$

$$\varepsilon_{i3}(\mu_i, \mu_{i+1}) = -\frac{J}{2} - \frac{J\Delta}{4} - \frac{h}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (6.6)$$

$$\varepsilon_{i4}(\mu_i, \mu_{i+1}) = \frac{J\Delta}{4} - \left(J_1 + \frac{h}{2}\right)(\mu_i + \mu_{i+1}) + h, \quad (6.7)$$

e os correspondentes auto-estados em termos da base  $\{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$  são dados por

$$|\varphi_{i1}\rangle = |00\rangle_i, \quad (6.8)$$

$$|\varphi_{i2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_i + |10\rangle_i), \quad (6.9)$$

$$|\varphi_{i3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_i - |10\rangle_i), \quad (6.10)$$

$$|\varphi_{i4}\rangle = |11\rangle_i. \quad (6.11)$$

Analogamente, para o dímero impuro, os autovalores de  $\mathcal{H}_i^{imp}$  podem ser obtidos por

$$\tilde{\varepsilon}_{i1}(\mu_i, \mu_{i+1}) = \frac{\tilde{J}\tilde{\Delta}}{4} + \left(\tilde{J}_1 - \frac{h}{2}\right)(\mu_i + \mu_{i+1}) - h, \quad (6.12)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{i2}(\mu_i, \mu_{i+1}) = \frac{\tilde{J}}{2} - \frac{\tilde{J}\tilde{\Delta}}{4} - \frac{h}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (6.13)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{i3}(\mu_i, \mu_{i+1}) = -\frac{\tilde{J}}{2} - \frac{\tilde{J}\tilde{\Delta}}{4} - \frac{h}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \quad (6.14)$$

$$\tilde{\varepsilon}_{i4}(\mu_i, \mu_{i+1}) = \frac{\tilde{J}\tilde{\Delta}}{4} - \left(\tilde{J}_1 + \frac{h}{2}\right)(\mu_i + \mu_{i+1}) + h, \quad (6.15)$$

e os respectivos auto-estados são



$$|\tilde{\varphi}_{i1}\rangle = |00\rangle_i, \quad (6.16)$$

$$|\tilde{\varphi}_{i2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_i + |10\rangle_i), \quad (6.17)$$

$$|\tilde{\varphi}_{i3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle_i - |10\rangle_i), \quad (6.18)$$

$$|\tilde{\varphi}_{i4}\rangle = |11\rangle_i, \quad (6.19)$$

onde  $i = r$ , em que  $r$  corresponde a posição do dímero com a impureza.

## 6.2 Função de Partição e Operador Densidade

Para estudar o emaranhamento térmico (que foi medido através da concorrência quântica) primeiramente precisamos obter a função de partição do nosso modelo de cadeia de spins tipo diamante. Este modelo pode ser resolvido exatamente através do método de matriz de transferência. Analogamente a seção 5.2, definimos os pesos de Boltzmann da impureza como

$$\tilde{\omega}(\mu_i, \mu_{i+1}) = \sum_{i=1}^4 e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_{ij}(\mu_i, \mu_{i+1})}, \quad (6.20)$$

onde  $\mu_i$  e  $\mu_{i+1}$  representam os spins vizinhos mais próximos. Logo, a função de partição da cadeia Ising-XXZ tipo diamante com uma impureza pode ser escrita em termos dos pesos de Boltzmann,

$$Z_N = \sum_{\{\omega\}} \omega(\mu_1, \mu_2) \dots \omega(\mu_{r-1}, \mu_r) \tilde{\omega}(\mu_r, \mu_{r+1}) \omega(\mu_{r+1}, \mu_{r+2}) \dots \omega(\mu_N, \mu_1). \quad (6.21)$$

Usando a notação de matriz de transferência, podemos escrever diretamente a função de partição da cadeia como

$$Z_N = \sum_{\{\mu\}} \langle \mu_1 | W | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | W | \mu_3 \rangle \dots \langle \mu_{r-1} | W | \mu_r \rangle \langle \mu_r | \tilde{W} | \mu_{r+1} \rangle \langle \mu_{r+1} | W | \mu_{r+2} \rangle \dots \langle \mu_{N-1} | W | \mu_N \rangle \langle \mu_N | W | \mu_{N-r} \rangle, \quad (6.22)$$

como  $\sum_{\mu_i} |\mu_i\rangle \langle \mu_i| = 1$  e  $\mu_1 = \mu_{N-r}$ , teremos, a exemplo da equação 3.10,

$$Z_N = \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | W \sum_{\mu_2} | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | W | \mu_3 \rangle \cdots \langle \mu_{r-1} | W \sum_{\mu_r} | \mu_r \rangle \langle \mu_r | \tilde{W} \sum_{\mu_{r+1}} | \mu_{r+1} \rangle \langle \mu_{r+1} | W | \mu_{r+2} \rangle \cdots \langle \mu_{N-1} | W \sum_{\mu_N} | \mu_N \rangle \langle \mu_N | W | \mu_{N-r} \rangle, \quad (6.23)$$

$$Z_N = \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | W_1 W_2 \cdots W_{r-1} \tilde{W}_r W_{r+1} \cdots W_{N-1} W_N | \mu_1 \rangle, \quad (6.24)$$

$$Z_N = \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | W^{r-1} \tilde{W}_r W^{N-r} | \mu_1 \rangle, \quad (6.25)$$

$$Z_N = Tr \left( W^{r-1} \tilde{W}_r W^{N-r} \right), \quad (6.26)$$

onde a matriz de transferência é expressa como

$$W = \begin{bmatrix} \omega \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) & \omega \left( \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \\ \omega \left( -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) & \omega \left( -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_{++} & w_{+-} \\ w_{-+} & w_{--} \end{bmatrix}. \quad (6.27)$$

De forma semelhante, também pode ser derivada a matriz de transferência  $\tilde{W}$  para impureza dada por

$$\tilde{W} = \begin{bmatrix} \tilde{\omega} \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) & \tilde{\omega} \left( \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \\ \tilde{\omega} \left( -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) & \tilde{\omega} \left( -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{w}_{++} & \tilde{w}_{+-} \\ \tilde{w}_{-+} & \tilde{w}_{--} \end{bmatrix}, \quad (6.28)$$

vale lembrar que os elementos da matriz de transferência são denotados como  $w_{++} \equiv \omega \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$ ,  $w_{+-} \equiv \omega \left( \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right)$ ,  $w_{-+} \equiv \omega \left( -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$  e  $w_{--} \equiv \omega \left( -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right)$ , analogamente, para os elementos da matriz de transferência da impureza,  $\tilde{w}_{++} \equiv \tilde{\omega} \left( \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$ ,  $\tilde{w}_{+-} \equiv \tilde{\omega} \left( \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right)$ ,  $\tilde{w}_{-+} \equiv \tilde{\omega} \left( -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right)$  e  $\tilde{w}_{--} \equiv \tilde{\omega} \left( -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right)$ .

Após realizar a diagonalização da matriz de transferência  $W$ , equação 6.27, os autovalores dessa matriz são dados pela equação 5.26. Portanto, a função de partição para cadeia finita sob condições de contorno periódicas é dada por

$$Z_N = Tr \left( U U^{-1} W_1 U U^{-1} \cdots U U^{-1} W_{r-1} U U^{-1} \tilde{W}_r U U^{-1} W_{r+1} U U^{-1} \cdots U U^{-1} W_N U U^{-1} \right), \quad (6.29)$$

sendo  $U$  e  $U^{-1}$  definidos pelas equações 5.37 e 5.38, respectivamente. Assim,

$$Z_N = \text{Tr} \left( U D_1 \dots D_{r-1} U^{-1} \tilde{W}_r U D_{r+1} \dots D_N U^{-1} \right) = \text{Tr} \left( D^{r-1} U^{-1} \tilde{W}_r U D^{N-r} \right), \quad (6.30)$$

$$Z_N = \text{Tr} \left( U^{-1} \tilde{W}_r U D^{N-1} \right) = \text{Tr} \left( U^{-1} \tilde{W}_r U \begin{bmatrix} \Lambda_+^{N-1} & 0 \\ 0 & \Lambda_-^{N-1} \end{bmatrix} \right). \quad (6.31)$$

Realizando o produto de maneira gradativa dessas matrizes da equação 6.31 até alcançarmos o traço, teremos, primeiramente utilizando as equações 5.38 e 6.28,

$$U^{-1} \tilde{W} = \begin{bmatrix} \frac{\tilde{w}_{++}}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{-+} & \frac{\tilde{w}_{+-}}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{--} \\ -\frac{\tilde{w}_{++}}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{-+} & -\frac{\tilde{w}_{+-}}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{--} \end{bmatrix}, \quad (6.32)$$

agora, dispo do equação 5.37, teremos o seguinte produto

$$U^{-1} \tilde{W} U = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}, \quad (6.33)$$

onde

$$a = \left[ \frac{\tilde{w}_{++}}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{-+} \right] (\Lambda_+ - w_{--}) + \left[ \frac{\tilde{w}_{+-}}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{--} \right] w_{+-}, \quad (6.34)$$

$$b = \left[ \frac{\tilde{w}_{++}}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{-+} \right] (\Lambda_- - w_{--}) + \left[ \frac{\tilde{w}_{+-}}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{--} \right] w_{+-}, \quad (6.35)$$

$$c = \left( -\frac{\tilde{w}_{++}}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{-+} \right) (\Lambda_+ - w_{--}) + \left( -\frac{\tilde{w}_{+-}}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{--} \right) w_{+-}, \quad (6.36)$$

$$d = \left( -\frac{\tilde{w}_{++}}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{-+} \right) (\Lambda_- - w_{--}) + \left( -\frac{\tilde{w}_{+-}}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}} \tilde{w}_{--} \right) w_{+-}, \quad (6.37)$$

finalmente, substituindo a equação 6.33 na equação 6.31, teremos,

$$Z_N = \text{Tr} \left( \begin{bmatrix} a \Lambda_+^{N-1} & b \Lambda_-^{N-1} \\ c \Lambda_+^{N-1} & d \Lambda_-^{N-1} \end{bmatrix} \right) = a \Lambda_+^{N-1} + d \Lambda_-^{N-1}. \quad (6.38)$$

Agora, realizando as devidas álgebras para expandir os elementos  $a$  e  $d$  (equações 6.34 e 6.37, respectivamente), teremos, primeiramente para a equação 6.34,

$$\begin{aligned}
a = & \frac{\tilde{w}_{++}}{Q} (\Lambda_+ - w_{--}) - \frac{\tilde{w}_{-+}}{Qw_{+-}} (\Lambda_- - w_{--}) (\Lambda_+ - w_{--}) + \\
& + \frac{\tilde{w}_{+-}w_{+-}}{Q} - \frac{\tilde{w}_{--}}{Q} (\Lambda_- - w_{--}),
\end{aligned} \tag{6.39}$$

utilizando equação 5.26, obtemos  $\Lambda_{\pm} - w_{--} = \frac{w_{++}-w_{--}\pm Q}{2}$ , logo,

$$\begin{aligned}
a = & \frac{\tilde{w}_{++}}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2} - \frac{\tilde{w}_{-+}}{Qw_{+-}} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2} + \\
& + \frac{\tilde{w}_{+-}w_{+-}}{Q} - \frac{\tilde{w}_{--}}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2},
\end{aligned} \tag{6.40}$$

$$\begin{aligned}
a = & \frac{\tilde{w}_{++}}{2} + \tilde{w}_{++} \frac{w_{++} - w_{--}}{2Q} - \frac{\tilde{w}_{-+}}{4Qw_{+-}} [(w_{++} - w_{--})^2 - Q^2] + \\
& + \frac{\tilde{w}_{+-}w_{+-}}{Q} - \tilde{w}_{--} \frac{w_{++} - w_{--}}{2Q} + \frac{\tilde{w}_{--}}{2},
\end{aligned} \tag{6.41}$$

como  $(w_{++} - w_{--})^2 - Q^2 = -4w_{+-}^2$ , então,

$$a = \frac{\tilde{w}_{++} + \tilde{w}_{--}}{2} + \frac{(\tilde{w}_{++} - \tilde{w}_{--})(w_{++} - w_{--})}{2Q} + \frac{2\tilde{w}_{+-}w_{+-}}{Q}, \tag{6.42}$$

portanto,

$$a = \frac{Q(\tilde{w}_{++} + \tilde{w}_{--}) + (w_{++} - w_{--})(\tilde{w}_{++} - \tilde{w}_{--}) + 4w_{+-}\tilde{w}_{+-}}{2Q}, \tag{6.43}$$

e, analogamente para a equação 6.37,

$$\begin{aligned}
d = & -\frac{\tilde{w}_{++}}{Q} (\Lambda_- - w_{--}) + \frac{\tilde{w}_{-+}}{Qw_{+-}} (\Lambda_+ - w_{--}) (\Lambda_- - w_{--}) + \\
& - \frac{\tilde{w}_{+-}w_{+-}}{Q} + \frac{\tilde{w}_{--}}{Q} (\Lambda_+ - w_{--}),
\end{aligned} \tag{6.44}$$

$$\begin{aligned}
d = & -\frac{\tilde{w}_{++}}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2} + \frac{\tilde{w}_{-+}}{Qw_{+-}} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2} + \\
& - \frac{\tilde{w}_{+-}w_{+-}}{Q} + \frac{\tilde{w}_{--}}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2},
\end{aligned} \tag{6.45}$$

$$d = \frac{\tilde{w}_{++}}{2} - \tilde{w}_{++} \frac{w_{++} - w_{--}}{2Q} + \left[ (w_{++} - w_{--})^2 - Q^2 \right] \frac{\tilde{w}_{-+}}{4Qw_{+-}} + \left( -\frac{\tilde{w}_{+-}w_{+-}}{Q} + \tilde{w}_{--} \frac{w_{++} - w_{--}}{2Q} + \frac{\tilde{w}_{--}}{2} \right), \quad (6.46)$$

$$d = \frac{\tilde{w}_{++} + \tilde{w}_{--}}{2} - \frac{(\tilde{w}_{++} - \tilde{w}_{--})(w_{++} - w_{--})}{2Q} - \frac{2\tilde{w}_{+-}w_{+-}}{Q}, \quad (6.47)$$

e, finalmente,

$$d = \frac{Q(\tilde{w}_{++} + \tilde{w}_{--}) - (w_{++} - w_{--})(\tilde{w}_{++} - \tilde{w}_{--}) - 4w_{+-}\tilde{w}_{+-}}{2Q}. \quad (6.48)$$

No limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ) a função de partição será simplificada. Assim, a partir da equação 6.38, obtemos  $Z_N = a\Lambda_+^{N-1}$ .

Nosso interesse inicial está focado no emaranhamento. Para atingir nosso objetivo é essencial obter o *operador densidade reduzido*  $\tilde{\rho}$  do dímero Heisenberg com a impureza. A fim de resumir esta abordagem, vamos definir o seguinte operador como uma função das partículas de spin Ising  $\mu_i$  e seu primeiro vizinho  $\mu_{i+1}$

$$\tilde{\rho}(\mu_i, \mu_{i+1}) = \sum_{i=1}^4 e^{-\beta \tilde{\epsilon}_{ij}(\mu_i, \mu_{i+1})} |\tilde{\phi}_{ij}\rangle \langle \tilde{\phi}_{ij}|, \quad (6.49)$$

em que  $\beta = 1/k_B T$ ,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  é a temperatura absoluta.

Na forma matricial temos  $\tilde{\rho}$  como

$$\tilde{\rho} = \begin{bmatrix} \tilde{\rho}_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\rho}_{2,2} & \tilde{\rho}_{2,3} & 0 \\ 0 & \tilde{\rho}_{3,2} & \tilde{\rho}_{3,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{\rho}_{4,4} \end{bmatrix}, \quad (6.50)$$

onde os elementos deste operador são dados por

$$\tilde{\varrho}_{1,1} = e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_{i1}(\mu_i, \mu_{i+1})}, \quad (6.51)$$

$$\tilde{\varrho}_{2,2} = \frac{1}{2} \left[ e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_{i2}(\mu_i, \mu_{i+1})} + e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_{i3}(\mu_i, \mu_{i+1})} \right] = \tilde{\varrho}_{3,3}, \quad (6.52)$$

$$\tilde{\varrho}_{2,3} = \frac{1}{2} \left[ e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_{i2}(\mu_i, \mu_{i+1})} - e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_{i3}(\mu_i, \mu_{i+1})} \right] = \tilde{\varrho}_{3,2}, \quad (6.53)$$

$$\tilde{\varrho}_{4,4} = e^{-\beta \tilde{\varepsilon}_{i4}(\mu_i, \mu_{i+1})}. \quad (6.54)$$

O valor médio de cada elemento do operador Heisenberg (equação 6.50) será usada para construir o operador densidade reduzido. Desse forma, a partir da equação 4.18, os elementos do operador de densidade reduzida  $\tilde{\rho}$  para impureza localizado no  $r$ -ésimo bloco (célula unitária), podem ser definidos por

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\mu\}} \omega(\mu_1, \mu_2) \cdots \omega(\mu_{r-1}, \mu_r) \tilde{\varrho}_{i,j}(\mu_r, \mu_{r+1}) \omega(\mu_{r+1}, \mu_{r+2}) \cdots \omega(\mu_N, \mu_1). \quad (6.55)$$

Usando a abordagem de matriz de transferência,  $\tilde{\rho}_{i,j}$  pode ser alternativamente reescrito como

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{i,j} = & \frac{1}{Z_N} \sum_{\{\mu\}} \langle \mu_1 | W | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | W | \mu_3 \rangle \cdots \langle \mu_{r-1} | W | \mu_r \rangle \langle \mu_r | \tilde{P}_{i,j} | \mu_{r+1} \rangle \langle \mu_{r+1} | W | \mu_{r+2} \rangle \cdots \\ & \langle \mu_{N-1} | W | \mu_N \rangle \langle \mu_N | W | \mu_{N-r} \rangle, \end{aligned} \quad (6.56)$$

onde

$$\tilde{P}_{i,j} = \begin{bmatrix} \tilde{\varrho}_{i,j}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) & \tilde{\varrho}_{i,j}(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \\ \tilde{\varrho}_{i,j}(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) & \tilde{\varrho}_{i,j}(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{\varrho}_{i,j}(++) & \tilde{\varrho}_{i,j}(+-) \\ \tilde{\varrho}_{i,j}(-+) & \tilde{\varrho}_{i,j}(--) \end{bmatrix}, \quad (6.57)$$

com  $\tilde{\varrho}_{i,j}(++) \equiv \tilde{\varrho}_{i,j}(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ ,  $\tilde{\varrho}_{i,j}(+-) \equiv \tilde{\varrho}_{i,j}(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ ,  $\tilde{\varrho}_{i,j}(-+) \equiv \tilde{\varrho}_{i,j}(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  e  $\tilde{\varrho}_{i,j}(--) \equiv \tilde{\varrho}_{i,j}(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$ . Seja  $\sum_{\mu_i} |\mu_i\rangle \langle \mu_i| = 1$  e  $\mu_1 = \mu_{N-r}$ , teremos

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{i,j} = & \frac{1}{Z_N} \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | W \sum_{\mu_2} | \mu_2 \rangle \langle \mu_2 | W | \mu_3 \rangle \cdots \langle \mu_{r-1} | W \sum_{\mu_r} | \mu_r \rangle \langle \mu_r | \tilde{P}_{i,j} \sum_{\mu_{r+1}} | \mu_{r+1} \rangle \langle \mu_{r+1} | \\ & W | \mu_{r+2} \rangle \cdots \langle \mu_{N-1} | W \sum_{\mu_N} | \mu_N \rangle \langle \mu_N | W | \mu_{N-r} \rangle, \end{aligned} \quad (6.58)$$

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | W_1 W_2 \cdots W_{r-1} \tilde{P}_{i,j} W_{r+1} \cdots W_{N-1} W_N | \mu_1 \rangle, \quad (6.59)$$

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \sum_{\mu_1} \langle \mu_1 | W^{r-1} \tilde{P}_{i,j} W^{N-r} | \mu_1 \rangle, \quad (6.60)$$

finalmente,

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left( W^{r-1} \tilde{P}_{i,j} W^{N-r} \right). \quad (6.61)$$

De modo similar ao que foi feito para a função de partição (equação 6.29), podemos escrever os elementos do operador densidade da seguinte forma

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}_{i,j} = & \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left( U U^{-1} W_1 U U^{-1} W_2 U U^{-1} \dots U U^{-1} W_{r-1} U U^{-1} \tilde{P}_{i,j} U U^{-1} W_{r+1} U U^{-1} \right. \\ & \left. W_{r+2} U U^{-1} \dots U U^{-1} W_N U U^{-1} \right), \end{aligned} \quad (6.62)$$

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left( U D_1 D_2 \cdots D_{r-1} U^{-1} \tilde{P}_{i,j} U D_{r+1} D_{r+2} \cdots D_N U^{-1} \right), \quad (6.63)$$

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left( D^{r-1} U^{-1} \tilde{P}_{i,j} U D^{N-r} \right) = \frac{1}{Z_N} \text{Tr} \left( U^{-1} \tilde{P}_{i,j} U D^{N-1} \right). \quad (6.64)$$

Finalmente, usando a equação 6.38, o valor médio dos elementos de matriz do operador densidade reduzido da impureza definidos na equação 6.55 devem ser expressos por

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{\text{Tr} \left( U^{-1} \tilde{P}_{i,j} U \begin{bmatrix} \Lambda_+^{N-1} & 0 \\ 0 & \Lambda_-^{N-1} \end{bmatrix} \right)}{a \Lambda_+^{N-1} + d \Lambda_-^{N-1}}. \quad (6.65)$$

Novamente, realizando gradativamente o produto entres essas matrizes, teremos, primeiramente utilizando as equações 5.38 e 6.57,

$$U^{-1}\tilde{P}_{ij} = \begin{bmatrix} \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(-+) & \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(--) \\ -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(-+) & -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(--) \end{bmatrix}, \quad (6.66)$$

agora, utilizando a equação 5.37, obtemos

$$U^{-1}\tilde{P}_{ij}U = \begin{bmatrix} \tilde{\mathcal{K}} & \tilde{\mathcal{G}} \\ \tilde{\mathcal{O}} & \tilde{\mathcal{L}} \end{bmatrix}, \quad (6.67)$$

onde

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{K}} &= \left[ \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(-+) \right] (\Lambda_+ - w_{--}) + \\ &+ \left[ \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(--) \right] w_{+-}, \end{aligned} \quad (6.68)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{G}} &= \left[ \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(-+) \right] (\Lambda_- - w_{--}) + \\ &+ \left[ \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} - \frac{(\Lambda_- - w_{--})}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(--) \right] w_{+-}, \end{aligned} \quad (6.69)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{O}} &= \left[ -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(-+) \right] (\Lambda_+ - w_{--}) + \\ &+ \left[ -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(--) \right] w_{+-}, \end{aligned} \quad (6.70)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}} &= \left[ -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(-+) \right] (\Lambda_- - w_{--}) + \\ &+ \left[ -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} + \frac{\Lambda_+ - w_{--}}{Qw_{+-}}\tilde{\varrho}_{i,j}(--) \right] w_{+-}, \end{aligned} \quad (6.71)$$

finalmente, substituindo a equação 6.67 na equação 6.65 teremos

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{\text{Tr} \left( \begin{bmatrix} \tilde{\mathcal{K}}\Lambda_+^{N-1} & \tilde{\mathcal{G}}\Lambda_-^{N-1} \\ \tilde{\mathcal{O}}\Lambda_+^{N-1} & \tilde{\mathcal{L}}\Lambda_-^{N-1} \end{bmatrix} \right)}{a\Lambda_+^{N-1} + d\Lambda_-^{N-1}} = \frac{\tilde{\mathcal{K}}\Lambda_+^{N-1} + \tilde{\mathcal{L}}\Lambda_-^{N-1}}{a\Lambda_+^{N-1} + d\Lambda_-^{N-1}}. \quad (6.72)$$



Vamos agora realizar as devidas álgebras das equações 6.68 e 6.71 para expandirmos os elementos  $\tilde{\mathcal{K}}$  e  $\tilde{\mathcal{L}}$ , respectivamente. Assim, da equação 6.68 teremos,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{K}} = & \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} (\Lambda_+ - w_{--}) - \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(-+)}{Qw_{+-}} (\Lambda_- - w_{--}) (\Lambda_+ - w_{--}) + \\ & + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} - \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{Q} (\Lambda_- - w_{--}), \end{aligned} \quad (6.73)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{K}} = & \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2} - \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(-+)}{Qw_{+-}} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2} + \\ & + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} - \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2}, \end{aligned} \quad (6.74)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{K}} = & \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{2} + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--}}{2} - \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(-+)}{4Qw_{+-}} \left[ (w_{++} - w_{--})^2 - Q^2 \right] + \\ & + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{2} - \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--}}{2}, \end{aligned} \quad (6.75)$$

$$\tilde{\mathcal{K}} = \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++) + \tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{2} + \frac{[\tilde{\varrho}_{i,j}(++) - \tilde{\varrho}_{i,j}(--)] (w_{++} - w_{--})}{2Q} + \frac{2\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)w_{+-}}{Q}, \quad (6.76)$$

e, finalmente,

$$\tilde{\mathcal{K}} = \frac{Q [\tilde{\varrho}_{i,j}(++) + \tilde{\varrho}_{i,j}(--)] + [\tilde{\varrho}_{i,j}(++) - \tilde{\varrho}_{i,j}(--)] (w_{++} - w_{--}) + 2\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)w_{+-}}{2Q}. \quad (6.77)$$

Analogamente, da equação 6.71 obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}} = & -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} (\Lambda_- - w_{--}) + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(-+)}{Qw_{+-}} (\Lambda_+ - w_{--}) (\Lambda_- - w_{--}) + \\ & - \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{Q} (\Lambda_+ - w_{--}), \end{aligned} \quad (6.78)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}} = & -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2} + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(-+)}{Qw_{+-}} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2} \frac{w_{++} - w_{--} - Q}{2} + \\ & -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--} + Q}{2}, \end{aligned} \quad (6.79)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{L}} = & \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{2} - \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--}}{2} + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(-+)}{4Qw_{+-}} \left[ (w_{++} - w_{--})^2 - Q^2 \right] + \\ & -\frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q} w_{+-} + \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{2} - \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{Q} \frac{w_{++} - w_{--}}{2}, \end{aligned} \quad (6.80)$$

$$\tilde{\mathcal{L}} = \frac{\tilde{\varrho}_{i,j}(++) + \tilde{\varrho}_{i,j}(--)}{2} - \frac{[\tilde{\varrho}_{i,j}(++) - \tilde{\varrho}_{i,j}(--)](w_{++} - w_{--})}{2Q} - \frac{2\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)w_{+-}}{Q}, \quad (6.81)$$

e, por fim,

$$\tilde{\mathcal{L}} = \frac{Q [\tilde{\varrho}_{i,j}(++) + \tilde{\varrho}_{i,j}(--)] - [\tilde{\varrho}_{i,j}(++) - \tilde{\varrho}_{i,j}(--)](w_{++} - w_{--}) - 4\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)w_{+-}}{2Q}. \quad (6.82)$$

Este resultado é válido para o número arbitrário  $N$  de células na cadeia tipo diamante. No limite termodinâmico ( $N \rightarrow \infty$ ), como  $\Lambda_+ > \Lambda_-$ , o valor médio dos elementos do operador densidade reduzido, após esta árdua manipulação algébrica, tornam-se, a partir da equação 6.72

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{\tilde{\mathcal{K}}\Lambda_+^{N-1}}{a\Lambda_+^{N-1}} = \frac{\tilde{\mathcal{K}}}{a}, \quad (6.83)$$

explicitamente, através das equações 6.43 e 6.77, teremos

$$\tilde{\rho}_{i,j} = \frac{Q [\tilde{\varrho}_{i,j}(++) + \tilde{\varrho}_{i,j}(--)] + (w_{++} - w_{--}) [\tilde{\varrho}_{i,j}(++) - \tilde{\varrho}_{i,j}(--)] + 4w_{+-}\tilde{\varrho}_{i,j}(+-)}{Q(\tilde{w}_{++} + \tilde{w}_{--}) + (w_{++} - w_{--})(\tilde{w}_{++} - \tilde{w}_{--}) + 4\tilde{w}_{+-}w_{+-}}. \quad (6.84)$$

De posse de todos os elementos do operador densidade reduzido, podemos escrevê-lo na forma matricial como

$$\tilde{\rho}(T) = \begin{bmatrix} \tilde{\rho}_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{\rho}_{2,2} & \tilde{\rho}_{2,3} & 0 \\ 0 & \tilde{\rho}_{3,2} & \tilde{\rho}_{3,3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{\rho}_{4,4} \end{bmatrix}. \quad (6.85)$$

Vale notar que este operador densidade reduzido da impureza é o operador Heisenberg médio-térmico de dois qubits, imerso na cadeia de diamantes e pode-se verificar que  $Tr(\tilde{\rho}) = 1$ .

### 6.3 O Emaranhamento Térmico e a Coerência Quântica da Impureza de Dois Qubits Heisenberg

Nesta seção, pretendemos estudar os efeitos da impureza de nosso modelo no emaranhamento térmico e na coerência quântica. O emaranhamento é um tipo especial de correlação quântica que surge somente em sistemas quânticos. Para quantificar o emaranhamento de qubits anisotrópicos de Heisenberg no modelo de Ising-Heisenberg em uma cadeia tipo diamante, usaremos a Concorrência (emaranhamento) dos dois qubits de Heisenberg (dímero), que interage com dois spins de Ising nodais. A Concorrência  $\mathcal{C}$  de Wootters é usada para medir o emaranhamento (HILL; WOOTTERS, 1997; WOOTTERS, 1998) e é fornecida pela equação 4.17, assim temos

$$\mathcal{C}(\tilde{\rho}) = \max \left\{ 0, \sqrt{\tilde{\lambda}_1} - \sqrt{\tilde{\lambda}_2} - \sqrt{\tilde{\lambda}_3} - \sqrt{\tilde{\lambda}_4} \right\}, \quad (6.86)$$

onde os  $\tilde{\lambda}_i$  ( $i = 1, 2, 3, 4$ ) são autovalores, em ordem decrescente, do operador  $\tilde{R}$  que é dado por

$$\tilde{R} = \tilde{\rho} \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y) \cdot \tilde{\rho}^* \cdot (\sigma^y \otimes \sigma^y), \quad (6.87)$$

aqui  $\tilde{\rho}$  é o operador de densidade da impureza,  $\tilde{\rho}^*$  denota o complexo conjugado desta matriz e  $\sigma^y$  é a matriz de Pauli.

Em nosso modelo, substituindo a equação 6.85 na equação 6.87, obtemos a concorrência da impureza de dois qubits de Heisenberg na forma (analogamente a equação 5.62)

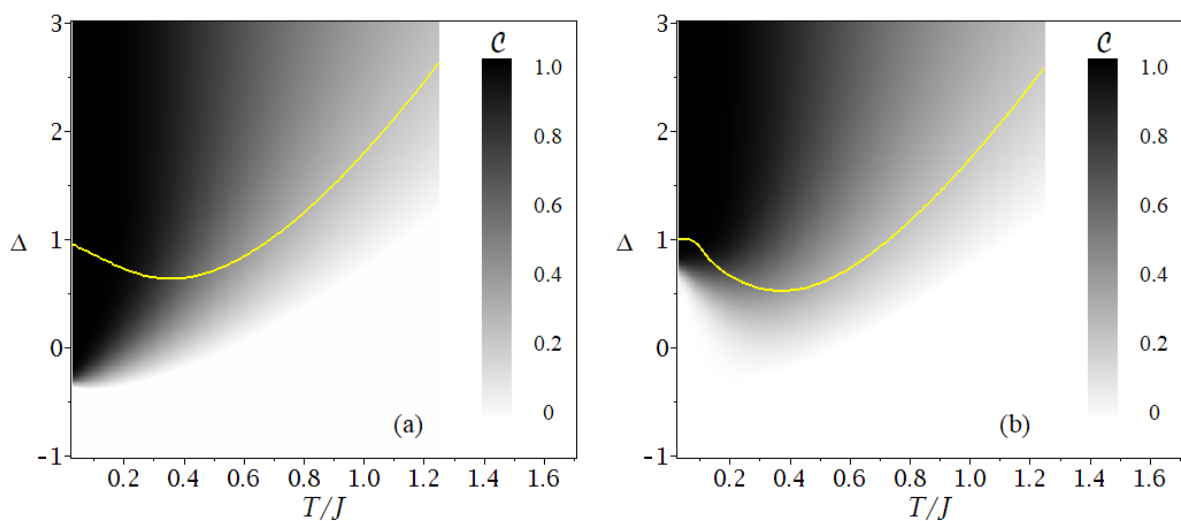
$$\mathcal{C}(\tilde{\rho}) = 2 \max \left\{ 0, |\tilde{\rho}_{2,3}| - \sqrt{\tilde{\rho}_{1,1} \tilde{\rho}_{4,4}} \right\}. \quad (6.88)$$

• **Concorrência**

O emaranhamento térmico em uma cadeia tipo diamantes Ising-XXZ sem impureza foi investigado em (ROJAS et al., 2012). Neste nosso trabalho estamos preocupados principalmente em investigar os efeitos e possíveis ganhos sobre o emaranhamento térmico causados pelo dímero impuro isolado na cadeia Ising-XXZ tipo diamante. Daqui em diante plotaremos as curvas do modelo original com linhas sólidas, enquanto para a cadeia Ising-XXZ tipo diamante com impureza usaremos linhas tracejadas. Além disso, com o intuito de obter um aprimoramento do emaranhamento, da coerência quântica e do teletransporte, fixamos os parâmetros da impureza como  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ , os quais influenciam nos parâmetros de Heisenberg ( $J$ ), de anisotropia ( $\Delta$ ) e de Ising ( $J_1$ ), respectivamente.

Vale lembrar que  $\tilde{J} = J(1 + \alpha)$ ,  $\tilde{\Delta} = \Delta(1 + \gamma)$  e  $\tilde{J}_1 = J_1(1 + \eta)$ , conseqüentemente, teremos  $\tilde{J} = J$ ,  $\tilde{\Delta} = 1,8\Delta$  e  $\tilde{J}_1 = 0,2J_1$ , portanto, ao fixarmos esses valores de  $\alpha$ ,  $\gamma$  e  $\eta$ , estamos indicando que nossa impureza consiste na deformação mecânica de uma única plaqueta situada na posição  $r$ , de modo que a interação Heisenberg (dímero intersticial na posição  $r$ ) no eixo  $z$  seja mais forte, ou seja, os spins estão mais próximos, enquanto que a interação Ising (spins nodal-intersticial) seja mais fraca, ou seja, os spins  $\mu_{r-1}$  e  $\mu_{r+1}$  estão mais afastados.

Figura 6.2 – Gráfico da densidade de concorrência  $\mathcal{C}$  como função de  $T/J$  e  $\Delta$ , enquanto os parâmetros de impureza são fixados  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ . Em (a) exibimos a concorrência  $\mathcal{C}$  na ausência do campo magnético e em (b) expressamos a concorrência  $\mathcal{C}$  para  $h/J = 1$ .

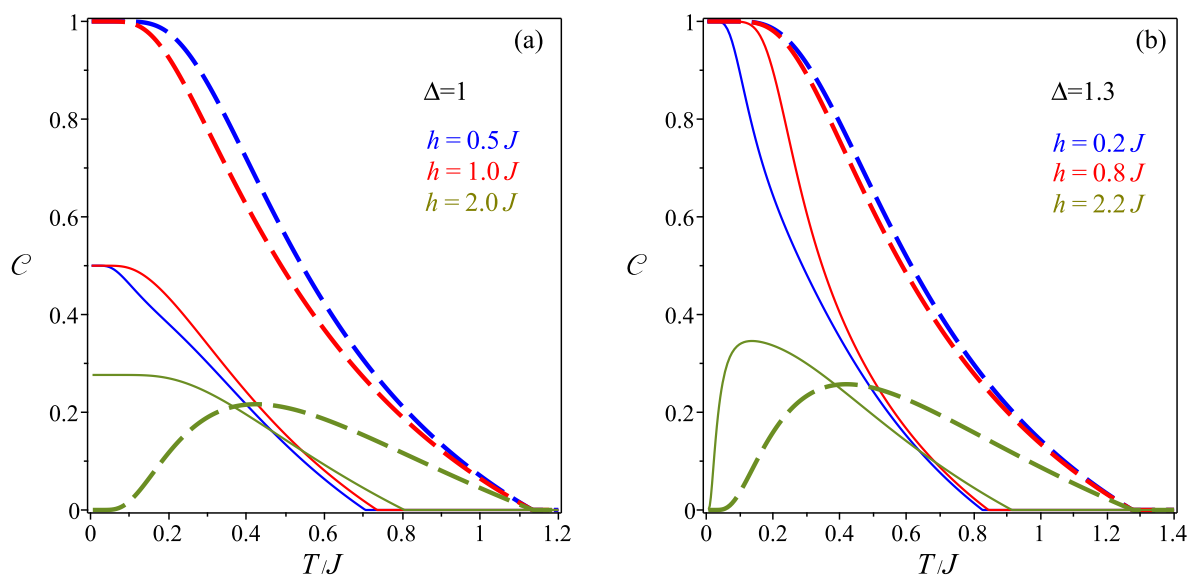


Fonte: Adaptado (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019)

Primeiramente, na figura 6.2, temos o gráfico da densidade de concorrência  $\mathcal{C}$  em função de  $T/J$  e  $\Delta$ , para valor fixo de  $J_1/J = 1$ . Nesta figura temos as regiões em preto, branco e cinza indicando, respectivamente, a região de emaranhamento máximo ( $\mathcal{C} = 1$ ), região

sem emaranhamento ( $\mathcal{C} = 0$ ) e região com diferentes graus de emaranhamento ( $0 < \mathcal{C} < 1$ ), além disso, a linha contínua em amarelo denota o limite de regiões emaranhadas para o caso original. Dessa forma, é notório que há um ganho de regiões emaranhadas com a inserção de uma impureza, como indica as regiões sombreadas abaixo da linha amarela. Além do mais, tanto na figura 6.2 (a) quanto na figura 6.2 (b) temos uma região em diversas tonalidades de cinza, a qual expressa um comportamento difuso para temperaturas elevadas. Na figura 6.2 (a) é mostrado o emaranhamento para campo magnético nulo, esta figura indica que o emaranhamento é máximo ( $\mathcal{C} = 1$ ) em baixas temperaturas para  $\Delta$  pequeno ( $\Delta \gtrsim -0,3$ ), por outro lado,  $0 < \mathcal{C} < 1$  em altas temperaturas para esses mesmos valores de  $\Delta$ . Na figura 6.2 (b) fixamos o campo magnético  $h/J = 1$ , esta figura mostra emaranhamento máximo  $\mathcal{C} = 1$  para  $\Delta \gtrsim 0,7$  a baixas temperaturas, por outro lado, para  $\Delta < 0,7$  não há emaranhamento em baixas temperaturas. É interessante observar que, nesse contexto, conforme aumenta-se a temperatura, subitamente surge um emaranhamento de baixa intensidade até que desaparece novamente em altas temperaturas (reentrância). Note, também, que a impureza permite sistemas maximamente emaranhados para  $\Delta < 1$ , enquanto que no caso original tem-se emaranhamento máximo apenas para  $\Delta > 1$ .

Figura 6.3 – Concorrência  $\mathcal{C}$  em função de  $T/J$  com  $J_1/J = 1$ . Para o modelo Ising-XXZ sem impurezas (curva sólida), temos  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0$  e  $\eta = 0$ . Por outro lado, quando consideramos a impureza em nosso modelo (curva tracejada), fixamos  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ . (a)  $\Delta = 1,0$ . (b)  $\Delta = 1,3$ .



Fonte: (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019)

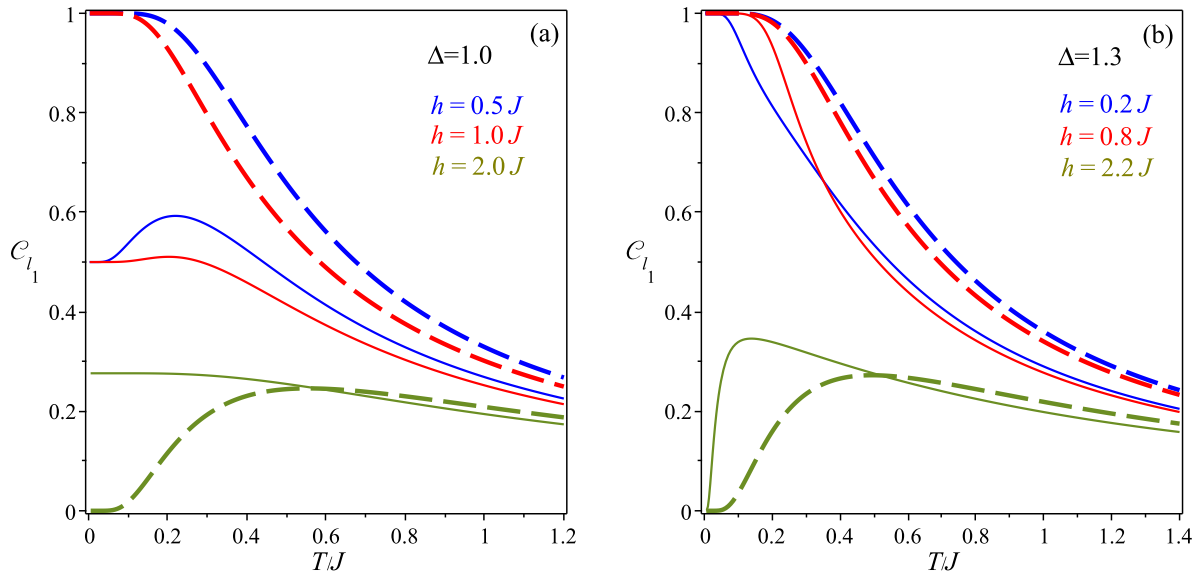
Na figura 6.3 (a), a concorrência  $\mathcal{C}$  em função da temperatura  $T/J$  é plotada para  $\Delta = 1$  (modelo isotrópico Ising-XXX no caso original) e vários valores do campo magnético  $h/J$ . Mostra-se que, para baixas temperaturas ( $0 \leq T/J \lesssim 0,1$ ) e campos magnéticos fracos ( $h = 0,5J$  e  $h = 1,0J$ ), o dímero de Heisenberg com impureza é maximamente emaranhado ( $\mathcal{C} = 1$ ), em contraste com o modelo original em que é parcialmente emaranhado ( $\mathcal{C} = 0,5$ ), portanto, o comportamento de concorrência é mais robusto na impureza. Por outro lado, para campo magnético forte ( $h = 2,0J$ ) a concorrência é nula para baixas temperaturas no modelo com impureza. Contudo, quando a temperatura aumenta, temos um nascimento súbito (reentrância) do emaranhamento até o valor máximo  $\mathcal{C} \approx 0,22$  e, finalmente, desaparece completamente na temperatura  $T/J \approx 1,12$ . Deve-se notar, nesse caso, que o modelo original é parcialmente emaranhado a baixas temperaturas e decai com o aumento da temperatura, em contraste com o modelo com a impureza, onde o emaranhamento é criado/reforçado com o aumento da temperatura ( $0,1 \lesssim T/J \lesssim 0,4$ ), além disso, note que a temperatura limiar no caso original e com impureza é  $0,7 \leq T_{th}/J \leq 0,8$  e  $T_{th}/J \approx 1,12$ , respectivamente, ou seja, a impureza nos permite o emaranhamento em temperatura limiar maior. Na figura 6.3 (b), plotamos a concorrência  $\mathcal{C}$  como uma função da temperatura  $T/J$  para o parâmetro anisotrópico  $\Delta = 1,3$  e vários valores do campo magnético. Para campo magnético fraco ( $h = 0,2J$  e  $h = 0,8J$ ) e para a temperatura no intervalo  $0 \leq T/J \lesssim 0,2$ , o emaranhamento térmico é máximo para ambos os modelos (com e sem impureza), porém, quando a temperatura aumenta, é possível observar uma forte influência da impureza, o emaranhamento é mais robusto e a temperatura limiar aumenta no modelo com impureza atingindo o valor  $T_{th}/J \approx 1,27$ , enquanto que no modelo original  $0,82 \lesssim T_{th}/J \lesssim 0,92$ . Para campos magnéticos fortes ( $h = 2,2J$ ), a concorrência é nula para ambos os modelos. Entretanto, pode-se observar que, a medida que a temperatura aumenta, ocorre o fenômeno de reentrância do emaranhamento e, no modelo com impureza, a concorrência atinge o valor máximo  $\mathcal{C} \approx 0,26$ , desaparecendo subitamente em  $T/J \approx 1,27$ .

Cabe ressaltar que a implementação da impureza de spin neste modelo é gerado por processo de deformação mecânica, seja tensão ou compressão, na estrutura da cadeia.

- ***Norma- $l_1$  da Coerência***

A fim de quantificar a coerência quântica em nosso modelo, a norma- $l_1$   $\mathcal{C}_{l_1}$  versus a temperatura  $T/J$  é plotada na figura 6.4 para diferentes valores do campo magnético e para o parâmetro anisotrópico  $\Delta = 1$  e  $\Delta = 1,3$ , em (a) e (b), respectivamente. Na figura 6.4 (a), observamos um aumento dramático na norma- $l_1$   $\mathcal{C}_{l_1}$  para campos magnéticos fracos ( $h = 0,5J$

Figura 6.4 – A norma- $l_1$  da coerência  $\mathcal{C}_{l_1}$  em função da temperatura  $T/J$  para  $J_1/J = 1,0$  e diferentes valores do campo magnético  $h$ . Em (a)  $\Delta = 1,0$  e em (b)  $\Delta = 1,3$ . Os parâmetros de impureza são definidos como  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ . As curvas sólidas e tracejadas representam o modelo original e com impureza, respectivamente.

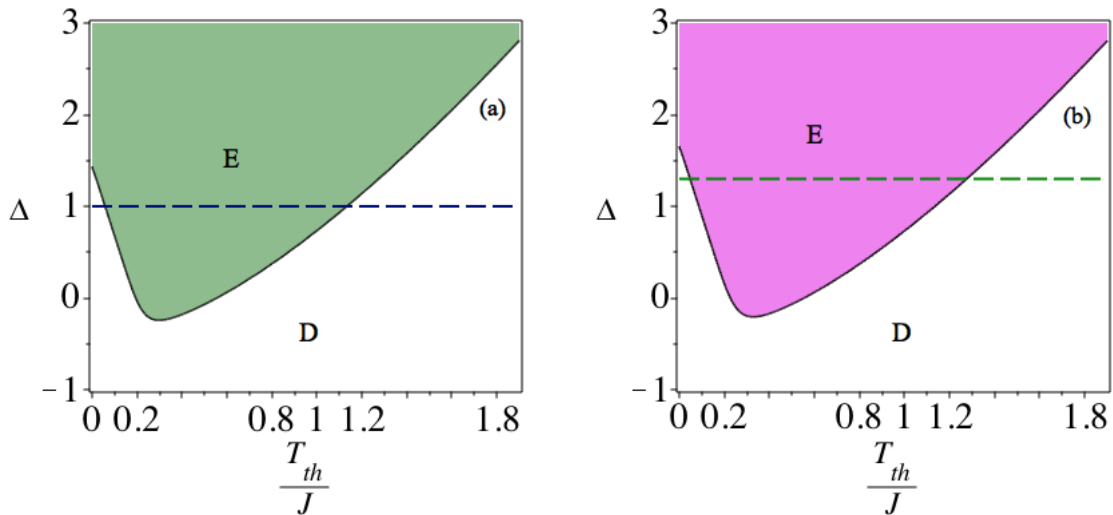


Fonte: (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019)

e  $h = 1,0J$ ), tornando-a máxima ( $\mathcal{C}_{l_1} = 1$ ) quando a impureza é incluída no modelo. Por outro lado, para o caso do campo magnético forte,  $h = 2,0J$ , a cadeia diamante com impureza tem um comportamento singular na coerência quântica. Neste caso e para baixas temperaturas ( $0 \leq T \lesssim 0,06$ ), a coerência quântica é nula e, subitamente, o sistema aumenta a coerência, atingindo o valor máximo  $\mathcal{C}_{l_1} \approx 0,25$  e diminuindo monotonicamente a medida que  $T/J$  aumenta. Na figura 6.4 (b), os resultados para  $\mathcal{C}_{l_1}$  indicam que, para baixas temperaturas ( $0 \leq T \lesssim 0,05$ ) e campos magnéticos fracos ( $h = 0,2J$  e  $h = 0,8J$ ), a coerência quântica é máxima ( $\mathcal{C}_{l_1} = 1,0$ ) para ambos os modelos (com e sem a impureza). No entanto, para temperaturas  $T/J \gtrsim 0,15$ , a coerência quântica com a impureza é mais robusta para o caso de campo magnético fraco ( $h = 0,2J$  e  $h = 0,8J$ ) em comparação com o modelo original. Por outro lado, para campo magnético forte,  $h = 2,2J$ , o comportamento da coerência quântica é muito semelhante ao da concorrência, ver figura 6.3 (b), no início, é nulo e logo ocorre um nascimento súbito até atingir o valor  $\mathcal{C}_{l_1} \approx 0,28$ , em seguida diminui monotonicamente com o aumento da temperatura. É interessante notar que tanto a concorrência quanto a coerência quântica têm o mesmo comportamento em baixas temperaturas, mas quando a temperatura aumenta, a coerência quântica predomina sobre a concorrência, ou seja, sobre o entrelaçamento quântico (ver figuras 6.3 e 6.4).

• *Temperatura Limiar*

Figura 6.5 – A concorrência  $\mathcal{C}$ , dependendo do parâmetro de anisotropia e da temperatura limiar, quando  $J_1/J = 1$  e  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ . As regiões verde e lilás indicam a região em que o sistema está emaranhado (E), enquanto que a região em branco representa o sistema não emaranhado (D). Em (a)  $h/J = 2,0$  e  $\Delta = 1,0$  (linha azul tracejada), enquanto em (b)  $h/J = 2,2$  e  $\Delta = 1,3$  (linha verde tracejada).



Fonte: (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019)

Também investigamos os efeitos da temperatura no comportamento da concorrência e da coerência quântica na presença de um forte campo magnético externo. As figuras 6.3 e 6.4 mostram um comportamento de reentrância na concorrência e na coerência quântica (norma- $l_1$ ) para campos magnéticos fortes ( $h/J = 2,0$  e  $h/J = 2,2$ ). Na Figura 6.5, exibimos o diagrama de fases da região emaranhada (E) e da região não emaranhada (D), em função do parâmetro de anisotropia  $\Delta$  e da temperatura limiar  $T_{th}/J$  para alguns valores do campo magnético  $h$  e do valor fixo  $J_1/J = 1$ , além disso, definimos os parâmetros da impureza como  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ . Aqui, a temperatura limiar delimita o regime dos spins emaranhados (concorrência finita) e dos spins não emaranhados (concorrência nula). A região emaranhada (E) é o estado emaranhado na fase ferrimagnética quântica, que foi indicada por "ENQ", enquanto a região não emaranhada (D) é o estado ferromagnético não emaranhado que é indicado por "UFM", como visto na seção 5.2 (ROJAS et al., 2012). Observa-se na figura 6.5 (a), para um campo magnético forte ( $h/J = 2,0$ ), o fenômeno de reentrância do emaranhamento térmico quando o parâmetro de anisotropia ( $\Delta = 1$ ) está suficientemente próximo, mas, ligeiramente abaixo do limite do estado fundamental entre o fase "ENQ" e "UFM". Sob essa condição, a concorrência/coerência começa do zero (ver linha tracejada azul) na fase "UFM" (não



emaranhada), depois transita do estado não emaranhado para o emaranhado na fase "ENQ", ou seja, um aumento na temperatura favorece a criação de um sistema emaranhado termicamente (o surgimento repentino de coerência quântica) para finalmente retornar à fase "UFM" não emaranhada. Na Figura 6.5 (b), exibimos o diagrama de fases para a região emaranhada e a não emaranhada em função do parâmetro de anisotropia ( $\Delta$ ) e da temperatura limiar  $T_{th}/J$ , para um valor fixo do campo magnético  $h/J = 2,2$  e  $\Delta = 1,3$  (linha tracejada verde). Nesta figura, a linha tracejada verde mostra a transição que vai da região não emaranhada para a emaranhada e depois volta para a anterior (D-E-D). Essa transição é possível apenas devido ao fenômeno de reentrância presente no modelo com impureza.

#### 6.4 Teletransporte

Nesta seção, implementamos o protocolo de teletransporte em um estado misto emaranhado (BOWEN; BOSE, 2001; PERES, 1996) e investigamos a influência da impureza presente na cadeia Ising-XXZ tipo diamante no teletransporte quântico. Estudamos o teletransporte quântico via estados emaranhados de um par de dímeros de Heisenberg impuros presentes na cadeia Ising-XXZ com estrutura tipo diamante. Consideramos dois qubits em um estado arbitrário desconhecido  $|\psi_{in}\rangle$  como uma entrada, ou seja

$$|\psi_{in}\rangle = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)|10\rangle + e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)|01\rangle \quad (6.89)$$

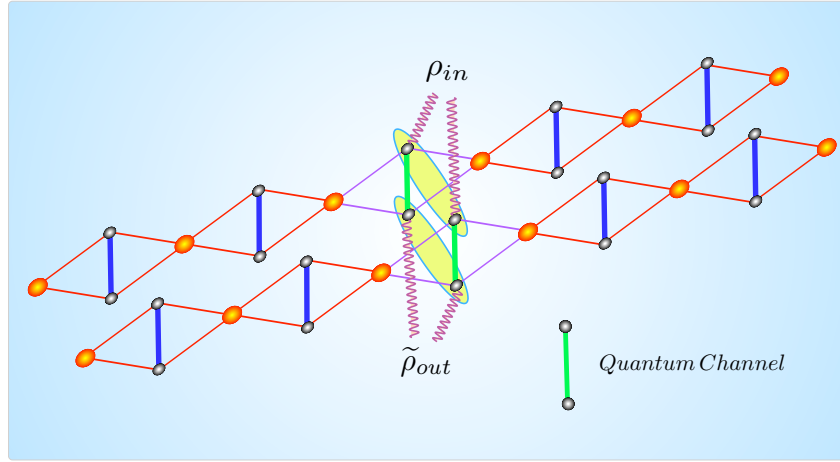
onde  $0 \leq \theta \leq \pi$  e  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ . Aqui,  $\theta$  descreve o estado arbitrário e  $\phi$  é a fase correspondente desse estado. No formalismo operador densidade  $\rho_{in} = |\psi_{in}\rangle\langle\psi_{in}|$ , pode ser escrito explicitamente como

$$\rho_{in} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & 0 \\ 0 & e^{-i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.90)$$

a concorrência do estado de entrada  $C_{in}$ , conforme a equação 5.62, é dada por

$$C_{in} = 2 \left| e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \right| = |\sin(\theta)| \quad (6.91)$$

Figura 6.6 – A representação esquemática para o teletransporte do estado de entrada  $\rho_{in}$  através de um par de dímeros de Heisenberg independentes com impureza (linhas verdes) em uma cadeia Ising-XXZ tipo diamante. O estado de saída teleportado é indicado por  $\tilde{\rho}_{out}$ .



Fonte: (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019)

Quando o estado quântico  $\rho_{in}$ , representado na figura 6.6, é teleportado através do canal quântico misto  $\tilde{\rho}_{ch}$  o estado da réplica de saída  $\tilde{\rho}_{out}$  pode ser obtido aplicando uma medição conjunta e a transformação unitária local ao estado de entrada  $\rho_{in}$ , conforme a equação 4.34 (BOWEN; BOSE, 2001; PERES, 1996; YEO, 2002; ZHANG, 2007)

$$\tilde{\rho}_{out} = \sum_{i,j=0}^3 p_i p_j (\sigma^i \otimes \sigma^j) \rho_{in} (\sigma^i \otimes \sigma^j) \quad (6.92)$$

na qual,  $p_i = Tr [E^i \tilde{\rho}_{ch}]$ , onde  $E^i = (\sigma^i \otimes \mathbb{1}) E^0 (\sigma^i \otimes \mathbb{1})$ , em que definimos  $E^0 = |\Psi^-\rangle \langle \Psi^-|$ , além disso,  $\sigma^0 = \mathbb{1}$ ,  $\sigma^1 = \sigma^x$ ,  $\sigma^2 = \sigma^y$  e  $\sigma^3 = \sigma^z$ , lembrando que  $\sigma^x$ ,  $\sigma^y$  e  $\sigma^z$  são as matrizes de Pauli definidas na equação 2.7. Dessa forma, teremos  $E^1 = |\Phi^-\rangle \langle \Phi^-|$ ,  $E^2 = |\Phi^+\rangle \langle \Phi^+|$  e  $E^3 = |\Psi^+\rangle \langle \Psi^+|$ , onde  $|\Phi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |00\rangle \pm |11\rangle$  e  $|\Psi^\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |01\rangle \pm |10\rangle$  são os estados de Bell (equações 4.8 e 4.9). Aqui consideramos o operador densidade do canal  $\tilde{\rho}_{ch} \equiv \tilde{\rho}(T)$  obtido na equação 6.85.

Expandindo o somatório da equação 6.92, teremos

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}_{out} = & p_0 p_0 (\sigma^0 \otimes \sigma^0) \rho_{in} (\sigma^0 \otimes \sigma^0) + p_0 p_1 (\sigma^0 \otimes \sigma^1) \rho_{in} (\sigma^0 \otimes \sigma^1) + \\
& + p_0 p_2 (\sigma^0 \otimes \sigma^2) \rho_{in} (\sigma^0 \otimes \sigma^2) + p_0 p_3 (\sigma^0 \otimes \sigma^3) \rho_{in} (\sigma^0 \otimes \sigma^3) + \\
& + p_1 p_0 (\sigma^1 \otimes \sigma^0) \rho_{in} (\sigma^1 \otimes \sigma^0) + p_1 p_1 (\sigma^1 \otimes \sigma^1) \rho_{in} (\sigma^1 \otimes \sigma^1) + \\
& + p_1 p_2 (\sigma^1 \otimes \sigma^2) \rho_{in} (\sigma^1 \otimes \sigma^2) + p_1 p_3 (\sigma^1 \otimes \sigma^3) \rho_{in} (\sigma^1 \otimes \sigma^3) + \\
& + p_2 p_0 (\sigma^2 \otimes \sigma^0) \rho_{in} (\sigma^2 \otimes \sigma^0) + p_2 p_1 (\sigma^2 \otimes \sigma^1) \rho_{in} (\sigma^2 \otimes \sigma^1) + \\
& + p_2 p_2 (\sigma^2 \otimes \sigma^2) \rho_{in} (\sigma^2 \otimes \sigma^2) + p_2 p_3 (\sigma^2 \otimes \sigma^3) \rho_{in} (\sigma^2 \otimes \sigma^3) + \\
& + p_3 p_0 (\sigma^3 \otimes \sigma^0) \rho_{in} (\sigma^3 \otimes \sigma^0) + p_3 p_1 (\sigma^3 \otimes \sigma^1) \rho_{in} (\sigma^3 \otimes \sigma^1) + \\
& + p_3 p_2 (\sigma^3 \otimes \sigma^2) \rho_{in} (\sigma^3 \otimes \sigma^2) + p_3 p_3 (\sigma^3 \otimes \sigma^3) \rho_{in} (\sigma^3 \otimes \sigma^3),
\end{aligned} \tag{6.93}$$

onde os produtos  $p_i p_j$  são

$$p_0 p_0 = (\tilde{\rho}_{2,2} - \tilde{\rho}_{2,3})^2, \tag{6.94}$$

$$p_0 p_3 = p_3 p_0 = \tilde{\rho}_{2,2}^2 - \tilde{\rho}_{2,3}^2, \tag{6.95}$$

$$p_0 p_1 = p_1 p_0 = p_0 p_2 = p_2 p_0 = \frac{1}{2} (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4}) (\tilde{\rho}_{2,2} - \tilde{\rho}_{2,3}), \tag{6.96}$$

$$p_1 p_1 = p_1 p_2 = p_2 p_1 = p_2 p_2 = \frac{1}{4} (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2, \tag{6.97}$$

$$p_1 p_3 = p_3 p_1 = p_2 p_3 = p_3 p_2 = \frac{1}{2} (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4}) (\tilde{\rho}_{2,2} + \tilde{\rho}_{2,3}), \tag{6.98}$$

$$p_3 p_3 = (\tilde{\rho}_{2,2} + \tilde{\rho}_{2,3})^2. \tag{6.99}$$

Finalmente, o operador densidade de saída  $\tilde{\rho}_{out}$  é descrito por

$$\tilde{\rho}_{out} = \begin{bmatrix} c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f & \Xi & 0 \\ 0 & \Xi^* & g & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c \end{bmatrix}, \tag{6.100}$$

( $\Xi^*$  é o complexo conjugado do elemento  $\Xi$ ) os elementos dessa matriz densidade podem ser expressos por

$$c = 2\tilde{\rho}_{2,2}(\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4}), \quad (6.101)$$

$$f = (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + 4\tilde{\rho}_{2,2} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (6.102)$$

$$g = 4\tilde{\rho}_{2,2} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (6.103)$$

$$\Xi = 2e^{i\phi} \tilde{\rho}_{2,3}^2 \sin \theta. \quad (6.104)$$

Usando a equação 6.100 na definição da concorrência (equação 4.17), obtemos a concorrência de saída  $C_{out}(\tilde{\rho}_{out})$ , que é dada por

$$C_{out}(\tilde{\rho}_{out}) = 2\max\left\{|\tilde{\rho}_{out2,3}| - \sqrt{\tilde{\rho}_{out1,1} \cdot \tilde{\rho}_{out4,4}}, 0\right\}, \quad (6.105)$$

agora, como  $\tilde{\rho}_{out2,3} = \Xi$  e  $\tilde{\rho}_{out1,1} = \tilde{\rho}_{out4,4} = c$ , obtemos

$$C_{out}(\tilde{\rho}_{out}) = 2\max\left\{2\tilde{\rho}_{2,3}^2 C_{in} - 2|\tilde{\rho}_{2,2}| |\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4}|, 0\right\}. \quad (6.106)$$

Mais recentemente, o teletransporte do mesmo estado teletransporta foi estudado no modelo original, sem impurezas (ROJAS; SOUZA; ROJAS, 2017).

#### • *Fidelidade do Teletransporte*

Agora, focamos principalmente em quanto de informação foi teleportada, ou seja, na eficiência do teletransporte quântico. Para isso, utilizamos a fidelidade entre  $\rho_{in}$  e  $\tilde{\rho}_{out}$ , a qual caracteriza a qualidade do estado teleportado. A fidelidade é definida por (JOZSA, 1994; SCHUMACHER; NIELSEN, 1996), conforme a equação 4.35,

$$F = \langle \Psi_{in} | \tilde{\rho}_{out} | \Psi_{in} \rangle. \quad (6.107)$$

Utilizando as equações 6.90 e 6.100 esta equação 6.107 fica

$$F = f \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) + \Xi e^{-i\Phi} \frac{\sin \theta}{2} + \Xi^* e^{i\Phi} \frac{\sin \theta}{2} + g \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (6.108)$$

$$F = f \frac{(1 - \cos \theta)}{2} + (\Xi e^{-i\Phi} + \Xi^* e^{i\Phi}) \frac{\sin \theta}{2} + g \frac{(1 + \cos \theta)}{2}, \quad (6.109)$$

$$F = \frac{g+f}{2} + \frac{g-f}{2} \cos \theta + (\Xi e^{-i\Phi} + \Xi^* e^{i\Phi}) \frac{\sin \theta}{2}, \quad (6.110)$$

$$F = \frac{4\tilde{\rho}_{2,2}^2 + (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2}{2} + \frac{4\tilde{\rho}_{2,2}^2 - (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2}{2} \cos^2 \theta + 2\tilde{\rho}_{2,3}^2 \sin^2 \theta, \quad (6.111)$$

$$F = \frac{4\tilde{\rho}_{2,2}^2 + (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2}{2} + \frac{4\tilde{\rho}_{2,2}^2 - (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2}{2} (1 - \sin^2 \theta) + 2\tilde{\rho}_{2,3}^2 \sin^2 \theta, \quad (6.112)$$

$$F = 4\tilde{\rho}_{2,2}^2 + \frac{(\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 - 4\tilde{\rho}_{2,2}^2}{2} \sin^2 \theta + 2\tilde{\rho}_{2,3}^2 \sin^2 \theta, \quad (6.113)$$

e, finalmente,

$$F = \frac{\sin^2 \theta}{2} \left[ (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 + 4\tilde{\rho}_{2,3} - 4\tilde{\rho}_{2,2} \right] + 4\tilde{\rho}_{2,2}^2. \quad (6.114)$$

A fidelidade média  $F_A$  do teletransporte é dada de acordo com a equação 4.36,

$$F_A = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi F \sin \theta d\theta \quad (6.115)$$

Substituindo a equação 6.114 nesta equação 6.115, pode-se obter a expressão analítica para  $F_A$ . Explicitamente temos

$$F_A = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \left\{ \frac{\sin^2 \theta}{2} \left[ (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 + 4\tilde{\rho}_{2,3} - 4\tilde{\rho}_{2,2} \right] + 4\tilde{\rho}_{2,2}^2 \right\} \sin \theta d\theta, \quad (6.116)$$

$$F_A = \frac{1}{2} \left\{ \frac{[(\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 + 4\tilde{\rho}_{2,3} - 4\tilde{\rho}_{2,2}]}{2} \int_0^\pi \sin^2 \theta \sin \theta d\theta + 4\tilde{\rho}_{2,2}^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \right\}, \quad (6.117)$$

$$F_A = \frac{1}{2} \left\{ \frac{[(\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 + 4\tilde{\rho}_{2,3} - 4\tilde{\rho}_{2,2}]}{2} \int_0^\pi (1 - \cos^2 \theta) \sin \theta d\theta + 8\tilde{\rho}_{2,2}^2 \right\}, \quad (6.118)$$

utilizando o método de substituição de variáveis, em que  $u = \cos \theta$ , logo,  $du = -\sin \theta d\theta$  e

$$F_A = \frac{1}{2} \left\{ -\frac{[(\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 + 4\tilde{\rho}_{2,3} - 4\tilde{\rho}_{2,2}]}{2} \int_1^{-1} (1-u^2) du + 8\tilde{\rho}_{2,2}^2 \right\}, \quad (6.119)$$

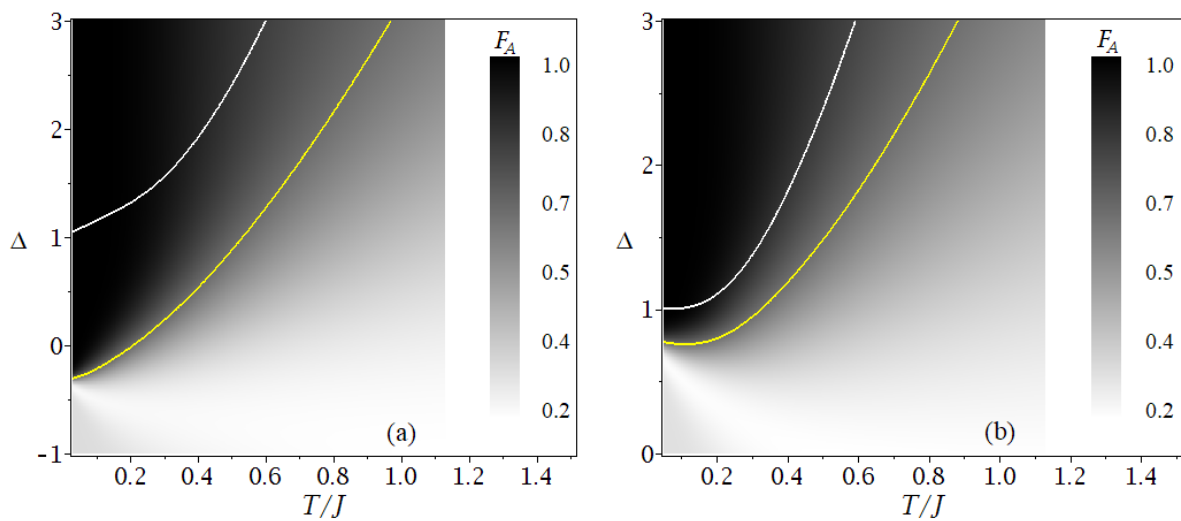
$$F_A = \frac{1}{2} \left\{ -\frac{[(\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 + 4\tilde{\rho}_{2,3} - 4\tilde{\rho}_{2,2}]}{2} \left[ u - \frac{u^3}{3} \right] \Big|_1^{-1} + 8\tilde{\rho}_{2,2}^2 \right\}, \quad (6.120)$$

$$F_A = \frac{1}{2} \left\{ \frac{2[(\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 + 4\tilde{\rho}_{2,3} - 4\tilde{\rho}_{2,2}]}{3} + 8\tilde{\rho}_{2,2}^2 \right\}, \quad (6.121)$$

e, finalmente,

$$F_A = \frac{1}{3} [(\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 + 4\tilde{\rho}_{2,3} - 4\tilde{\rho}_{2,2}] + 4\tilde{\rho}_{2,2}^2. \quad (6.122)$$

Figura 6.7 – A densidade da fidelidade média  $F_A$  em função de  $\Delta$  e  $T/J$ . Em (a)  $h/J = 0$  e em (b)  $h/J = 1,0$ . Nestas figuras, a curva sólida amarela é o contorno de  $F_A = 2/3$  no modelo com impureza e a branca correspondente ao modelo sem impureza. As regiões preta e branca correspondem a  $F_A = 1$  e  $F_A = 0$ , respectivamente, e as regiões cinza indicam uma fidelidade média  $0 < F_A < 1$ .



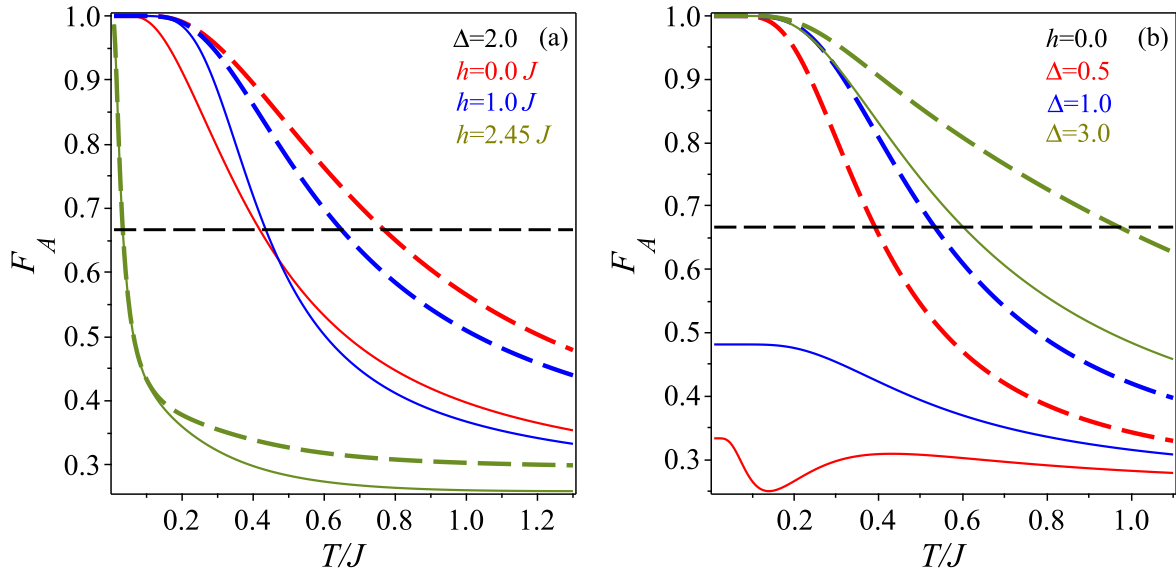
Fonte: Adaptado (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019)

A fidelidade média depende dos parâmetros do canal quântico. Para transmitir o estado de entrada  $|\Psi_{in}\rangle$  com melhor fidelidade do que qualquer protocolo de comunicação clássico,  $F_A$  deve ser maior que  $2/3$  (HARDY; SONG, 2001b; HARDY; SONG, 2001a).

Levamos em consideração os efeitos da impureza na fidelidade do teletransporte de informação e comparamos com o indicado no modelo original (ROJAS; SOUZA; ROJAS, 2017). Na figura 6.7, ilustramos a densidade da  $F_A$  em função de  $T/J$  e  $\Delta$ , para os dois valores fixos do campo magnético  $h/J = 0$  e  $h/J = 1,0$ . A região preta corresponde à fidelidade média máxima  $F_A = 1$ , enquanto a branca corresponde a  $F_A = 0$ . Além disso, as curvas branca e amarela indicam o limite em que teremos sucesso do teletransporte no caso original e com impureza, respectivamente, de modo que a região cercada pela curva branca indica onde o teletransporte quântico terá sucesso ( $F_A > 2/3$ ), enquanto que abaixo dessas curvas o teletransporte quântico falha ( $F_A < 2/3$ ) em ser observado no caso original, análise idêntica quanto a região cercada pela linha amarela (com impureza), ou seja, acima da linha amarela teremos sucesso do teletransporte, enquanto que abaixo desta linha o teletransporte não é bem sucedido. Na figura 6.7 (a), é representado o gráfico de densidade de  $F_A$  em relação a  $\Delta$  e  $T/J$ , para o campo magnético nulo. Como pode ser observado, há uma ampla região onde o teletransporte de informações é bem sucedido além da região permitida (curva limitada em branco) no caso com impureza. Isso significa que a introdução da impureza permite uma eficiência aprimorada para o teletransporte quântico. Observa-se, também, que o teletransporte quântico do modelo isotrópico ( $\Delta = 1$ ) é possível apenas em  $T = 0$ , enquanto na presença de impureza é possível para  $T \geq 0$ . Na figura 6.7 (b), temos o gráfico de densidade  $F_A$  em função de  $\Delta$  e  $T/J$ , agora para o campo magnético  $h/J = 1,0$ . Nele, também observamos um aumento na eficiência do teletransporte (fidelidade média) devido à impureza inserida, evidenciado pela região entre a curva em branco e a curva em amarelo.

Além disso, para entender os efeitos do campo magnético  $h$  e do parâmetro anisotropia  $\Delta$  na fidelidade média, na figura 6.8 plotamos  $F_A$  como uma função da temperatura  $T/J$  nas condições  $\Delta = 2,0$  e  $h/J = 0$ , onde a linha tracejada horizontal denota  $F_A = 2/3$ . Na figura 6.8 (a), definimos o parâmetro anisotrópico como  $\Delta = 2,0$  e adotamos valores distintos de campo magnético. A partir disso, é fácil ver que a fidelidade média aumenta para campos magnéticos fracos ( $h = 0,0$  e  $h = 1,0J$ ) em relação ao modelo original, mesmo que não haja diferença a baixas temperaturas ( $0 \leq T/J \lesssim 0,1$ ). Para campos magnéticos mais intensos ( $h/J = 2.45$ ) pode observar-se que a impureza não influencia no teletransporte de informação. Na Figura 6.8 (b), fixamos  $h = 0,0$  e alteramos os valores do parâmetro de anisotropia  $\Delta$ , notamos que para  $\Delta = 0,5$  ou  $\Delta = 1,0$ , a fidelidade média  $F_A$  permanece abaixo de  $2/3$  para o modelo original, impossibilitando o teletransporte de informação. No entanto, quando consideramos a

Figura 6.8 – A fidelidade média do teletransporte é plotada em relação à temperatura  $T/J$ . Consideramos  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$ ,  $\eta = -0,8$  e  $J_1/J = 1,0$ . Em (a)  $\Delta = 2,0$  e em (b)  $h/J = 0$ . A linha tracejada horizontal indica fidelidade média constante  $F_A = 2/3$ . As demais linhas tracejadas representam o modelo com impureza e as linhas solidas representam o modelo original.



Fonte: (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019)

inclusão da impureza, temos um aumento drástico em tal quantidade, e, a baixas temperaturas ( $0 \leq T \lesssim 0,13$ ), atingem seu máximo e logo depois diminui monotonicamente assim que a temperatura aumenta. Considerando a anisotropia elevada ( $\Delta = 3,0$ ), a fidelidade média é a mesma em ambos os modelos em baixas temperaturas ( $0 \leq T \lesssim 0,13$ ), mas, aumentando-se a temperatura, observamos uma clara vantagem do modelo com impureza sobre o caso original. Esses resultados mostram que podemos obter um aprimoramento significativo da fidelidade pela inclusão de impurezas na estrutura do modelo. Finalmente, na Figura 6.8 (b), a fidelidade média exibe um intrigante decaimento não monotônico na dependência da temperatura para  $\Delta = 0,5$  na região de comunicação clássica (linha contínua vermelha).

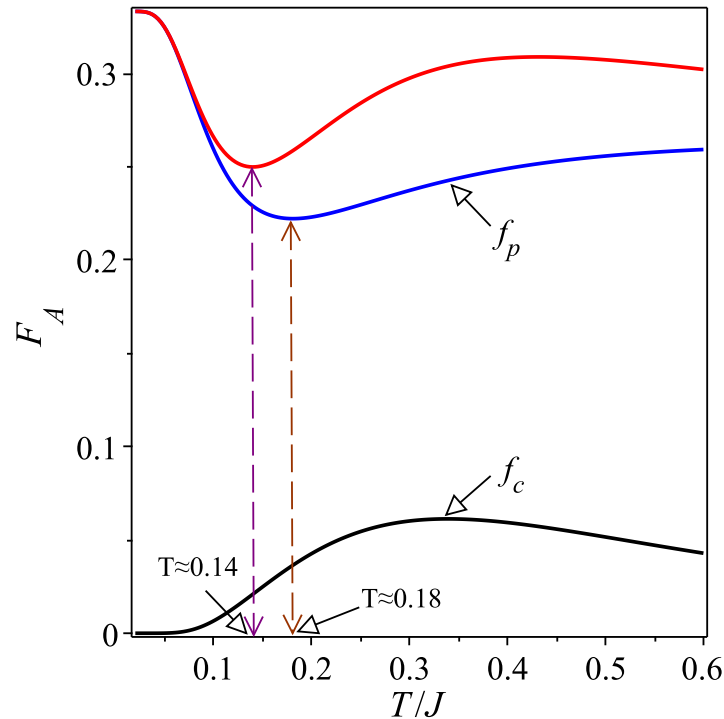
Para entender esse comportamento da fidelidade média, reescrevemos a equação 6.122 como  $F_A = f_p + f_c$ , onde

$$f_p = \frac{1}{3} \left[ (\tilde{\rho}_{1,1} + \tilde{\rho}_{4,4})^2 + 8\tilde{\rho}_{2,2} \right] \quad (6.123)$$

$$f_c = \frac{4}{3} \tilde{\rho}_{2,3}^2 \quad (6.124)$$



Figura 6.9 – A fidelidade média do teletransporte  $F_A$ ,  $f_p$ ,  $f_c$  em função da temperatura  $T/J$  para o modelo original ( $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0$ ,  $\eta = 0$ ) com  $J_1/J = 1,0$ ,  $h = 0$  e  $\Delta = 0,5$ . A linha tracejada vertical magenta indica o mínimo da fidelidade e a linha tracejada vertical marrom vertical indica o mínimo do termo  $f_p$ .



Fonte: (FREITAS; FILGUEIRAS; ROJAS, 2019)

O termo  $f_p$  é uma função dos elementos da população do operador densidade, enquanto o termo  $f_c$  é uma função da coerência quântica. Na figura 6.9, observamos o termo  $f_p$  decair para o mínimo em  $T/J \approx 0,18$ , enquanto  $f_c$  é inicialmente nulo para  $T = 0$  até  $T \approx 0,05$ , então a coerência quântica  $f_c$  aumenta a uma taxa maior que o decaimento do termo  $f_p$ . Dessa forma, a fidelidade média atinge o mínimo em  $T \approx 0,14$ , em seguida aumenta até atingir o máximo e depois diminui monotonamente. As curvas da fidelidade média mostram comportamento semelhante em  $0 < \Delta < 1$ .

## 7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em resumo, investigamos os efeitos da inclusão de uma única plaqueta impura na cadeia de spin-1/2 Ising-XXZ com estrutura tipo diamante. Essa impureza consiste na deformação mecânica dessa plaqueta, de modo que os dímeros de Heisenberg (intersticiais) estejam mais próximos e os spins de Ising estão mais afastados em comparação com as demais plaquetas da cadeia, o que ficou evidente ao fixarmos os parâmetros  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = 0,8$  e  $\eta = -0,8$ , de modo que os parâmetros da impureza ficaram na forma  $\tilde{J} = J$ ,  $\tilde{\Delta} = 1,8\Delta$  e  $\tilde{J}_1 = 0,2J_1$  em que  $J$ ,  $\Delta$  e  $J_1$  denotam, respectivamente, a interação tipo Heisenberg (spins intersticiais), a anisotropia e interação tipo Ising (spins nodais-intersticiais). A concorrência quântica e a norma- $l_1$  da coerência são escolhidas como quantificadores do emaranhamento e da coerência quântica, respectivamente, e são obtidas por meio do operador densidade de um sistema em banho térmico através do método da matriz de transferência.

Descobrimos que a cadeia Ising-XXZ tipo diamante com uma impureza incorporada pôde induzir um aumento significativo no emaranhamento quântico e na coerência quântica. Verificamos que a concorrência é mais robusta para campos magnéticos fracos ou fortes, sendo que para campos magnéticos intensos, observamos o nascimento súbito do emaranhamento. Comportamento similar apresentada na coerência quântica.

Também discutimos o teletransporte de dois qubits de um estado arbitrário através de um par de canais quânticos compostos por dímeros de Heisenberg impuros em uma cadeia infinita com interação Ising-XXZ e estrutura tipo diamante. Observamos como o teletransporte de informações é bem-sucedido além da região permitida pelo caso livre de impurezas. Assim, mostramos que a fidelidade média do teletransporte poderia ser aprimorada para alguns parâmetros adequados de impureza. A influência da impureza é mais evidente na fidelidade média quando consideramos campo magnético nulo. Vimos que é possível teleportar informações em uma ampla variedade de modelos anisotrópicos. Isso é impossível no modelo original.

Portanto, afirmamos que através da inserção de uma única impureza na cadeia de spin-1/2 Ising-XXZ tipo diamante pode ser alcançado um aprimoramento considerável do emaranhamento, da coerência quântica e do teletransporte quântico. Pois, ajustando mecanicamente os parâmetros de impureza, podemos obter um emaranhamento mais robusto (bem como a coerência) e fidelidade média (eficiência do teletransporte) aprimorada. Isso

pode ser usado localmente para controlar os recursos quânticos e o teletransporte quântico das informações, diferentemente do modelo original onde é feito globalmente.

Além disso, nossos resultados lançam algumas luzes sobre o controle local do emaranhamento térmico, coerência quântica e teletransporte quântico, manipulando os parâmetros das impurezas inseridas na cadeia.

## **7.1 Perspectivas**

Como mencionado ao longo deste trabalho, a impureza sobre a qual tratamos aqui consiste em uma deformação mecânica (estrutural). Como perspectivas, pretendemos investigar os efeitos de uma impureza magnética na cadeia de spin-1/2 Ising-XXZ tipo diamante e compará-lo com o modelo original e com o modelo com uma impureza estrutural apresentados neste trabalho. A impureza magnética a ser implementada será a mudança do campo magnético externo em um único dímero de Heisenberg, de modo que este campo magnético externo será diferente do campo aplicado nos demais spins pertencentes à cadeia. Além disso, pretendemos estudar o comportamento dessas cadeias em contato com o meio ambiente (sistemas quânticos abertos).

## REFERÊNCIAS

- ÅBERG, J. Catalytic coherence. **Physical Review Letters**, APS, v. 113, n. 15, p. 150402, 2014.
- AGRAWAL, P.; PATI, A. K. Probabilistic quantum teleportation. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 305, n. 1-2, p. 12–17, 2002.
- AMICO, L. et al. Entanglement in many-body systems. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 80, n. 2, p. 517, 2008.
- ANANIKIAN, N.; LAZARYAN, H.; NALBANDYAN, M. Magnetic and quantum entanglement properties of the distorted diamond chain model for azurite. **The European Physical Journal B**, Springer, v. 85, n. 7, p. 223, 2012.
- APOLLARO, T. et al. Effective cutting of a quantum spin chain by bond impurities. **Physical Review A**, APS, v. 88, n. 5, p. 052336, 2013.
- ARNESEN, M.; BOSE, S.; VEDRAL, V. Natural thermal and magnetic entanglement in the 1d Heisenberg model. **Physical Review Letters**, APS, v. 87, n. 1, p. 017901, 2001.
- ASPECT, A.; DALIBARD, J.; ROGER, G. Experimental test of bell's inequalities using time-varying analyzers. **Physical review letters**, APS, v. 49, n. 25, p. 1804, 1982.
- ASPECT, A.; GRANGIER, P.; ROGER, G. Experimental tests of realistic local theories via bell's theorem. **Physical Review Letters**, APS, v. 47, n. 7, p. 460, 1981.
- BASSALO, J. M. F. A crônica da física do estado sólido: Iv. magnetismo. **Revista Brasileira do Ensino de Física**, v. 16, p. 1–4, 1994.
- BAUMGRATZ, T.; CRAMER, M.; PLENIO, M. B. Quantifying coherence. **Physical Review Letters**, APS, v. 113, n. 14, p. 140401, 2014.
- BAXTER, R. J. **Exactly Solved models in Statistical Sechanics**. [S.l.]: Elsevier, 2016.
- BELL, J. S. On the Einstein Podolsky Rosen paradox. **Physics Physique Fizika**, APS, v. 1, n. 3, p. 195, 1964.
- BENNETT, C. H. et al. Teleporting an unknown quantum state via dual classical and Einstein-Podolsky-Rosen channels. **Physical Review Letters**, APS, v. 70, n. 13, p. 1895, 1993.
- BENNETT, C. H. et al. Purification of noisy entanglement and faithful teleportation via noisy channels. **Physical Review Letters**, APS, v. 76, n. 5, p. 722, 1996.
- BENNETT, C. H.; DIVINCENZO, D. P. Quantum information and computation. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 404, n. 6775, p. 247, 2000.
- BENNETT, C. H. et al. Mixed-state entanglement and quantum error correction. **Physical Review A**, APS, v. 54, n. 5, p. 3824, 1996.
- BOWDREY, M. D. et al. Fidelity of single qubit maps. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 294, n. 5-6, p. 258–260, 2002.
- BOWEN, G.; BOSE, S. Teleportation as a depolarizing quantum channel, relative entropy, and classical capacity. **Physical Review Letters**, APS, v. 87, n. 26, p. 267901, 2001.

BRÁDLER, K. et al. Identifying the quantum correlations in light-harvesting complexes. **Physical Review A**, APS, v. 82, n. 6, p. 062310, 2010.

ÇAKMAK, B.; KARPAT, G.; FANCHINI, F. Factorization and criticality in the anisotropic  $XY$  chain via correlations. **Entropy**, Multidisciplinary Digital Publishing Institute, v. 17, n. 2, p. 790–817, 2015.

CARVALHO, I. et al. Tuning the thermal entanglement in a Ising- $XXZ$  diamond chain with two impurities. **Quantum Information Processing**, Springer, v. 18, n. 5, p. 134, 2019.

CARVALHO, I. M. **Funções de Correlação para uma Cade de Ising Decorada com Spin Heisenberg numa Estrutura Diamante**. Dissertação (Mestrado em Ciências) — UFLA, 2018.

CHENG, W. et al. Control of impurity over entanglement in Heisenberg chain. **Journal of Physics E: Low-dimensional Systems and Nanostructures**, Elsevier, v. 39, n. 1, p. 150, 2007.

CHENG, W. et al. Finite-temperature scaling of trace distance discord near criticality in spin diamond structure. **Scientific Reports**, Nature Publishing Group, v. 7, p. 42360, 2017.

COEY, J. M. **Magnetism and Magnetic Materials**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.

COLLINI, E. et al. Coherently wired light-harvesting in photosynthetic marine algae at ambient temperature. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 463, n. 7281, p. 644, 2010.

ĆWIKLIŃSKI, P. et al. Limitations on the evolution of quantum coherences: towards fully quantum second laws of thermodynamics. **Physical Review Letters**, APS, v. 115, n. 21, p. 210403, 2015.

DIEKS, D. Communication by EPR devices. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 92, n. 6, p. 271–272, 1982.

EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. Can quantum-mechanical description of physical reality be considered complete? **Physical Review**, APS, v. 47, n. 10, p. 777, 1935.

EKERT, A. K. Quantum cryptography based on Bell's theorem. **Physical Review Letters**, APS, v. 67, n. 6, p. 661, 1991.

ENGEL, G. S. et al. Evidence for wavelike energy transfer through quantum coherence in photosynthetic systems. **Nature**, Nature Publishing Group, v. 446, n. 7137, p. 782, 2007.

FASSIOLI, F.; OLAYA-CASTRO, A. Distribution of entanglement in light-harvesting complexes and their quantum efficiency. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 12, n. 8, p. 085006, 2010.

FERREIRA, J. T. **Modelos de Spin Ising-Heisenberg e spin-elétron: Emaranhamento quântico e propriedades magnéticas e termodinâmicas**. Tese (Doutorado em Física da Materia Condensada) — IF-UFAL, 2018.

FREITAS, M.; FILGUEIRAS, C.; ROJAS, M. The effects of an impurity in an ising- $XXZ$  diamond chain on thermal entanglement, on quantum coherence, and on quantum teleportation. **Annalen der Physik**, Wiley Online Library, 2019.

FU, H.; SOLOMON, A. I.; WANG, X. Pairwise entanglement in the  $XX$  model with a magnetic impurity. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 35, n. 19, p. 4293, 2002.

FUKUHARA, T. et al. Quantum dynamics of a mobile spin impurity. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 9, n. 4, p. 235, 2013.

GÁLISOVÁ, L. Magnetic properties of the spin-1/2 Ising-Heisenberg diamond chain with the four-spin interaction. **Physica Status Solidi (b)**, Wiley Online Library, v. 250, n. 1, p. 187–195, 2013.

GOMES, R. F. I. **Estados Parcialmente Emaranhados em Comunicação Quântica**. Dissertação (Física Estatística) — UFSCar, 2012.

GOMES, R. F. I. **Teletransporte Quântico na Presença de Ruídos**. Tese (Física Estatística) — UFSCar, 2016.

GRAÇA, C. **Eletrodinâmica**. 2012. UFSM. Disponível em: <<http://coral.ufsm.br/cograca/eletro12.pdf>>. Acesso em: 11 jun. 2019.

GRIFFITHS, D. J. **Eletrodinâmica**. Tradução: Heloisa Coimbra. Revisão Técnica: Antonio Manoel Mansanares. 3. ed. [S.l.]: São Paulo: Editora Pearson, 2011.

GRIFFITHS, D. J. **Mecânica Quântica**. Tradução: Lara Freitas. Revisão Técnica: Marcelo Mulato. [S.l.]: São Paulo: Editora Pearson, 2011.

HALLIDAY; RESNICK; WALKER, J. **Fundamentos da Física, volume 4: óptica e física moderna**. Tradução e Revisão Técnica: Ronaldo Sérgio de Biasi. 8. ed. [S.l.]: Rio de Janeiro: LTC, 2009.

HARDY, L.; SONG, D. D. Nonlinear qubit transformations. **Physical Review A**, APS, v. 64, n. 3, p. 032301, 2001.

HARDY, L.; SONG, D. D. Universal manipulation of a single qubit. **Physical Review A**, APS, v. 63, n. 3, p. 032304, 2001.

HEISENBERG, W. Zur theorie des ferromagnetismus. In: **Original Scientific Papers Wissenschaftliche Originalarbeiten**. [S.l.]: Springer, 1928. p. 580–597.

HILL, S.; WOOTTERS, W. K. Entanglement of a pair of quantum bits. **Physical Review Letters**, APS, v. 78, n. 26, p. 5022, 1997.

HONECKER, A. et al. Dynamic and thermodynamic properties of the generalized diamond chain model for azurite. **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 23, n. 16, p. 164211, 2011.

HUANG, K. **Statistical Mechanics**. [S.l.]: John Wiley Sons, 1987.

HUANG, X.; SI, T.; YANG, Z. Quantum entanglement investigation on impurity effects in the transverse Ising chain. **Physica B: Condensed Matter**, Elsevier, v. 462, p. 25–29, 2015.

ISING, E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. **Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei**, Springer, v. 31, n. 1, p. 253–258, 1925.

ISING, T. et al. The fate of Ernst Ising and the fate of his model. **Journal of Physical Studies**, v. 21, n. 3, p. 3002, 2017.

JASČUR, M.; STREČKA, J. Spin frustration in an exactly solvable Ising-Heisenberg diamond chain. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 272, p. 984–986, 2004.

JESCHKE, H. et al. Multistep approach to microscopic models for frustrated quantum magnets: the case of the natural mineral azurite. **Physical Review Letters**, APS, v. 106, n. 21, p. 217201, 2011.

JOZSA, R. Fidelity for mixed quantum states. **Journal of Modern Optics**, Taylor & Francis, v. 41, n. 12, p. 2315–2323, 1994.

KAMTA, G. L.; STARACE, A. F. Anisotropy and magnetic field effects on the entanglement of a two qubit Heisenberg  $XY$  chain. **Physical Review Letters**, APS, v. 88, n. 10, p. 107901, 2002.

KANG, J. et al. Consequences of the intrachain dimer–monomer spin frustration and the interchain dimer–monomer spin exchange in the diamond-chain compound azurite  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ . **Journal of Physics: Condensed Matter**, IOP Publishing, v. 21, n. 39, p. 392201, 2009.

KARLSTRÖM, O. et al. Increasing thermoelectric performance using coherent transport. **Physical Review B**, APS, v. 84, n. 11, p. 113415, 2011.

KIKUCHI, H. et al. Experimental observation of the  $1/3$  magnetization plateau in the diamond-chain compound  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ . **Physical Review Letters**, APS, v. 94, n. 22, p. 227201, 2005.

KIKUCHI, H. et al. Magnetic properties of the diamond chain compound  $Cu_3(CO_3)_2(OH)_2$ . **Progress of Theoretical Physics Supplement**, Oxford University Press, v. 159, p. 1–10, 2005.

KRAMERS, H. A.; WANNIER, G. H. Statistics of the two-dimensional ferromagnet. part i. **Physical Review**, APS, v. 60, n. 3, p. 252, 1941.

LI, S.-B.; XU JING-BO T. K. LIU, H. L. Magnetic impurity effects on the entanglement of three-qubit Heisenberg  $XY$  chain with intrinsic decoherence. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 334, n. 2, p. 109, 2005.

LI, W.-L.; LI, C.-F.; GUO, G.-C. Probabilistic teleportation and entanglement matching. **Physical Review A**, APS, v. 61, n. 3, p. 034301, 2000.

LOSTAGLIO, M.; JENNINGS, D.; RUDOLPH, T. Description of quantum coherence in thermodynamic processes requires constraints beyond free energy. **Nature Communications**, Nature Publishing Group, v. 6, p. 6383, 2015.

LOSTAGLIO, M. et al. Quantum coherence, time-translation symmetry, and thermodynamics. **Physical Review X**, APS, v. 5, n. 2, p. 021001, 2015.

MAZIERO, J. et al. Quantum and classical thermal correlations in the  $XY$  spin- $1/2$  chain. **Physical Review A**, APS, v. 82, n. 1, p. 012106, 2010.

NARASIMHACHAR, V.; GOUR, G. Low-temperature thermodynamics with quantum coherence. **Nature Communications**, Nature Publishing Group, v. 6, p. 7689, 2015.

- NÉEL, L. Propriétés magnétiques de l'état métallique et énergie d'interaction entre atomes magnétiques. In: EDP SCIENCES. **Annales de Physique**. [S.l.], 1936. v. 11, n. 5, p. 232–279.
- NÉEL, L. Magnetic properties of ferrites: ferrimagnetism and antiferromagnetism. **Annales de Physique**, v. 3, p. 137–198, 1948.
- NÉEL, L. Antiferromagnetism and ferrimagnetism. **Proceedings of the Physical Society. Section A**, IOP Publishing, v. 65, n. 11, p. 869, 1952.
- NIELSEN, M. A.; CHUANG, I. L. **Quantum Computation and Quantum Information**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2010.
- NOLTING, W.; RAMAKANTH, A. **Quantum Theory of Magnetism**. [S.l.]: Springer Science & Business Media, 2009.
- NOVAES, M.; STUDART, N. Mecânica quântica básica. **São Paulo: Editora Livraria da Física**, 2016.
- NUSSENZVEIG, M. **Curso de Física Básica 3: Eletromagnetismo**. [S.l.]: Editora Edgard Blücher, 2006.
- OLLIVIER, H.; ZUREK, W. H. Quantum discord: a measure of the quantumness of correlations. **Physical Review Letters**, APS, v. 88, n. 1, p. 017901, 2001.
- ONSAGER, L. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. **Physical Review**, APS, v. 65, n. 3-4, p. 117, 1944.
- PEIERLS, R. On Ising's model of ferromagnetism. In: CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS. **Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society**. [S.l.], 1936. v. 32, n. 3, p. 477–481.
- PEREIRA, M.; MOURA, F. de; LYRA, M. Magnetization plateau in diamond chains with delocalized interstitial spins. **Physical Review B**, APS, v. 77, n. 2, p. 024402, 2008.
- PEREIRA, M.; MOURA, F. de; LYRA, M. Magnetocaloric effect in kinetically frustrated diamond chains. **Physical Review B**, APS, v. 79, n. 5, p. 054427, 2009.
- PEREIRA, M. S. S. **Platô na Magnetização e Efeito Magnetocalórico na Cadeia Diamante Cineticamente Frustrada**. Dissertação (Mestrado em Ciências) — IF-UFAL, 2008.
- PERES, A. Separability criterion for density matrices. **Physical Review Letters**, APS, v. 77, n. 8, p. 1413, 1996.
- RIBEIRO, G. A. P. As propriedades magnéticas da matéria: um primeiro contato. **Revista Brasileira de Ensino de Física**, v. 22, n. 3, 2000.
- RIGOLIN, G. Quantum teleportation of an arbitrary two-qubit state and its relation to multipartite entanglement. **Physical Review A**, APS, v. 71, n. 3, p. 032303, 2005.
- RIGOLIN, G. Unity fidelity multiple teleportation using partially entangled states. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**, IOP Publishing, v. 42, n. 23, p. 235504, 2009.



- RIGOLIN, G. G. **Estados Quânticos Emaranhados**. Tese (Doutorado em Física) — Instituto de Física Cleb Wataghin, 2005.
- ROJAS, M.; SOUZA, S. de; ROJAS, O. Entangled state teleportation through a couple of quantum channels composed of  $XXZ$  dimers in an Ising- $XXZ$  diamond chain. **Annals of Physics**, Elsevier, v. 377, p. 506–517, 2017.
- ROJAS, O. et al. Thermal entanglement in an exactly solvable Ising- $XXZ$  diamond chain structure. **Physical Review A**, APS, v. 86, n. 4, p. 042330, 2012.
- ROJAS, O. et al. Thermal entanglement in a spin-1/2 Ising- $XYZ$  distorted diamond chain with the second-neighbor interaction between nodal Ising spins. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, Elsevier, v. 486, p. 367–377, 2017.
- ROJAS, O.; SOUZA, S. D. Spinless fermion model on diamond chain. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 375, n. 10, p. 1295–1299, 2011.
- ROJAS, O. et al. Exactly solvable mixed-spin Ising-Heisenberg diamond chain with biquadratic interactions and single-ion anisotropy. **Physical Review B**, APS, v. 83, n. 9, p. 094430, 2011.
- ROMERO, E. et al. Quantum coherence in photosynthesis for efficient solar-energy conversion. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 10, n. 9, p. 676, 2014.
- RULE, K. et al. Nature of the spin dynamics and 1/3 magnetization plateau in azurite. **Physical Review Letters**, APS, v. 100, n. 11, p. 117202, 2008.
- SAKURAI, J. N. J. **Mecânica Quântica Moderna**. Tradução: Sílvia Renato Dahmen. [S.l.]: Bookman, 2013.
- SALINAS, S. R. **Introdução a Física Estatística vol. 09**. [S.l.]: Edusp, 1997.
- SANTOS, A. C. O computador quântico da IBM e o IBM quantum experience. **Caderno Brasileiro de Ensino de Física**, v. 39, n. 1, 2017.
- SAROVAR, M. et al. Quantum entanglement in photosynthetic light-harvesting complexes. **Nature Physics**, Nature Publishing Group, v. 6, n. 6, p. 462–467, 2010.
- SCHUMACHER, B.; NIELSEN, M. A. Quantum data processing and error correction. **Physical Review A**, APS, v. 54, n. 4, p. 2629, 1996.
- SHANNON, C. E.; WEAVER, W. **The mathematical theory of communication**. [S.l.]: University of Illinois press, 1998.
- SOUZA, F. et al. Magnetization processes and quantum entanglement in a spin-1/2 Ising-Heisenberg chain model of a heterotrimetallic Fe-Mn-Cu coordination polymer. **Journal of Magnetism and Magnetic Materials**, Elsevier, v. 471, p. 423–431, 2019.
- STRELTSOV, A.; ADESSO, G.; PLENIO, M. B. Colloquium: Quantum coherence as a resource. **Reviews of Modern Physics**, APS, v. 89, n. 4, p. 041003, 2017.
- STRELTSOV, A. et al. Maximal coherence and the resource theory of purity. **New Journal of Physics**, IOP Publishing, v. 20, n. 5, p. 053058, 2018.

STRELTSOV, A. et al. Measuring quantum coherence with entanglement. **Physical Review Letters**, APS, v. 115, n. 2, p. 020403, 2015.

TORRICO, J. et al. Spin frustration and fermionic entanglement in an exactly solved hybrid diamond chain with localized Ising spins and mobile electrons. **Physical Review B**, APS, v. 93, n. 1, p. 014428, 2016.

TORRICO, J. et al. Pairwise thermal entanglement in the Ising-XYZ diamond chain structure in an external magnetic field. **EPL (Europhysics Letters)**, IOP Publishing, v. 108, n. 5, p. 50007, 2014.

UNIVERSIDAD DE MALAGA. **Azurite**. 1999. Disponível em: <<http://www.uciencia.uma.es/Coleccion-cientifico-tecnica/Mineralogia/Galeria/Azurita>>. Acesso em: 29 jun. 2019.

VAZQUEZ, H. et al. Probing the conductance superposition law in single-molecule circuits with parallel paths. **Nature Nanotechnology**, Nature Publishing Group, v. 7, n. 10, p. 663, 2012.

VEDRAL, V. et al. Statistical inference, distinguishability of quantum states, and quantum entanglement. **Physical Review A**, APS, v. 56, n. 6, p. 4452, 1997.

VEDRAL, V. et al. Quantifying entanglement. **Physical Review Letters**, APS, v. 78, n. 12, p. 2275, 1997.

WANG, X. Entanglement in the quantum Heisenberg  $XY$  model. **Physical Review A**, APS, v. 64, n. 1, p. 012313, 2001.

WANG, X.; FU, H.; SOLOMON, A. I. Thermal entanglement in three-qubit Heisenberg models. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, IOP Publishing, v. 34, n. 50, p. 11307, 2001.

WOOTTERS, W. K. Entanglement of formation of an arbitrary state of two qubits. **Physical Review Letters**, APS, v. 80, n. 10, p. 2245, 1998.

XI, X.-q. et al. Impurity entanglement in three-qubit Heisenberg  $XX$  chain. **Physics Letters A**, Elsevier, v. 297, n. 5-6, p. 291–299, 2002.

YEO, Y. Teleportation via thermally entangled states of a two-qubit Heisenberg  $XX$  chain. **Physical Review A**, APS, v. 66, n. 6, p. 062312, 2002.

YEO, Y. Studying the thermally entangled state of a three-qubit Heisenberg  $XX$  ring via quantum teleportation. **Physical Review A**, APS, v. 68, n. 2, p. 022316, 2003.

ZHANG, G.-F. Thermal entanglement and teleportation in a two-qubit Heisenberg chain with Dzyaloshinski-Moriya anisotropic antisymmetric interaction. **Physical Review A**, APS, v. 75, n. 3, p. 034304, 2007.