



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

HERBERT DA SILVA SOUSA

DIAGRAMA DE FASES E EMARANHAMENTO EM SISTEMAS DE SPINS
ISING-HUBBARD

MACEIÓ - AL

2019

HERBERT DA SILVA SOUSA

TESE DE DOUTORADO

DIAGRAMA DE FASES E EMARANHAMENTO EM SISTEMAS DE SPINS ISING-HUBBARD

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas como requisito para obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra

MACEIÓ - AL

2019

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecário: Marcelino de Carvalho

S725d Sousa, Herbert da Silva.
Diagrama de fases e emaranhamento em sistemas de spins Ising-Hubbard /
Herbert da Silva Sousa. – 2019.
99. : il.

Orientador: Marcelo Leite Lyra.
Tese (doutorado em Física) – Universidade Federal de Alagoas. Instituto de
Física. Maceió, 2019.

Bibliografia: f. 83-90.
Apêndices: f. 91-99.

1. Emaranhamento quântico. 2. Spin - Partículas (Física nuclear). 3.
Magnetismo. I. Título.

CDU: 537.622

**PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
TESE DE DOUTORADO**

**“Diagrama de fases e emaranhamento em sistemas de
spin de Ising-Hubbard”**

por

Herbert da Silva Sousa


A Banca Examinadora composta pelos professores Marcelo Leite Lyra (presidente da banca e orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, José Pimentel de Lima, da Universidade Federal do Piauí, Rosa Carolina Pinto Carvalho, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Guilherme Martins Alves de Almeida, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Jordana Torrico Ferreira, da Universidade Federal de Lavras consideram o candidato aprovado com grau “A”.

Maceió, 28 de junho de 2019


Prof. Dr. Marcelo Leite Lyra


Prof. Dr. José Pimentel de Lima


Profa. Dra. Rosa Carolina Pinto Carvalho


Prof. Dr. Guilherme Martins Alves de Almeida


Profa. Dra. Jordana Torrico Ferreira

Á LORENNNA & BENJAMIN.

Agradecimentos

- Primeiramente a Deus;
- Em especial a minha esposa pelo incentivo pelo apoio incondicional ao longo dessa jornada e toda minha família de modo geral, por que sem eles não teria conseguido chegar até aqui;
- Ao professor Marcelo Lyra, pela ótima orientação e por sua incansável dedicação no decorrer de todo o curso, sempre disponível para me ajudar;
- Aos coordenadores do projeto Dinter José Ricardo Fonseca e Marcelo Lyra pelo suporte sem o qual seria muito difícil concluir o trabalho;
- Aos colegas pelo companheirismo e amizade;
- Ao Programa de Pós Graduação do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas pela oportunidade e recursos necessários junto ao IFPI para minha formação;
- À Capes pelo suporte financeiro durante o projeto DINTER IFPI-UFAL;
- Aos professores do Instituto de Física da UFAL.

Resumo

Nas últimas décadas, vários trabalhos têm sido dedicados à investigação de uma nova classe de sistemas de spins híbridos. Nesta tese o grau de emaranhamento fermiônico é examinado em uma escada de Ising-Hubbard exatamente solucionável, que envolve a interação de elétrons nos degraus da escada descritos pelos dímeros de Hubbard a meio preenchimento em cada degrau, levando em consideração os termos de salto entre os degraus e de Coulomb. Considera-se que o acoplamento entre os dímeros vizinhos de Hubbard tenha uma natureza semelhante a uma interação de Ising. O diagrama de fases do estado fundamental consiste em quatro regiões distintas, correspondentes à fase saturada paramagnética, a antiferromagnética clássica, a antiferromagnética quântica e a fase quântica clássica mista. Nós calculamos exatamente a concorrência fermiônica, que mede o grau de emaranhamento quântico entre o par de elétrons nos degraus da escada. Os efeitos da amplitude de hopping, do termo de Coulomb, da temperatura e dos campos magnéticos no emaranhamento fermiônico são explorados em detalhe. É mostrado que a concorrência fermiônica exibe um comportamento reentrante quando o emaranhamento quântico está sendo gerado em temperaturas moderadas acima do estado clássico fundamental paramagnético saturado. Nós também estudamos as propriedades do estado fundamental de um tubo triangular Ising-Hubbard o qual apresenta um diagrama de fases com até 6 fases distintas.

Palavras-chave: Emaranhamento fermiônico, Escadas de spin, concorrência fermiônica

Abstract

Over the last decades, several works have been devoted to the investigation of a new class of hybrid spin systems. In this thesis the degree of fermionic entanglement is examined in an exactly solvable Ising-Hubbard ladder, which involves interacting electrons on the ladders rungs described by Hubbard dimers at half-filling on each rung, accounting for intrarung hopping and Coulomb terms. The coupling between neighboring Hubbard dimers is assumed to have an Ising-like nature. The ground-state phase diagram consists of four distinct regions corresponding to the saturated paramagnetic, the classical antiferromagnetic, the quantum antiferromagnetic, and a mixed classical-quantum phase. We have exactly computed the fermionic concurrence, which measures the degree of quantum entanglement between the pair of electrons on the ladder rungs. The effects of the hopping amplitude, the Coulomb term, temperature, and magnetic fields on the fermionic entanglement are explored in detail. It is shown that the fermionic concurrence displays a reentrant behavior when quantum entanglement is being generated at moderate temperatures above the classical saturated paramagnetic ground state. We also study the ground-state properties of an Ising-Hubbard triangular tube which presents a phase-diagram with up to 6 distinct phases.

Key-words: Fermionic entanglement, Spin ladder, fermionic concurrence.

Lista de Figuras

1.1	Colisão entre duas partículas distinguíveis.	8
1.2	Colisão entre duas partículas indistinguíveis.	9
1.3	Dependência da magnetização (a) susceptibilidade (b) versus temperatura para o ferromagnetismo.	15
1.4	Curvas do momento magnético para diversos sais paramagnéticos.	17
1.5	Representação esquemática de domínios magnéticos num cristal ferromagnético: a) amostra com magnetização total nula; b) esquema da magnetização da amostra por aplicação de um campo magnético.	20
1.6	Ciclo de histerese.	21
1.7	Célula unitária de um material antiferromagnético YMn_2Ge_2 abaixo de sua temperatura de Néel. Os círculos cor de rosa representam os átomos de Ítrio, os círculos brancos, os átomos de Manganês (magnéticos) e os círculos pretos, os átomos de Germânio.	21
1.8	Comportamento da magnetização em função da temperatura para valores abaixo da temperatura de Néel para as sub-redes.	22
1.9	Susceptibilidade magnética em função da temperatura para o antiferromagnetismo.	23
1.10	Representação pictórica do ferromagnetismo, anti-ferromagnetismo e ferrimagnetismo.	24
3.1	Direções das componentes de spin.	39
4.1	Esquema da cadeia dupla formada por spins híbridos.	54

4.2	Diagrama de fases do estado fundamental para $k_B T/J \rightarrow 0$. A fase de dímeros desacoplados pode assumir a forma ferromagnética ou frustrada nas regiões mostradas na figura.	54
4.3	Um esquema da escada de Ising-Hubbard. Os degraus da escada são compostos de dímeros de Hubbard, que contêm dois elétrons móveis por dímero, estando sujeitos ao termo hopping t e ao termo de Coulomb U	55
4.4	Os diagramas de fase do estado fundamental no plano $t/J - H/J$ para (a) $U/J = 0$, (b) $U/J = 10$, (c) $U/J = -2$ e (d) $U/J = -10$	58
4.5	A entropia de formação \mathcal{S} e a concorrência fermiônica \mathcal{C} como função de U/t para dímeros de autoestados $ \lambda_2\rangle$. Ambas as medidas de emaranhamento têm tendências semelhantes sendo máximas em $U = 0$ e decaem quando $ U $ decresce. Observe que a concorrência fermiônica desaparece quando $ U \rightarrow \infty$ enquanto a entropia de formação permanece finita.	62
4.6	Concorrência fermiônica nos degraus do dímero em função da amplitude de hopping normalizada t/J para dois valores representativos do campo magnético e quatro valores distintos do termo Coulomb U/J . Os saltos descontínuos sinalizam as transições de fase induzidas pelo campo. Um completo emaranhamento é alcançado na fase antiferromagnética quântica Q no limite $t/ U \rightarrow \infty$	63
4.7	Dependência da temperatura com a concorrência fermiônica para alguns valores representativos do campo magnético, a amplitude de hopping e dois valores do termo Coulomb:(a) $U/J = 0$; (b) $U/J = 10$	64
4.8	Concorrência fermiônica versus o campo magnético para o caso particular com termo zero de Coulomb $U = 0$ e dois valores da amplitude de hopping, que orientam o estado fundamental a campo zero do sistema investigado para:(a) a fase antiferromagnética clássica AF ; (b) a fase paramagnética saturada P	65
4.9	Gráficos de densidade da concorrência fermiônica no plano $k_B T/J - H/J$ para o caso particular sem o termo Coulomb $U = 0$ e dois valores distintos da amplitude de hopping levando a diferentes estados fundamentais a campo zero.	66
5.1	Modelo do tubo de spin frustrado de Ising-Heisenberg.	69
5.2	Diagrama de fases do estado fundamental do modelo de tubo de spin Ising-Heisenberg.	69
5.3	Um esquema do tubo de Ising-Hubbard.	70

5.4	Um esquema do tubo de Ising-Hubbard.	71
5.5	Um esquema do tubo de Ising-Hubbard.	73
5.6	Os diagramas de fase do estado fundamental no plano $t/J - H/J$ para (a) $U/J = 0$, (b) $U/J = 2$, (c) $U/J = 6$ e (d) $U/J = 10$	75
5.7	Os diagramas de fase do estado fundamental no plano $t/J - H/J$ para (a) $U/J = 0$, (b) $U/J = -2$, (c) $U/J = -6$ e (d) $U/J = -10$	76
5.8	A entropia de formação \mathcal{S} como função de U/t para células de autoestados a) $ \lambda_4\rangle$ e b) $ \lambda_5\rangle$	79

Sumário

Agradecimento	v
Resumo	vi
Abstract	vii
Lista de Figuras	viii
1 Introdução	1
1.1 Breve história do magnetismo	2
1.2 Origem do magnetismo	5
1.2.1 Interação de troca	8
1.2.2 Teoria do campo médio	12
1.3 Fases Magnéticas	18
1.3.1 Diamagnetismo	18
1.3.2 Paramagnetismo	19
1.3.3 Ferromagnetismo	20
1.3.4 Antiferromagnetismo	21
1.3.5 Ferrimagnetismo	23
1.4 Magnetismo em Baixas Dimensionalidades	24
1.5 Organização	26
2 Modelos Magnéticos	27
2.1 Modelo de Ising	28
2.2 Técnica da matriz transferência	30

2.3	Modelo de Heisenberg	33
2.4	Modelo de Hubbard	34
3	Emaranhamento	36
3.1	EPR e desigualdade de Bell	36
3.1.1	Teorema de Bell	39
3.2	Estados emaranhados	41
3.3	Medidas de emaranhamento	45
3.3.1	Emaranhamento de formação e destilação	47
3.3.2	Concorrência	50
3.3.3	Negatividade	51
4	Cadeia dupla de spins Ising-Hubbard	53
4.1	Modelo	55
4.2	O diagrama de fase	56
4.3	Emaranhamento quântico	59
5	Tubo triangular de Spin Ising-Hubbard	68
5.1	Modelo	70
5.2	O diagrama de fase	71
5.3	Emaranhamento quântico	77
6	Conclusões e Perspectiva	81
	Referências Bibliográficas	83

Introdução

O magnetismo quântico é uma das áreas mais ativas de pesquisa em física da matéria condensada. Ainda que os materiais magnéticos sejam conhecidos há cerca de três milênios, foi somente no século XX, com o advento da mecânica quântica, que a origem microscópica do magnetismo pôde ser compreendida[1]. A motivação para este interesse é tanto acadêmica quanto dirigida para aplicações práticas.

Atualmente há grande interesse da comunidade científica acerca do magnetismo, especialmente em sistemas de spins em redes de baixas dimensionalidades[2]. Tais sistemas possuem um grande número de realizações experimentais e exibem uma variedade de fenômenos cuja origem pode ser atribuída a efeitos quânticos e baixas dimensões. A principal motivação para o estudo dos modelos unidimensionais é a maior facilidade com que tais modelos apresentam soluções exatas. Sistemas de spins em redes de baixa dimensionalidade têm sido amplamente explorados no contexto do processamento de informação quântica[3, 4].

No decorrer do capítulo será descrita brevemente a história do desenvolvimento da teoria do magnetismo, falaremos sobre a origem do magnetismo, do acoplamento de troca, e seguimos com uma breve breve descrição dos principais fenômenos magnéticos.

1.1 Breve história do magnetismo

O estudo das propriedades magnéticas dos materiais é um dos mais antigos da ciência. No mundo ocidental, há conhecimento dos fenômenos magnéticos desde a Grécia antiga. A capacidade do ímã de atrair objetos ferrosos foi observada pela primeira vez com o tetróxido de triferro (Fe_3O_4), numa região da Ásia chamada Magnésia[5]. Devido esse fato, esse minério de ferro é chamado magnetita, e os ímãs são chamados magnetos.

Existem sinais de que os chineses podem ter sido os primeiros a observar o fenômeno do magnetismo. Porém, os relatos concretos mais antigos são dos gregos, especificamente do filósofo Tales de Mileto. Por volta de 800 a.C., o cirurgião e escritor hindu Sushruta descreveu o uso de magnetos para remover farpas de metal do corpo[5]. Uma outra referência antiga ao magnetismo é encontrada em um trabalho chinês escrito no século IV a.C. chamado Book of the Devil Valley Master, que diz: “magnetita faz o ferro se aproximar ou ela o atrai”[5]. As magnetitas podem ter sido usadas em bússolas desde 270, mas o primeiro uso confirmado de uma bússola para navegação apareceu no livro de Zhu Yu Pingzhou, Table Talks, em 1117, que diz: “O navegador sabe a geografia, ele olha as estrelas à noite, observa o Sol durante o dia. Quando o dia é escuro e nublado, ele olha a bússola”[5].

As primeiras investigações científicas do magnetismo foram realizadas pelo inglês William Gilbert (1544-1603), um cientista da corte de Elizabeth I. Ele publicou seu livro De magnete em 1600 descrevendo muitas experiências que fizera para tentar descobrir a natureza do magnetismo e da eletricidade[5]. Ele dava a primeira explanação sobre a capacidade misteriosa de a agulha da bússola apontar para o norte-sul, revelando a verdade surpreendente de que a Terra em si é magnética[6].

Em 1820, Christian Orsted (1777-1851) notou que uma corrente elétrica podia defletir a agulha de uma bússola. Este fato foi esclarecido posteriormente por André-Marie Ampère que demonstrou na Academie de Science que, quando fios paralelos carregam uma corrente elétrica, eles podem atrair ou repelir um ao outro, dependendo de suas correntes correrem no mesmo sentido ou em sentidos opostos[5].

Todo esse trabalho experimental inspirou a formulação de James Clerk Maxwell de uma teoria unificada de eletricidade, magnetismo e luz em 1864, que é resumida nas quatro famosas equações que levam seu nome:

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}, \quad (1.1a)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (1.1b)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (1.1c)$$

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}. \quad (1.1d)$$

A resposta da matéria aos campos magnéticos aplicados ainda era uma questão pendente na teoria do eletromagnetismo. As teorias atômico-moleculares estavam começando a surgir e embora teorias clássicas para explicar o comportamento da matéria na presença do campo elétricos fossem bem sucedidas, o mesmo não acontecia quando se buscava compreender o magnetismo na matéria[7].

Muitos modelos fenomenológicos foram propostos desde 1820, mas uma visão mais profunda sobre os fenômenos magnéticos teve que aguardar o advento da mecânica quântica. Modelos para o diamagnetismo e o paramagnetismo foram propostos, destacando-se os nomes de Pierre Curie e Langevin[7]. Uma modificação da teoria de Langevin foi proposta por Pierre Weiss, permitindo explicar em partes o ferromagnetismo, modelo que ficou conhecido como aproximação do campo molecular.

Entre 1911 e 1919 Niels Bohr e Miss van Leeuwen demonstraram a impossibilidade de qualquer resposta da matéria ao campo magnético a partir dos postulados da física clássica[7]. Na verdade foi este resultado, parte integrante da tese de doutoramento de Bohr que o levou, dentre outras inconsistências, a descartar a mecânica clássica e a descrever o átomo de hidrogênio através da quantização dos níveis de energia, teoria que lhe rendeu o prêmio Nobel.

No final dos anos 20 e início da década de 30, a mecânica quântica foi formulada por Heisenberg e Schrödinger. Nesse mesmo período o próprio Heisenberg e também Pauli, Dirac e Van Vleck elucidaram a origem do magnetismo no qual os spins dos elétrons dão origem a momentos magnéticos e a interação entre os spins explica a interação coletiva entre os momentos, que é responsável pela ordem magnética.

Na década de 30 destacam-se os estudos feitos por Néel sobre o antiferromagnetismo e ferrimagnetismo [8–10]. No período da Segunda Guerra Mundial um dos grandes desenvolvimentos tecnológicos foi a descoberta dos ferrites num laboratório da Philips, na Holanda. Os ferrites são ligas isolantes que podem ser usadas em altas frequências, pois

não têm perdas com correntes parasitas. Já em 1948, Néel [10] mostrou que a maioria dos materiais magnéticos isolantes são ferrimagnéticos.

Nos anos 50, Slater e Stoner estabeleceram a base do magnetismo dos metais, chamado magnetismo itinerante porque os momentos residiam em elétrons não ligados[11]. Em 1963, Hubbard propôs um Hamiltoniano para o magnetismo itinerante, ainda muito usado até hoje[11].

As aplicações tradicionais dos materiais magnéticos podem ser vistas em geradores, motores, transformadores e dispositivos acústicos. Esses materiais também têm aplicações na medicina, onde a ressonância magnética nuclear (RMN) é utilizada em exames de tomografia computadorizada. Uma aplicação promissora do magnetismo e materiais magnéticos que ocorre na indústria da farmacologia é o uso das chamadas nanopartículas magnéticas. Neste caso, o fármaco seria acoplado ao material magnético que seria guiado por um ímã até o local onde deve agir sem prejudicar, portanto, células saudáveis[11].

Uma outra grande aplicação do magnetismo é a gravação magnética, que baseia-se na capacidade que o cabeçote de gravação tem de gerar um campo magnético em resposta a uma corrente elétrica. Com esse campo pode-se alterar o estado de magnetização de um material próximo, armazenando nele informações. A recuperação ou leitura dos dados é feita realizando o processo inverso. Esse processo de gravação magnética é muito útil no funcionamento de gravadores de som e vídeo e em equipamentos acionados por cartões magnéticos, como nos caixas bancários.

A descoberta da magnetorresistência gigante em 1988 [12, 13], fenômeno que permite o aumento da sensibilidade dos cabeçotes e assim melhora o processo de gravação magnética impulsionou a indústria da informática e também conduziu ao desenvolvimento de uma nova área da física baseada na eletrônica do spin, a spintrônica.

No entanto, materiais magnéticos podem apresentar emaranhamento quântico em nível microscópico. O emaranhamento quântico pode ser entendido no contexto do princípio da incerteza, apresentado por Werner Heisenberg em 1927. Tal princípio estabelece que não se pode conhecer com precisão absoluta a posição e momento de uma partícula na escala atômica simultaneamente [16]. Usando esse fato da teoria, Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen demonstraram a violação da localidade na Mecânica Quântica. Partindo de um experimento mental, eles demonstraram que se duas partículas

são criadas no mesmo estado quântico e separadas, elas devem se manter correlacionadas. Se fizermos uma medida de posição em uma das partículas a outra partícula é afetada para que o princípio da incerteza não seja violado. Logo medindo uma partícula, a outra colapsa no estado. Esse efeito, que ficou conhecido como paradoxo de EPR, foi chamado por Schrödinger de emaranhamento [17].

O emaranhamento quântico de estados físicos permite que dois ou mais objetos estejam de alguma forma tão ligados que um objeto não possa ser corretamente descrito sem que a sua contra-parte seja mencionada[18–20]. O emaranhamento pode ser utilizado para diversos fins tecnológicos tais como teletransporte quântico, correlação quântica de erros, protocolos de computação quântica, distribuição de chave criptográfica quântica entre outros.

Os refrigeradores magnéticos, cujo funcionamento é baseado no efeito magneto-calórico, também é uma grande aplicação do magnetismo. Nesse efeito, uma substância ativa, um composto magnético, emite calor quando submetido a um campo e absorve calor quando o campo é retirado. Tais refrigeradores têm grandes vantagens em relação aos convencionais, entre as quais maior rendimento e menor prejuízo ambiental. Percebemos que a importância do magnetismo está além da pesquisa básica, pois os materiais magnéticos desempenham um importante e imprescindível papel na tecnologia moderna.

1.2 Origem do magnetismo

As propriedades dos materiais magnéticos têm origem na estrutura eletrônica dos átomos. Ainda que alguns aspectos sejam descritos dentro do contexto do eletromagnetismo clássico, somente a partir do Século XX, com o surgimento da mecânica quântica, é que foi possível explicar a origem microscópica do magnetismo e suas consequências[1].

A origem dos fenômenos magnéticos está relacionada à existência de elétrons que se movem em torno dos núcleos. Quando uma certa porção de matéria é submetida a um campo magnético externo, os elétrons que se moviam em torno do núcleo passam a sofrer a ação de uma força magnética causada pelo campo.

O elétron que gira ao redor das linhas de campo magnético dá origem a um momento de dipolo magnético induzido, também chamado de momento de dipolo magnético orbital. Além do momento orbital, o elétron possui um momento de dipolo magnético

intrínseco bem determinado chamado de spin[1].

Quando se trata da matéria não magnetizada existe uma distribuição de dipolos magnéticos totalmente aleatória, porém, se o material é colocado na presença de um campo magnético ele acaba se magnetizando. O grau de magnetização depende da natureza do meio. Existem materiais que adquirem magnetização na direção do campo, são os materiais paramagnéticos e os materiais ferromagnéticos, sendo os ferromagnéticos fortemente orientados e os paramagnéticos fracamente orientados. Já os materiais que se magnetizam no sentido oposto ao campo são denominados materiais diamagnéticos[21].

Os elétrons ligados aos átomos possuem um momento angular orbital, \mathbf{L} , ao qual se pode associar um momento de dipolo magnético orbital $\boldsymbol{\mu}_L$ [6, 23]:

$$\boldsymbol{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e}\mathbf{L}, \quad (1.2)$$

onde $\boldsymbol{\mu}_L$ é o momento magnético orbital, \mathbf{L} é o momento angular orbital, e a carga elementar e m_e a massa do elétron. Podemos reescrever a expressão do momento magnético orbital em função do fator de Landé[1, 6]:

$$\boldsymbol{\mu}_L = g\mathbf{L}. \quad (1.3)$$

O spin do elétron foi descoberto experimentalmente por Otto Stern e Walter Gerlach em Frankfurt. O experimento consiste essencialmente num ímã produzindo um campo magnético não uniforme. Um feixe de átomos penetra no ímã numa direção perpendicular ao gradiente do campo magnético. Devido a interação do seu spin com o campo magnético, os átomos sofrem uma deflexão na sua passagem pelo campo. A deflexão do feixe implica na existência de um momento magnético dos átomos e conseqüentemente de um momento angular intrínseco, denominado de spin [26].

Associado a este spin existe um momento de dipolo magnético de spin $\boldsymbol{\mu}_S$, relacionado a \mathbf{S} por:

$$\boldsymbol{\mu}_S = -\frac{e}{m_e}\mathbf{S} = g\mathbf{S}, \quad (1.4)$$

O próprio spin \mathbf{S} não pode ser medido, a mecânica quântica prevê (e a experiência confirma) que apenas uma das componentes do spin e o quadrado do seu módulo podem ser medidos simultaneamente. A componente (medida ao longo do eixo z , por exemplo)

é quantizada e pode ter dois valores que diferem apenas em sinal:

$$s_z|\uparrow\rangle = +\frac{\hbar}{2}|\uparrow\rangle, \quad (1.5)$$

$$s_z|\downarrow\rangle = -\frac{\hbar}{2}|\downarrow\rangle. \quad (1.6)$$

O momento magnético de spin pode ser rescrito como:

$$\boldsymbol{\mu}_S = 2\mu_B\mathbf{m}_S, \quad (1.7)$$

onde $\mathbf{S}_z = \hbar\mathbf{m}_S$, com $\mathbf{m}_S = \pm\frac{1}{2}$.

Os autoestados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ formam uma base na qual qualquer estado de spin pode ser expandida. Consequentemente:

$$\langle\uparrow|\uparrow\rangle = \langle\downarrow|\downarrow\rangle = 1 \text{ e } \langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0. \quad (1.8)$$

Um estado de spin genérico $|\varepsilon\rangle$ é dado por:

$$|\varepsilon\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle, \quad (1.9)$$

onde a e b são números complexos, que satisfazem à relação: $|a|^2 + |b|^2 = 1$. A mesma relação é satisfeita pelas funções seno e cosseno de um ângulo. Podemos mapear a e b em ângulos θ e ϕ , da seguinte forma:

$$|\varepsilon\rangle = \cos(\theta)|\uparrow\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta)|\downarrow\rangle. \quad (1.10)$$

A vantagem de escrevermos o estado genérico de um spin $1/2$ é que $|\varepsilon\rangle$ pode ser geometricamente associado aos pontos sobre a superfície de uma esfera. Caso, $\theta = \phi = 0$ é o polo superior da esfera, que representa o autoestado $|\uparrow\rangle$ e assim por diante.

A representação matricial dos autoestados $|\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\rangle$ é:

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ e } |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (1.11)$$

Podemos definir o operador de spin para o caso de spin $\frac{1}{2}$ como:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}, \quad (1.12)$$

onde $\mathbf{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x$, $\mathbf{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y$ e $\mathbf{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ e σ são as matrizes de Pauli[26]:

$$\sigma_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \sigma_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.13)$$

O elétron de um átomo possui momento angular orbital e de spin. A interação entre esses momentos é denominada de interação (ou acoplamento) spin-órbita e é responsável pela criação do momento angular total. O momento angular total de um átomo será simplesmente a soma das duas contribuições, orbital e de spin[6]:

$$\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_L + \boldsymbol{\mu}_S = g\mathbf{L} + g\mathbf{S} = g\mathbf{J}, \quad (1.14)$$

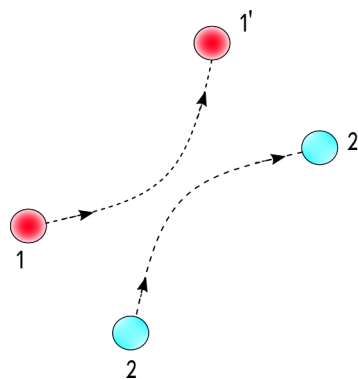
onde \mathbf{J} é o momento angular total.

Nos materiais magnéticos, os momentos magnéticos dos íons mantêm uma orientação relativa entre si, havendo uma interação entre os momentos de dipolos magnéticos. A origem relativa entre os spins é explicada através da interação de troca, que é conhecida como acoplamento *exchange*, que discutiremos a seguir.

1.2.1 Interação de troca

Um conceito importante em Mecânica Quântica é o de partículas idênticas. Em Mecânica clássica, duas partículas idênticas são distinguíveis já que suas trajetórias podem ser bem determinadas e com isso podemos segui-las e distingui-las[24,26]. Nesse caso dados os estados iniciais das partículas 1 e 2 e os estados finais 1' e 2' é possível saber qual das partículas iniciais foi para dado estado final, ou seja, poderíamos dizer com certeza que $1 \rightarrow 1'$ e $2 \rightarrow 2'$, conforme é ilustrado na figura 1.1.

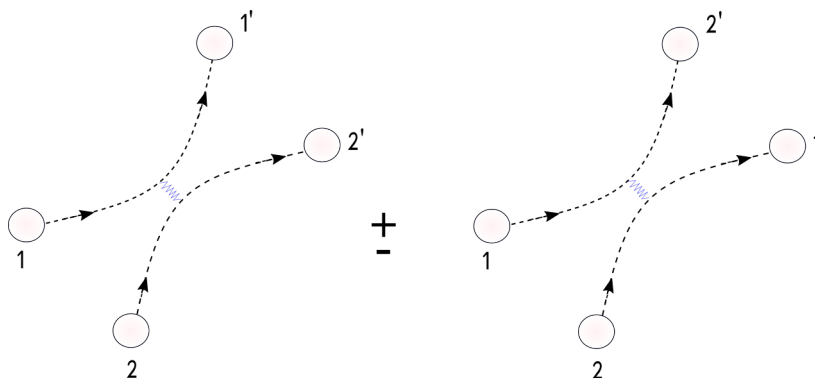
Figura 1.1: Colisão entre duas partículas distinguíveis.



fonte: Autor

No entanto, na Mecânica Quântica não é possível distinguir um elétron de outro por exemplo, eles são indistinguíveis. Podemos considerar que dois elétrons estejam muito distantes de tal modo que é possível chamá-los pelos rótulos iniciais 1 e 2. Porém à medida que se propagam um em direção ao outro, haverá um momento de proximidade na colisão a partir do qual não é mais possível acompanhar as trajetórias. Nesse caso o elétron 1 pode ter originado o estado 1' e o elétron 2 o estado 2', mas também é possível que 1 deu origem a 2' e 2 a 1'. Essa impossibilidade de distinguir qual das partículas iniciais deu origem a qual dos estados finais é que se denomina identidade das partículas indistinguíveis[24, 26]. Como existem dois processos possíveis na Mecânica Quântica, dados os estados iniciais e finais, devemos somar coerentemente as probabilidades de que aconteçam. A figura 1.2 ilustra esse caso.

Figura 1.2: Colisão entre duas partículas indistinguíveis.



fonte: Autor

No contexto da Mecânica Quântica, o postulado da simetrização estabelece que a função de ondas resultante dessas duas partículas deve ter paridade definida perante permutação das duas partículas, sendo simétrica(paridade positiva) ou anti-simétrica(paridade negativa)[24, 26]. Será simétrica para partículas de spin inteiro e anti-simétrica para partículas de spin semi-inteiro. As partículas de spin inteiro serão denominadas bósons enquanto as de spin semi-inteiro serão denominadas férmions.

Consideremos duas partículas idênticas que estão nos estados ψ_1 e ψ_2 . A função de onda simetrizada é dada por:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) \pm \psi_1(\mathbf{r}_2)\psi_2(\mathbf{r}_1)], \quad (1.15)$$

onde \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 são as coordenadas de posição dos elétrons. De tal forma que não é possível estabelecer que a partícula 1 ocupa o orbital ψ_1 ou é a partícula 2 e vice-versa. O sinal + corresponde a bósons e o sinal - na equação acima corresponde aos férmions.

Para partículas de spin inteiro, denominadas agora bósons, a permuta de \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 , correspondendo à permuta das duas partículas idênticas não altera o sinal da função de ondas total[21]. Os bósons podem ocupar o mesmo estado quântico, haja vista que se dois bósons ocupam um estado físico ψ_1 a função de ondas adiciona-se construtivamente. Bósons podem condensar em um único estado físico, tal efeito é conhecido como Condensação de Bose-Einstein.

Partículas com spin semi-inteiro devem satisfazer o princípio de exclusão de Pauli. Nesse caso o sinal negativo deve ser adotado. Note que se $\psi_1 = \psi_2$ a função de ondas resultante é nula, ou seja, não existe probabilidade de que o mesmo estado físico seja ocupado por duas partículas[21]. Esse resultado denomina-se Princípio de Exclusão de Pauli.

A existência de momentos magnéticos, sendo eles induzidos pela presença de um campo externo ou não, está diretamente relacionada com a magnetização de um sistema. Existem alguns materiais na natureza que, mesmo na ausência de campos magnéticos externos, possuem uma magnetização diferente de zero. Esses materiais possuem uma magnetização espontânea e são chamados de ferromagnetos[21].

Em uma rede cristalina, os spins dos elétrons desemparelhados dos átomos ou dos íons da rede interagem entre si. As interações mais relevantes para o estudo das propriedades magnéticas nos sólidos são a interação de troca de curto alcance e a interação dipolar magnética, muito mais fraca que a interação de troca, mais significantes a grandes distâncias. A interação de troca é causada pela repulsão eletrostática dos elétrons e pelo princípio de exclusão de Pauli. Matematicamente, esse princípio é satisfeito exigindo-se que a função de onda total do elétron seja anti-simétrica com relação a troca de coordenadas espaciais e spinorais[1, 23]. A função de onda total é formada pelo produto da parte orbital $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, pela parte de spin $\xi(\sigma_1, \sigma_2)$. Considerando um sistema de dois elétrons, podemos escrever a função de onda

$$\Psi_S(1, 2) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\xi(\sigma_1, \sigma_2), \quad (1.16)$$

onde \mathbf{r}_1 e \mathbf{r}_2 são as coordenadas de posição dos elétrons, σ_1 e σ_2 são suas coordenadas de spin, e ψ e ξ as respectivas funções de onda.

Para calcularmos a interação Coulombiana entre dois elétrons

$$U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (1.17)$$

onde $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ é a distância entre os elétrons.

Usando a teoria de perturbação de primeira ordem, obtém-se as auto energias dadas por

$$\langle U \rangle = E \pm J_{troca}, \quad (1.18)$$

onde

$$E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1)\psi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\mathbf{r}_1)\psi_b(\mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2, \quad (1.19)$$

$$J_{troca} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1)\psi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \psi_a(\mathbf{r}_2)\psi_b(\mathbf{r}_1) d^3r_1 d^3r_2. \quad (1.20)$$

A energia de troca J_{troca} corresponde a diferença entre as energias dos estados de spin antiparalelos e spins paralelos, de onde se conclui que, para $J_{troca} > 0$, o estado com spins paralelos tem uma energia menor do que um estado com spins antiparalelos, enquanto para $J_{troca} < 0$ temos uma situação inversa[1]. A interação de troca decresce rapidamente com a distância entre átomos, logo cada elétron só vai interagir apreciavelmente com os elétrons em átomos de primeiros vizinhos.

Percebe-se, que embora a interação entre o elétrons não dependa explicitamente do spin, a sua energia média dependerá. Assim podemos escrever a energia do sistema em termos das variáveis de spin. Heisenberg e Dirac[27, 28], foram os primeiros a considerar a energia de troca para explicar a ordem magnética dos materiais. Eles propuseram um Hamiltoniano de troca da seguinte forma

$$H_{troca} = -2J_{troca} \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2. \quad (1.21)$$

Essa expressão é a base para a compreensão dos fenômenos ferromagnéticos, por exemplo. O Hamiltoniano Eq.(1.21) é denominado simplesmente Hamiltoniano de Heisenberg.

Em 1907, Weiss [29] sugeriu uma teoria que dá uma visão qualitativa e quantitativa das propriedades magnéticas dos ferromagnetos (substâncias que possuem magnetização espontânea). Essa teoria ficou conhecida como teoria de Weiss ou aproximação de campo médio.

1.2.2 Teoria do campo médio

No vácuo o campo magnético \mathbf{H} e a indução \mathbf{B} são relacionados por:

$$\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}, \quad (1.22)$$

onde μ_0 é a permeabilidade do vácuo e seu valor é de $4\pi \times 10^{-7} \text{N/A}^2$.

Para descrever o estado magnético da matéria introduz-se a magnetização \mathbf{M} para que a indução total se torne:

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}). \quad (1.23)$$

Para que haja magnetização, é preciso que exista momentos magnéticos, e que estes, em média, apontem para a mesma direção. Isso ocorre sempre que houver um campo magnético atuando no sistema ou se a temperatura for suficientemente baixa. Como veremos adiante, este campo pode tanto ser aplicado externamente, quanto produzido por mecanismos de interação entre os próprios momentos magnéticos[22].

Para um vasto conjunto de materiais, especificamente os paramagnéticos e os diamagnéticos, existe uma proporcionalidade entre \mathbf{M} e \mathbf{H} :

$$\mathbf{M} = \chi_m \mathbf{H}. \quad (1.24)$$

A constante de proporcionalidade χ_m é chamada de *susceptibilidade magnética*. Assume valor positivo para materiais paramagnéticos e negativo para materiais diamagnéticos. Os materiais que obedecem a Eq(1.24) são chamados de *meios lineares*. Em vista que da Eq(1.23):

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0(1 + \chi_m)\mathbf{H}, \quad (1.25)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H},$$

onde, $\mu \equiv \mu_0(1 + \chi_m)$, é denominada *permeabilidade do material*. No vácuo, onde não há matéria para se magnetizar, a susceptibilidade é nula. É importante notar que a relação Eq(1.24) não se aplica aos materiais ferromagnéticos.

Em geral, a susceptibilidade dos átomos é composta por uma contribuição diamagnética χ_{dia} e uma contribuição paramagnética χ_{para} . A contribuição paramagnética é devida à orientação dos momentos magnéticos intrínsecos presentes pela ação do campo aplicado[21]. Esses momentos magnéticos derivam do momento angular orbital dos elétrons e de seu spin.

Existem materiais que exibem uma ordem magnética espontânea abaixo de uma certa temperatura crítica, isto é, sua magnetização não aparece como resultado da aplicação de um campo externo. A origem quântica da magnetização espontânea está na interação de troca entre os spins:

$$\mathcal{H} = -2J_{troca} \sum_{i \neq j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.26)$$

onde J_{troca} é a energia de troca, e \mathbf{S}_k o spin do k -ésimo sítio magnético da rede.

Podemos reescrever o hamiltoniano em função das projeções σ dos operadores de spin sobre o momento angular total do íon:

$$\sigma = (g - 1)\mathbf{J}, \quad (1.27)$$

com isso:

$$\mathcal{H} = -2J_{troca}(g - 1)^2 \sum_{i \neq j} \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{J}_j. \quad (1.28)$$

Logo a interação no i -ésimo sítio será:

$$\mathcal{H}^i = -2J_{troca}(g - 1)^2 \sum_j \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{J}_j. \quad (1.29)$$

Pierre Weiss ao criar a teoria de campo médio, considera que cada spin da rede esteja sujeito a um campo proporcional à magnetização [29]. As interações spin-spin entre os elétrons são substituídas por interações entre spins e um campo magnético. Portanto, além do campo externo, existe um campo magnético interno que tende a alinhar os momentos magnéticos denominado de campo de Weiss ou campo molecular.

A aproximação de campo médio consiste em substituímos o operador quântico \mathbf{J}_j pelo seu valor médio térmico $\langle \mathbf{J}_j \rangle_T$, considerando apenas a interação com os primeiros vizinhos, o hamiltoniano Eq(1.29) se torna:

$$\mathcal{H}^i = -2J_{troca}(g - 1)^2 z \mathbf{J}_i \langle \mathbf{J}_j \rangle_T, \quad (1.30)$$

onde o fator z representa o número de primeiros vizinhos do átomo no i -ésimo sítio da rede. Porém, o valor médio de \mathbf{J} está relacionado com a magnetização da amostra através da expressão:

$$\langle \mathbf{J}_j \rangle_T = \frac{1}{Ng\mu_B} \mathbf{M}. \quad (1.31)$$

Escrevendo $\mathbf{J}_i = \frac{\boldsymbol{\mu}_i}{g\mu_B}$, obtemos:

$$\mathcal{H}^i = -2J_{troca}(g - 1)^2 z \frac{\boldsymbol{\mu}_i}{g\mu_B} \cdot \frac{1}{Ng\mu_B} \mathbf{M} = - \left[\frac{2(g - 1)^2 J_{troca} z}{Ng^2 \mu_B^2} \mathbf{M} \right] \cdot \boldsymbol{\mu}_i, \quad (1.32)$$

onde, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$, é chamado de *magneto de Bohr*, sendo m_e a massa do elétron e e a carga elementar. O hamiltoniano acima pode ser rescrito na forma:

$$\mathcal{H}^i = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_m, \quad (1.33)$$

sendo $\mathbf{B}_m = \frac{2(g-1)^2 J_{troca} z}{Ng^2 \mu_B^2} \mathbf{M}$, denominado de campo molecular ou campo médio. Observamos que o campo molecular é proporcional a magnetização da amostra. Weiss postulou que cada momento magnético na amostra sente um campo magnético proporcional à magnetização total da amostra dada por:

$$\mathbf{B}_m = \lambda_m \mathbf{M}, \quad (1.34)$$

onde λ é o parâmetro de Weiss, que expressa a razão entre a grandeza da interação de troca e a grandeza da interação magnética entre elétrons de primeiros vizinhos:

$$\lambda_m = \frac{2(g-1)^2 J_{troca} z}{Ng^2 \mu_B^2}. \quad (1.35)$$

Portanto, a aproximação de campo médio pode ser utilizada para descrevermos o comportamento de um material que apresente magnetização espontânea. Assim podemos representar a magnetização por:

$$M = Ng\mu_B J B_J \left(\frac{g\mu_B \lambda M}{k_B T} \right). \quad (1.36)$$

Chamando $x = \frac{g\mu_B \lambda M}{k_B T}$, a Eq1.36 pode ser resolvida utilizando métodos gráficos (ou numéricos)[1].

A temperatura crítica pode ser encontrada, fazendo x pequeno ($T \approx T_C$). Através da expansão da função de Brillouin, obtém-se para T_C :

$$T_C = \frac{Ng^2 \mu_B^2 \lambda M J(J+1)}{3k_B}, \quad (1.37)$$

que representa a temperatura à qual se dá a transição de fase ferromagnética-paramagnética. Assim a magnetização pra altas temperaturas pode ser reescrita como:

$$M = \frac{T_c}{T - T_c} \frac{H}{\lambda}. \quad (1.38)$$

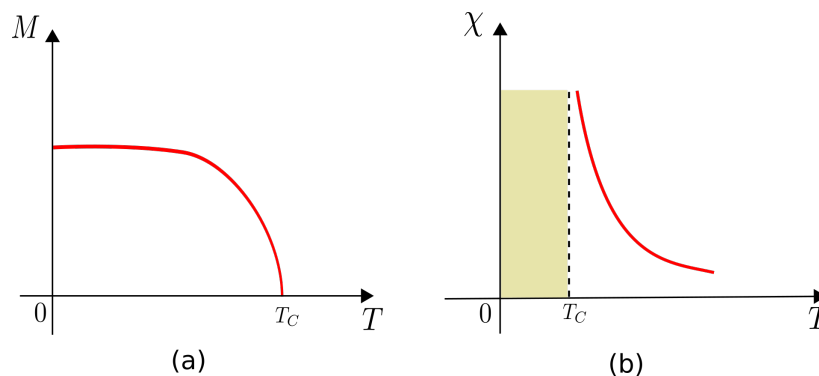
Na aproximação, a magnetização é proporcional ao campo magnético, e o parâmetro que descreve a resposta magnética do sistema ao campo aplicado é a susceptibilidade magnética, dada por:

$$\chi_T = \frac{C}{T - T_c}, \quad (1.39)$$

onde $C = \frac{T_c}{\lambda}$. A expressão acima é conhecida como *Lei de Curie*, em que C é a constante de Curie.

Portanto a teoria de campo médio de Weiss permite determinar ainda a dependência da magnetização espontânea com a temperatura. A magnetização espontânea pode ser representada graficamente conforme vemos na figura 1.3, onde verificamos que a magnetização espontânea vai a zero quando $T = T_c$, isto é, a medida que a temperatura aumenta, as flutuações térmicas acabam destruindo a ordenação dos spins. Como a magnetização espontânea se anula de maneira contínua quando $T \rightarrow T_c$, a transição da fase ferromagnética para fase paramagnética é contínua. Acima da temperatura crítica, a susceptibilidade desses materiais obedecem a Lei de Curie-Weiss. Este tipo de transição é designado por *transição de fase de segunda ordem*.

Figura 1.3: Dependência da magnetização (a) susceptibilidade (b) versus temperatura para o ferromagnetismo.



fonte: Autor

Podemos concluir que a teoria de campo médio ou molecular, proposta por Weiss, apesar da simplicidade algébrica, fornece uma surpreendente visão de muitas propriedades importantes dos ferromagnetos, como a susceptibilidade para altas temperaturas, o calor específico e a dependência da magnetização espontânea com a temperatura, prevendo assim uma transição de fase, na ausência de campo externo. Entretanto, nessa teoria somente as interações entre vizinhos próximos é considerada.

Langevin em 1905 descreveu de modo bastante satisfatório o paramagnetismo assumindo que cada átomo ou molécula de um meio qualquer possuam um momento de dipolo magnético bem definido de módulo m , mas que possam orientar-se aleatoriamente[21, 23]. Para um dado estado de momento angular total \mathbf{J} do átomo, o hamiltoniano da interação

entre o momento magnético \mathbf{m} , e um campo magnético \mathbf{B} é dado por:

$$\mathcal{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}. \quad (1.40)$$

As energias possíveis para o caso em que o campo é estático e aponta na direção z , são dadas por:

$$E_l = -g\mu_B B_0 l, \quad (1.41)$$

com $l = -J, -J+1, \dots, J-1, J$. Observamos que para minimizar a energia de interação, os momentos de spin devem ficar paralelos ao campo magnético externo.

Assim a densidade de energia interna do sistema, onde N representa o número de momentos por unidade de volume, pode ser calculada a partir de:

$$u = \frac{\sum_{l=-J}^{+J} E_l e^{-\beta E_l}}{\sum_{l=-J}^{+J} e^{-\beta E_l}} = -Ng\mu_B B_0 \frac{\sum_{l=-J}^{+J} l e^{-\beta E_l}}{\mathcal{Z}}, \quad (1.42)$$

onde \mathcal{Z} é a função de partição.

Dessa forma podemos calcular a magnetização do sistema, como:

$$M = N\langle m_z \rangle_T = Ng\mu_B \langle J_z \rangle_T = Ng\mu_B \frac{\sum_{l=-J}^{+J} l e^{-\beta E_l}}{\mathcal{Z}}, \quad (1.43)$$

sendo $\langle m_z \rangle_T$ a média térmica da componente z do momento magnético atômico e $\langle J_z \rangle_T$ a média térmica de J_z .

Podemos calcular o valor médio de dipolo magnético, da seguinte forma:

$$\langle m_z \rangle = g\mu_B J B_J(x), \quad (1.44)$$

onde $B_J(x)$ é chamada de função de Brillouin:

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \coth \left[\frac{(2J+1)x}{2} \right] - \frac{1}{2J} \coth \left(\frac{x}{2} \right), \quad (1.45)$$

sendo $x = \frac{g\mu_B B_0}{k_B T}$ com k_B como a constante de Boltzmann, e T a temperatura. A magnetização pode então ser escrita como:

$$M = Ng\mu_B J B_J(x), \quad (1.46)$$

no limite de baixas temperaturas ou campos magnéticos intensos, $x \rightarrow \infty$. Nesse caso, podemos expandir a função de Brillouin:

$$\begin{aligned}\lim_{x \rightarrow \infty} B_J(x) &= \lim_{x \rightarrow \infty} \left[\left(\frac{2J+1}{2J} \right) \coth \left(\frac{2J+1}{2} \right) x - \frac{1}{2J} \coth \frac{x}{2} \right], \\ &= 1 + \frac{1}{2J} - \frac{1}{2J}\end{aligned}\quad (1.47)$$

ou seja:

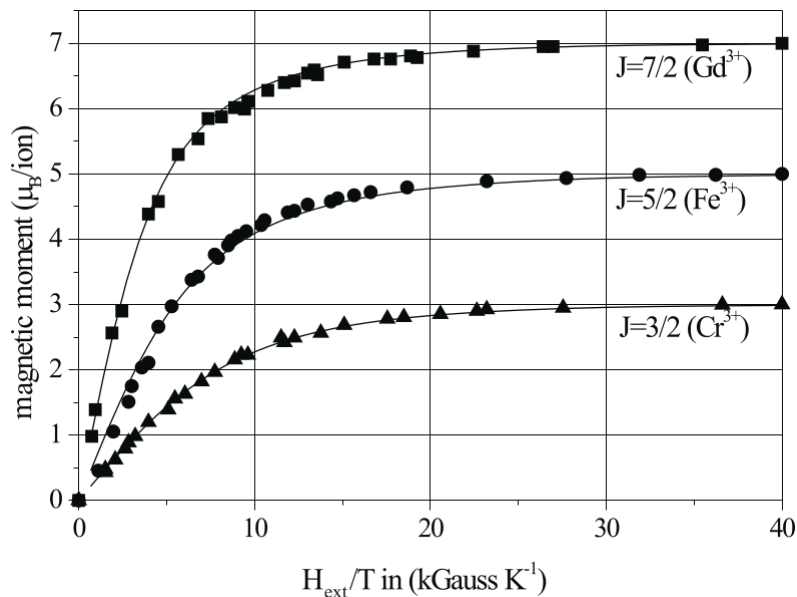
$$B_J(x) \approx 1, \quad x \gg 1, \quad (1.48)$$

assim, a função de Brillouin tende a 1, para qualquer J , de forma que:

$$M \rightarrow Ng\mu_B J, \quad (1.49)$$

o sistema atinge a magnetização de saturação. A figura 1.4 mostra a curva da magnetização para alguns sais paramagnéticos.

Figura 1.4: Curvas do momento magnético para diversos sais paramagnéticos.



fonte: Autor

Para temperaturas altas e campos magnéticos não muito intensos, de forma que $x \ll 1$, pode-se então expandir a função cotangente hiperbólica:

$$\coth(x) \approx \frac{1}{x} + \frac{x}{3}. \quad (1.50)$$

A partir dessa expansão, a função de Brillouin para $x \ll 1$ fica:

$$B_J(x) \approx \left(\frac{J+1}{3} \right) x, \quad (1.51)$$

logo a magnetização torna-se:

$$M = Ng\mu_B J \left(\frac{J+1}{3} \right) x, \quad (1.52)$$

substituindo o valor de x , obtemos:

$$M = \frac{g^2 \mu_0 \mu_B^2 J(J+1)}{3k_B T} H. \quad (1.53)$$

Portanto a susceptibilidade assume o valor:

$$\chi = \frac{N g^2 \mu_0 \mu_B^2 J(J+1)}{3k_B T} = \frac{C}{T}, \quad (1.54)$$

que também segue uma lei de Curie do tipo inverso da temperatura, com a constante de Curie assumindo o valor:

$$C = \frac{N g^2 \mu_0 \mu_B^2 J(J+1)}{3k_B}. \quad (1.55)$$

Já sabemos que a susceptibilidade de um material que não possuem magnetização espontânea, quando submetido a um campo externo, obedece a Lei de Curie. Agora resta-nos saber como um material, que apresenta magnetização espontânea, se comporta na presença de um campo externo.

A análise da susceptibilidade dos materiais, quando sujeitos a campos magnéticos possibilita a classificação do comportamento magnético. Uma descrição dos principais comportamentos magnéticos é dada na seção seguinte.

1.3 Fases Magnéticas

Podemos classificar as diversas fases magnéticas de acordo com a origem microscópica de sua magnetização e de suas interações internas. Os principais tipos de fases magnéticas são o Diamagnetismo, Paramagnetismo, Ferromagnetismo, Antiferromagnetismo, entre outros. A seguir vamos discutir estes, utilizando uma abordagem macroscópica para que se tenha uma ideia dos diferentes tipos de comportamento magnético[21].

1.3.1 Diamagnetismo

A origem do diamagnetismo está associada à tendência das cargas elétricas em se opor à penetração de um campo magnético em um material. Ela pode ser entendida de maneira bastante simplificada com base na Lei de Lenz. Imaginemos um elétron em movimento orbital, ao aplicarmos um campo magnético externo o fluxo magnético que

atravessa a área definida pela órbita do elétron varia, e uma corrente induzida surge com um sentido tal que o fluxo magnético produzido por esta corrente se opõe à variação do fluxo[21]. Nesse caso o momento angular do elétron irá alterar a sua direção, produzindo assim um campo magnético interno tal que se oponha ao campo aplicado externamente. O material será diamagnético se as outras interações são negligenciáveis e é caracterizado por uma pequena susceptibilidade magnética negativa:

$$\chi < 0. \quad (1.56)$$

Em materiais diamagnéticos geralmente a susceptibilidade é muito menor do que a unidade, ou seja, $\chi \ll 1$. São exemplos de materiais diamagnéticos notavelmente o Bismuto ($\chi = -1,66 \times 10^{-4}$), a água ($\chi = -9,05 \times 10^{-6}$), bem como o carbono na forma diamante e na forma grafite, o cobre, mercúrio, a prata, dentre outros.

O diamagnetismo está presente em todos os materiais, ou seja, todo material é diamagnético, mas isto só é observado quando não existem outros tipos de comportamento magnéticos superpostos[21]. Nos materiais diamagnéticos os átomos têm momento angular total nulo, ou seja, não possuem momento de dipolo magnético intrínseco, ele é induzido pelo campo magnético externo.

1.3.2 Paramagnetismo

O paramagnetismo esta associado com a tendência que os momentos de dipolo magnético tem de se alinhar ao campo aplicado, contrariamente ao efeito diamagnético em que o meio tende a repelir o campo externo[21]. Em um material paramagnético interações de troca entre momentos de dipolo magnético vizinhos não são relevantes e podem ser negligenciadas em uma primeira aproximação. Dessa forma:

$$\chi > 0. \quad (1.57)$$

Uma variada gama de materiais apresenta uma resposta paramagnética. Podemos citar alguns: óxido ferroso ($\chi = 7,2 \times 10^{-3}$), urânio ($\chi = 4 \times 10^{-4}$), platina ($\chi = 2,6 \times 10^{-3}$), tungstênio ($\chi = 6,8 \times 10^{-5}$), céσιο ($\chi = 5,1 \times 10^{-5}$), alumínio ($\chi = 2,2 \times 10^{-5}$) entre outros. Em condições usuais de temperatura e para baixos valores de campo aplicado o paramagnetismo apresenta uma dependência com a temperatura na forma $1/T$, resultado que foi descoberto experimentalmente por Pierre Curie. Portanto a lei da forma:

$$\chi = \frac{C}{T}, \quad (1.58)$$

onde C é a constante de Curie[21].

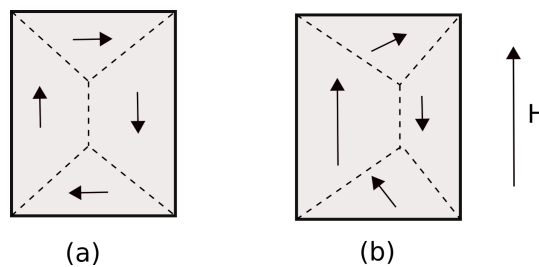
1.3.3 Ferromagnetismo

Os materiais ferromagnéticos possuem momentos magnéticos, devidos ao movimento orbital e ao spin dos elétrons, tão fortes, que cada momento acaba por se orientar espontaneamente de acordo com o campo magnético criado pelos seus vizinhos[21, 23]. Neste caso a magnetização pode existir localmente, mesmo sem campo magnético exterior aplicado ou com um campo muito fraco. Para estes materiais:

$$\chi \gg 1. \quad (1.59)$$

Os materiais ferromagnéticos possuem regiões microscópicas denominadas *domínios*, nos quais os momentos magnéticos estão alinhados. Numa região não magnetizada os domínios estão aleatoriamente orientados, de modo que o momento magnético total é zero[21, 23]. Quando colocado em um campo magnético externo, os domínios tendem a alinhar-se com o campo, ficando a amostra magnetizada, representação é mostrada na figura 1.5. Removendo o campo retém-se pelo menos temporariamente a magnetização na direção do campo original (material se transforma em um ímã).

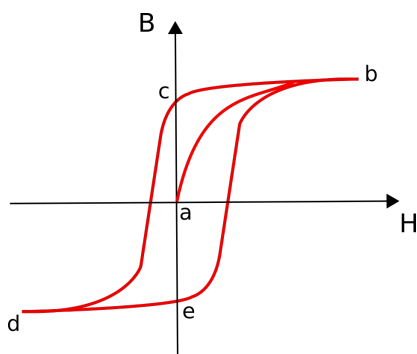
Figura 1.5: Representação esquemática de domínios magnéticos num cristal ferromagnético: a) amostra com magnetização total nula; b) esquema da magnetização da amostra por aplicação de um campo magnético.



fonte: Autor

A altas temperaturas instala-se a desordem e a baixas temperaturas a ordem é mais estável. Para um material inicialmente desmagnetizado pode-se obter uma curva de *histerese* típica que é representada na figura 1.6. Partindo da substância desmagnetizada e aumentando H a magnetização ocorre rapidamente até B atingir uma quase saturação, quando os momentos se alinham[21, 23]. Ao diminuir H , o campo B diminui mas não é zero para $H = 0$. Ao inverter H , B acaba por mudar de sinal. Repetindo o processo para $H > 0$, a trajetória seguida é diferente da inicial.

Figura 1.6: Ciclo de histerese.



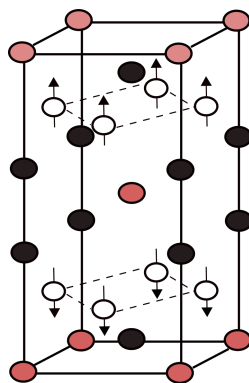
fonte: Autor

A histerese mostra uma capacidade que os materiais ferromagnéticos possuem em reter informação, tendo por isso inúmeras aplicações, como nos discos rígidos de computadores, cartões de crédito e fitas magnéticas.

1.3.4 Antiferromagnetismo

Os materiais antiferromagnéticos são qualitativamente semelhantes aos materiais ferromagnéticos, porém apresentam uma tendência de alinhamento antiparalelo dos spins vizinhos, contrário ao que acontece com o ferromagnetismo[21, 23, 25]. Um exemplo de célula unitária de um antiferromagneto é mostrada na figura 1.7.

Figura 1.7: Célula unitária de um material antiferromagnético YMn_2Ge_2 abaixo de sua temperatura de Néel. Os círculos cor de rosa representam os átomos de Ítrio, os círculos brancos, os átomos de Manganês (magnéticos) e os círculos pretos, os átomos de Germânio.



fonte: Buschow, 2004

Na aproximação de campo molecular, um antiferromagneto pode ser descrito como duas subredes ferromagnéticas, com magnetização $\mathbf{M}_A = M_A \mathbf{k}$ e $\mathbf{M}_B = -M_B \mathbf{k}$, que se alinham antiparalelamente, onde os spins em cada uma delas sentem um campo médio devido à própria subrede e à subrede oposta. Na presença de um campo externo $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{k}$, e altas temperaturas, a magnetização em cada subrede pode ser escrita como,

$$M_A = \frac{C}{T}(B_0 - \lambda M_B + \lambda' M_A) \quad (1.60)$$

$$-M_B = \frac{C}{T}(B_0 - \lambda M_A + \lambda' M_B) \quad (1.61)$$

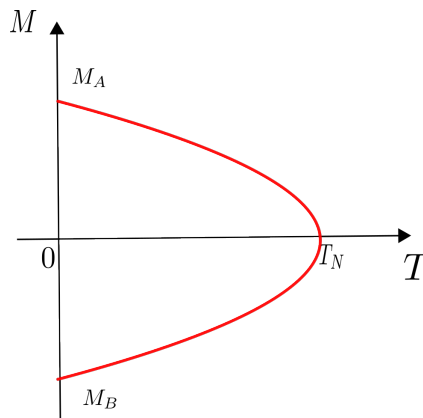
onde λ e λ' são as constantes de campo molecular, inter e intra-rede. É possível ainda obter a susceptibilidade magnética, através de uma teoria do campo molecular de Weiss [25, 29], encontrando assim o seguinte resultado:

$$\chi = \frac{C}{T - T_N}, \quad (1.62)$$

onde T_N é denominada de temperatura de Néel. Quando um material antiferromagnético atinge a temperatura de Néel, ocorre uma transição de fase do antiferromagnetismo para o paramagnetismo de Currie-Weiss[21, 23, 25].

Para valores de temperatura abaixo da temperatura de Néel, temos que a magnetização de cada subrede separadamente tem valores de mesmo módulo, porém sinais opostos resultando numa magnetização total nula, de acordo com a figura 1.8.

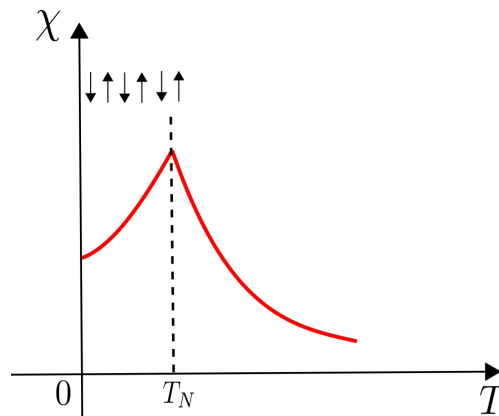
Figura 1.8: Comportamento do magnetização em função da temperatura para valores abaixo da temperatura de Néel para as sub-redes.



fonte: Pereira, 2008[11]

Portanto, num arranjo antiferromagnético o momento magnético é nulo em temperaturas inferiores a temperatura de Néel. Nessa região a susceptibilidade, ao contrário do paramagnetismo, diminui com a diminuição da temperatura, conforme estudos feitos por Van Vleck[14] e comprovados por experimentos usando difração de nêutrons[15]. Em $T = T_N$ a susceptibilidade de um material antiferromagnético não é infinita, mas possui um vértice não muito acentuado conforme a figura 1.9.

Figura 1.9: Susceptibilidade magnética em função da temperatura para o antiferromagnetismo.



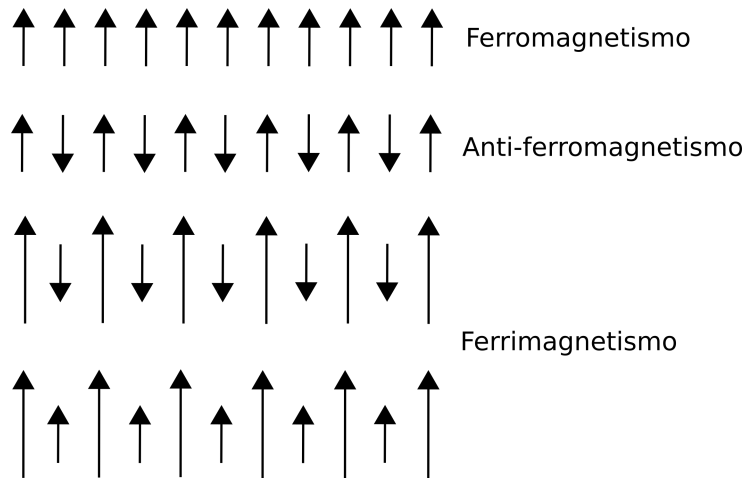
fonte: Pereira, 2008[11]

1.3.5 Ferrimagnetismo

Assim como o ferromagnetismo, o ferri e o anti-ferromagnetismo são dois fenômenos em que as interações entre spins não podem ser desprezadas, mas para que ocorram é necessário que a rede cristalina do material seja composta de duas sub-redes de tal modo que as interações de troca sejam diferentes entre os primeiros e os segundos vizinhos. Aqui, ao contrário do que ocorre no antiferromagnetismo, a magnetização das subredes não são iguais e, assim, a diferença entre as duas magnetizações dará origem a um forte magnetismo.

O artigo publicado em 1948 por Néel [8–10] forneceu a chave para a compreensão teórica das ferritas, a palavra ferrimagnetismo é devido a elas. Substâncias ferrimagnéticas exibem uma magnetização espontânea substancial à temperatura ambiente e abaixo de uma temperatura crítica como ferromagnetos. Esses materiais não correspondem à magnetização de saturação esperada para os íons paramagnéticos constituintes, correspondendo ao alinhamento paralelo destes quando $T \rightarrow 0$. A figura 1.10, apresenta de modo simplificado uma representação dos três fenômenos.

Figura 1.10: Representação pictórica do ferromagnetismo, anti-ferromagnetismo e ferrimagnetismo.



fonte: Autor

1.4 Magnetismo em Baixas Dimensionalidades

Sistemas físicos em baixas dimensões despertam grande interesse da comunidade científica desde 1925, quando Ernest Ising propôs a solução para o modelo teórico de um sistema magnético unidimensional. A baixa dimensionalidade pode facilitar um tratamento teórico exato. Materiais reais são $3D$, mas comportam-se efetivamente como sistemas de baixa dimensão, uma vez que, as interações de troca que levam ao acoplamento magnético são muito mais fortes em uma ou duas direções espaciais do que nas restantes.

Do ponto de vista teórico, pode-se tratar esses sistemas magnéticos através de spins localizados em diferentes sítios ao longo de uma determinada topologia de rede.

Sistemas magnéticos unidimensionais têm atraído considerável atenção teórica desde o trabalho pioneiro de Bethe[31], descrevendo a técnica do “Bethe ansatz” que foi construída para se encontrar o estado fundamental exato do modelo antiferromagnético quântico proposto por Heisenberg[34], para o caso unidimensional. Em alguns casos, é possível calcular exatamente a energia do estado fundamental, o espectro de excitação e as quantidades termodinâmicas dos sistemas magnéticos uni e bidimensionais. Um ponto importante no estudo de sistemas magnéticos de spins com baixa dimensionalidade é que a curva de magnetização do modelo antiferromagnético nem sempre apresenta um cresci-

mento contínuo, partindo do valor de saturação nulo, com o aumento do campo magnético externo.

Em certos sistemas, a curva de magnetização exhibe platôs em certos valores racionais da magnetização por sítio. Osgikawa e colaboradores[32] encontraram uma condição para a ocorrência dos platôs de magnetização em modelos quase unidimensionais pela generalização do exemplar “de Land surface model”[33], quando incluído o campo externo magnético.

Atualmente pesquisas em sistemas magnéticos de baixa dimensão voltaram a receber muita atenção, depois da descoberta dos supercondutores de alta temperatura[34,35], cuja descrição teórica completa ainda representa um campo em aberto na física. Os Cupratos por exemplo, são compostos que podem exibir o fenômeno da supercondutividade de alta temperatura.

Sistemas magnéticos de baixa dimensão têm sido amplamente explorados no contexto do processamento de informação quântica devido à possibilidade de criação e distribuição de emaranhamento quântico entre unidades específicas de spin agindo como qubits[3,4]. O grau de emaranhamento quântico também foi investigado em modelos híbridos de spin assumindo tanto as interações de troca de Heisenberg como as de Ising[38,39].

A alternância dos acoplamentos de Ising e Heisenberg nas cadeias de spin é motivada pelo fato da maioria desses modelos se torna exatamente solúvel, oferecendo uma compreensão mais profunda do papel das flutuações térmicas e do campo magnético externo no emaranhamento quântico entre os spins vizinhos[40,41].

Nessa perspectiva, os modelos de spin quântico-híbrido clássicos oferecem uma classe interessante de sistemas físicos, que exibem um alto grau de emaranhamento quântico que sobrevive em uma faixa mais ampla de temperaturas e campos magnéticos.

Até o momento, soluções exatas foram encontradas para várias geometrias de modelos, incluindo cadeias alternadas de Ising-Heisenberg, correntes diamantadas, escadas e tubos[42–57]. Recentemente, uma nova classe de modelos de spin quântico híbrido sendo composta de spins de Ising localizados intercalados por elétrons móveis foi introduzida[58,59].

Um modelo híbrido deste tipo foi introduzido pela primeira vez para uma cadeia diamantes e demonstrou exibir várias características não convencionais, como um rico diagrama de fase, platôs de magnetização, curvas de calor específicos[58], bem como um

efeito magnetocalórico pronunciado[59]. O emaranhamento quântico fermiônico entre um par de elétrons intercalantes também tem sido explorado em várias variantes dessa cadeia híbrida de diamantes[51, 60–63].

Até hoje, o estudo de modelos quânticos e/ou clássicos de spin, continua sendo objeto de interesse de diversos pesquisadores, sobretudo devido a sua grande capacidade para prever e reproduzir resultados experimentais nos mais diversos sistemas físicos.

Dentre os vários modelos de cadeias de spin que descrevem sistemas físicos reais já discutidos, um modelo promissor e de particular interesse é o modelo da escada de spins. Motivado pelos recentes avanços experimentais na quantificação do emaranhamento quântico nas cadeias de Bose-Hubbard[37], introduziremos um novo modelo de escada de spins do tipo Ising-Hubbard solucionável na qual o grau de emaranhamento quântico no degrau da escada podem ser analisados analiticamente.

1.5 Organização

O objetivo principal deste trabalho é estudar efeitos magnéticos em sistemas de baixa dimensionalidade, usando um modelo que inclua interações competitivas, flutuações quânticas e que seja exatamente solúvel, apresentando uma série de efeitos recentemente observados em materiais magnéticos.

Após a introdução histórica e uma descrição sucinta dos principais aspectos relacionados às propriedades magnéticas dos materiais e sua modelagem teórica apresentados neste capítulo, no capítulo II descrevemos o comportamento termodinâmico de sistemas magnéticos de baixas dimensões como os modelos de Ising e Heisenberg unidimensionais, ferro e antiferromagnéticos. No capítulo III um estudo sobre emaranhamento quântico.

No capítulo IV, expomos os resultados por nós obtidos no estudo do diagrama de fases e do emaranhamento fermiônico para a cadeia dupla de Ising-Hubbard. No capítulo V, exibimos os diagramas de fases e o comportamento do emaranhamento de formação para o tubo de spins Ising-Hubbard. No capítulo VI, apresentamos nossas conclusões e perspectivas de possíveis desdobramentos.

Modelos Magnéticos

Sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade têm a vantagem de permitir a comparação entre resultados teóricos e experimentais. Apesar de não haver transição de fase em sistemas unidimensionais em temperaturas finitas, efeitos importantes podem ser investigados de forma analítica, o que contribui para uma compreensão mais aprofundada dos fenômenos magnéticos[11]. Além disso, antiferromagnetismo quântico em baixas dimensões é um dos mais fascinantes temas da física da matéria condensada. Em particular, nas cadeias quânticas antiferromagnéticas com valores baixos de spins, o clássico estado de Néel não é mais um auto-estado do Hamiltoniano, devido às fortes flutuações quânticas. Assim, outras fases quânticas são esperadas para ocorrer no estado fundamental[11]. Nesse capítulo apresentaremos os conhecidos modelos de sistemas magnéticos de Ising, Heisenberg e Hubbard, dando ênfase ao caso unidimensional.

2.1 Modelo de Ising

Proposto em 1920 por Wilhelm Lenz ao seu aluno de doutorado Ernest Ising, tinha como objetivo estudar um dos fenômenos mais importantes em matéria condensada, o ferromagnetismo de momentos localizados. O modelo consiste em uma cadeia linear de momentos magnéticos σ_i interagindo com seus primeiros vizinhos, onde um spin σ_i tem apenas dois estados possíveis: “para cima” ou “para baixo”. Podemos, como é convencional, organizar os spins em redes de 1, 2, 3 ou outra dimensão d qualquer. Em 1925, Ising publicou a solução exata para uma cadeia linear ($d = 1$). Em 1944, Lars Onsager produziu uma solução analítica para o modelo de Ising em uma rede quadrada ($d = 2$), com condições de contorno periódicas sem campo aplicado[65].

A energia associada a uma configuração de spins neste modelo é dada por:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,i+1} \sigma_i \sigma_{i+1}, \quad (2.1)$$

onde $\sigma_i = \pm \frac{1}{2}$ denota a variável de spin de Ising localizada no sítio i da cadeia linear. Frequentemente até nos referimos a σ_i como um spin (spin de Ising), mas há de se entender que nesse modelo os σ_i não seguem nenhuma relação de comutação de momento angular. Vendo os spins como momentos magnéticos localizados, teremos para $J > 0$ uma interação ferromagnética e para $J < 0$ uma interação antiferromagnética. No caso do ferromagnetismo, o estado fundamental (de mais baixa energia) é aquele em que os spins estão alinhados, isto é, todos para cima ou todos para baixo. No antiferromagnetismo, o estado fundamental é aquele em que os spins estão anti-paralelos, isto é, cada spin tende a se manter no sentido oposto ao de seus primeiros vizinhos.

A Eq.(2.1) possui esta simetria interessante: se invertermos todos os spins, seu valor continuará o mesmo. A aplicação de um campo magnético externo H quebra esta simetria:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_i \sigma_i, \quad (2.2)$$

restando, entretanto, a simetria para o caso em que o sinal (sentido) do campo também seja invertido.

A agitação térmica influencia o sistema de spins de Ising de modo que a uma temperatura bastante baixa ($k_B T \ll J$) este terá um valor baixo na energia, spins alinhados e uma magnetização elevada. Já a temperaturas altas, os spins estarão apontando

em direções aleatórias, o sistema terá elevada energia e não apresentará magnetização líquida a nível macroscópico. Se baixarmos a temperatura gradualmente, encontraremos um ponto crítico de temperatura onde ocorre uma transição de fase no sistema. Essa transição consiste em passar da fase desordenada (paramagnética, de altas temperaturas) para a fase ordenada (ferromagnética, de baixa temperatura). Esta temperatura crítica é chamada de temperatura de Curie.

Na solução exata para $d = 1$, Ising mostrou que o modelo não apresenta transição de fase a nenhuma temperatura, exceto $T = 0$. Deste modo, a magnetização a campo nulo é nula em qualquer temperatura finita. A susceptibilidade $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$ é finita a qualquer temperatura T . Não há divergência tanto no calor específico quanto na susceptibilidade.

Do ponto de vista da Teoria da Aproximação de Campo Médio, os resultados discutidos anteriormente estão incorretos, uma vez que essa aproximação, indica a existência de uma transição não-trivial ($T \neq 0$). Este problema colocou em dúvida a ideia de que o formalismo da mecânica estatística pudesse ser usado para descrever todos os fenômenos de transição de fase. Pode-se argumentar que a transição de fase que não aparece na solução de Ising é um artifício da aproximação de campo médio. Quando Onsager resolveu o modelo de Ising em duas dimensões, deu fim ao dilema. Isto porque para $d = 2$, o modelo apresenta uma transição de fase de segunda ordem, caracterizada por singularidades na função de partição com divergências no calor específico, susceptibilidade e comprimento de correlação. A temperatura de transição é dada por:

$$\frac{k_B T}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (2.3)$$

Desde a última metade do século XX, o Modelo de Ising tem sido intensivamente estudado, sendo que o modelo com interações entre os primeiros vizinhos em uma rede quadrada tem um papel especial, pois o conhecimento exato da energia, magnetização espontânea e das correlações a campo zero, leva ao conhecimento exato dos expoentes críticos, que são valores que obedecem à característica de universalidade. O modelo de Ising tem sido muito utilizado por ser um modelo bastante simples e ainda assim apresenta muitas propriedades que se aproximam de sistemas reais.

2.2 Técnica da matriz transferência

O objetivo desta seção é descrever como a matriz transferência pode ser usada para resolver modelos de spins clássicos unidimensionais. A ideia é representar a função de partição em termos da matriz transferência. As propriedades termodinâmicas do modelo são totalmente descritas pelo próprio espectro da matriz. Em particular, a energia livre por spin no limite termodinâmico depende apenas do maior autovalor e do comprimento de correlação apenas de dois autovalores através de fórmulas simples.

A aplicação mais simples da técnica da matriz de transferência é a solução exata de modelos de spin unidimensionais com um número finito de vizinhos por sítio e um número finito de estados de spin. Matriz transferência, no entanto, também se mostraram muito úteis na solução de modelos bidimensionais exatamente solúveis. A análise das matrizes de dimensões maiores requer uma matemática mais sofisticada[67].

Usaremos o modelo de Ising unidimensional em um campo magnético como um exemplo explícito de como configurar uma matriz transferência. Este modelo é descrito pelo Hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=0}^N \sigma_i \sigma_{i+1} - H \sum_{i=1}^N \sigma_i, \quad (2.4)$$

onde σ_i e σ_j são as variáveis de spin, J é a energia devido a uma interação entre os sítios representados pelas variáveis de spin, H é o campo externo aplicado ao sistema. Por conveniência, devemos tomar condições de contorno periódicas, ou seja, identificar $\sigma_N \equiv \sigma_0$. A escolha das condições de contorno torna-se irrelevante no limite termodinâmico, $N \rightarrow \infty$.

A função de partição é escrita como:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma_i} \exp(-\beta\mathcal{H}), \quad (2.5)$$

onde \sum_{σ_i} representa o traço sobre todos os estados possíveis do sistema, ou seja, a soma sobre $\sum_{\sigma_i = \pm 1}$ para todos os spins \sum_{σ_i} . A função de partição pode ser facilmente fatorada num produto de vários termos que relacionam apenas dois spins adjacentes:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\sigma} \exp\left(\beta J \sigma_0 \sigma_1 + \beta H \frac{(\sigma_0 + \sigma_1)}{2}\right) \exp\left(\beta J \sigma_1 \sigma_2 + \beta H \frac{(\sigma_1 + \sigma_2)}{2}\right) \quad (2.6)$$

$$\dots \exp\left(\beta J \sigma_{N-1} \sigma_N + \beta H \frac{(\sigma_{N-1} + \sigma_N)}{2}\right),$$

$$\mathcal{Z} \equiv \sum_{\sigma} \mathcal{T}_{0,1} \mathcal{T}_{1,2} \dots \mathcal{T}_{N-1,N}, \quad (2.7)$$

onde

$$\mathcal{T}_{i,i+1} \equiv \exp\left(\beta J \sigma_{N-1} \sigma_N + \beta H \frac{(\sigma_{N-1} + \sigma_N)}{2}\right), \quad (2.8)$$

são os elementos de uma matriz \mathcal{T} com linhas rotuladas pelos valores de σ_i e colunas pelos valores de σ_{i+1} . Escrevendo \mathcal{T} explicitamente, temos:

$$\mathcal{T} = \begin{bmatrix} \exp \beta(J + H) & \exp(-\beta J) \\ \exp(-\beta J) & \exp \beta(J - H) \end{bmatrix}. \quad (2.9)$$

Já se pode compreender o porquê da matriz \mathcal{T} ser conhecida como matriz de transferência, ela transfere a dependência de um spin para seus vizinhos próximos. Portanto, solução exata, para a cadeia de spin de Ising num campo longitudinal, equivale a calcular o traço sobre a matriz \mathcal{T}^N , se asseguramos condições de contorno periódicas.

Para calcular o traço da matriz \mathcal{T}^N utiliza-se a invariância do traço com respeito as permutações cíclicas do produto de matrizes, $Tr[ABC] = Tr[BCA] = Tr[CAB]$ (sendo A , B e C matrizes quadradas). Assim, podemos usar a matriz unitária \mathcal{U} , e sua inversa, \mathcal{U}^{-1} (sendo $\mathcal{U}\mathcal{U}^{-1} = 1$) para converter \mathcal{T} para uma forma diagonal:

$$\mathcal{U}\mathcal{T}\mathcal{U}^{-1} = \Delta = \begin{bmatrix} \lambda^+ & 0 \\ 0 & \lambda^- \end{bmatrix}. \quad (2.10)$$

A equação Eq(2.7) é facilmente simplificada, notando que é um produto matricial escrito em termos das componentes da matriz \mathcal{T} . Tomando o traço sobre os spins $i = 1, 2, \dots, N - 1$ corresponde à realização do produto:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_N &= Tr[\mathcal{T}^N] = Tr[(\mathcal{U}\mathcal{U}^{-1})\mathcal{T}(\mathcal{U}\mathcal{U}^{-1})\mathcal{T}(\mathcal{U}\mathcal{U}^{-1})\mathcal{T} \dots (\mathcal{U}\mathcal{U}^{-1})\mathcal{T}] \quad (2.11) \\ \mathcal{Z}_N &= Tr[(\mathcal{U}^{-1}\mathcal{T}\mathcal{U})(\mathcal{U}^{-1}\mathcal{T}\mathcal{U}) \dots (\mathcal{U}^{-1}\mathcal{T}\mathcal{U})] \\ \mathcal{Z}_N &= Tr[\Delta^N] \end{aligned}$$

Aplicando a equação secular ($\mathcal{T} - \lambda I = 0$), onde I é uma matriz identidade, podemos encontrar os autovalores de \mathcal{T} :

$$\lambda_{0,1} = \exp(\beta J) \cosh(\beta H) \pm \sqrt{\exp(2\beta J) \sinh^2(\beta H) + \exp(-2\beta J)}, \quad (2.12)$$

Com autovetores:

$$\langle \vec{u}_0 | = (\alpha_+, \alpha_-), \quad \langle \vec{u}_1 | = (\alpha_-, -\alpha_+), \quad (2.13)$$

onde:

$$\alpha_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\exp(\beta J) \sinh(\beta H)}{\sqrt{\exp(2\beta J) \sinh^2(\beta H) + \exp(-2\beta J)}} \right). \quad (2.14)$$

Este é o ponto final da solução exata do modelo, desde que toda a termodinâmica pode ser obtida através da função de partição Eq(2.11). Se especificarmos que $h = 0$, na equação Eq(2.12), a função de partição obtida será a mesma independente da condição de contorno assumida, no limite termodinâmico $N \rightarrow \infty$. A expressão final para a energia livre de Helmholtz por spin é dada por:

$$f = -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{Z}_N, \quad (2.15)$$

$$= -kT \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left\{ \lambda_0^N \left(1 + \sum_i \frac{\lambda_i^N}{\lambda_0^N} \right) \right\}. \quad (2.16)$$

$$(2.17)$$

Mas, como $N \rightarrow \infty$, $\left(\frac{\lambda_i^N}{\lambda_0^N}\right)^N \rightarrow 0$, porque a razão é menor que 1 e, portanto,

$$f = -kT \ln \lambda_0. \quad (2.18)$$

Este é um resultado importante, porque muitas vezes é muito mais fácil calcular λ_0 do que todo o espectro de uma matriz. Não é necessário se preocupar com a degenerescência em λ_0 , porque pode-se provar que as matrizes de transferência pertencem a uma classe de matrizes não degeneradas com o maior autovalor positivo λ_0 , dando assim uma energia livre fisicamente aceitável[68].

A energia livre no limite termodinâmico, é:

$$f = -kT \ln[\exp(\beta J) \cosh(\beta H) + \sqrt{\exp(2\beta J) \sinh^2(\beta H) + \exp(-2\beta J)}], \quad (2.19)$$

com $\beta \rightarrow 0$, resulta,

$$f \rightarrow -kT \ln[\exp(\beta J)(\cosh(\beta H) + \sinh(\beta H))] = -J - H. \quad (2.20)$$

A magnetização por spin, pode ser obtida diferenciando-se o negativo da energia livre em relação ao campo magnético:

$$m(T, H) = - \left(\frac{\partial f}{\partial H} \right)_T = \left(\frac{\sinh(\beta H)}{\sqrt{\sinh^2(\beta H) + \exp(-4\beta J)}} \right). \quad (2.21)$$

Para spins não interagentes $J = 0$ (ou equivalentemente $T \rightarrow \infty$), a magnetização se reduz:

$$m(T, H) = \tanh(\beta H), \quad (2.22)$$

como esperado para um paramagneto. Em campo zero a qualquer temperatura finita $m = 0$, como esperado da simetria do modelo, demonstrando que o modelo não explica o ferromagnetismo.

O método da matriz de transferência é útil sempre que a função de partição puder ser fatorada em uma forma como Eq(2.7) e, portanto, expressa como um produto de matrizes. Uma aplicação comum é em sistemas de spins clássicos unidimensionais com interações de alcance finito. O tamanho da matriz transferência depende do número de estados de spins por sítio e do alcance das interações. Para o modelo de Ising unidimensional com interações de primeiro e segundo vizinhos, as linhas e colunas são rotuladas por σ_i, σ_{i+1} e $\sigma_{i+2}, \sigma_{i+3}$ respectivamente e, portanto, a matriz é 4×4 . Conforme o modelo fica mais complicado a utilidade do formalismo depende se a matriz de transferência pode ser diagonalizada analiticamente ou numericamente. O modo pictórico de pensar a matriz de transferência é que ela constrói a rede passo a passo.

2.3 Modelo de Heisenberg

O modelo de Heisenberg [66] foi introduzido em 1928 e pode ser visto como uma generalização do modelo de Ising. Heisenberg propôs um modelo semelhante ao de Ising, porém com os momentos magnéticos σ_i substituídos por operadores de spin \mathbf{S}_i . A descrição quântica de materiais que apresentam propriedades magnéticas, proposta no modelo de Heisenberg[34], assume que a principal contribuição para o forte magnetismo da matéria tem sua origem nas interações quânticas dos agrupamentos de spin dos elétrons pertencentes aos átomos que formam o material. Assim o caráter quântico dos momentos magnéticos passou a ser importante. O Hamiltoniano do modelo de Heisenberg é:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (2.23)$$

onde J é a constante de troca, para $J > 0$ temos um acoplamento ferromagnético e caso contrário, $J < 0$, esse acoplamento é antiferromagnético. A soma deve ser feita sobre

pares de vizinhos mais próximos, pois o termo de troca envolve justaposições de funções de onda que apenas se tornam apreciáveis entre sítios vizinhos.

Podemos introduzir nesse modelo um termo para levar em consideração a presença de anisotropia (existência de uma direção preferencial para os spins apontarem). Nesse caso, o Hamiltoniano pode se escrito da seguinte forma:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \lambda S_i^z S_j^z), \quad (2.24)$$

de onde teremos os seguintes modelos:

- ◆ se $\lambda = 1$, teremos o modelo de Heisenberg isotrópico, caracterizado por não haver nenhuma direção preferencial para os spins apontarem;
- ◆ se $0 < \lambda < 1$, então temos o modelo de Heisenberg de Plano Fácil;
- ◆ $\lambda = 0$, temos o modelo XX ;
- ◆ $\lambda > 1$, temos o modelo de Heisenberg de eixo fácil, que é caracterizado pela preferência dos spins em se alinharem perpendicularmente ao plano xy ;

A este Hamiltoniano também pode ser acrescentado um campo H :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - g\mu_B \sum_i \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i. \quad (2.25)$$

Este modelo, como apresentado acima, é uma aproximação extremamente realista ao caso quântico para temperaturas próximas a T_c .

Uma aproximação simples para calcular a energia do estado fundamental do modelo de Heisenberg é a de campo médio. A ideia básica dessa aproximação é substituir um sistema de spins interagentes por um spin clássico em um meio onde atua um campo magnético médio, produzido por todos os outros spins.

2.4 Modelo de Hubbard

O modelo de Hubbard foi introduzido na década de 1960 pelo físico britânico John Hubbard, com o objetivo de descrever os graus de liberdade eletrônicos dos sólidos. Em

poucas palavras, o modelo descreve a competição entre a energia cinética dos elétrons, que tende a distribuir as funções de onda e a interação elétron-elétron, que tende a localizá-las.

Atualmente, o modelo de Hubbard tem sido usado no estudo de sistemas fortemente correlacionados e de super redes magnéticas. Considera-se que este é o modelo padrão da física do estado sólido. A principal razão disso é a inclusão da correlação eletrônica, que faz com que, apesar da aparente simplicidade, o mesmo descreva de forma eficiente muitos sistemas experimentais.

No modelo de Hubbard de um único orbital por sítio, os elétrons estão distribuídos nos sítios da rede, e cada sítio pode estar vazio ou conter 1 ou 2 elétrons. Neste último caso, os elétrons têm que ter spins opostos devido ao princípio de exclusão de Pauli. A mobilidade eletrônica é introduzida no modelo através da energia de hopping ou transferência entre sítios e os elétrons podem interagir entre si ou com o núcleo.

Em uma dimensão, o Hamiltoniano pode ser escrito no formato da segunda quantização, na forma:

$$H = -t \sum_{j=1}^N \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + h.c.) + U \sum_{j=1}^N n_{j\uparrow} n_{j\downarrow}, \quad (2.26)$$

onde N é o número de sítios. O primeiro termo à direita da equação é a energia cinética. O segundo representa a interação entre elétrons, ou seja, a energia Coulombiana. O operador $c_{i,\sigma}^\dagger$ cria um elétron no sítio i com spin σ , enquanto o operador $c_{i,\sigma}$ destrói um elétron no sítio j com spin σ . Já o operador $n_{i,\sigma}$ é denominado operador número e sua função é contar o número de partículas com spin $\sigma = \uparrow\downarrow$ em cada sítio i . Por serem operadores fermiônicos (que obedecem a estatística de Fermi-Dirac) satisfazem as seguintes relações de anticomutação,

$$\{c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma'}^\dagger\} = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (2.27)$$

$$\{c_{i,\sigma}, c_{j,\sigma'}\} = 0. \quad (2.28)$$

Emaranhamento

O conceito de emaranhamento é uma das principais características da mecânica quântica, sendo base para tecnologias emergentes, tais como computação quântica, criptografia quântica e tem sido usado para experiências como o teletransporte quântico[69–71]. Por isso é de fundamental importância tanto o entendimento quanto a quantificação do emaranhamento em sistemas quânticos. Neste capítulo, faremos uma breve discussão do “paradoxo EPR” e da desigualdade de Bell mostrando como a ideia de emaranhamento está ligada aos fundamentos da mecânica quântica, não havendo análogo clássico para esse fenômeno. Em seguida, discutiremos as formas de caracterização e quantificação do emaranhamento.

3.1 EPR e desigualdade de Bell

Uma questão importante dentro da mecânica quântica era se partículas separadas a grandes distâncias poderiam manter uma conexão tal que, as medidas realizadas sobre uma afetaria a outra[72–74].

Alguns dos fundadores da mecânica quântica, como Albert Einstein e Erwin Schrödinger, se sentiam desconfortáveis com a impossibilidade de se fazer previsões mais precisas de estados quânticos. Einstein pretendia mostrar que a teoria quântica era uma teoria incompleta, sendo assim necessário uma teoria além da mecânica quântica que pudesse prever com precisão o comportamento das partículas[72, 73]. Schrödinger foi quem introduziu a ideia de emaranhamento para descrever essa impossibilidade de se fazer previsões mais precisas de estados quânticos. Segundo a teoria quântica, as propriedades das

partículas podem ser emaranhadas de tal forma que seu valor conjunto é conhecido com precisão, mas os valores individuais continuam completamente imprecisos. Isso se deve ao fato da teoria quântica não permitir obter resultados a partir de uma única medição de forma determinística, gerando com isso uma variedade de paradoxos.

Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen (conhecidos em conjunto como EPR)[75], analisaram dois elétrons emaranhados bem afastados um do outro. Supondo que os spins das partículas estejam emaranhados de tal forma que, quando medidos segundo a mesma direção, resultam sempre valores opostos. Por exemplo, durante a medida do spin de um elétron encontra-se que ele aponta para cima, então o outro apontará para baixo, ou seja, se você medir a orientação do spin para cima, o outro instantaneamente apontará para baixo, de modo que o emaranhamento existe independentemente da distância entre as partículas[77–81]. Einstein se recusou a aceitar esse conceito, denominando-o de “ação fantasmagórica à distância”.

A análise desse caso foi publicado em 1935 por EPR, partindo de duas hipóteses. Primeira, se os cientistas podem prever o resultado de uma medida com precisão, deve existir alguma propriedade da natureza que corresponda a esse resultado, tal propriedade é denominada por Einstein de “elemento de realidade” [82]. Segundo, um evento em um local não pode afetar instantaneamente um evento em outro local distante, isto é, as influências não podem se propagar mais rápido do que a velocidade da luz. Segundo EPR, se essas condições forem introduzidas na mecânica quântica, obteremos uma contradição. Um exemplo de contradição seria o seguinte[82]. Sejam dois elétrons emaranhados mantidos em locais distantes por dois observadores Alice e Bob, imagine que Alice meça o spin de seu elétron na direção z , ela sabe imediatamente qual será o resultado, se Bob também medir o spin na direção z . Pela teoria de EPR, a componente z do spin do elétron de Bob seria um elemento de realidade. Analogamente, se Alice decide medir o spin na direção x , ela sabe com certeza o resultado da medida do spin do elétron de Bob na direção x . Nesse caso a componente x do spin do elétron de Bob seria um elemento de realidade[82]. Porém Alice e Bob estão muito distantes, a decisão de Alice medir na direção z ou na direção x não pode influenciar no que acontece no local onde Bob se encontra. Isso parece contradizer a teoria quântica que afirma que, pelo chamado princípio da incerteza de Heisenberg, o spin pode ter um valor bem definido somente em uma direção.

A ideia fundamental que está por trás do artigo de EPR é o conceito de realismo

local, ou seja, a hipótese de que objetos físicos possuem propriedades definidas que independem do processo de observação, e de que uma medida feita por um observador não pode influenciar medidas feitas por outro observador, se eles estiverem separados de tal forma que a troca de informações entre eles seja impossível. Tal conflito levou EPR a concluir que a teoria quântica estava incompleta. Eles sugeriram que poderia ser possível resolver essa contradição acrescentando mais variáveis à teoria [76]. Em outras palavras, deve haver uma teoria mais profunda que vá além da mecânica quântica, na qual o elétron possui propriedades adicionais que descrevem seu comportamento quando medidos conjuntamente. Os físicos chamam qualquer teoria sucessora da mecânica quântica que contenha essas variáveis de “teoria de variáveis ocultas locais” (TVOL). O motivo para esse nome é que tais teorias conteriam os elementos necessários para explicar o indeterminismo quântico, mas tais elementos estariam fora do escopo da mecânica quântica, ou seja, estariam ocultos. Sendo ϕ uma variável oculta que determina o valor exato de um observável \mathcal{O} de uma partícula, uma coleção de partículas idênticas terá associada uma distribuição de variáveis ocultas $p(\phi)$. Assim, o valor esperado do observável \mathcal{O} será dado pela média:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int \mathcal{O}(\phi)p(\phi)d\phi. \quad (3.1)$$

Se tal descrição estivesse correta, reproduziria todos os resultados da mecânica quântica, contudo não apresentaria contradição com o realismo local. Entretanto, em 1965 John Bell descobriu uma incompatibilidade entre a mecânica quântica e a teoria de variáveis ocultas. Matematicamente, esta incompatibilidade tomou a forma de um conjunto de desigualdades, hoje conhecidas como desigualdades de Bell, que podem ser violadas apenas por sistemas emaranhados[83].

A explicação, reforçada por verificações experimentais[83], é que a função de onda que descreve a superposição de todos os estados quânticos possíveis existe em todos os pontos simultaneamente. O valor do observável s do sistema A e do observável r do sistema B não são quantidades independentes, mas são obtidos por uma mesma estrutura dentro das equações da física quântica, o que é conhecido como representação de estados emaranhados. No instante em que é feita a medição do subsistema A , todo o resto da função de onda colapsa em um único estado.

O fato da informação entre os estados estar fortemente correlacionada quanticamente poderia implicar que a informação seria transmitida de forma não local, o que

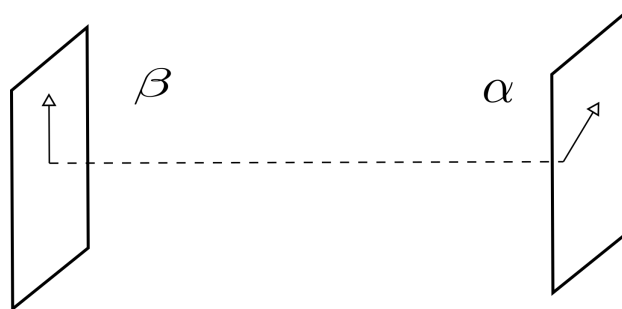
significa que interações entre entidades separadas podem ocorrer instantaneamente, sem que haja qualquer relação material entre elas[83]. É como se não existisse distância física entre dois eventos, nem mesmo o tempo existisse.

3.1.1 Teorema de Bell

Suponhamos um sistema em repouso e com momento angular zero que em dado instante se divide em duas partículas de spin $1/2$. Pela conservação do momento angular, a soma dos spins em qualquer direção tem de ser nula[84,85]. Isso significa que o sistema está no estado “singlete”, dado pelo vetor de estado

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle|-\rangle - |-\rangle|+\rangle). \quad (3.2)$$

Figura 3.1: Direções das componentes de spin.



fonte: Autor

Através dos detectores vistos na Figura.3.1, que medem a componente do spin em direções especificadas pelos vetores unitários α e β , podemos registrar os valores encontrados em uma sequência de medidas preparadas identicamente, na qual a medida do spin das duas partículas nas direções especificadas α e β só é especificada por dois valores, $+1$ (spin para cima) ou -1 (spin para baixo)[84,85]. Consideramos, ainda, uma terceira quantidade que representa o produto das duas medidas.

Chamaremos a média desses produtos de $P(\alpha, \beta)$. Note que, como o spin total é zero, o produto das medidas deve ser sempre -1 se os detectores estiverem alinhados, já que as partículas têm sempre spins opostos em uma dada direção. Logo, $P(\alpha, \alpha) = -1$. Quando os detectores estiverem orientados em sentidos opostos, o produto das medidas

deve ser sempre +1 e a média dos produtos será $P(\alpha, -\alpha) = +1$. Para detectores orientados em direções arbitrárias α e β , não podemos dizer que estes valores dos produtos das medidas sejam sempre os mesmos. Realizaremos uma comparação entre as propriedades da média “clássica” e os resultados da teoria quântica[84, 85].

Para começar, calcularemos a média “clássica” supondo que existem variáveis ocultas. Isso significa que a projeção $A(\alpha, \lambda)$ do spin da partícula 1 ao longo da direção α está definida por um parâmetro λ , a variável oculta (pode haver mais de uma variável oculta e nesse caso λ representa o conjunto delas)[84, 85]. O “realismo” vem do fato de o valor $A(\alpha, \lambda)$ existir antes da medida, e não ser criado por ela. A imprevisibilidade do resultado das medidas é explicada por não conhecermos o valor da variável oculta λ .

De forma análoga, definimos $B(\beta, \lambda)$ como o valor do spin da partícula 2 ao longo da direção β . A hipótese de localidade está implícita nessas definições, pois estamos supondo que, devido à separação entre os dois aparelhos de medida, $A(\alpha, \lambda)$ não depende da orientação de β , nem $B(\beta, \lambda)$ depende de α . Vamos supor que $A(\alpha, \lambda)$ e $B(\beta, \lambda)$ só podem assumir valores +1 (spin para cima) ou -1 (spin para baixo). Quando os detectores estão alinhados, paralela ou antiparalelamente, temos que $A(\alpha, \lambda) = \pm B(\mp\alpha\lambda)$, para qualquer λ .

A variável oculta λ varia estatisticamente conforme uma distribuição $\varrho(\lambda)$, onde $\int \varrho(\lambda)d\lambda = 1$. A média do produto das medições é dada por,

$$P(\alpha, \beta) = \int \varrho(\lambda)A(\alpha, \lambda)B(\beta, \lambda)d\lambda. \quad (3.3)$$

Porém, $B(\beta, \lambda) = -A(\beta, \lambda)$, de modo que

$$P(\alpha, \beta) = - \int \varrho(\lambda)A(\alpha, \lambda)A(\beta, \lambda)d\lambda, \quad (3.4)$$

tomando uma terceira direção c

$$P(\alpha, \gamma) = - \int \varrho(\lambda)A(\alpha, \lambda)A(\gamma, \lambda)d\lambda. \quad (3.5)$$

Logo,

$$P(\alpha, \gamma) - P(\alpha, \beta) = - \int \varrho(\lambda) [A(\alpha, \lambda)A(\gamma, \lambda) - A(\alpha, \lambda)A(\beta, \lambda)] d\lambda. \quad (3.6)$$

Como as funções $A(\alpha, \lambda)$, $A(\beta, \lambda)$ e $A(\gamma, \lambda)$ só podem assumir os valores ± 1 , o quadrado de qualquer uma delas só pode ter como resultado o valor 1. Um caso particular,

$$[A(\beta, \lambda)]^2 = 1, \quad (3.7)$$

assim,

$$P(\alpha, \beta) - P(\alpha, \gamma) = - \int \varrho(\lambda) [1 - A(\beta, \lambda)A(\gamma, \lambda)] A(\alpha, \lambda)A(\beta, \lambda)d\lambda. \quad (3.8)$$

O módulo dessa diferença obedece à desigualdade

$$|P(\alpha, \beta) - P(\alpha, \gamma)| \leq - \int |\varrho(\lambda) [1 - A(\beta, \lambda)A(\gamma, \lambda)] A(\alpha, \lambda)A(\beta, \lambda)|d\lambda. \quad (3.9)$$

Como $\varrho(\lambda) \geq 0$, $[1 - A(\beta, \lambda)A(\gamma, \lambda)] \geq 0$ e $|A(\alpha, \lambda)A(\beta, \lambda)| = 1$, a desigualdade se reduz

$$|P(\alpha, \beta) - P(\alpha, \gamma)| \leq - \int \varrho(\lambda) [1 - A(\beta, \lambda)A(\gamma, \lambda)] d\lambda, \quad (3.10)$$

a qual pode ser reescrita como,

$$|P(\alpha, \beta) - P(\alpha, \gamma)| \leq 1 + P(\beta, \gamma). \quad (3.11)$$

Esta é a desigualdade de Bell [83], que deve ser obedecida por qualquer teoria realista e local. A mecânica quântica prevê que $P(\alpha, \beta) = -\alpha.\beta$. Podemos ver que, para determinadas orientações dos vetores unitários, a desigualdade de Bell é violada.

Com esses resultados, a mecânica quântica se mostra incompatível com qualquer teoria de variáveis ocultas locais. A ideia de Einstein, de completar a teoria quântica com variáveis que restaurassem o realismo e impusessem a localidade, é impraticável. Ou o realismo ou a localidade devem ser abandonados. A desigualdade que obtivemos acima é apenas uma de muitas relações equivalentes que podem ser demonstradas, conhecidas coletivamente como desigualdades de Bell. A mais conhecida é a desigualdade de Clauser-Horne-himony-Holt(CHSH)[86].

3.2 Estados emaranhados

O emaranhamento é uma das propriedades mais intrigantes da mecânica quântica, manifesta-se como um tema de difícil interpretação e inclusive sua definição formal ainda é um tema em aberto. Ele é caracterizado pelas correlações entre diferentes partes de um sistema que constituem um estado global. Tais correlações são de natureza quântica e por isso é de extrema importância na distinção entre sistemas quânticos e clássicos.

Imagine dois sistemas físicos, a princípio completamente independentes. O primeiro descrito por funções definidas em um espaço de Hilbert de dimensão N e o segundo por funções definidas no espaço de Hilbert de dimensão M .

Agora considere o sistema composto por esses dois espaços de estados. O espaço de Hilbert correspondente, denotado por \mathcal{H} , terá dimensão $N \times M$ e será formado a partir do produto tensorial entre \mathcal{H}^A e \mathcal{H}^B . Como os dois sistemas constituintes são independentes, um estado do sistema global $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ fica completamente definido uma vez definidos os estados $|\psi_m^A\rangle$ e $|\psi_n^B\rangle$.

Um estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ é denominado de estado produto e pode ser escrito como,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M C_{mn} |\psi_m^A\rangle \otimes |\psi_n^B\rangle, \quad (3.12)$$

sendo a matriz C , cujos elementos são C_{mn} , em geral retangular, já que as dimensões dos espaços de Hilbert podem ser diferentes. O estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}^A \otimes \mathcal{H}^B$ é denominado de emaranhado se ele não puder ser escrito como um produto tensorial dos estados de cada subsistema. Se for possível fatorá-lo, ou seja, expressá-lo na forma de um produto tensorial, dessa maneira, os sistemas constituintes seriam então não correlacionados, isto é, completamente independentes.

É vantajoso obtermos uma forma diagonal para a matriz C . Isso pode ser realizado através da decomposição do valor singular $C = UDV$, sendo U uma matriz quadrada e unitária, D uma matriz diagonal e V uma matriz retangular com linhas ortonormais. Seja $\lambda_n = D_{n,n}$ então temos,

$$|\psi\rangle = \sum_{m,n,k} U_{m,k} \lambda_k V_{k,n} |\psi_m^A\rangle \otimes |\psi_n^B\rangle, \quad (3.13)$$

de onde obtemos a decomposição de Schmidt[87],

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1} \lambda_k |\phi_k^A\rangle \otimes |\phi_k^B\rangle, \quad (3.14)$$

sendo,

$$|\phi_k^A\rangle = \sum_{m=1}^M U_{m,k} |\psi_m^A\rangle, \quad (3.15a)$$

$$|\phi_k^B\rangle = \sum_{n=1}^N V_{k,n} |\psi_n^B\rangle. \quad (3.15b)$$

As vantagens de expressar $|\phi\rangle$ nesta base é que $|\phi_j\rangle$ são ortonormais em ambas as partes e que $|\lambda_n|^2 = 1$. Observe que λ_n descreve a estrutura do emaranhamento, uma vez que se no caso limite $\lambda_1 = 1$ e $\lambda_n = 0$ para $n > 1$, temos na soma Eq(3.14), que corresponde a um estado produto, ou seja, um estado não emaranhado. Já se $\lambda_n = \frac{1}{M}$

para todo n (supondo que $M \leq N$), temos todos os termos com mesmo peso, logo um estado de máximo emaranhamento.

Nem sempre é fácil saber se um vetor de estado global $|\psi\rangle$ pode ou não ser escrito como produto direto de outros vetores de estado. É provável que um estado global $|\psi\rangle$ não possa ser escrito como produto direto de outros dois estados em uma determinada base $|n\rangle$ e $|m\rangle$, e ser escrito como produto direto em outra base diferente $|p\rangle$ e $|q\rangle$. Assim, uma escolha “inadequada” de base pode dificultar a decomposição do estado global como produto direto de estados e com isso levar a uma classificação equivocada de um estado não-emaranhado como emaranhado.

Quando o sistema é descrito em termos da sua matriz densidade, a escolha dessa base “ideal” é dispensada. Por isso vale a pena construir um procedimento capaz de distinguir estados emaranhados de não-emaranhados em termos de matrizes densidade. Onde podemos definir a matriz densidade de um sistema descrito por um espaço vetorial $|\psi\rangle$, da seguinte forma[88],

$$\rho = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad (3.16)$$

que satisfaz as propriedades $\rho^\dagger = \rho$, $Tr(\rho) = 1$ e $\rho \geq 0$, ou seja, todos os seus autovalores são não negativos.

Se um sistema é descrito pela soma de N estados vetoriais $|\psi_n\rangle$, $n = 1, \dots, N$, sua matriz densidade na forma de Schmidt é dada por

$$\rho = \sum_{n,n'} \lambda_n \lambda_{n'} |\phi_n^A, \phi_n^B\rangle\langle\phi_{n'}^A, \phi_{n'}^B|. \quad (3.17)$$

Já que estamos interessados em um sistema bipartido, necessitamos de uma ferramenta que descreva individualmente cada subsistema do sistema composto. Tal descrição é obtida através da matriz de densidade reduzida, definida por[88]

$$\rho_A = Tr_B(\rho) \quad \rho_B = Tr_A(\rho). \quad (3.18)$$

Dessa forma, escolhendo um dos subsistemas, toda a informação sobre esta parte pode ser obtida traçando sobre os graus de liberdade da outra parte. De modo geral, a matriz densidade reduzida ($i = A, B$) para um dado sistema é dada por,

$$\rho_i = \sum_j |\lambda_j|^2 |\phi_j^i\rangle\langle\phi_j^i|. \quad (3.19)$$

Um sistema global composto por dois subsistemas de dois níveis, pode ser usado como exemplo, para explorarmos os conceitos introduzidos até aqui. Um sistema de dois níveis pode ser formado pelas duas polarizações possíveis de um fóton, onde o sistema global conteria os graus de liberdade de 2 fótons, cada um com duas polarizações.

Para um sistema de dois níveis, um estado qualquer fica caracterizado pela superposição de seus dois estados base, $|+\rangle, |-\rangle \in \mathcal{H} = \mathbb{C}^2$, que pode ser escrito como

$$|\psi_1\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle, \quad (3.20)$$

onde $a, b \in \mathbb{C}$ e $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

O sistema global é descrito por um espaço de Hilbert dado por $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$. Nesse espaço, um estado global fica dado pela superposição dos estados base $|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle$ e $|--\rangle$ ou seja,

$$|\psi\rangle = a|++\rangle + b|+-\rangle + c|-+\rangle + d|--\rangle, \quad (3.21)$$

onde $a, b, c, d \in \mathbb{C}$ e $|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 = 1$.

Diferentes valores de a, b, c e d formam estados emaranhados ou não. Considerando, $a = d = 0, b = \frac{1}{\sqrt{2}}$ e $c = -\frac{1}{\sqrt{2}}$, o estado se torna

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle). \quad (3.22)$$

Obtemos a matriz densidade,

$$\begin{aligned} \rho &= |\psi\rangle\langle\psi|, \\ \rho &= \frac{1}{2}(|+-\rangle - |-+\rangle)(\langle+-| - \langle-+|), \\ \rho &= \frac{1}{2}(|+-\rangle\langle+-| - |+-\rangle\langle-+| - |-+\rangle\langle+-| + |-+\rangle\langle-+|). \end{aligned} \quad (3.23)$$

Tomando o traço parcial com relação ao segundo grau de liberdade, obtém-se

$$\begin{aligned} \rho_1 &= Tr_2(\rho), \\ \rho_1 &= (\mathbb{I} \otimes \langle+|) \rho (\mathbb{I} \otimes |+\rangle) + (\mathbb{I} \otimes \langle-|) \rho (\mathbb{I} \otimes |-\rangle), \\ \rho_1 &= \frac{1}{2}(|-\rangle\langle-| + |+\rangle\langle+|). \end{aligned} \quad (3.24)$$

O sistema apresenta dois autovalores não nulos, ou seja, o estado do sistema global Eq(3.22) é emaranhado. Podemos observar que quando efetuamos a medida da primeira polarização acabamos determinando a medida da segunda polarização. É interessante

explorar ainda outro aspecto desse caso. Logo, se a primeira polarização for +, a segunda obrigatoriamente será – e vice-versa. Isso significa que, apesar de as duas polarizações não serem correlacionadas a princípio, quando o estado considerado é dado por Eq(3.22), aparece uma correlação entre elas[89].

Podemos associar vários tipos de entropia a esses estados globais constituídos de mais de um subsistema. Essas definições de entropia podem ser usadas, inclusive, para distinguir estados emaranhados e não-emaranhados.

3.3 Medidas de emaranhamento

O emaranhamento quântico exerce um papel de extrema importância em vários tipos de processamento de informação quântica, o que justifica o fundamental interesse em determinar o grau de emaranhamento e quando o estado está maximamente emaranhado.

Existem diversas formas de se quantificar o grau de emaranhamento de um estado quântico, dependendo da abordagem que se quer adotar. Aqui focaremos apenas em sistemas bipartites, discutindo as duas principais medidas de emaranhamento (o emaranhamento de formação e o de destilação) que possuem uma interpretação física relevante [90, 91]. Para finalizar, falaremos sobre algumas medidas de emaranhamento que possuem uma expressão fechada em função do estado quântico (que serão utilizadas mais a frente nesta tese) e estão relacionadas com o emaranhamento de formação (no caso da concorrência) e com o emaranhamento de destilação (no caso da negatividade).

Particularmente em sistemas bipartites, a existência de um estado maximamente emaranhado é assegurada, no sentido de que qualquer estado do sistema pode ser obtido a partir desse estado via operações locais e comunicação clássica (LOCC). Assim, podemos tomar o emaranhamento contido nesse estado como padrão de medida, quando quisermos quantificar o emaranhamento de nosso sistema. Para definir uma medida de emaranhamento, a ideia é considerar um funcional que não aumente sob LOCC, já que emaranhamento não pode ser criado por esse tipo de operação.

Para estados bipartites descritos por uma matriz densidade ρ qualquer, uma boa medida de emaranhamento deve satisfazer as seguintes condições [90–93],

- ◆ O emaranhamento é não negativo nulo para estados separáveis,

$$E(\rho) \geq 0. \tag{3.25}$$

Condição óbvia, já que qualquer estado quântico separável é conhecido por não conter emaranhamento, já um estado inseparável deve conter um grau (positivo) de emaranhamento.

◆ Normalização

$$E(\rho^{max}) = \log_2 d, \quad (3.26)$$

onde d é a dimensão do espaço de Hilbert do subsistema de menor dimensão e ρ^{max} é um estado maximamente emaranhado, para sistemas 2×2 , $E(\rho^{max}) = 1$. Essa condição restringe o número de medidas possíveis.

◆ O emaranhamento não pode aumentar sob operações locais e comunicações clássicas,

$$E(\rho) = E\left(U_A \otimes U_B \rho U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger\right). \quad (3.27)$$

As operações unitárias locais representam apenas uma mudança de base (fisicamente corresponde a evolução temporal dos subsistemas, sem perdas, ocorrendo separadamente) não alterando o grau de emaranhamento.

Caso alguma operação seja realizada em qualquer um dos subsistemas resultando em um estado γ_i com probabilidade p_i , então

$$E(\rho) \geq \sum_i p_i E(\gamma_i), \quad (3.28)$$

Qualquer correlação oriunda do conjunto LOCC deve ser, por natureza, clássica e desta forma o grau de emaranhamento não deve aumentar. O único modo de aumentar o grau de emaranhamento é por interações globais (direta ou indiretamente). Tais condições são comumente aceitas. Medidas de emaranhamento que satisfazem essas condições tem sido chamadas de emaranhamentos monotônicos.

Critérios de separabilidade

Saber se um estado é inseparável ou não, em geral, não é trivial. Para estados puros a desigualdade de Bell representa um teste suficiente já para estados mistos a situação é mais complexa. Como já foi dito anteriormente, um estado é dito separável se a matriz densidade do sistema composto puder ser representada como a soma de produtos diretos,

$$\rho = \sum_i p_i \rho_A^i \otimes \rho_B^i. \quad (3.29)$$

Quando um estado pode ser expressado pela 3.29, o transposto parcial de ρ referente ao subsistema A é, por definição,

$$\rho^{TA} = \sum_i p_i (\rho_A^i)^T \otimes (\rho_B^i). \quad (3.30)$$

Tomando-se a matriz transposta de qualquer operador densidade ρ , em qualquer base ortonormal, obtêm-se outro operador densidade ($\rho^T \equiv \rho^*$) ou seja, outro operador com autovalores não negativos e traço igual a um[94]. Desta forma, se a matriz ρ é separável, ρ^{TA} também representa um operador densidade com traço unitário e autovalores positivos.

Por outro lado, se ao tomarmos o transposto parcial de um operador ρ obtivermos um operador com alguns autovalores negativos, o estado inicial não é semelhante a expressão dada na 3.29 sendo, portanto, inseparável. Essa é uma condição necessária de separabilidade conhecida como critério de Peres[94].

Embora todo estado separável seja Transposto Parcial Positivo (TPP), o inverso não é necessariamente verdade (condição apenas necessária). Existem alguns estados que são inseparáveis mas são TPP. P. Horodecki apresentou alguns exemplos de estados com tal propriedade em sistemas 2×4 e 3×3 .

Horodecki demonstrou que apenas para sistemas 2×2 e 2×3 o critério de Peres é uma condição necessária e suficiente para separabilidade[94]. Desde então esse critério ficou também conhecido como o critério de Peres-Horodecki mas aqui será referido como critério TPP.

3.3.1 Emaranhamento de formação e destilação

O emaranhamento de formação E_f [95], representa o número mínimo de estados maximamente emaranhados que devem ser compartilhados entre duas partes para que outro estado ρ possa ser produzido utilizando apenas LOCC.

Já o emaranhamento destilável E_D [95, 96] toma a rota inversa de E_f . Estamos interessados em saber a fração de estados maximamente emaranhados que podem ser destilados do estado ρ , usando somente LOCC. Assim o emaranhamento que pode ser destilado de ρ é,

$$E_D(\rho) = \lim_{q \rightarrow \infty} \frac{r}{q} \log_2 d, \quad (3.31)$$

onde q é o número de cópias de ρ , r é o número de estados maximamente emaranhados que podem ser obtidos e d é a dimensão do espaço de Hilbert dos subsistemas.

Para um sistema bipartite d -dimensional, um estado puro qualquer pode ser representado na decomposição de Schmidt

$$|\psi\rangle = \sum_{k=1}^d \lambda_k |\phi_k^A\rangle \otimes |\phi_k^B\rangle, \quad (3.32)$$

onde $|\phi_k^A\rangle$ e $|\phi_k^B\rangle$ são os estados ortonormais dos subsistemas A e B , e os λ_k são coeficientes reais e positivos. Logo o emaranhamento de formação desse estado, pode ser definido como a entropia de Von Neumann de um dos subsistemas [100].

Entropia de emaranhamento

Apesar do completo espectro da matriz de densidade dar claramente a assinatura do emaranhamento em sistemas bipartidos, é também desejável termos uma medida simples através de um número. Na última década diversas medidas de emaranhamento têm sido propostas e calculadas para o estado fundamental de diversos sistemas de muitos corpos. A entropia de emaranhamento é, sem dúvida, a quantidade mais comumente calculada para quantificar o emaranhamento. A entropia de von Neumann é obtida da entropia de Renyi, definida como,

$$\mathcal{S}_{i,n} = \frac{1}{1-n} \log \mathcal{Z}_{i,n}, \quad (3.33)$$

onde

$$\mathcal{Z}_{i,n} = \text{Tr}(\rho_i^n), \quad (3.34)$$

define a função partição associada ao grau de liberdade i . Essa função partição pode ser escrita simplesmente como a soma dos autovalores $\lambda_{i,\alpha}$ de ρ_i elevados à n , isto é,

$$\mathcal{Z}_{i,n} = \text{Tr}(\rho_i^n) = \sum_{\alpha} \lambda_{i,\alpha}^n. \quad (3.35)$$

Se $\mathcal{S}_{i,n} = 0$ o sistema é puro, assim os dois subsistemas não são correlacionados e não há emaranhamento. Caso contrário, se $\mathcal{S}_{i,n} \neq 0$, a matriz reduzida ρ_i é mista e os dois subsistemas estão correlacionados, conseqüentemente, emaranhados.

Tomando o limite $n \rightarrow 1$ na definição da entropia de Renyi, obtém-se a entropia de von Neumann,

$$\mathcal{S}_i = -\text{Tr}(\rho_i \log \rho_i). \quad (3.36)$$

Assim como a entropia de Renyi, a entropia de von Neumann é tal que, se $\mathcal{S}_i = 0$, não há emaranhamento e, se $\mathcal{S}_i \neq 0$, há emaranhamento. Para ilustrar esse fato, considere novamente o sistema composto por dois fótons, considerados anteriormente. No caso exemplificado, os autovalores de ρ_1 são degenerados e iguais a $1/2$, tal que a entropia de von Neumann fica dada por

$$\begin{aligned}\mathcal{S}_1 &= -Tr(\rho_1 \log \rho_1) = -\sum_{\alpha} (\lambda_{1,\alpha} \log(\lambda_{1,\alpha})), \\ \mathcal{S}_1 &= -\left(\frac{1}{2} \log \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \log \frac{1}{2}\right) = \log 2,\end{aligned}\tag{3.37}$$

como $\mathcal{S}_i \neq 0$, há emaranhamento.

Entropia de formação para estados mistos

O emaranhamento de formação para um estado misto é definido como o valor mínimo possível para a média do emaranhamento sobre todas as decomposições de ρ em estados puros,

$$E_f(\rho) = \min_{p_i, |\psi_i\rangle} \sum_i p_i E_f(|\psi_i\rangle).\tag{3.38}$$

Na expressão acima o mínimo é tomado para desprezar as correlações clássicas presentes na mistura estatística. Sem a minimização, a quantidade E_f não distingue correlações clássicas de quânticas.

Para estados puros, o processo de formação é reversível, assim a formação de emaranhamento e a destilação de emaranhamento coincidem. No entanto, para misturas estatísticas o emaranhamento necessário para construir um estado misto particular não pode mais ser destilado por completo, assim o emaranhamento de destilação é geralmente menor que a formação de emaranhamento[98]

Para sistemas de dimensões 2×2 e 2×3 todos os estados emaranhados têm uma transposta parcial não positiva[107], tendo uma destilação de emaranhamento não nula. Para um sistema de dimensão 3×3 e sistemas de dimensão maior, existem estados emaranhados que possuem transposta parcial positiva, embora estes estados possuam uma formação de emaranhamento não nulo, eles não tem destilação de emaranhamento. Este tipo de emaranhamento, a partir do qual nenhum emaranhamento de estado puro pode ser

destilado, é chamado de emaranhamento ligado [99, 110]. A destilação de estados emaranhados pode desempenhar um papel análogo a correção de erros em teoria de informação. Por esse motivo existe uma grande procura por protocolos ótimos de purificação para assim aumentar a eficiência no processamento de informação quântica.

3.3.2 Concorrência

Quando ρ descreve um sistema em um estado misto, encontrar sua decomposição em estados puros que minimiza a expressão Eq.(3.38) não é um trabalho fácil. Hill e Wootters [123, 124] mostraram um procedimento algorítmico para calcular o emaranhamento de formação para estados de dois qubits. Mais tarde, Wootters demonstrou que tal procedimento é geral, e que, portanto, há uma fórmula para se calcular o emaranhamento de formação para qualquer estado de dois qubits. Assim é possível expressar o emaranhamento de formação na forma

$$E_f(\rho) = h\left(\frac{1 + \sqrt{1 - \mathcal{C}(\rho)^2}}{2}\right), \quad (3.39)$$

onde $h(x)$ é uma função entropia,

$$h(x) = -x \log_2 x - (1 - x) \log_2(1 - x), \quad (3.40)$$

Wootters [123] definiu a quantidade \mathcal{C} denominada de concorrência, usando a matriz de Pauli σ_y como um operador de spin flip. Para sistemas 2×2 , $\sigma_y \otimes \sigma_y$ transforma estados maximamente emaranhados neles mesmos a menos de uma fase global. Assim, a concorrência para um estado puro $|\psi_i\rangle$, fica

$$\mathcal{C}(|\psi\rangle) = |\langle\psi|\sigma_y \otimes \sigma_y|\psi^*\rangle|, \quad (3.41)$$

onde $|\psi^*\rangle$ é o complexo conjugado de $|\psi\rangle$.

Para um estado puro de dois qubits na forma de Schmidt temos,

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^2 k_{ii} |ii\rangle, \quad (3.42)$$

onde k_1 e k_2 são os coeficientes de Schmidt com a condição $k_1^2 + k_2^2 = 1$.

Aplicando o operador spin flip no estado $|\psi\rangle$, obtemos

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sigma_y \otimes \sigma_y |\psi^*\rangle = -k_2 |11\rangle - k_1 |22\rangle. \quad (3.43)$$

Logo a concorrência para um estado puro de dois qubits é

$$\mathcal{C}(|\psi\rangle) = 2k_1k_2. \quad (3.44)$$

Da mesma forma que no emaranhamento de formação, a concorrência para estados mistos também pode ser definida pelo seguinte método variacional,

$$\mathcal{C}(\rho) = \min_{p_i, |\psi_i\rangle} \sum_i p_i \mathcal{C}(|\psi_i\rangle). \quad (3.45)$$

Contudo, para um estado de dois qubits (puro ou misto), Wootters mostrou que a concorrência pode ser definida como [123],

$$\mathcal{C}(\rho) = \max(0, \sqrt{\lambda_1} - \sqrt{\lambda_2} - \sqrt{\lambda_3} - \sqrt{\lambda_4}), \quad (3.46)$$

onde os λ 's são os autovalores da matriz $\rho(\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y)$ na ordem decrescente.

O emaranhamento de formação e a concorrência são medidas equivalentes de emaranhamento. A quantidade $\mathcal{C}(\rho)$ varia entre 0 e 1, é monotonicamente relacionada com E_f e não aumenta sob operações locais, representando uma boa e facilmente computável medida de emaranhamento.

3.3.3 Negatividade

O conceito de negatividade de um estado bipartite está relacionado ao critério de separabilidade de Peres-Horodecki ou TPP [106, 107]. A medida essencialmente quantifica o grau que ρ^{TA} viola o critério de separabilidade TPP. Ela é baseada na norma do traço da matriz transposta parcial do estado. A norma do traço de qualquer operador Hermitiano é definida como

$$\|A\|_1 = \sqrt{A^\dagger A}. \quad (3.47)$$

Para matrizes densidades de estados (puros ou mistos), todos os autovalores são positivos e então $\|\rho\|_1 = \rho = 1$. Porém a matriz transposta parcial ρ^{TA} pode apresentar autovalores negativos e a norma do traço fica,

$$\|\rho^{TA}\| = 1 + \left| \sum_i \mu_i \right|, \quad (3.48)$$

onde $|\sum_i \mu_i|$ é o valor absoluto da soma dos autovalores negativos de ρ^{TA} .

Vidal e Werner [108] provaram que a negatividade, assim definida, é uma medida monotônica sendo portanto uma boa medida de emaranhamento. Caso ρ seja um estado separável (ou seja não emaranhado) então ρ^{TA} ainda representa uma matriz densidade de estados sendo um operador com apenas autovalores positivos. Desta forma $\|\rho^{TA}\|_1 = 1$ e a negatividade se anula.

Contudo, para estados puros maximamente emaranhados essa quantidade tem valor menor que um, isto é, não está normalizada. Para que a negatividade tenha valor unitário para estados maximamente emaranhados em um sistema $d \times d'$ ($d \leq d'$) ela deve ser definida como [109],

$$N(\rho) = \frac{\|\rho^{TA}\|_1 - 1}{d - 1} = \frac{2}{d - 1} \left| \sum_i \mu_i \right|. \quad (3.49)$$

Embora todo estado separável seja TPP e portanto tenha negatividade nula, existem estados TPP que são inseparáveis [110] (exceto em sistemas 2×2 e 2×3). Desta forma a medida não pode distinguir estados com emaranhamento ligado [110] dos estados separáveis.

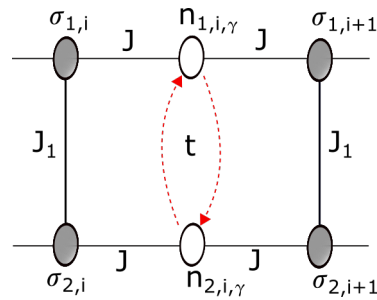
Cadeia dupla de spins Ising-Hubbard

Nos capítulos anteriores, foram feitas breves revisões sobre a teoria necessária para se obter as propriedades magnéticas, termodinâmicas e de emaranhamento em modelos de cadeias de spin. O agrupamento destas técnicas será aplicado ao sistema magnético conhecido como cadeia dupla de spins[?, 111]. Neste capítulo ocorrerá a apresentação do modelo e as definições das propriedades termodinâmicas e de emaranhamento de interesse.

Nas últimas décadas, vários trabalhos têm sido dedicados à investigação de cadeias de spins quânticos de baixa dimensionalidade, de forma ampla no contexto do processamento de informação quântica devido à possibilidade de criação e distribuição de emaranhamento quântico entre unidades específicas de spin agindo como qubits. Muitos compostos magnéticos têm suas interações magnéticas relevantes ao longo das cadeias de spin. Os últimos são, por exemplo, realizados em uma grande família de cerâmicas supercondutoras de óxido de cobre[35, 114–116]. Motivados pelos recentes avanços experimentais na quantificação do emaranhamento quântico nas cadeias de Bose-Hubbard[37], introduziremos uma cadeia de Ising-Hubbard solucionável na qual o grau de emaranhamento quântico nos degraus da escada pode ser analisado analiticamente.

Um modelo que exemplifica características similares às do modelo estudado neste trabalho, é o modelo de uma cadeia dupla de spins de Ising com interação entre os primeiros vizinhos na ausência de campo magnético [111] e o modelo de uma cadeia dupla decorada formada por spins de Ising localizados em sítios nodais intercalados por elétrons itinerantes[111] conforme a ilustrado na Fig.4.1, onde os elétrons itinerantes podem saltar de uma cadeia para outra obedecendo o princípio da exclusão de Pauli. Porém a estes elétrons não é permitido o salto para os sítios nodais.

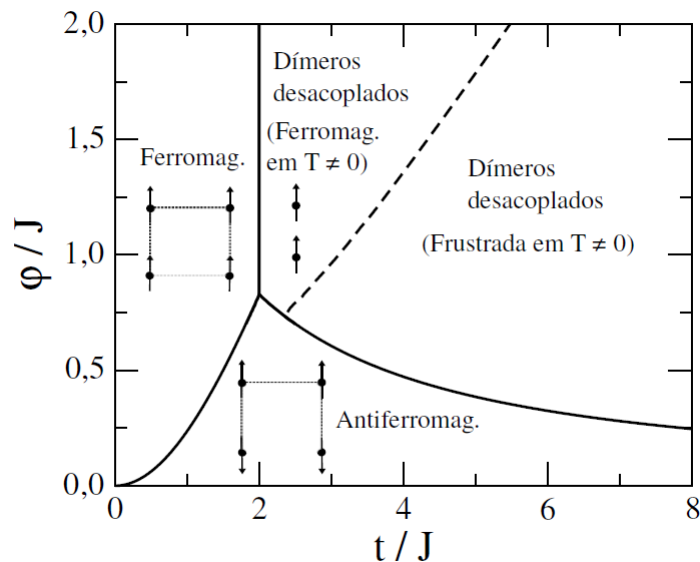
Figura 4.1: Esquema da cadeia dupla formada por spins híbridos.



fonte: Carvalho,[63]

O diagrama de fase[63] com subdivisão da fase de dímeros desacoplados e o comportamento da concorrência fermiônica são mostrados na Fig.4.2. Esta subdivisão revela a existência de uma competição entre J_1/J e t/J . Para valores suficientemente grandes de J_1/J , a fase de dímeros desacoplados ferromagnética prevalece. Já quando o valor de t/J é suficientemente grande, temos a fase de dímeros desacoplados frustrada.

Figura 4.2: Diagrama de fases do estado fundamental para $k_B T/J \rightarrow 0$. A fase de dímeros desacoplados pode assumir a forma ferromagnética ou frustrada nas regiões mostradas na figura.



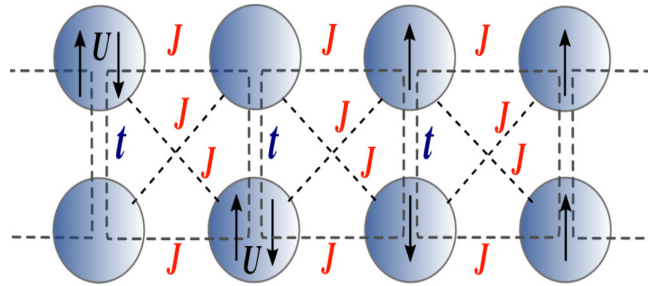
fonte: Carvalho,[63]

Os resultados obtidos mostram que as propriedades magnéticas do estado fundamental de uma escada de spin exibem uma rica fenomenologia associada à competição entre o acoplamento ferromagnético entre os spins de Ising e o acoplamento de hopping entre os elétrons intersticiais[63].

4.1 Modelo

Considerando uma escada híbrida de Ising-Hubbard, como mostra a Fig.4.3. Cada degrau da escada é composto de um dímero de Hubbard contendo dois elétrons móveis que passam por um processo de salto quântico entre dois degraus de um dímero específico caracterizado pela amplitude de salto t .

Figura 4.3: Um esquema da escada de Ising-Hubbard. Os degraus da escada são compostos de dímeros de Hubbard, que contêm dois elétrons móveis por dímero, estando sujeitos ao termo hopping t e ao termo de Coulomb U .



fonte: Autor

Nesse sentido, os elétrons se tornam estritamente localizados quando possuem o mesmo estado de spin devido à validade do princípio de exclusão de Pauli. Os elétrons com spins opostos podem, eventualmente, ocupar o mesmo degrau de um dímero e, neste caso, eles experimentam uma interação de Coulomb.

Embora a maioria dos sistemas físicos esteja sendo sujeita a um termo repulsivo de Coulomb $U > 0$ devido ao caráter repulsivo da interação elétron-elétron, pode eventualmente aparecer um atrativo termo Coulomb $U < 0$ como resultado de interações subjacentes dos elétrons com vibrações moleculares ou estados eletrônicos excitados favorecendo o emparelhamento elétron-elétron tal como ocorre em supercondutores[120, 121].

A interação entre os elétrons dos degraus vizinhos é levada em conta por um acoplamento de troca tipo Ising J . O modelo introduzido retém, assim, uma interação quântica entre dois elétrons do mesmo degrau, ao passo que a interação entre elétrons de degraus vizinhos é tratada classicamente através de um acoplamento de troca de Ising.

O Hamiltoniano do sistema pode ser escrita como,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ J \sum_{l,l'=1}^2 S_{l,i}^z S_{l',i+1}^z + t \sum_{\gamma=\uparrow,\downarrow} (c_{1,i,\gamma}^\dagger c_{2,i,\gamma} + H.c.) + U \sum_{l=1}^2 (n_{l,i,\uparrow} n_{l,i,\downarrow}) - H \sum_{l=1}^2 S_{l,i}^z \right\}, \quad (4.1)$$

onde $c_{l,i,\gamma}^\dagger$ e $c_{l,i,\gamma}$ são os operadores de criação e aniquilação para um elétron com spin $\gamma = \uparrow, \downarrow$ e $n_{l,i,\gamma} = c_{l,i,\gamma}^\dagger c_{l,i,\gamma}$ é o operador número. $S_{l,i}^z$ representa a componente z do operador spin total do dímero no sítio $l = 1, 2$ do i -ésimo degrau, que assume o valor de $S_{l,i}^z = 0$ quando o sítio está vazio ou contém dois elétrons com spins opostos, $S_{l,i}^z = \pm 1$.

4.2 O diagrama de fase

O modelo da cadeia dupla de Ising-Hubbard pode ser representado pelo seguinte Hamiltoniano,

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i + \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i^0, \quad (4.2)$$

onde \mathcal{H}_i^0 representa a matriz sem a parte de interação de troca.

Diagonalizando exatamente a matriz \mathcal{H}_i^0 do Hamiltoniano total (4.1), iniciamos pelo hamiltoniano tipo Hubbard de um degrau isolado, que pode ser colocado na base de estado do degrau em seis configurações eletrônicas possíveis de um único dímero de Hubbard $\{|\uparrow\downarrow; 0\rangle; |0; \uparrow\downarrow\rangle; |\uparrow; \downarrow\rangle; |\downarrow; \uparrow\rangle; |\uparrow; \uparrow\rangle; |\downarrow; \downarrow\rangle\}$. Resumindo os possíveis estados de energia dos spins numa forma matricial,

$$\mathcal{H}_i^0 = \begin{pmatrix} U & 0 & t & t & 0 & 0 \\ 0 & U & t & t & 0 & 0 \\ t & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2H & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2H \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

Os autovalores do dímero Hamiltoniano (4.3) podem ser obtidos por um procedimento simples de diagonalização,

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{U + \sqrt{\Delta}}{2}, \\ \lambda_2 &= \frac{U - \sqrt{\Delta}}{2}, \\ \lambda_3 &= U, \\ \lambda_4 &= 0, \\ \lambda_5 &= -2H, \\ \lambda_6 &= 2H, \end{aligned}$$

onde os respectivos autovetores são dados por

$$\begin{aligned}
|\lambda_1\rangle &= \frac{2t}{\sqrt{\Delta - U\sqrt{\Delta}}} [|\uparrow\downarrow; 0\rangle + |0; \uparrow\downarrow\rangle - \alpha|\uparrow; \downarrow\rangle - \alpha|\downarrow; \uparrow\rangle], \\
|\lambda_2\rangle &= \frac{2t}{\sqrt{\Delta + U\sqrt{\Delta}}} [|\uparrow\downarrow; 0\rangle + |0; \uparrow\downarrow\rangle - \beta|\uparrow; \downarrow\rangle - \beta|\downarrow; \uparrow\rangle], \\
|\lambda_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow; 0\rangle - |0; \uparrow\downarrow\rangle], \\
|\lambda_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow; \downarrow\rangle - |\downarrow; \uparrow\rangle], \\
|\lambda_5\rangle &= |\uparrow; \uparrow\rangle, \\
|\lambda_6\rangle &= |\downarrow; \downarrow\rangle,
\end{aligned}$$

onde,

$$\begin{aligned}
\Delta &= U^2 + 16t^2, \\
\alpha &= \frac{U - \sqrt{\Delta}}{4t}, \\
\beta &= \frac{U + \sqrt{\Delta}}{4t}.
\end{aligned}$$

Após serem obtidos analiticamente os autovalores, construímos os diagramas de fase através da minimização destes. No diagrama estão representadas as seguintes fases no estado fundamental: o paramagnético totalmente saturado (P), o antiferromagnético clássico (AF), o totalmente quântico (Q) e o quântico-clássico (PQ).

O estado paramagnético totalmente saturado com a energia por degrau $E_p = -2H + 4J$ é dado pelo autovetor com todas as células no estado do dímero ferromagnético clássico $|\lambda_5\rangle$,

$$|P\rangle = \prod_{i=1}^N |\lambda_5\rangle_i. \quad (4.4)$$

O segundo estado fundamental possível é o estado antiferromagnético clássico com uma energia por degrau $E_{AF} = -4J$, que é composto por uma alternância regular de degraus totalmente polarizados $|\lambda_5\rangle$ e $|\lambda_6\rangle$,

$$|AF\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} |\lambda_5\rangle_{2i-1} \otimes |\lambda_6\rangle_{2i}. \quad (4.5)$$

As duas fases $|P\rangle$ e $|AF\rangle$ têm um caráter clássico com nenhuma correlação quântica entre os estados de elétrons. O terceiro estado fundamental é totalmente quântico com

energia por degrau $E_Q = \frac{U-\sqrt{\Delta}}{2}$ e todos os degraus no estado do dímero $|\lambda_2\rangle$,

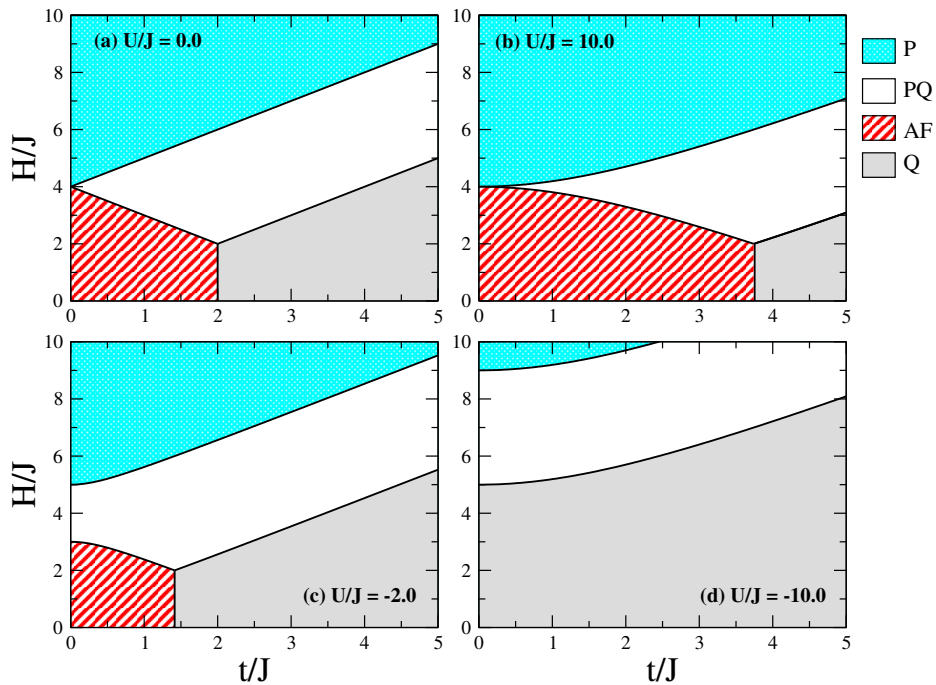
$$|Q\rangle = \prod_{i=1}^N |\lambda_2\rangle_i. \quad (4.6)$$

Este estado não pode ser escrito como um produto direto de estados individuais de dois elétrons móveis no mesmo degrau, o que revela a presença de correlações quânticas entre eles. O quarto estado fundamental com uma energia por degrau $E_{PQ} = -H + \frac{U-\sqrt{\Delta}}{4}$ tem mistura de características quânticas e clássicas porque envolve uma alternância regular do estado do dímero ferromagnético clássico $|\lambda_5\rangle$ com o estado quântico do dímero antiferromagnético $|\lambda_2\rangle$,

$$|PQ\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} |\lambda_5\rangle_{2i-1} \otimes |\lambda_2\rangle_{2i}. \quad (4.7)$$

Na Fig.4.4 apresentamos um conjunto de diagramas de fase no plano $t/J - H/J$ para alguns valores representativos do termo Coulomb.

Figura 4.4: Os diagramas de fase do estado fundamental no plano $t/J - H/J$ para (a) $U/J = 0$, (b) $U/J = 10$, (c) $U/J = -2$ e (d) $U/J = -10$.



fonte: Autor

Na ausência da interação de Coulomb $U = 0$ os limites das fases são funções lineares. Em campos suficientemente baixos, o sistema passa por uma transição de fase descontínua entre o estado antiferromagnético clássico AF e o estado quântico Q em $t/J = 2$. Esses dois estados fundamentais são substituídos pela fase quântica clássica-quântica PQ para campos magnéticos moderados. Finalmente, a fase clássica paramagnética saturada P aparece em campos magnéticos suficientemente fortes.

O termo repulsivo de Coulomb $U > 0$ leva a uma supressão das regiões de parâmetros correspondentes a ambos os estados quânticos Q e PQ . O limite de fase entre o estado antiferromagnético clássico AF e o estado quântico Q , por exemplo, é deslocado para valores da amplitude de hopping maiores que $t/J = \sqrt{U/J + 4}$. Da mesma forma, os limites de fase entre os estados fundamentais clássicos (P e AF) e a fase mista quântica-clássica PQ tornam-se não-lineares (curvas), o que resulta em uma redução da faixa de campo correspondente à fase PQ mista clássica-quântica.

Existem dois regimes distintos para um termo de Coulomb atrativo $U < 0$. Para acoplamento elétron-elétron fracamente atrativo $|U| < 4J$, o diagrama de fase do estado fundamental ainda envolve todos os quatro estados fundamentais disponíveis conforme a Fig.4.4, enquanto que a fase antiferromagnética clássica AF é substancialmente suprimida. A faixa de campos magnéticos correspondentes à fase mista quântica-clássica PQ emergente entre as fases clássicas AF e P geralmente aumenta, enquanto permanece finita mesmo que o termo hopping desapareça $t \rightarrow 0$. No regime fortemente atrativo da interação de Coulomb $|U| > 4J$, a fase de AF clássica é totalmente suprimida e o sistema sofre uma sequência de transições de fase induzidas ($Q \rightarrow PQ \rightarrow P$) ao aumentar-se o campo magnético, independentemente da amplitude de hopping.

4.3 Emaranhamento quântico

Outra discussão interessante que consideramos neste trabalho foi sobre o emaranhamento quântico de sistemas bipartidos entre dois elétrons móveis entre os degraus da escada de Ising-Hubbard. O emaranhamento quântico está intimamente relacionado às correlações não locais presentes em um sistema quântico. Para dois qubits, ele pode ser quantificado pelo emaranhamento de formação [124] dado pela Eq.(3.36) e a concorrência quântica dada pela Eq.(3.46).

Para medirmos o emaranhamento quântico através da concorrência é conveniente escrevermos a matriz densidade $\rho_{i,j} = Tr_{i,j}|\Psi_{i,j}\rangle\langle\Psi_{i,j}|$, onde $Tr_{i,j}$ é o traço sobre todos os sítios com exceção dos i - e j -ésimos sítios. Para o caso dos férmions[126], levando-se em conta o princípio da exclusão de Pauli, temos que cada sítio pode assumir quatro estados possíveis: $|0\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\rangle$ e $|\uparrow\downarrow\rangle$. Portanto, a medida do emaranhamento nos sítios será dada na base correspondente ao produto direto dos subespaços de Hilbert que representam os sítios que interagem, isto é: $|0, 0\rangle, |0, \uparrow\rangle, |\uparrow, 0\rangle$ e $|\uparrow, \uparrow\rangle$ para spin up e $|0, 0\rangle, |0, \downarrow\rangle, |\downarrow, 0\rangle$ e $|\downarrow, \downarrow\rangle$ para spin down[126]. Desse modo, podemos determinar uma medida do emaranhamento entre os sítios i e j , também chamado de emaranhamento local por exibir correlações entre um estado localizado e a outra parte do sistema. Assim quantificaremos o emaranhamento quântico no subespaço de spins em uma determinada célula unitária. Portanto, na base local $|0, 0\rangle, |0, \uparrow\rangle, |\uparrow, 0\rangle$ e $|\uparrow, \uparrow\rangle$, a matriz densidade reduzida pode ser escrita na forma geral:

$$\rho_{1,2} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & z & 0 \\ 0 & z^* & y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad (4.8)$$

onde os elementos podem ser diretamente relacionados às seguintes médias térmicas:

$$\begin{aligned} b &= \langle n_{1,\uparrow} n_{2,\uparrow} \rangle, \\ x &= \langle n_{1,\uparrow} \rangle - \langle n_{1,\uparrow} n_{2,\uparrow} \rangle, \\ y &= \langle n_{2,\uparrow} \rangle - \langle n_{1,\uparrow} n_{2,\uparrow} \rangle, \\ a &= \langle (1 - n_{1,\uparrow})(1 - n_{2,\uparrow}) \rangle \\ z &= z^* = \langle c_{1,\uparrow}^\dagger, c_{2,\uparrow} \rangle. \end{aligned}$$

Para estados puros $|\Psi\rangle$ de um sistema de duas partes (AB), o grau de emaranhamento quântico pode ser calculado diretamente através da realização do traço parcial da matriz densidade $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ sobre os estados de uma das partes. A partir da matriz densidade reduzida $\rho_A = Tr_B \rho$, o emaranhamento quântico intrínseco entre as partes pode ser quantificado através do cálculo da entropia de formação $\mathcal{S} = -\sum_j p_j \ln p_j$, onde p'_j são os autovalores da matriz densidade reduzida. Para estados puros temos $\mathcal{S} = 0$, representando um produto direto de cada estado não emaranhado. Por outro lado, quando $\mathcal{S} = \ln n$ temos um estado com emaranhamento máximo de n estados.

O que verificamos depois de efetuar o traço parcial sobre os estados dos degraus do dímero, foi que a matriz densidade para os estados $|\lambda_3\rangle$ e $|\lambda_4\rangle$ é uma mistura uniforme de dois estados e sua entropia de formação vale $\mathcal{S} = \ln 2$. Por outro lado, os estados $|\lambda_1\rangle$ e $|\lambda_2\rangle$ produzem uma matriz densidade parcial composta em uma mistura desigual de quatro estados. Um cálculo direto fornece para esses estados a entropia de formação,

$$\mathcal{S} = \frac{2}{2 + 2\beta^2} \left[\ln(2 + 2\beta^2) + \beta^2 \ln \frac{2 + 2\beta^2}{\beta^2} \right], \quad (4.9)$$

onde β é o coeficiente de estado definido na seção anterior e atinge um valor máximo de $\mathcal{S} = \ln 4$ para $U = 0$, correspondendo às misturas pares de todas as quatro componentes de estado com orientação de spin antiparalela dos elétrons do dímero. O valor mínimo de $\mathcal{S} = \ln 2$ ocorre quando $|U| \rightarrow \infty$ em que o estado tem os elétrons no mesmo ou em degraus distintos para U fortemente atraente ou repulsivo, respectivamente.

Em temperaturas finitas, o estado do dímero tornar-se-á uma mistura estatística de todos os possíveis auto-estados do dímero. Neste caso, o emaranhamento de formação é o emaranhamento médio mínimo de um conjunto de estados puros que representa a matriz densidade ρ . Um quantificador estritamente relacionado é a concorrência quântica, que é dada pela expressão[124]. A concordância é definida em termos dos espectros da matriz $\rho_{1,2}\tilde{\rho}_{1,2}$ [124], onde $\tilde{\rho}_{1,2} = (\sigma_1^y \otimes \sigma_2^y)\rho^*(\sigma_1^y \otimes \sigma_2^y)$. Sendo Λ_i os autovalores de $\rho_{1,2}\tilde{\rho}_{1,2}$, a concorrência é definida como $\mathcal{C} = \max(0, \sqrt{\Lambda_1} - \sqrt{\Lambda_2} - \sqrt{\Lambda_3} - \sqrt{\Lambda_4})$, com Λ_1 representando o maior autovalor[124]. A expressão final para concorrência fermiônica pode ser escrita como:

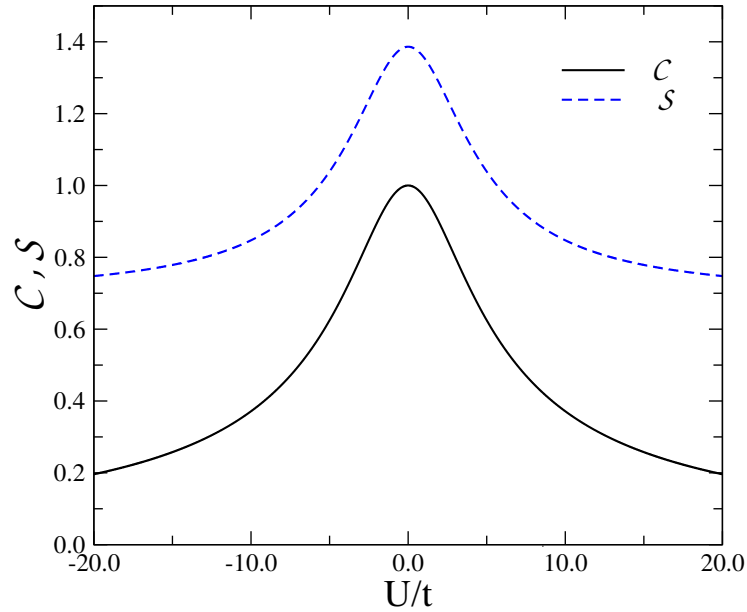
$$\mathcal{C} = 2\max \left\{ 0, |\langle c_{1,\uparrow}^\dagger, c_{2,\uparrow} \rangle| - \sqrt{\langle n_{1,\uparrow} n_{2,\uparrow} \rangle (1 - 2\langle n_{1,\uparrow} \rangle) + \langle n_{1,\uparrow} n_{2,\uparrow} \rangle} \right\}.$$

A concorrência fermiônica no subespaço spin up é nula nos auto-estados não separáveis $|\lambda_3\rangle$ e $|\lambda_4\rangle$. Essa característica reflete o fato de que ele captura apenas uma fração das correlações quânticas subjacentes. No entanto, a concorrência fermiônica torna-se diferente de zero nos outros dois auto-estados $|\lambda_1\rangle$ e $|\lambda_2\rangle$, para o qual adquire o valor diferente de zero $\mathcal{C} = 1/\sqrt{1 + (U/4t)^2}$.

Na Fig.4.5 nós comparamos a entropia de formação e a concorrência fermiônica para o estado emaranhado puro $|\lambda_2\rangle$ em função da razão $\frac{U}{t}$. Ambas as quantidades assumem valor máximo com $U = 0$ para o qual o estado do dímero é uma superposição uniforme de todos os seus quatro estados possíveis com spins antiparalelos. O emaranha-

mento mínimo desses estados ocorre no regime em que $|U| \rightarrow \infty$ onde dois componentes de estado são suprimidos.

Figura 4.5: A entropia de formação \mathcal{S} e a concorrência fermiônica \mathcal{C} como função de U/t para dímeros de autoestados $|\lambda_2\rangle$. Ambas as medidas de emaranhamento têm tendências semelhantes sendo máximas em $U = 0$ e decaem quando $|U|$ decresce. Observe que a concorrência fermiônica desaparece quando $|U| \rightarrow \infty$ enquanto a entropia de formação permanece finita.

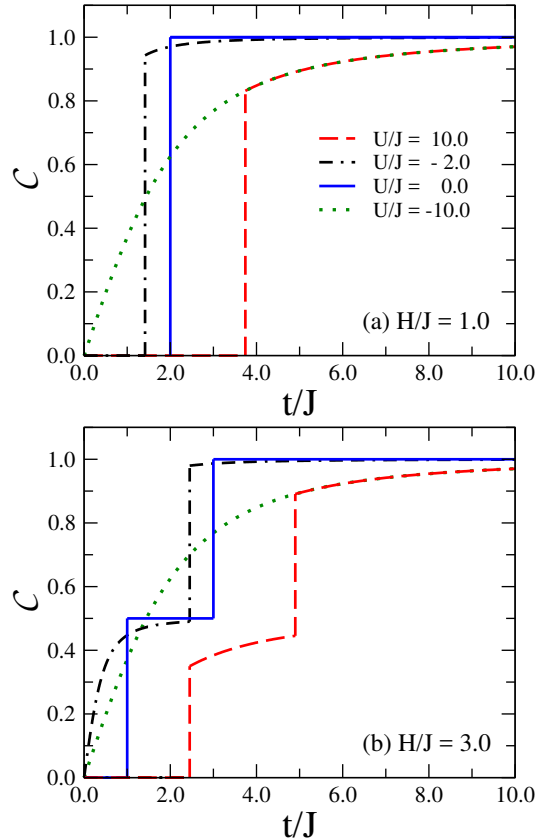


fonte: Autor

Considerando que a concorrência fermiônica também pode ser computada para os estados estatisticamente misturados que aparecem em temperaturas finitas, discutiremos suas principais características sob a luz do diagrama de fases do estado fundamental e a influência das excitações térmicas sobre ele. Assim, os dois estados fundamentais clássicos P e AF possuem $\mathcal{C} = 0$ a temperatura zero. A fase quântica de dímeros Q tem a mesma concorrência quântica fermiônica que o auto-estado $|\lambda_2\rangle$, enquanto a concorrência fermiônica média do estado fundamental quântico-clássico PQ tem metade desse valor. Tendo isso em mente, a concorrência fermiônica quântica exibe um salto descontínuo em todos os limites de fase.

Na Fig.4.6 ilustramos a dependência da concorrência fermiônica em relação a amplitude de hopping nos regimes de campo baixo e campo intermediário para os mesmos valores representativos da interação de Coulomb, como usado anteriormente nos diagramas de fase do estado fundamental.

Figura 4.6: Concorrência fermiônica nos degraus do dímero em função da amplitude de hopping normalizada t/J para dois valores representativos do campo magnético e quatro valores distintos do termo Coulomb U/J . Os saltos descontínuos sinalizam as transições de fase induzidas pelo campo. Um completo emaranhamento é alcançado na fase antiferromagnética quântica Q no limite $t/|U| \rightarrow \infty$.



fonte: Autor

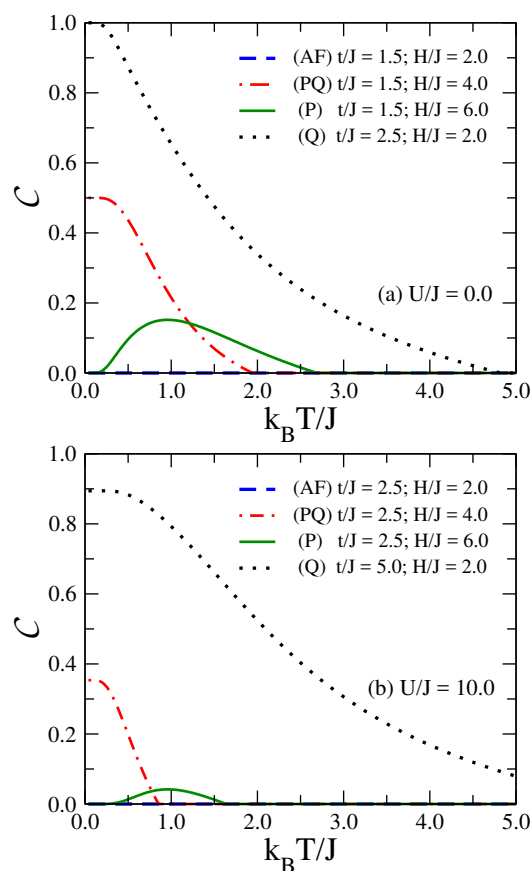
No regime de campo baixo, o sistema exibe uma transição induzida pelo campo da fase antiferromagnética clássica AF para a fase antiferromagnética quântica Q . Observe que o emaranhamento fermiônico máximo $\mathcal{C} = 1$ é alcançado na fase quântica de dímeros Q quando o termo Coulomb está ausente $U = 0$. Note, além disso, que a fase quântica Q torna-se o único estado fundamental possível em campos magnéticos baixos o suficiente para termos atrativos de Coulomb $U/J < -4$.

No regime de campos magnéticos intermediários, os dois saltos descontínuos na concorrência fermiônica sinalizam as transições de fase $AF \rightarrow PQ$ e $PQ \rightarrow Q$, respectivamente. A completa supressão da fase antiferromagnética clássica AF para interações de Coulomb fortemente atrativas, leva a um único salto descontínuo na concorrência fermiônica intimamente ligado à transição de fase conduzida pelo campo $PQ \rightarrow Q$ (ver

a curva $U/J = -2$) ou a um aumento monótono da concorrência fermiônica dentro do estado fundamental do dímero quântico Q (ver a curva $U/J = -10$).

Na Fig4.7 ilustramos a concorrência fermiônica como uma função da temperatura para o caso particular sem a interação de Coulomb e o caso particular com uma forte interação repulsiva de Coulomb.

Figura 4.7: Dependência da temperatura com a concorrência fermiônica para alguns valores representativos do campo magnético, a amplitude de hopping e dois valores do termo Coulomb:(a) $U/J = 0$; (b) $U/J = 10$.

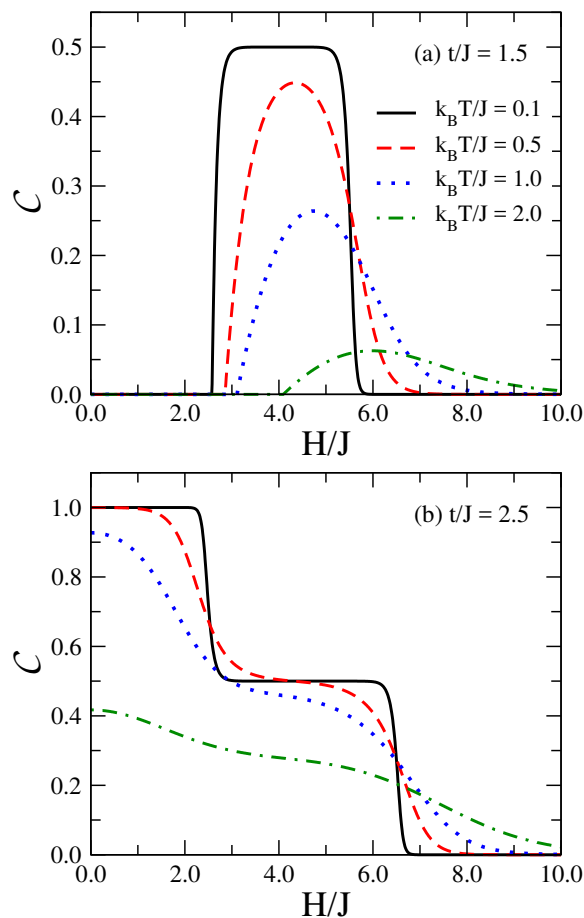


fonte: Autor

Sempre que o estado fundamental tem um emaranhamento fermiônico finito (fases PQ e Q), as flutuações térmicas degradam continuamente as correlações quânticas até que a concorrência fermiônica desapareça acima de uma certa temperatura limiar. No entanto, as flutuações térmicas desempenham papéis bastante distintos acima dos estados fundamentais clássicos. Enquanto a concorrência fermiônica permanece zero para todas as temperaturas acima da fase antiferromagnética clássica AF , algum grau de emaranhamento quântico pode ser induzido termicamente acima da fase paramagnética saturada.

A concorrência fermiônica versus o campo magnético é ilustrada apenas para o caso especial sem a interação de Coulomb, como mostra a Fig.4.8 para algumas temperaturas diferentes.

Figura 4.8: Concorrência fermiônica versus o campo magnético para o caso particular com termo zero de Coulomb $U = 0$ e dois valores da amplitude de hopping, que orientam o estado fundamental a campo zero do sistema investigado para:(a) a fase antiferromagnética clássica AF ; (b) a fase paramagnética saturada P .



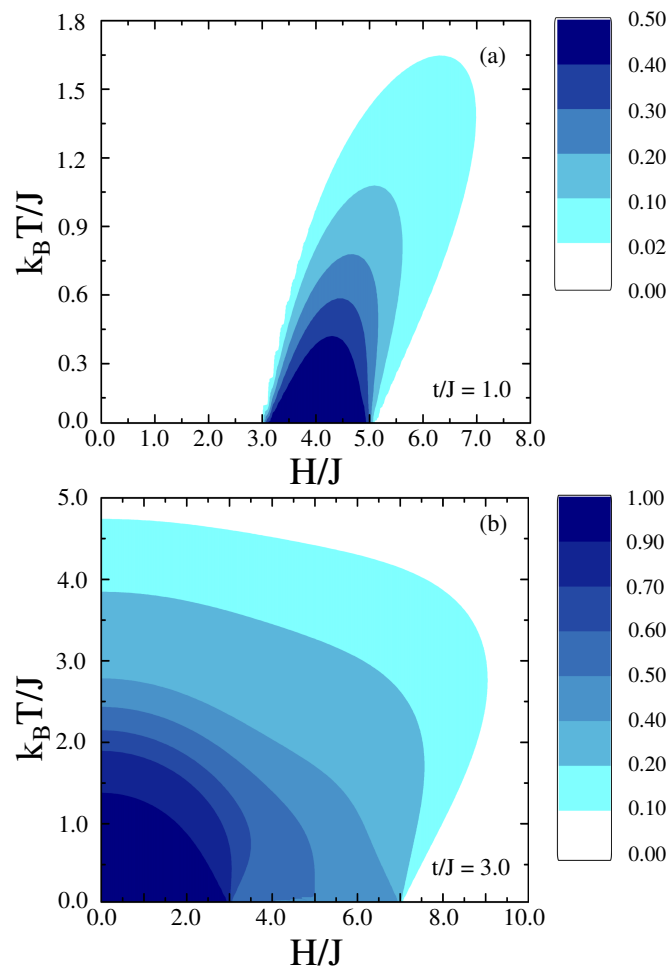
fonte: Autor

Ambos os campos de limiares se deslocam para valores mais altos com o aumento da temperatura, o que significa que as flutuações térmicas induzem o surgimento de concorrência fermiônica acima da fase saturada paramagnética P . Vale ressaltar que a menor temperatura limiar é deslocada para valores de campo maiores à medida que a temperatura é elevada. Isso significa que nenhum emaranhamento fermiônico pode ser gerado a temperaturas finitas acima do estado fundamental antiferromagnético AF . A temperatura do segundo limiar, na qual a concorrência fermiônica retorna a zero, também é deslocada para campos maiores. Este resultado significa que as flutuações térmicas promovem o sur-

gimento de concorrência fermiônica acima da fase saturada paramagnética P , embora o emaranhamento máximo que pode ser produzido pelo ajuste do campo magnético diminua à medida que a temperatura aumenta.

Um entendimento completo das dependências de campo e temperatura da concorrência fermiônica pode ser obtido a partir dos gráficos de densidade mostrados na Fig.4.9.

Figura 4.9: Gráficos de densidade da concorrência fermiônica no plano $k_B T/J - H/J$ para o caso particular sem o termo Coulomb $U = 0$ e dois valores distintos da amplitude de hopping levando a diferentes estados fundamentais a campo zero.



fonte: Autor

Para pequenas amplitudes de hopping, o estado fundamental, em campo baixo, é a fase antiferromagnética clássica AF com concorrência fermiônica nula. O comportamento reentrante da concorrência é claramente sinalizado pela flexão da região com concorrência finita em direção a campos maiores. Para grandes amplitudes de hopping, o estado fundamental, em campo baixo, é a fase quântica antiferromagnética Q com concorrência

máxima. O mecanismo físico que leva ao caráter reentrante do emaranhamento fermiônico é a excitação térmica de um estado fundamental não emaranhado com um estado excitado emaranhado.

Nesse regime, o emaranhamento induzido termicamente também é refletido pelo comportamento reentrante da concorrência quântica. É interessante notar que as maiores temperaturas, nas quais algum grau de emaranhamento quântico fermiônico pode ser gerado, são encontradas em campos magnéticos correspondentes a um estado fundamental paramagnético P .

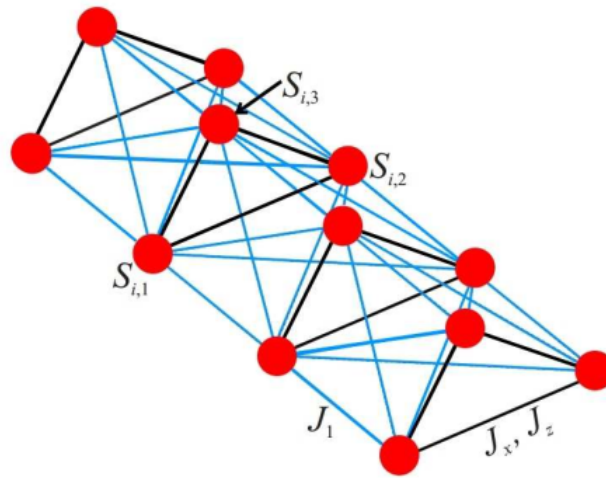
Tubo triangular de Spin Ising-Hubbard

Neste capítulo, estudaremos as propriedades magnéticas de um modelo conhecido como tubo triangular de spin. A análise do emaranhamento quântico num modelo exatamente solúvel não se restringe unicamente ao ponto de vista teórico. Existe uma variedade de componentes químicos que retém estruturas magnéticas semelhante a uma escada de spin com três cadeias. Isso pode ser visto na análise experimental de polímeros de coordenação unidimensionais, como o $[(CuCl_2tancH)_3Cl]Cl_2$ ($tach = 1, 3, 5$ -triamina ciclohexano)[112].

Exemplificaremos agora um modelo exatamente solúvel com características semelhantes com as do modelo estudado neste trabalho. Esse modelo constitui-se de um tubo de spin-1/2 frustrado de Ising-Heisenberg composto por células unitárias triangulares. Cada triângulo é composto por 3 spins conectados por ligações de Heisenberg tipo XXZ. Cada spin pertencente à célula unitária i é conectado a todos os spins da célula posterior $i + 1$ através de ligações tipo Ising [45, 47].

A Fig.5.1 mostra a geometria do tubo de spin $\frac{1}{2}$ frustrado de Ising-Heisenberg, onde as linhas sólidas representam os acoplamentos XXZ de Heisenberg dentro da célula unitária triangular (J_z, J_x) e as linhas finas correspondem às interações de Ising entre as células unitárias.

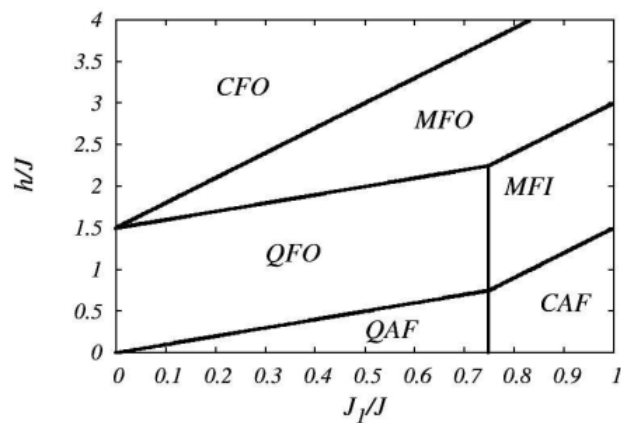
Figura 5.1: Modelo do tubo de spin frustrado de Ising-Heisenberg.



fonte: Alécio,[45]

Todas as possíveis configurações de ordenamento magnético, para o estado fundamental do sistema é descrito na Fig.5.2. Desta forma, foram encontrados apenas seis estados fundamentais, para os pares de células unitárias adjacentes. Por inspeção, os seis estados fundamentais são *CAF* antiferromagnético clássico, *CFO* ferromagnético clássico, *QAF* antiferromagnético quântico, *QFO* ferrimagnético quântico, *MFI* misto quântico-clássico ferrimagnético e *MFO* quântico-clássico ferromagnético.

Figura 5.2: Diagrama de fases do estado fundamental do modelo de tubo de spin Ising-Heisenberg.

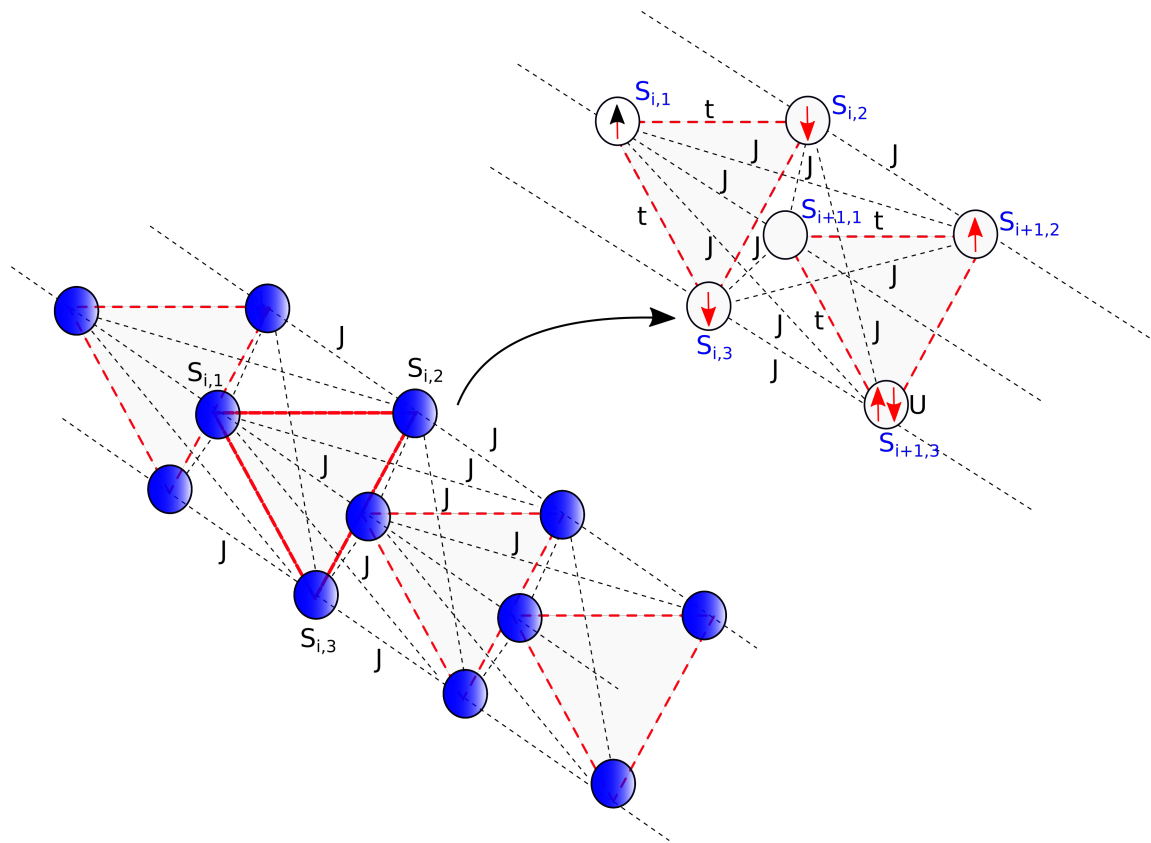


fonte: Alécio,[45]

5.1 Modelo

Introduzimos o modelo de um tubo de spins de Ising-Hubbard como mostra a Fig.5.3. Este modelo é composto de células unitárias triangulares, onde cada triângulo é composto por 3 spins que passam por um processo de salto quântico, entre os sítios do triângulo, caracterizado pela amplitude de salto t . Cada spin pertencente à célula unitária i é conectado a todos os spins da célula posterior $i + 1$ através de ligações tipo Ising J . Os elétrons com spins opostos podem, eventualmente, ocupar o mesmo sítio de um triângulo e, neste caso, eles experimentam uma interação de Coulomb.

Figura 5.3: Um esquema do tubo de Ising-Hubbard.



fonte: Autor

Para iniciarmos o estudo, primeiro devemos definir o Hamiltoniano que será utilizado e descrever as interações entre os spins no modelo, ilustradas na Fig.5.3.

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i + \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i^0, \quad (5.1)$$

onde \mathcal{H}_i^0 representa a matriz sem a parte de interação de troca. O Hamiltoniano do

sistema pode ser escrito como,

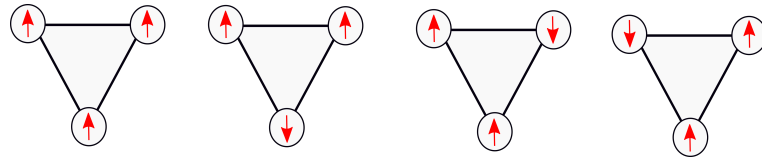
$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ J \sum_{l,l'=1}^3 S_{l,i}^z S_{l',i+1}^z + t \sum_{\gamma=\uparrow,\downarrow} (c_{1,i,\gamma}^\dagger c_{2,i,\gamma} + c_{2,i,\gamma}^\dagger c_{3,i,\gamma} + c_{3,i,\gamma}^\dagger c_{1,i,\gamma} + H.c.) + U \sum_{l=1}^3 (n_{l,i,\uparrow} n_{l,i,\downarrow}) - H \sum_{l=1}^3 S_{l,i}^z \right\}, \quad (5.2)$$

onde $c_{l,i,\gamma}^\dagger$ e $c_{l,i,\gamma}$ são os operadores criação e aniquilação para um elétron com spin $\gamma = \uparrow, \downarrow$ e $n_{l,i,\gamma} = c_{l,i,\gamma}^\dagger c_{l,i,\gamma}$ é o operador número. O índice l descreve qualquer um dos 3 spins localizados nos vértices do triângulo da célula unitária i , com $S_{l,i}^z$ representando a componente z do operador spin total no vértice $l = 1, 2, 3$ do i -ésimo triângulo, que assume o valor de $S_{l,i}^z = 0$ quando o sítio está vazio ou contém dois elétrons com spins opostos. O parâmetro J denota o acoplamento de troca tipo Ising entre os elétrons de triângulos vizinhos. A interação entre dois spins de Ising vizinhos na mesma célula é mediada pelo par de elétrons que podem saltar entre as cadeias com energia cinética representada pela amplitude de hopping t , e o termo de Coulomb [$U > 0$ ($U < 0$) representa a interação elétron-elétron repulsiva (atrativa)], e H é o campo externo aplicado ao longo da direção z .

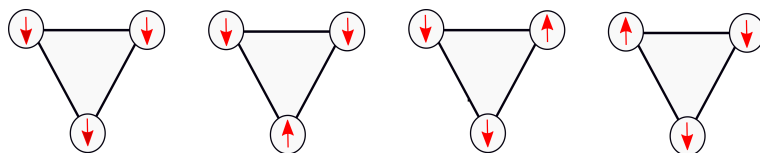
5.2 O diagrama de fase

Diagonalizaremos exatamente a matriz \mathcal{H}_i^0 do Hamiltoniano total (5.2) iniciando pelo Hamiltoniano tipo Hubbard de uma célula isolada, que pode ser colocado na base de estados em vinte configurações eletrônicas,

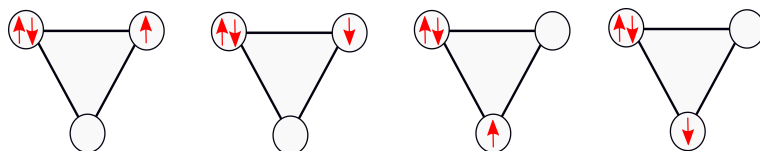
Figura 5.4: Um esquema do tubo de Ising-Hubbard.



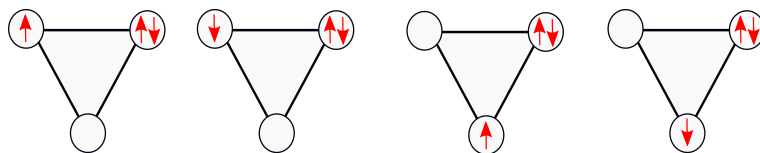
$$|1\rangle = |\uparrow; \uparrow; \uparrow\rangle \quad |2\rangle = |\uparrow; \uparrow; \downarrow\rangle \quad |3\rangle = |\uparrow; \downarrow; \uparrow\rangle \quad |4\rangle = |\downarrow; \uparrow; \uparrow\rangle$$



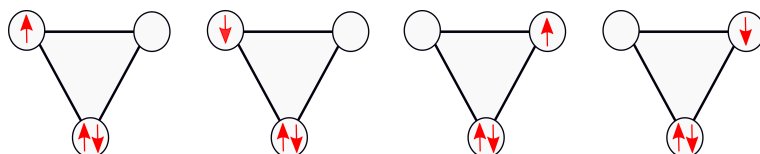
$$|5\rangle = |\downarrow; \downarrow; \downarrow\rangle \quad |6\rangle = |\downarrow; \downarrow; \uparrow\rangle \quad |7\rangle = |\downarrow; \uparrow; \downarrow\rangle \quad |8\rangle = |\uparrow; \downarrow; \downarrow\rangle$$



$$|9\rangle = |\uparrow\downarrow; \uparrow; 0\rangle \quad |10\rangle = |\uparrow\downarrow; \downarrow; 0\rangle \quad |11\rangle = |\uparrow\downarrow; 0; \uparrow\rangle \quad |12\rangle = |\uparrow\downarrow; 0; \downarrow\rangle$$



$$|13\rangle = |\uparrow; \uparrow\downarrow; 0\rangle \quad |14\rangle = |\downarrow; \uparrow\downarrow; 0\rangle \quad |15\rangle = |0; \uparrow\downarrow; \uparrow\rangle \quad |16\rangle = |0; \uparrow\downarrow; \downarrow\rangle$$



$$|17\rangle = |\uparrow; 0; \uparrow\downarrow\rangle \quad |18\rangle = |\downarrow; 0; \uparrow\downarrow\rangle \quad |19\rangle = |0; \uparrow; \uparrow\downarrow\rangle \quad |20\rangle = |0; \downarrow; \uparrow\downarrow\rangle$$

fonte: Autor

Para obter os diagramas de fase do estado fundamental para o modelo descrito acima, nós diagonalizamos exatamente a matriz do Hamiltoniano total e obtivemos os autovalores e auto-estados como função do campo magnético externo H , da constante de acoplamento J , da interação de coulomb U e da amplitude de hopping t . Os autovalores

por célula unitária do Hamiltoniano sem a parte de interação de troca são,

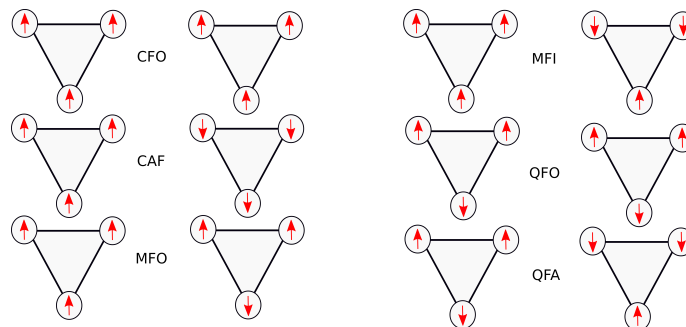
$$\begin{aligned}
 \lambda_1 &= 0, \\
 \lambda_2 &= U - 2t, \\
 \lambda_3 &= U + t, \\
 \lambda_4 &= t + \frac{U + \Sigma}{2}, \\
 \lambda_5 &= t + \frac{U - \Sigma}{2}, \\
 \lambda_6 &= \frac{U - t + \Omega}{2}, \\
 \lambda_7 &= \frac{U - t - \Omega}{2},
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

onde, $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_4$ e λ_5 são duplamente degenerados, enquanto λ_3, λ_6 e λ_7 são quatro vezes degenerados. Utilizamos as novas variáveis mostradas na equação 5.4 para condensar a notação,

$$\begin{aligned}
 \Sigma &= \sqrt{U^2 + 4Ut + 36t^2}, \\
 \Omega &= \sqrt{U^2 - 2Ut + 9t^2}.
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Então identificamos seis possíveis estados fundamentais dependendo da relação entre os parâmetros do modelo (H, J, U e t) mostrados na Fig 5.5. Como podemos ver são eles: um estado ferromagnético clássico (CFO), o estado antiferromagnético clássico (CAF), o estado antiferromagnético quântico (QAF), o estado ferrimagnético quântico (QFO), o estado misto quântico-clássico ferrimagnético (MFI) e o estado misto quântico-clássico ferromagnético (MFO).

Figura 5.5: Um esquema do tubo de Ising-Hubbard.



fonte: Autor

A energia de cada um desses possíveis estados é representada considerando os regimes distintos. Primeiramente considerando $U > 0$,

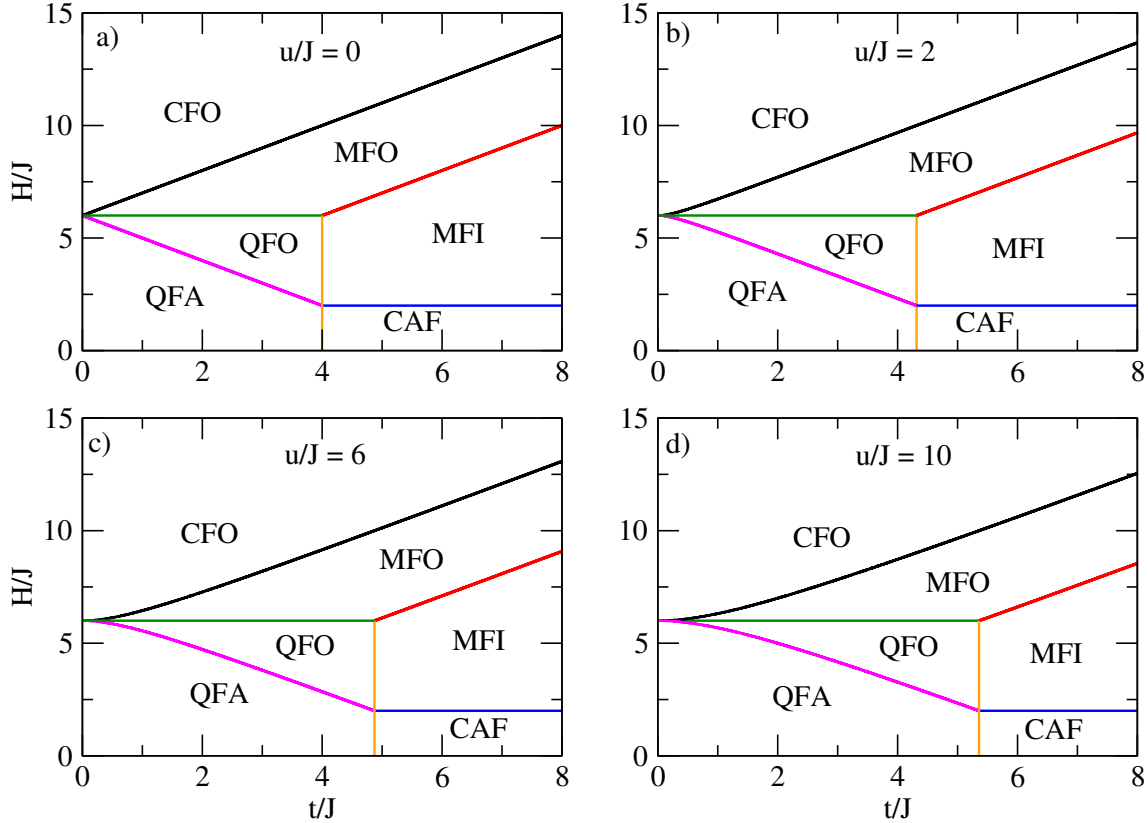
$$\begin{aligned}
 E_1 &= -3h + 9|J|, \\
 E_2 &= -9|J|, \\
 E_3 &= -2h + 3|J| + \frac{t}{2} + \frac{U - \Sigma}{4}, \\
 E_4 &= -h - 3|J| + \frac{t}{2} + \frac{U - \Sigma}{4}, \\
 E_5 &= -h + |J| + t + \frac{U - \Sigma}{2}, \\
 E_6 &= -|J| + t + \frac{U - \Sigma}{2}.
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

Agora adotando $U < 0$,

$$\begin{aligned}
 E_1 &= -3h + 9|J|, \\
 E_2 &= -9|J|, \\
 E_3 &= -2h + 3|J| + \frac{U}{2} - t, \\
 E_4 &= -h - 3|J| + \frac{U}{2} - t, \\
 E_5 &= -h + |J| + U - 2t, \\
 E_6 &= -|J| + U - 2t.
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Na Fig.5.6 apresentamos um conjunto de diagramas de fase no plano $t/J - H/J$ com a interação coulombiana assumindo valores positivos ($U > 0$). Na ausência da interação de Coulomb $U = 0$ os limites das fases são retas lineares.

Figura 5.6: Os diagramas de fase do estado fundamental no plano $t/J - H/J$ para (a) $U/J = 0$, (b) $U/J = 2$, (c) $U/J = 6$ e (d) $U/J = 10$.



fonte: Autor

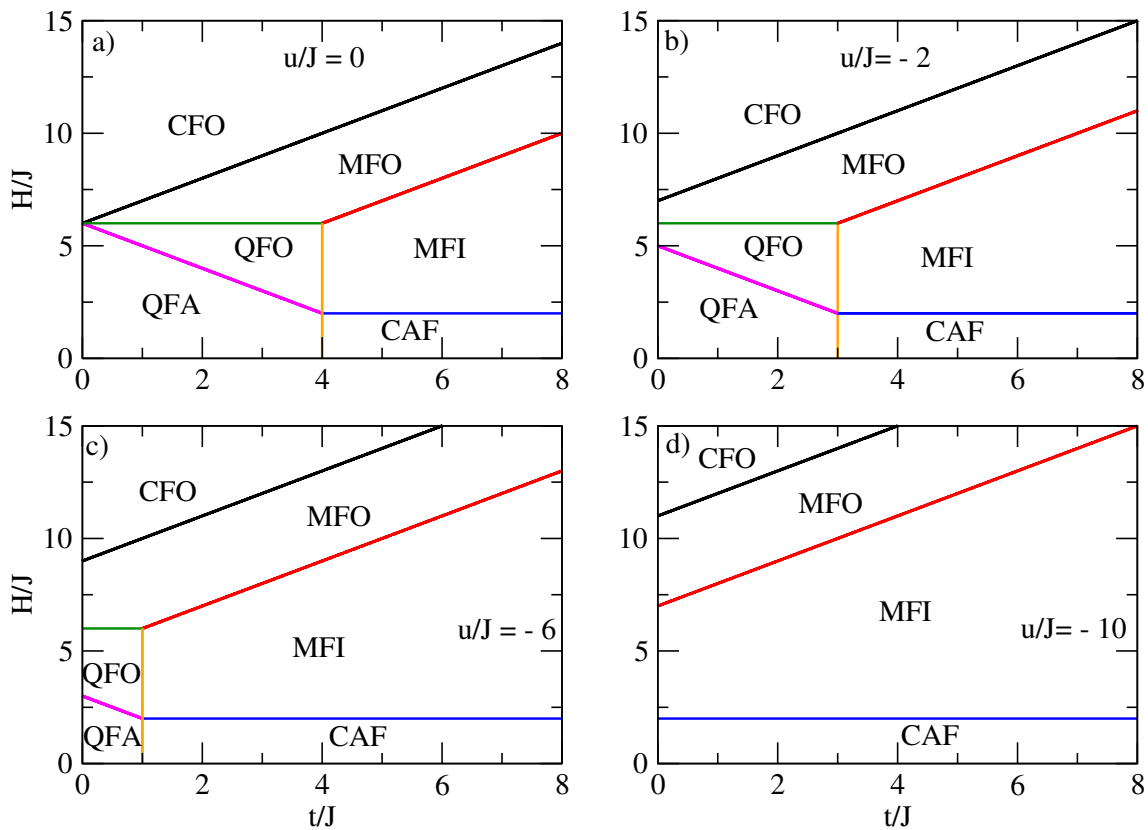
Em campos suficientemente baixos, o sistema passa por uma transição de fase descontínua entre o estado antiferromagnético quântico QAF e o estado antiferromagnético clássico CAF em $t/J = 4$. Esses dois estados fundamentais são substituídos pelos ordenamentos ferrimagnético quântico QFO e o ordenamento misto quântico-clássico ferrimagnético MFI para campos magnéticos moderados. Finalmente, o ordenamento misto quântico-clássico ferromagnético MFO e o estado ferromagnético clássico CFO aparece em campos magnéticos suficientemente fortes.

Notamos que o termo repulsivo de Coulomb $U > 0$, leva a um deslocamento no limite de fases entre o estado antiferromagnético quântico QAF e o estado antiferromagnético clássico CAF , por exemplo, é deslocado para valores da amplitude de hopping maiores que $t/J = 4 + \sqrt{U/J + 9}$. Da mesma forma, os limites de fase entre os estados fundamentais ferrimagnético quântico QFO e o estado misto quântico-clássico ferrimagnético MFI , bem como e a fase de ordenamento misto quântico-clássico ferromagnético MFO e o estado ferromagnético clássico CFO tornam-se curvas não-lineares, o que resulta em

uma redução da faixa de campo correspondente à fase ferrimagnético quântico QFO .

Na Fig.5.7 apresentamos um conjunto de diagramas de fase no plano $t/J - H/J$ para uma interação atrativa de Coulomb $U < 0$, que é o responsável, pela supressão das regiões de parâmetros correspondentes a ambos os estados quânticos, ferrimagnético quântico QFO e estado antiferromagnético quântico QAF . Para o termo de Coulomb $U < 0$ existem dois regimes distintos, para acoplamento elétron-elétron fracamente atrativo $|U| < 8J$, o diagrama de fase do estado fundamental ainda envolve todos os seis estados de fundamentais disponíveis, enquanto que as fases ferrimagnética quântica QFO e antiferromagnética quântica QAF são substancialmente suprimidas.

Figura 5.7: Os diagramas de fase do estado fundamental no plano $t/J - H/J$ para (a) $U/J = 0$, (b) $U/J = -2$, (c) $U/J = -6$ e (d) $U/J = -10$.



fonte: Autor

A faixa de campos magnéticos correspondentes ao ordenamento misto quântico-clássico ferrimagnético MFI aumenta. No regime fortemente atrativo da interação de Coulomb $|U| > 8J$, as fases ferrimagnética quântica QFO e antiferromagnética quântica QAF são totalmente suprimidas e o sistema sofre uma sequência de transições de fase induzidas ($CAF \rightarrow MFI \rightarrow MFO \rightarrow CFO$) ao aumentar-se o campo magnético.

5.3 Emaranhamento quântico

A entropia de Von Neumann representa a caracterização do emaranhamento quântico para nosso modelo. Assim determinamos a entropia de emaranhamento para cada um dos possíveis estados fundamentais do tubo triangular estudado neste capítulo. O estado $|\lambda_2\rangle$ é duplamente degenerado e corresponde a uma superposição uniforme de seis estados na forma

$$|\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} [-|\uparrow\downarrow, \uparrow, 0\rangle + |\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle + |\uparrow, \uparrow\downarrow, 0\rangle - |0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, 0, \uparrow\downarrow\rangle + |0, \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle], \quad (5.7)$$

Cuja matriz densidade é escrita como

$$\rho_2 = |\lambda_2\rangle\langle\lambda_2|. \quad (5.8)$$

Tomando o traço parcial com relação ao segundo e terceiro grau de liberdade, chegamos a expressão,

$$\rho_2 = \frac{1}{6} [2|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + 2|0\rangle\langle 0| + 2|\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|]. \quad (5.9)$$

Logo, a entropia de formação é dada por,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{|\lambda_2\rangle} &= -\frac{1}{3} \ln \frac{1}{3} - \frac{1}{3} \ln \frac{1}{3} - \frac{1}{3} \ln \frac{1}{3}, \\ \mathcal{S}_{|\lambda_2\rangle} &= \ln 3. \end{aligned} \quad (5.10)$$

O estado $|\lambda_3\rangle$ é quatro vezes degenerado sendo estes superposições uniformes de quatro estados. Dois destes estados assumem a forma

$$|\lambda_3\rangle = \frac{1}{2} [-|\uparrow\downarrow, \uparrow, 0\rangle - |\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle + |0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle + |0, \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle]. \quad (5.11)$$

Escrevendo a matriz densidade correspondente e tomando o traço parcial com relação ao segundo e terceiro grau de liberdade obtemos

$$\rho_3 = \frac{1}{4} [2|0\rangle\langle 0| + 2|\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow|]. \quad (5.12)$$

Assim, a entropia de formação é dada por,

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{|\lambda_3\rangle} &= -\frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \ln \frac{1}{2}, \\ \mathcal{S}_{|\lambda_3\rangle} &= \ln 2. \end{aligned} \quad (5.13)$$

O outro autoestado com dois spins “para cima” e um spin “para baixo” é,

$$|\lambda_3\rangle = \frac{1}{2} [-|\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle - |\uparrow, \uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle + |\uparrow, 0, \uparrow\downarrow\rangle]. \quad (5.14)$$

Tomando o traço parcial obtemos

$$\rho_3 = \frac{1}{4} [|0\rangle\langle 0| + |\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow| + 2|\uparrow\rangle\langle\uparrow|]. \quad (5.15)$$

Logo, a entropia de formação vale

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{|\lambda_3\rangle} &= -\frac{1}{2} \ln \frac{1}{2} - \frac{1}{4} \ln \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \ln \frac{1}{4}, \\ \mathcal{S}_{|\lambda_3\rangle} &= \frac{3}{2} \ln 2. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Os estados $|\lambda_4\rangle$ e $|\lambda_5\rangle$ produzem uma matriz de densidade parcial composta em uma superposição desigual de nove estados. Os estados $|\lambda_4\rangle$ e $|\lambda_5\rangle$ são duplamente degenerados correspondendo a um estado onde dois spins estão orientados “para cima” e um “spin baixo” e a outro estado com dois spins “para baixo” e um “para cima”. Eles se caracterizam pelas seguintes superposições de estados,

$$\begin{aligned} |\lambda_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3\eta_-^2 + 6}} [-\eta_-|\uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle - \eta_-|\uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle - \eta_-|\downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow, \uparrow, 0\rangle + |\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle \\ &+ |0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle + |\uparrow, \uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow, 0, \uparrow\downarrow\rangle], \end{aligned} \quad (5.17)$$

$$\begin{aligned} |\lambda_5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3\eta_+^2 + 6}} [-\eta_+|\uparrow, \uparrow, \downarrow\rangle - \eta_+|\uparrow, \downarrow, \uparrow\rangle - \eta_+|\downarrow, \uparrow, \uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow, \uparrow, 0\rangle + |\uparrow\downarrow, 0, \uparrow\rangle \\ &+ |0, \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle + |\uparrow, \uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow, \uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow, 0, \uparrow\downarrow\rangle], \end{aligned} \quad (5.18)$$

onde η_{\pm} é o coeficiente de estado definido como,

$$\eta_{\pm} = \frac{1}{2} + \frac{U}{4t} \pm \frac{3}{2} \sqrt{1 + \frac{U}{9t} + \frac{U^2}{36t^2}}. \quad (5.19)$$

Obtemos a matriz densidade,

$$\rho_{4,5} = |\lambda_{4,5}\rangle\langle\lambda_{4,5}|. \quad (5.20)$$

Novamente, tomando o traço parcial com relação ao segundo e terceiro grau de liberdade, chegamos a

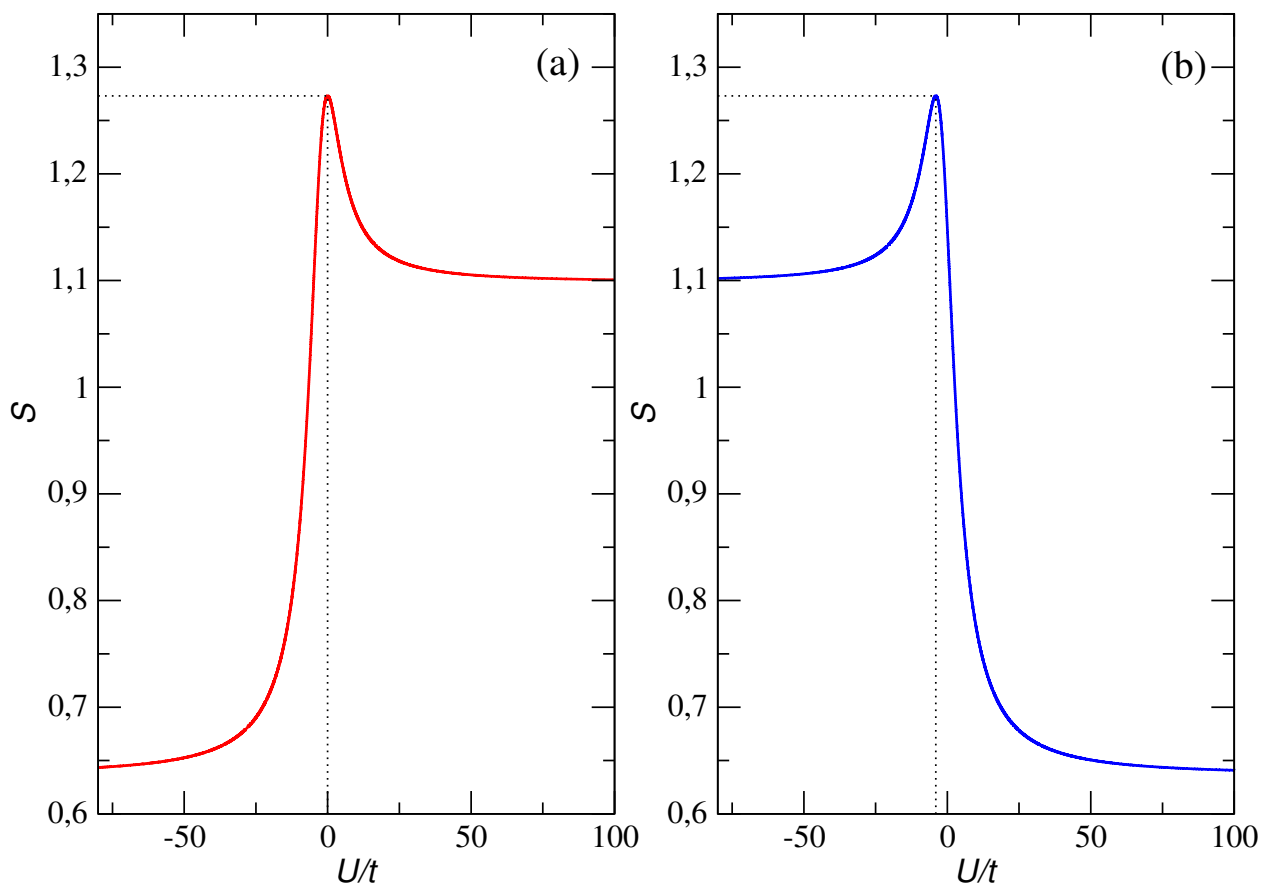
$$\rho_{4,5} = \frac{1}{3\eta_{\pm}^2 + 6} [(2\eta_{\pm}^2 + 2)|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \eta_{\pm}^2|\downarrow\rangle\langle\downarrow| + 2|\uparrow\downarrow\rangle\langle\uparrow\downarrow| + 2|0\rangle\langle 0|]. \quad (5.21)$$

Um cálculo direto fornece para os estados $|\lambda_4\rangle$ e $|\lambda_5\rangle$ as entropias de formação,

$$\mathcal{S}_{|\lambda_4\rangle,|\lambda_5\rangle} = \ln(3\eta_{\pm}^2 + 6) - \frac{1}{3\eta_{\pm}^2 + 6} [(2 + 2\eta_{\pm}^2) \ln(2 + 2\eta_{\pm}^2) + \eta_{\pm}^2 \ln(\eta_{\pm}^2) + 4 \ln(2)]. \quad (5.22)$$

Na figura Fig.5.8 mostramos a entropia de formação para os estados emaranhados $|\lambda_4\rangle$ e $|\lambda_5\rangle$ em função de $\frac{U}{t}$.

Figura 5.8: A entropia de formação \mathcal{S} como função de U/t para células de autoestados a) $|\lambda_4\rangle$ e b) $|\lambda_5\rangle$.



fonte: Autor

A entropia de formação para o estado $|\lambda_4\rangle$ assume seu valor máximo, $S_{max} = 2 \ln 3 - \frac{4}{3} \ln 2$, com $U/t = 0$ para o qual o estado da célula é uma superposição uniforme de todos os seus nove estados possíveis. No limite de $\frac{U}{t} \rightarrow -\infty$, regime altamente atrativo, a entropia de formação vai a $\mathcal{S} = (2/3) \ln(2/3) + (1/3) \ln(1/3)$. Já para o estado $|\lambda_5\rangle$ o valor máximo para entropia de formação, $2 \ln 3 - \frac{4}{3} \ln 2$, ocorre para $U/t = -4$. O emaranhamento de formação vai a zero $\mathcal{S} = -(2/3) \ln(2/3) - (1/3) \ln(1/3)$, em regimes fortemente repulsivos, $\frac{U}{t} \rightarrow \infty$. Verificamos também que a entropia de formação para o estado emaranhado $|\lambda_4\rangle$ em regimes fortemente repulsivos, $\frac{U}{t} \rightarrow \infty$, tende a $\ln 3$. Comportamento similar ocorre para entropia de formação do estado emaranhado $|\lambda_5\rangle$, que em regimes fortemente atrativos $\frac{U}{t} \rightarrow -\infty$, tem sua entropia de formação tendendo a $\ln 3$.

Conclusões e Perspectiva

Em resumo, nós introduzimos um modelo de escada Ising-Hubbard exatamente solúvel. Considerou-se que os degraus da escada eram compostos pelos dímeros de Hubbard a meio preenchimento em cada degrau, levando em conta o processo de salto quântico entre degraus dos elétrons móveis, bem como a interação de Coulomb no local. A interação entre os elétrons dos degraus vizinhos foi assumida como sendo do tipo Ising. O modelo foi exatamente resolvido usando a técnica de diagonalização exata e matriz transferência, enquanto nossa atenção foi particularmente focada no caso mais interessante com o acoplamento antiferromagnético de Ising. Ambos os casos de interação de Hubbard atrativa e repulsiva foram considerados.

Mostrou-se que o modelo investigado exhibe quatro possíveis estados fundamentais. Dois deles são clássicos: a fase paramagnética saturada P e a fase antiferromagnética clássica AF . Outros dois estados fundamentais são de natureza quântica. Existe um estado fundamental totalmente quântico Q com todos os dímeros de Hubbard no mesmo estado quântico emaranhado. O quarto estado fundamental PQ tem uma natureza mista clássica-quântica por causa de uma alternância regular dos dímeros de Hubbard nos estados desemaranhado e emaranhado. Foi demonstrado que a fase antiferromagnética clássica AF é totalmente suprimida quando a interação de Hubbard se torna fortemente atrativa.

O grau de emaranhamento quântico entre o par de elétrons em um determinado degrau da escada foi avaliado através do cálculo da concorrência fermiônica no subespaço dos spins up. Ficou convincentemente evidenciado que a fase totalmente antiferromagnética quântica Q é maximamente emaranhada para o caso especial com o termo de Coulomb

$U = 0$. A concorrência fermiônica diminui continuamente conforme o termo Coulomb $|U|$ se fortalece, enquanto se aproxima de zero no limite atômico $U \rightarrow \infty$. Também foi mostrado que as flutuações térmicas geralmente degradam o grau de emaranhamento quântico, especialmente quando o estado fundamental é de natureza quântica. Os elétrons permanecem desemaranhados a qualquer temperatura quando o estado fundamental é formado pela fase antiferromagnética clássica AF . Em contraste, as flutuações térmicas podem induzir um grau finito de emaranhamento quântico acima do estado paramagnético saturado clássico. Esse achado notável é evidenciado por um caráter reentrante da concorrência fermiônica em função da temperatura, quando o campo magnético é escolhido ligeiramente acima de seu valor de saturação. Algum grau de emaranhamento fermiônico quântico pode ser assim obtido a temperaturas relativamente altas quando um campo magnético suficientemente forte direciona o sistema para a fase paramagnética clássica.

Outro modelo investigado foi o tubo de spins de Ising-Hubbard, onde foi mostrado seis possíveis estados fundamentais, sendo dois deles clássicos, ordenamento ferromagnético clássico (CFO) e o antiferromagnético clássico (CAF), os outros de natureza quântica, ordenamento antiferromagnético quântico (QAF), o ferrimagnético quântico (QFO), o misto quântico-clássico ferrimagnético (MFI) e o misto quântico-clássico ferromagnético (MFO). Verificamos a existência de um estado fundamental totalmente quântico Q com todas as células de Hubbard no mesmo estado emaranhado. Vimos que a fase ferrimagnética quântica QFO e o estado antiferromagnético quântico QAF são totalmente suprimidos quando a interação de Hubbard se torna fortemente atrativa.

Por fim, enfatizamos que este trabalho abre perspectivas bastante promissoras na pesquisas de emaranhamento quântico em sistemas magnéticos modelados por cadeias de spin anisotrópicas do tipo Ising com estruturas mais elaboradas envolvendo processos quânticos. Em síntese, esperamos que a presente tese possa estimular futuros estudos de emaranhamento quântico em sistemas magnéticos de baixa dimensionalidade.

Referências Bibliográficas

- [1] IVAN, S. Oliveira; VITOR, L.B. de Jesus. **Introdução à física do estado sólido**. 3.ed. - São Paulo:Editora livraria da física, 2017.
- [2] BOSE I. **Low-dimensional quantum spin systems**. arXiv:cond-mat/ 0011262, 2000.
- [3] GUALDI, G; GIAMPAOLO, S. M.; ILLUMINATI, F. **Phys. Rev. Lett.** **106**, 050501 (2011).
- [4] ESTARELLAS, M. P.; DAMICO, I.; SPILLER, T. P. **Phys. Rev. A.** **95**, 042335 (2017);
- [5] ROONEY, A. **A história da física**. São Paulo: M.books do Brasil editora Ltda, 2013.
- [6] COEY, J. M. D. **Magnetism and Magnetic Materials**. Cambridge University Press, Cambridge, 1ed. edition, 2010.
- [7] DANIEL, C. Mattis. **The Theory of Magnetism: An introduction to the Study of Cooperative Phenomena**. Harper and Row Publishers (1965).
- [8] NÉEL, L. **Ann. Phys (Paris)** **3**, 137 (1948).
- [9] NÉEL, L. **Ann. Phys (Paris)** **17**, 5 (1932).
- [10] NÉEL, L. **Proc. Roy. Soc.** **65**, 869 (1952).
- [11] PEREIRA, M. S. S. **Platô na Magnetização e Efeito Magnetocalórico na Cadeia Diamante Cineticamente Frustrada**. 2008. 59 p. Dissertação (Mestrado em Física) - Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2008.

-
- [12] BAIBICHI, M. N.; BROTO, J. M.; FERT, A.; NGUYEN, Van Dau F.; PITROFF, F. Pitroff. **Phys. Rev.Lett.** **21**, 2472 (1988).
- [13] BISNASCH, G.; GRUNBERG, P.; SAURENBACH, F.; ZINN, W. **Phys. Rev. B** **39**, 4828 (1989).
- [14] VAN VLEK, J.H.; CHEM, J. **Phys.** **9**, 85 (1941).
- [15] SHULL, C.G.; STRAUSSER, W. A.; WOLLAN, E. O. **Phys. Rev.** **83**, 333 (1951).
- [16] BASSALO, J. M. F. **Einstein**. Editora Livraria da Física, São Paulo, 1ed.edition, 2013.
- [17] SCHRODINGER, E. **Discussion of probability relations between separated systems**. In Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, Cambridge, 1935.
- [18] BELL, J. S. **Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics**. Cambridge University Press, 2ed. edition, 2004.
- [19] AMICO, L.; FAZIO, R.; OSTERLOH, A.; CEDRAL, V.; Entanglement in many-body systems. **Reviews of Modern Physical**, 80:517, May 2008.
- [20] GUHNE, O.; TÓTH, G. Entanglement detection. **Physical Reports**, **474**, April 2009.
- [21] KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**, 6a. Ed., John Wiley, Nova York (1986).
- [22] CRANGLE, J. **Solid State Magnetism**, Edward Arnold, Londres (1991).
- [23] BLUNDELL, S. **Magnetism in Condense Matter**. Oxford University, New York, 1ed. edition, 2001.
- [24] SAKURAI, J. J. **Modern Quantum Mechanics**, Addison-Wesley, Revised Edition (1994).
- [25] SPALDIN, N. A. **Magnetic Materials: Fundamentals and Applications**. Cambridge University Press, 1ed. edition, 2010.

- [26] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum Mechanics**, John Wiley Sons, Nova York (1977).
- [27] HEISENBERG, W. **Physik** **38**, 411(1926);
- [28] DIRAC, P. A. M. **Proc. Roy. Soc. (London)**A123 ,714 (1929).
- [29] WEISS, P. J. **Phys.** **6**, 661 (1907).
- [30] HEISENBERG, W. **Physik** **38 (6)**, 411-426 (1926).
- [31] BETHE, H. **Zeitschrift fur. Physik** **71 (3)**, 205-226 (1931).
- [32] OSHIKAWA, M.; YAMAMAKA, M.; AFFLECK, I. **Phys. Rev. Lett.** **78** , 1984-1987 Mar(1997).
- [33] COSGROVE, B. A.; LOHMANN, D.; MITCHELL, K. E.; HOUSER, P. R.; WOOD, E. F.; SCHAAKE, J. C.; ROBOCK, A.; SHEFFIELD, J.; DUAN, Q.; LUO, L.; HIGGINS, R. W.; PINKER, R. T.; TARPLEY, J. **Journal of Geophysical Research: Atmospheres** **108 (D22)**, n/a-n/a (2003). 8845.
- [34] SANDVIK, A. W.; KURKIJARVI, J. **Phys. Rev. B** **43** , 5950-5961 Mar (1991).
- [35] NINIOS, K.; HONG, T.; MANABE, T.; HOTTA, C.; HERRINGER, S. N.; TURNBULL, M. M.; LANDEE, C. P.; TAKANO, Y.; CHAN, H. B. **Phys. Rev. Lett.** **108**, 097201 (2012).
- [36] ISLAM, R.; PREISS, P. M.; LUKIN, A.; RISPOLI, M.; GREINER, M. **Nature** **528**, 77 (2015).
- [37] FUKUHARA, T.; HILD, S.; ZEIHNER, J.; SCHAUSS, P.; BLOCH, I.; ENDRES, M.; GROSS, C. **Phys. Rev. Lett.** **115**, 035302 (2015).
- [38] ZHANG, G. F.; LI, S.S. **Phys. Rev. A** **72**, 034302 (2005).
- [39] TRIBEDI, A; BOSE, I. **Phys. Rev. A** **79**, 012331 (2009).
- [40] JIN, B. Q.; KOREPIN, V. E.; **Phys. Rev. A** **69**, 062314 (2004).
- [41] SANTOS, L. F.; RIGOLIN, G.; ESCOBAR, C. O. **Phys. Rev. A** **69**, 042304 (2004).

- [42] ZAD, H. A.; ANANIKIAN, N. **Phys.: Condens. Matter** **29**, 455402 (2017).
- [43] STRECKA, J.;PAVLICKO, J. **Phys. Polonica A** **132**, 167 (2017).
- [44] LISNYI, B.; STRECKA, J. **Physica A** **462**, 104 (2016).
- [45] ALECIO, R. C.; LYRA, M. L.; STRECKA, J. **Magn. Magn. Matter.****417**, 294 (2016).
- [46] ROJAS, O.; STRECKA, J.; SOUZA, S. M. **Solid Stat. Commun.** **246**, 68 (2016).
- [47] STRECKA, J; ALECIO, R. C.; LYRA, M. L.; ROJAS, O. **Magn. Magn. Matter.** **409**, 124 (2016).
- [48] HOVHANNISYAN, V. V.; STRECKA, J; ANANIKIAN, N. S. **Phys.: Condens. Matter** **28**, 085401 (2016).
- [49] ZHENG, D.; MAO, Z.; ZHOU, B. **Acta. Phys. Sinica** **66**, 230304 (2017).
- [50] ZAD, H. A.; ANANIKIAN, N. S. **Phys.: Condens. Matter** **29**, 455402 (2017).
- [51] TORRICO,J.; ROJAS, M.; PEREIRA, M.S.S.; STRECKA,J.; LYRA, M.L. **Phys. Rev. B** **93**, 014428 (2016).
- [52] ROJAS, M.; SOUZA, S.M.; ROJAS, O. **Phys. Rev. A** **89**, 032336 (2014).
- [53] TORRICO,J.; ROJAS, M.; SOUZA, S.M.; ROJAS, O.; ANANIKIAN, N.S. **EPL** **108**, 50007 (2014).
- [54] STRECKA,J.; ROJAS, O.; VERKHOLYAK, T.; LYRA, M.L. **Phys. Rev. E** **89**, 022143 (2014).
- [55] PAULINELLI, H.G.; SOUZA, S.M.; ROJAS, O. **J. Phys.: Condens. Matter** **25**, 306003 (2013).
- [56] ROJAS, O.; ROJAS, M.;ANANIKIAN, N.S.; SOUZA, S.M. **Phys. Rev. A****86**, 042330 (2012).
- [57] ANANIKIAN, N.S.; ANANIKIAN, L.N.; CHAKHMAKHCHYAN, L.A.; ROJAS, O.**J. Phys.: Condens. Matter** **24**, 256001 (2012).

- [58] PEREIRA, M.S.S.; MOURA, F.A.B.F.; LYRA, M.L. **Phys. Rev. B** **77**, 024402 (2008).
- [59] PEREIRA, M.S.S.; MOURA, F.A.B.F.; LYRA, M.L. **Phys. Rev. B** **79**, 054427 (2009).
- [60] NALBANDYAN, M.; LAZARYAN, H.; ROJAS, O.; SOUZA, S.M.; ANANIKIAN, N.S.J. **Phys. Soc. Japan** **83**, 074001 (2014).
- [61] LAZARYAN, H.; NALBANDYAN, M.; ANANIKIAN, N.S. **Int. J. Mod. Phys. B** **30**, 1650135 (2016).
- [62] TORRICO, J.; PEREIRA, M.S.S.; STRECKA, J.; LYRA, M.L. **Acta. Phys. Polonica A** **132**, 140 (2017).
- [63] CARVALHO, R.C.P.; PEREIRA, M.S.S.; OLIVEIRA, I.N.; STRECKA, J.; LYRA, M.L. **J. Phys.: Condens. Matt.** **29**, 365801 (2017).
- [64] ISING, E. **Z. Phys.** **31**, 253 (1925).
- [65] ONSAGER, L. **Phys. Rev.** **65**, 117 (1944).
- [66] HEISENBERG, W. **Z. Phys.** **49**, 619 (1928).
- [67] BAXTER, R. **Exactly solved models in statistical mechanics**. Academic Press, London and San Diego, 1982.
- [68] JOHNSON, C. A. **This is the Perron-Frobenius theorem which is discussed in Horn**. Matrix analysis, p.508. Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [69] EKERT, A.; JOZSA, R.; **Rev. Mod. Phys.** **68**, 733(1996); V. Vedral and M.B. Plenio, *Prog. Quantum Electronics*. 22, 1 (1997).
- [70] BENNETT, C.H.; BRASSARD, G.; CREPEAU, C.; JOZSA, R.; PERES, A.; WOOTTERS, W.K. **Phys. Rev. Lett.** **70**, 1895 (1993).
- [71] EKERT, A. **Phys. Rev. Lett.** **67**, 661 (1991).
- [72] GRIFFITHS, D. **Introduction to Quantum Mechanics**. Cambridge University Press, (2016).

- [73] FAYE, J.; ZALTA, E.; In **The Stanford Encyclopedia of Philosophy**. Metaphysics Research Lab, Stanford University fall 2014 edition (2014).
- [74] ASPECT, A. **A.Nature** 398 (6724), 189-190 Mar (1999).
- [75] EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N. **Phys. Rev.** **47**, 777 (1935).
- [76] DALTON, B. J.M. D.**ArXiv e-prints** November 2016.
- [77] BELL, J. S.**Epistemol. Lett.** **2** (1975).
- [78] HOLLAND, P.**Found. Phys.****35**, 177 (2005).
- [79] DE BROGLIE, L.J. **Phys. Radium** **8**, 225 (1927).
- [80] BOHM, D.**Phys. Rev.****85**, 166 (1952).
- [81] BOHM, D.**Phys. Rev.****85**, 180 (1952).
- [82] SHALM, L. K.; MEYER-SCOTT, E.; CHRISTENSEN, B. G.; BIERHORST, P.; WAYNE, M. A.; STEVENS, M. J.**Physical Review Letters**, **115**(25).
- [83] BELL, J. S. **Physics** **1**, 195 (1964).
- [84] ASPECT, A.; GRANGIER, P.; ROGER, G. **Phys. Rev. Lett.** **49** , 91-94 Jul (1982).
- [85] ASPECT, A.; DALIBARD, J.; ROGER, G. **Phys. Rev. Lett.** **49** , 1804-1807 Dec, (1982).
- [86] CLAUSER, J. F.; HORNE, M. A.; SHIMONY, A.; HOLT, R. A. **Phys. Rev. Lett.****23**, 880, (1969).
- [87] SCHMIDT, E. **Zur theorie der linearen und nichtlinearen integralgleichungen**, Math. Annalen 63, 433 (1907).
- [88] FEYNMAN, R. P. **Statistical mechanics: A set of lectures** , Westview Press, (1972).
- [89] SREDNICKI. **Physical Review Letters.** **71**, 5 (1997).
- [90] VEDRAL, V.; PLENIO, M.B.; RIPPIN, M.A.; KNIGHT, P.L.**Phys. Rev. Lett.** **78**, 2275, (1997).

-
- [91] VEDRAL, V.; PLENIO, M.B. **Phys. Rev. A.** **57**, 1619, (1997).
- [92] WEI, T. C.; NEMOTO, K.; GOLDBART, P. M.; KWIAT, P. G. **Phys. Rev. A.** **67**, 022110, (2003).
- [93] HORODECKI, M.; HORODECKI, P.; HORODECKI, R. **Phys. Rev. Lett.** **84**, 2014, (2000);
- [94] HORODECKI, R. et al., **Quantum entanglement. Rev. Mod. Phys.**, **81**, 865, 2009.
- [95] BENNETT, C. H.; DIVINCENZO, D. P.; SMOLIN, J. A.; WOOTTERS, W. K. **Phys. Rev. A.** **54**, 3824, (1996).
- [96] HORODECKI, M.; HORODECKI, P.; HORODECKI, R. **Phys. Rev. Lett.** **78**, 574, (1997).
- [97] HILL, S.; WOOTTERS, W. K. **Phys. Rev. Lett.** **78**, 5022, (1997).
- [98] HORODECKI, M.; HORODECKI, P.; HORODECKI, R. **Phys. Rev. Lett.** **84**, 2014, (2000).
- [99] HORODECKI, M.; HORODECKI, P.; HORODECKI, R. **Phys. Rev. Lett.** **80**, 5239, (1998).
- [100] BENNETT, C. H.; BERNSTEIN, H. J.; POPESCO, S.; SCHUMACHER, B. **Phys. Rev. A.** **53**, 2046, (1996).
- [101] VOLLBRECHT, K. G. H.; WERNER, R. F. **Phys. Rev. A.** **64**, 062307, (2001).
- [102] HORODECKI, M.; HORODECKI, P. **Phys. Rev. A.** **59**, 4206 (1999).
- [103] POPESCO, S.; ROHRLICH, D. **Phys. Rev. A.** **56**, 3219, (1997).
- [104] BENNETT, C. H.; BERNSTEIN, H. J.; POPESCO, S.; SCHUMACHER, B. SMOLIN, J. A.; WOOTTERS, W. K. **Phys. Rev. Lett.** **76**, 722, (1995).
- [105] WERNER, R. **Phys. Rev. A** **40**, 4277, (1989).
- [106] PERES, A. **Phys. Rev. Lett.** **77**, 1413, (1996).

- [107] HORODECKI, M.; HORODECKI, P.; HORODECKI, R. **Phys. Lett. A.** **223**, 1,(1996).
- [108] VIDAL, G.; WERNER, R. F. Werner. **Phys. Rev. A.** **65**, 032314, (2001).
- [109] LEE, S.; CHI, D. P.; OH, S. D.; KIM, J. **Phys. Rev. A.** **68**, 062304, (2003).
- [110] HORODECKI, P. **Phys. Lett. A.** **232**, 333, (1997).
- [111] SANTOS, R. J. V.; LYRA, M. L. **Physica A** **182**, 133, (1992)
- [112] IVANOV, N. B.; SCHNACK, J.; SCHNALLE, R.; RICHTER, J.; KOGERLER, P.; NEWTON, G. N. **Phys. Rev. Lett.** **105**, 037206, Jul (2010).
- [113] ARNESEN, M. C.; BOSE, S.; VEDRAL, V. **Phys. Rev. Lett.** **87**, 017901, (2001).
- [114] DAGOTTO, E.; RICE, T. M. **Science** **271**, 618, (1996).
- [115] UEHARA, M.; NAGATA, T.; AKIMITSU, J. Akimitsu.; TAKAHASHI, H.; MÔRI, N. **J. Phys. Soc. Jpn.** **65**, 2764, (1996).
- [116] HONG, T.; KIM, Y. H.; HOTTA, C.; TAKANO, Y.; TREMELLING, G.; TURNBULL, M. M.; LANDEE, C. P. **Phys. Rev. Lett.** **105**, 137207, (2010).
- [117] ANGELAKIS, D. G.; SANTOS, M. F.; BOSE, S. **Phys. Rev. A** **76**, 031805, (2007).
- [118] ALVAREZ, G. A.; SUTER, D. **Phys. Rev. Lett.** **104**, 230403, (2010).
- [119] ARNESEN, M.C.; BOSE, S.; VEDRAL, V. **Phys. Rev. Lett.** **87**, 017901, (2001).
- [120] MOREO, A.; SCALAPINO, D. J. **Phys. Rev. Lett.** **98**, 216402, (2007).
- [121] HACKERMULLER, L.; SCHNEIDER, U.; MORENO, M.C.; KITAGAWA, T.; BEST, T.; WILL, S.; DEMLER, E.; ALTMAN, E.; BLOCH, I.; PAREDES, B. **Science** **327**, 1621 (2010).
- [122] KEYL, M. **Phys. Rep.** **369**, 431, (2002).
- [123] HILL, S.; WOOTTERS, W.K. **Phys. Rev. Lett.** **78**, 5022 (1997).
- [124] WOOTTERS, W.K. **Phys. Rev. Lett.** **80**, 2245, (1998).

-
- [125] GU, S.J.; DENG, S.S.; LI, Y.Q.; LIN, H.Q. **Phys. Rev. Lett.** **93**, 086402, (2004).
- [126] GU, S.J.; DENG, S.S. **Chinese Phys. Lett.** **22**, 804, (2005).
- [127] RYCERZ, A. **New J. Phys.** **19**, 053025 (2017).

Phase diagram and re-entrant fermionic entanglement in a hybrid Ising-Hubbard ladderH. S. Sousa,^{1,2} M. S. S. Pereira,¹ I. N. de Oliveira,¹ J. Strečka,³ and M. L. Lyra¹¹*Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas 57072-970 Maceió, Alagoas, Brazil*²*Instituto Federal do Piauí, Campus Pedro II, 64255-000 Pedro II-Piauí, Brazil*³*Department of Theoretical Physics and Astrophysics, Faculty of Science, P.J. Šafárik University, Park Angelinum 9, 040 01 Košice, Slovakia*

(Received 23 January 2018; revised manuscript received 23 March 2018; published 14 May 2018)

The degree of fermionic entanglement is examined in an exactly solvable Ising-Hubbard ladder, which involves interacting electrons on the ladder's rungs described by Hubbard dimers at half-filling on each rung, accounting for intrarung hopping and Coulomb terms. The coupling between neighboring Hubbard dimers is assumed to have an Ising-like nature. The ground-state phase diagram consists of four distinct regions corresponding to the saturated paramagnetic, the classical antiferromagnetic, the quantum antiferromagnetic, and the mixed classical-quantum phase. We have exactly computed the fermionic concurrence, which measures the degree of quantum entanglement between the pair of electrons on the ladder rungs. The effects of the hopping amplitude, the Coulomb term, temperature, and magnetic fields on the fermionic entanglement are explored in detail. It is shown that the fermionic concurrence displays a re-entrant behavior when quantum entanglement is being generated at moderate temperatures above the classical saturated paramagnetic ground state.

DOI: [10.1103/PhysRevE.97.052115](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.97.052115)**I. INTRODUCTION**

Low-dimensional quantum spin chains have been extensively explored in the context of quantum information processing due to the possibility of creation and distribution of quantum entanglement between specific spin units acting as qubits [1–13]. The degree of entanglement can also be tuned by a local magnetic field, thus allowing a fine control of intrinsic quantum correlations. Many magnetic compounds have their relevant magnetic interactions along spin chains and ladders, the latter ones are, for instance, realized in a large family of copper oxide superconducting ceramics [14–18]. In addition, analogical structures can also be realized in arrays of coupled cavity-QED and NMR systems [19–22]. Very recently, progress has been made towards the experimental extraction of entanglement witnesses using ultracold atoms trapped in optical lattices [23,24].

Theoretical studies of quantum entanglement in low-dimensional spin chains are traditionally focused on systems composed of localized spins interacting through an antiferromagnetic Heisenberg-like exchange coupling [1,25–32]. In this case, the unsaturated nature of the sublattice magnetization of the antiferromagnetic ground state results in a very localized and relatively low degree of quantum entanglement between neighboring spins, especially for isotropic Heisenberg couplings [33–35]. Besides, thermal fluctuations and the action of an external magnetic field have been shown to degrade the bipartite entanglement, which may occasionally display re-entrant features [1].

The degree of quantum entanglement has also been investigated in hybrid spin models assuming both classical Ising as well as quantum Heisenberg exchange interactions [36–50]. The intercalation of Ising and Heisenberg couplings in spin chains is motivated by two main features. First, most of these models become exactly solvable, and they thus offer

a deeper understanding of the role of thermal fluctuations and external magnetic field on the quantum entanglement between neighboring spins. Second, the absence of quantum correlations between spins separated by classical Ising couplings leads to a pronounced enhancement of the quantum entanglement between the Heisenberg-coupled spin pair in comparison with the one achieved in pure Heisenberg chains. From this perspective, hybrid classical-quantum spin models afford an interesting class of physical systems, which exhibit a high degree of quantum entanglement surviving over a wider range of temperatures and magnetic fields. To date, exact solutions have been found for several model geometries including alternating Ising-Heisenberg chains, diamond chains, ladders, and tubes [36–50].

Recently, a new class of hybrid quantum spin models being composed of localized Ising spins intercalated by mobile electrons was introduced [51,52]. A hybrid model of this type was first introduced for a diamond chain and demonstrated to display several unconventional features, such as a rich phase diagram, magnetization plateaus, multi-peaked specific heat curves [51], as well as a pronounced magnetocaloric effect [52]. The fermionic quantum entanglement between a pair of intercalating electrons has also been explored in several variants of such a hybrid diamond chain [44,53–55]. In addition, we have also proposed a hybrid spin-electron ladder, which captures some features present in a family of superconducting cuprates [56].

Motivated by the recent experimental advances on the quantification of quantum entanglement in Bose-Hubbard chains [24], we will introduce a new solvable Ising-Hubbard ladder on which the degree of quantum entanglement on the ladder rungs can be analytically computed. Each ladder rung will be composed of the Hubbard dimer containing two mobile electrons, which may undergo a quantum-mechanical hopping process between the dimer sites and will be subject to an

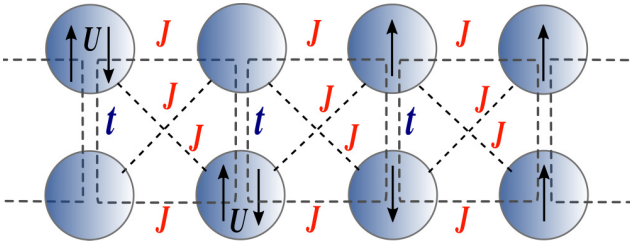


FIG. 1. A schematic of the Ising-Hubbard ladder. The ladder rungs are composed of Hubbard dimers at half-filling on each rung, which contain two mobile electrons per dimer being subject to the hopping term t and the on-site Coulomb term U . The inter-rung coupling J has an Ising-like nature.

on-site Coulomb term. The neighboring rungs will be coupled together through an Ising-like exchange coupling. We will report the exact ground-state phase diagram of the present model. The fermionic concurrence between the electrons localized in a given rung will be examined as a function of temperature and magnetic field. Particularly, we will show that thermal fluctuations can induce a quantum entanglement above a classical ground state. We will also provide a detailed analysis of the influence of hopping term, Coulomb term, temperature, and magnetic field on the degree of fermionic entanglement.

II. THE ISING-HUBBARD LADDER AND GROUND-STATE PHASE DIAGRAM

Let us consider a hybrid Ising-Hubbard ladder at half-filling on each rung (see Fig. 1). Each ladder rung is composed of a Hubbard dimer containing two mobile electrons, which undergo a quantum-mechanical hopping process between two sites of a specific dimer characterized by the hopping amplitude t . In this sense, the electrons become strictly localized when they possess the same spin state due to the validity of Pauli's exclusion principle. The electrons with opposite spins can eventually occupy the same site of a dimer and, in this case, they experience an on-site Coulomb interaction. Both cases of repulsive and attractive Coulomb interactions will be considered hereafter. Although most of the physical systems are being subject to a repulsive Coulomb term $U > 0$ due to the repulsive character of the electron-electron interaction, there may eventually appear an effective attractive Coulomb term $U < 0$ as a result of underlying interactions of the electrons with molecular vibrations or excited electronic states favoring electron-electron pairing in superconductors [57,58]. The interaction between the electrons from neighboring rungs is taken into account by an Ising-like exchange coupling J . The introduced model thus retains a quantum-mechanical interaction between two electrons from the same rung, whereas the interaction between electrons from neighboring rungs is treated classically through an Ising exchange coupling.

It is important to stress some relevant aspects of the presently introduced model. First, the Ising-like inter-rung coupling impairs a quantum entanglement between electrons from distinct rungs, at least, for magnetic fields applied along the Ising (easy) axis. Therefore, the present model can only

generate quantum entanglement between electrons from the same rung. The transfer of the entangled quantum state along the chain would require some degree of inter-rung coupling between the transversal components of the spins. Despite that, it has been demonstrated that mixed Ising-Heisenberg spin ladders can accurately capture the ground-state properties of fully quantum Heisenberg ladders in the regime of weak inter-rung coupling [39,47] where the ground state is composed of rung singlets [59,60]. In this sense, the build up of intrarung entanglement can be fairly analyzed considering an Ising-like inter-rung coupling. In order to describe the dynamics of this quantum entanglement transfer, some transverse coupling would be in order. Even though quantum entanglement in the ground-state would remain strongly localized [33–35]. For example, it just appears between first neighbor spins in the ground state of an isotropic antiferromagnetic Heisenberg chain [33,34]. The study of quantum-state transfer dynamics is out of the scope of the present paper and will be left for a future contribution. As a final remark, we would like to state that, although we are not deriving the introduced model from a more fundamental microscopic model, such as a fully quantum many-body Hubbard model, several magnetic compounds have the Ising-like character of their exchange couplings due to an underlying zero-field splitting leading to a strong Ising anisotropy [61,62].

The Hamiltonian of the hybrid Ising-Hubbard ladder we are introducing has the form

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ J \sum_{\ell, \ell'=1}^2 S_{\ell, i}^z S_{\ell', i+1}^z + t \sum_{\gamma=\uparrow, \downarrow} (c_{1, i, \gamma}^\dagger c_{2, i, \gamma} + \text{H.c.}) + U \sum_{\ell=1}^2 (n_{\ell, i, \uparrow} n_{\ell, i, \downarrow}) - H \sum_{\ell=1}^2 S_{\ell, i}^z \right\}, \quad (1)$$

where $c_{\ell, i, \gamma}^\dagger$ and $c_{\ell, i, \gamma}$ are fermionic creation and annihilation operators for an electron with the spin $\gamma = \uparrow, \downarrow$ and $n_{\ell, i, \gamma} = c_{\ell, i, \gamma}^\dagger c_{\ell, i, \gamma}$ is the respective number operator. $S_{\ell, i}^z$ stands for the z component of the total spin operator at the dimer site $\ell = 1, 2$ of the i th rung, which takes the value of $S_{\ell, i}^z = 0$ when the site is empty or contains two electrons with opposite spins, otherwise, it takes the values of $S_{\ell, i}^z = \pm 1$. The parameter J denotes the Ising-like exchange coupling between the electrons from neighboring rungs, whereas we will further focus on the most interesting case of an antiferromagnetic coupling $J > 0$. The other parameters have the following physical meaning: t is the intrarung hopping amplitude, U is the Coulomb term [$U > 0$ ($U < 0$) stands for repulsive (attractive) electron-electron interaction], and H is an external magnetic field applied along the z direction.

The Hamiltonian (1) can be exactly diagonalized due to the Ising-like nature of the inter-rung coupling J and the magnetic field H coupled to the z component of spin. We start by diagonalizing the Hubbard-like Hamiltonian of an isolated rung, which can be put in the local state basis spanned over six available electronic configurations of a single Hubbard dimer $\{|\uparrow\downarrow; 0\rangle, |0; \uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow; \downarrow\rangle, |\downarrow; \uparrow\rangle, |\uparrow; \uparrow\rangle, |\downarrow; \downarrow\rangle\}$ into the following

matrix form:

$$\mathcal{H}_i^0 = \begin{pmatrix} U & 0 & t & t & 0 & 0 \\ 0 & U & t & t & 0 & 0 \\ t & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -2H & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2H \end{pmatrix}. \quad (2)$$

The eigenvalues of the dimer Hamiltonian (2) can be obtained by a straightforward diagonalization procedure,

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \frac{U + \sqrt{\Delta}}{2}, \\ \lambda_2 &= \frac{U - \sqrt{\Delta}}{2}, \\ \lambda_3 &= U, \\ \lambda_4 &= 0, \\ \lambda_5 &= -2H, \\ \lambda_6 &= 2H, \end{aligned}$$

whereas the respective eigenvectors are given by

$$\begin{aligned} |\lambda_1\rangle &= \frac{2t}{\sqrt{\Delta - U\sqrt{\Delta}}} [|\uparrow\downarrow; 0\rangle + |0; \uparrow\downarrow\rangle - \alpha_1 |\uparrow; \downarrow\rangle \\ &\quad - \alpha_1 |\downarrow; \uparrow\rangle], \\ |\lambda_2\rangle &= \frac{2t}{\sqrt{\Delta + U\sqrt{\Delta}}} [|\uparrow\downarrow; 0\rangle + |0; \uparrow\downarrow\rangle - \alpha_2 |\uparrow; \downarrow\rangle \\ &\quad - \alpha_2 |\downarrow; \uparrow\rangle], \\ |\lambda_3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow\downarrow; 0\rangle - |0; \uparrow\downarrow\rangle], \\ |\lambda_4\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\uparrow; \downarrow\rangle - |\downarrow; \uparrow\rangle], \\ |\lambda_5\rangle &= |\uparrow; \uparrow\rangle, \\ |\lambda_6\rangle &= |\downarrow; \downarrow\rangle, \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned} \Delta &= U^2 + 16t^2, \\ \alpha_1 &= \frac{U - \sqrt{\Delta}}{4t}, \\ \alpha_2 &= \frac{U + \sqrt{\Delta}}{4t}. \end{aligned}$$

With all dimer eigenvalues and eigenstates at hand, one can readily find all possible ground states of the Ising-Hubbard ladder. Among the ladder's states with antiparallel spins, $|\lambda_2\rangle$ has the lowest energy for all finite values of the Hubbard coupling and hopping amplitude. This rung state has no net spin along the z direction to interact with the neighboring rungs via the Ising exchange coupling or to couple with the external field. States $|\lambda_5\rangle$ and $|\lambda_6\rangle$ have a net spin. Therefore, the possible ground states will be composed of combinations of $|\lambda_2\rangle$, $|\lambda_5\rangle$, and $|\lambda_6\rangle$ on the ladder rungs that minimize the total energy in distinct regions of the parameters. Following this prescription, one can identify four possible ground states. The fully saturated paramagnetic state with the energy per rung

$E_P = -2H + 4J$ is given by the eigenvector with all cells in the classical ferromagnetic dimer state $|\lambda_5\rangle$,

$$|P\rangle = \prod_{i=1}^N |\lambda_5\rangle_i. \quad (3)$$

The second possible ground state is the classical antiferromagnetic state with an energy per rung $E_{AF} = -4J$, which is composed of a regular alternation of fully polarized rungs $|\lambda_5\rangle$ and $|\lambda_6\rangle$,

$$|AF\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} |\lambda_5\rangle_{2i-1} \otimes |\lambda_6\rangle_{2i}. \quad (4)$$

The two phases $|P\rangle$ and $|AF\rangle$ have a classical character with no quantum correlation between the electron states. The third ground state is fully quantum with energy per rung $E_Q = (U - \sqrt{\Delta})/2$ and all rungs in the dimer state $|\lambda_2\rangle$,

$$|Q\rangle = \prod_{i=1}^N |\lambda_2\rangle_i. \quad (5)$$

This state cannot be written as a direct product of individual states of two mobile electrons on the same rung, which unveils the presence of quantum correlations between them. The fourth ground state with an energy per rung $E_{PQ} = -H + (U - \sqrt{\Delta})/4$ has a mixed classical-quantum character because it involves a regular alternation of the classical ferromagnetic dimer state $|\lambda_5\rangle$ with the quantum antiferromagnetic dimer state $|\lambda_2\rangle$,

$$|PQ\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} |\lambda_5\rangle_{2i-1} \otimes |\lambda_2\rangle_{2i}. \quad (6)$$

The full ground-state phase diagram can be obtained by searching for the lowest-energy state among the four aforementioned eigenstates. All phase boundaries can be analytically obtained from a comparison of the corresponding eigenenergies. In Fig. 2 we plot a set of phase diagrams on the t/J - H/J plane for a few representative values of the Coulomb term. In the absence of Coulomb interaction $U = 0$ all phase boundaries are straight linear lines as shown in Fig. 2(a). At sufficiently low fields, the system undergoes a discontinuous phase transition between the classical antiferromagnetic state AF and the quantum dimer state Q at $t/J = 2$. These two ground states are replaced with the mixed classical-quantum phase PQ at moderate magnetic fields. Finally, the classical saturated paramagnetic phase P appears at strong enough magnetic fields.

The repulsive Coulomb term $U > 0$ leads to a suppression of the parameter regions corresponding to both quantum ground states Q and PQ [see Fig. 2(b)]. The phase boundary between the classical antiferromagnetic state AF and the quantum dimer state Q is, for instance, displaced to larger values of the hopping amplitude $t/J = \sqrt{U/J + 4}$. Similarly, the phase boundaries between the classical ground states (P and AF) and the mixed classical-quantum phase PQ become nonlinear (curved), which results in a reduction of the field range corresponding to the mixed classical-quantum phase PQ .

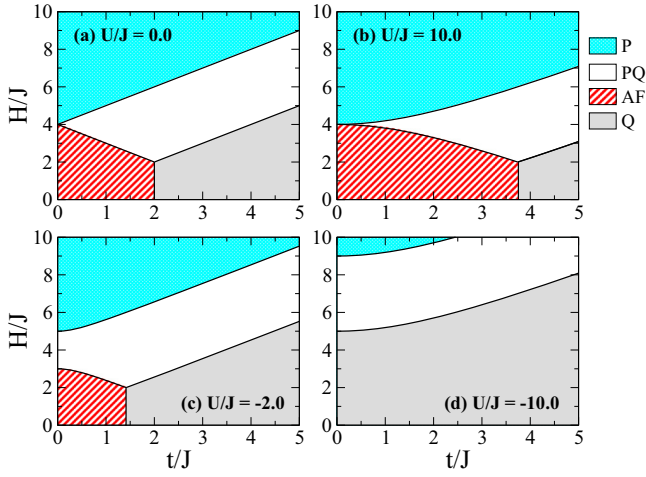


FIG. 2. The ground-state phase diagrams on the t/J - H/J plane for four distinct values of the Coulomb term. The four possible ground states are as follows: the saturated paramagnetic P , the classical antiferromagnetic AF , the fully quantum Q , and the mixed classical-quantum PQ ground state.

For an attractive Coulomb term $U < 0$ there exist two distinct regimes. For weakly attractive electron-electron coupling $|U| < 4J$, the ground-state phase diagram still involves all four available ground states [see Fig. 2(c)], whereas the classical antiferromagnetic phase AF is substantially suppressed. The range of magnetic fields corresponding to the mixed classical-quantum phase PQ emergent in between the classical phases AF and P generally increases, whereas it remains finite even if the hopping term vanishes $t \rightarrow 0$. In the strongly attractive regime of the Coulomb interaction $|U| > 4J$, the classical AF phase is fully suppressed, and the system undergoes a sequence of field-induced phase transitions $Q \rightarrow PQ \rightarrow P$ upon strengthening of the magnetic field regardless of the hopping amplitude [see Fig. 2(d) for an illustration].

III. FERMIONIC QUANTUM ENTANGLEMENT ON THE LADDER RUNGS

Nonseparable physical states imply the presence of intrinsic quantum correlations. This is the case of the dimer eigenstates $|\lambda_i\rangle$ ($i = 1-4$). Several quantities have been introduced in the literature to quantify quantum entanglement, the most natural of them is being von Neumann entropy (also called entropy of formation) [63]. For pure states $|\Psi\rangle$ of a two-parties (AB) system, the degree of quantum entanglement can be directly computed by performing the partial trace of the density matrix $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ over the states of one of the parties. From the reduced density matrix $\rho_A = \text{Tr}_B \rho$, the intrinsic quantum entanglement between the parties can be quantified by computing the entropy of formation $S = -\sum_j p_j \ln p_j$, where p_j 's are the eigenvalues of the reduced density matrix. Note that $S = 0$ when the state of the parties is a nonentangled direct product of each party state. On the other hand it becomes $S = \ln n$ for the maximal entanglement of n states.

After performing the partial trace over the states of the dimer sites it can be directly seen that the resulting density matrix for states $|\lambda_3\rangle$ and $|\lambda_4\rangle$ is an even mixture of two states and

$S = \ln 2$. On the other hand, states $|\lambda_1\rangle$ and $|\lambda_2\rangle$ produce a partial density matrix composed on an uneven mixture of four states. A straightforward calculation provides for these states the entropy of formation,

$$S = \frac{2}{2 + 2\alpha_2^2} \left[\ln(2 + 2\alpha_2^2) + \alpha_2^2 \ln \frac{2 + 2\alpha_2^2}{\alpha_2^2} \right], \quad (7)$$

where α_2 is the state coefficient defined in the previous section. It reaches a maximal value of $S = \ln 4$ for $U = 0$, corresponding to the even mixtures of all four state components with antiparallel spin orientation of the dimer electrons. The minimal value of $S = \ln 2$ occurs at $|U| \rightarrow \infty$ on which the state has the electrons in the same or in distinct sites for strongly attractive or repulsive U , respectively.

At finite temperatures, the dimer state will become a statistical mixture of all possible dimer eigenstates. In this case, there is no simple measure of quantum entanglement of a general bipartite system except for the case in which each party expands a two-dimensional space vector, i.e., for two entangled qubits. In this case, the entanglement of formation is the minimum average entanglement of an ensemble of pure states that represents the density matrix ρ [64,65]. A closely related quantifier is the quantum concurrence that is a monotonous function of the entropy of formation. The quantum concurrence can be directly extracted from the density matrix of the two qubits. Because the entanglement of formation is a monotonous function of the concurrence, one may directly use the concurrence as a measure of quantum entanglement ranging from 0 (no entanglement) up to 1 (maximum entanglement).

In the present model, each dimer site spans a four-dimensional vector state space with base vectors $|0\rangle$, $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$, and $|\uparrow\downarrow\rangle$. As such, there is no general prescription to fully evaluate the degree of entanglement within a dimer when it is in a thermal statistical mixture of states. An alternative approach is to evaluate the degree of quantum entanglement in specific sectors of the state vector space [66–68]. For example, the charge degrees of freedom within each dimer site with a fixed spin orientation spans a two-dimensional Hilbert space with basis vectors $|0\rangle$ and $|\uparrow\rangle$. In this sector of the Hilbert space, the dimer behaves effectively as two qubits. Here, we will follow a prescription previously introduced to compute the fermionic concurrence of Hubbard dimers in this sector which captures the intrinsic quantum correlations associated with the charge degrees of freedom [44,66,67]. However, it is important to have in mind that the charge correlations represent only a fraction of the actual quantum entanglement between the two parties. In this subspace, the density matrix written in the basis composed of the dimer states $|0,0\rangle$, $|0,\uparrow\rangle$, $|\uparrow,0\rangle$, and $|\uparrow,\uparrow\rangle$ can be put in the form

$$\rho_{1,2} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 \\ 0 & x & z & 0 \\ 0 & z^* & y & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b \end{pmatrix}, \quad (8)$$

where the elements represent the expectation values of distinct correlations between the two sites,

$$b = \langle n_{1,\uparrow}, n_{2,\uparrow} \rangle, \\ x = \langle n_{1,\uparrow} \rangle - \langle n_{1,\uparrow}, n_{2,\uparrow} \rangle,$$

$$\begin{aligned}
 y &= \langle n_{2,\uparrow} \rangle - \langle n_{1,\uparrow}, n_{2,\uparrow} \rangle, \\
 a &= \langle (1 - n_{1,\uparrow})(1 - n_{2,\uparrow}) \rangle, \\
 z &= z^* = \langle c_{1,\uparrow}^\dagger, c_{2,\uparrow} \rangle.
 \end{aligned} \quad (9)$$

The concurrence is defined in terms of the spectra of the matrix $\rho_{1,2}\bar{\rho}_{1,2}$ [65], where $\bar{\rho}_{1,2} = \sigma_1^y \otimes \sigma_2^y \rho_{1,2}^* \sigma_1^y \otimes \sigma_2^y$ with σ_i^y as a standard Pauli matrix. Being Λ_i the eigenvalues of $\rho_{1,2}\bar{\rho}_{1,2}$, the quantum concurrence is simply given by $C = \max[0, \sqrt{\Lambda_1} - \sqrt{\Lambda_2} - \sqrt{\Lambda_3} - \sqrt{\Lambda_4}]$ with Λ_1 being the largest eigenvalue [65]. The resulting expression for such fermionic concurrence can be written as

$$\begin{aligned}
 C &= 2 \max\{0, |\langle c_{1,\uparrow}^\dagger, c_{2,\uparrow} \rangle| \\
 &\quad - \sqrt{\langle n_{1,\uparrow}, n_{2,\uparrow} \rangle (1 - 2\langle n_{1,\uparrow} \rangle + \langle n_{1,\uparrow}, n_{2,\uparrow} \rangle)}\}.
 \end{aligned} \quad (10)$$

The fermionic concurrence in the up spin subspace is null in the nonseparable eigenstates $|\lambda_3\rangle$ and $|\lambda_4\rangle$. This feature reflects that fact that it only captures a fraction of the underlying quantum correlations. However, the fermionic concurrence becomes nonzero in the other two dimer eigenstates $|\lambda_1\rangle$ and $|\lambda_2\rangle$ for which it acquires the nonzero value $C = 1/\sqrt{1 + (U/4t)^2}$. In Fig. 3 we compare the entropy of formation and the above fermionic concurrence for the pure entangled state $|\lambda_2\rangle$ as a function of the ratio U/t . Both quantities are maximal at $U = 0$ for which the dimer state is an even superposition of all its four possible states with antiparallel spins. The minimal entanglement of these states takes place in the regime of $|U| \rightarrow \infty$ at which two state components are suppressed. This trend is captured by both entanglement quantifiers, although the fermionic concurrence vanishes in this limit because it does not retain information concerning the remaining quantum correlation between the spin degrees of freedom. Considering that the fermionic concurrence can be also computed for the

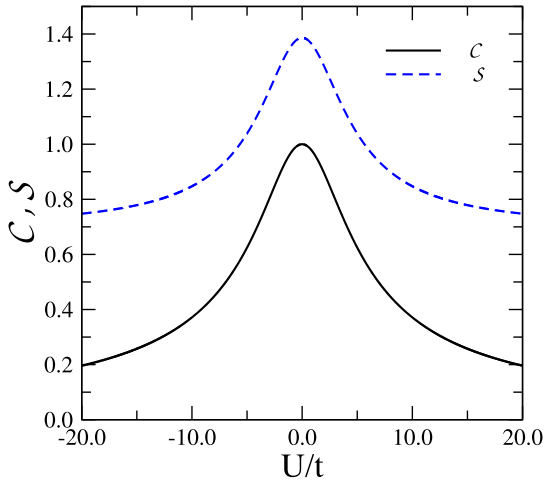


FIG. 3. The entropy of formation S and fermionic concurrence C as a function of U/t for the dimer eigenstate $|\lambda_2\rangle$. Both entanglement measures have similar trends being maximal at $U = 0$ and decaying as $|U|$ increases. Note that the fermionic concurrence vanishes when $|U| \rightarrow \infty$ whereas the entropy of formation remains finite. This behavior signals that the asymptotic state presents quantum correlations in other degrees of freedom besides the charge ones probed by C .

statistically mixed states appearing at finite temperatures, we will discuss its main features under the light of the ground-state phase diagram and the influence of thermal excitations on it.

Accordingly, the two classical ground-states P and AF have $C = 0$ at zero temperature. The quantum dimer phase Q has the same fermionic quantum concurrence as the eigenstate $|\lambda_2\rangle$, whereas the averaged fermionic concurrence of the mixed classical-quantum ground-state PQ has half of this value. Bearing this in mind, the fermionic quantum concurrence exhibits a discontinuous jump at all phase boundaries. In Fig. 4 we illustrate the dependence of the fermionic concurrence on the hopping amplitude in the low-field and intermediate-field regimes for the same representative values of the Coulomb interaction as previously used in the ground-state phase diagrams. In the low-field regime [Fig. 4(a)] the system exhibits a direct field-induced transition from the classical antiferromagnetic phase AF to the quantum antiferromagnetic phase Q . Notice that maximal fermionic entanglement $C = 1$ is achieved in the quantum dimer phase Q when the Coulomb term is absent $U = 0$ or, equivalently, in the limit of $t/J \rightarrow \infty$. Note furthermore that the quantum dimer phase Q becomes the only possible ground state at low enough magnetic fields for strong attractive Coulomb terms $U/J < -4$. In the regime of

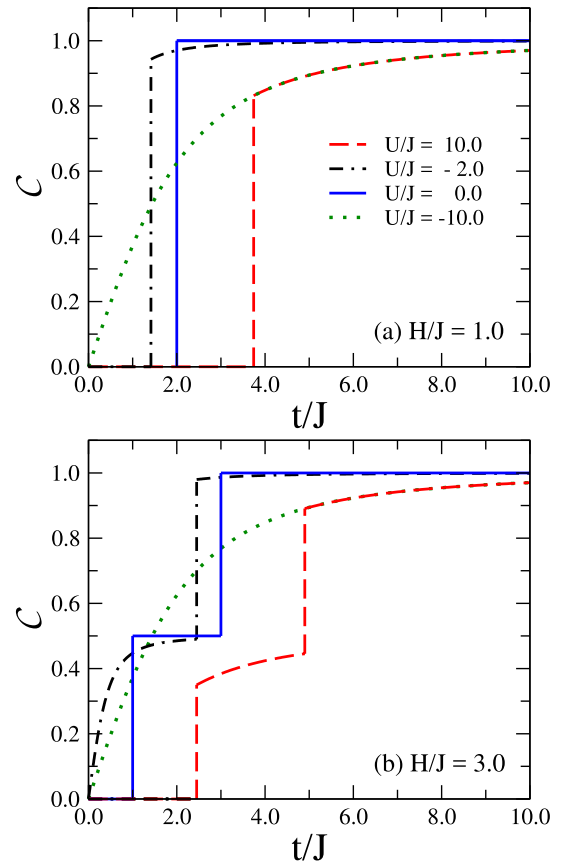


FIG. 4. The zero-temperature fermionic concurrence at the dimer rungs as a function of the normalized hopping amplitude t/J for two representative values of the magnetic field and four distinct values of the Coulomb term U/J . The discontinuous jumps signal the field-driven phase transitions. A full entanglement is achieved in the quantum antiferromagnetic phase Q in the limit $t/|U| \rightarrow \infty$.

intermediate magnetic fields [Fig. 4(b)], the two discontinuous jumps in the fermionic concurrence signal the field-driven phase transitions $AF \rightarrow PQ$ and $PQ \rightarrow Q$, respectively. The complete suppression of the classical antiferromagnetic phase AF for strongly attractive Coulomb interactions either leads to a single discontinuous jump in the fermionic concurrence closely connected with the field-driven phase transition $PQ \rightarrow Q$ [see the curve $U/J = -2$ in Fig. 4(b)] or to a monotonous rise of the fermionic concurrence within the quantum dimer ground state Q [see the curve $U/J = -10$ in Fig. 4(b)].

In order to investigate how thermal fluctuations affect the fermionic concurrence on the present Ising-Hubbard ladder, we have computed the partition function using the standard transfer-matrix formalism. The partition function can be written as $\mathcal{Z} = \text{Tr} \Lambda^N$, where $\Lambda = e^{-\beta H_{i,i+1}}$ with $H_{i,i+1}$ being the symmetrized cell Hamiltonian connecting the ladder rungs i and $i + 1$ and $\beta = 1/k_B T$. In the basis of the dimer eigenstates, the elements of the transfer matrix are given by

$$\langle \lambda_i | \Lambda | \lambda_j \rangle = e^{-\beta [J S_i^z S_j^z + (E_i + E_j)/2]}, \quad (11)$$

where S_i^z is the z component of the total spin of the i th dimer eigenstate. The full transfer matrix has the following explicit form:

$$\Lambda = \begin{pmatrix} x^2 r^{-2} & x^2 & x^3 r^{-1} & x r^{-1} & x z r^{-1} & x z^{-1} r^{-1} \\ x^2 & x^2 r^2 & x^3 r & x r & x z r & x r z^{-1} \\ x^3 r^{-1} & x^3 r & x^4 & x^2 & x^2 z & x^2 z^{-1} \\ x r^{-1} & x r & x^2 & 1 & z & z^{-1} \\ x z r^{-1} & x z r & x^2 z & z & y z^2 & y^{-1} \\ x z^{-1} r^{-1} & x r z^{-1} & x^2 z^{-1} & z^{-1} & y^{-1} & y z^{-2} \end{pmatrix}, \quad (12)$$

where

$$x = e^{-\beta U/4}, \quad (13)$$

$$r = e^{\beta \sqrt{\Delta}/4}, \quad (14)$$

$$z = e^{\beta H}, \quad (15)$$

$$y = e^{-4\beta J}. \quad (16)$$

The above transfer matrix can be diagonalized with a high numerical accuracy in order to get the partition function $\mathcal{Z} = \text{Tr} \Lambda^N = \lambda^N$, which is expressed in terms of the largest eigenvalue λ of the transfer-matrix (12). Alternatively, the eigenvalues and eigenvectors can be obtained from the algebraic solution of a fourth order polynomial equation after noting that the above transfer matrix has two null eigenvalues. However, the resulting expressions are quite cumbersome and do not unveil any relevant aspect of the system's thermodynamics. All thermodynamic averages can be directly computed from the knowledge of the transfer-matrix eigenvalues and eigenvectors. In the following, we will focus in the resulting temperature dependence of the fermionic concurrence.

In Fig. 5 we plot the fermionic concurrence as a function of temperature for the particular case without the Coulomb interaction [Fig. 5(a)] and the particular case with a strong repulsive Coulomb interaction [Fig. 5(b)]. Four distinct sets of physical parameters were used to probe all possible ground states. Similar trends are obtained in both noninteracting and

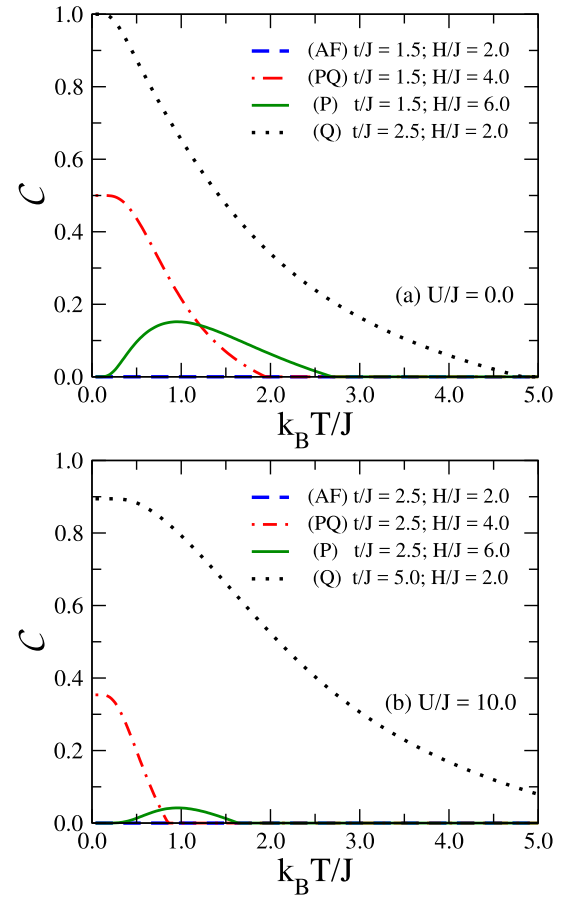


FIG. 5. Temperature dependence of the fermionic concurrence for a few representative values of the magnetic field, the hopping amplitude, and two selected values of the Coulomb term: (a) $U/J = 0$; (b) $U/J = 10$. Thermal fluctuations may induce emergence of fermionic concurrence above the classical saturated paramagnetic phase P but not above the classical antiferromagnetic phase AF .

strongly repulsive cases. Whenever the ground state has a finite fermionic entanglement (PQ and Q phases), thermal fluctuations continuously degrade the quantum correlations until the fermionic concurrence finally vanishes above a certain threshold temperature. However, thermal fluctuations play quite distinct roles above the classical ground states. Although the fermionic concurrence remains zero for all temperatures above the classical antiferromagnetic phase AF , some degree of quantum entanglement can be thermally induced above the saturated paramagnetic phase P .

The aforementioned thermally induced entanglement can also be clearly seen from the field dependence of the fermionic concurrence shown in Fig. 6 for a few different temperatures. For illustration, the fermionic concurrence is only plotted for the special case without the Coulomb interaction, but the main features remain the same also for finite values of the Coulomb term. In Fig. 6(a) we have used a set of parameters for which the classical antiferromagnetic phase AF constitutes the zero-field ground state. It is noteworthy that the lower threshold temperature at which the fermionic concurrence starts to develop is displaced to larger field values as the temperature is raised from zero. This means that no fermionic entanglement

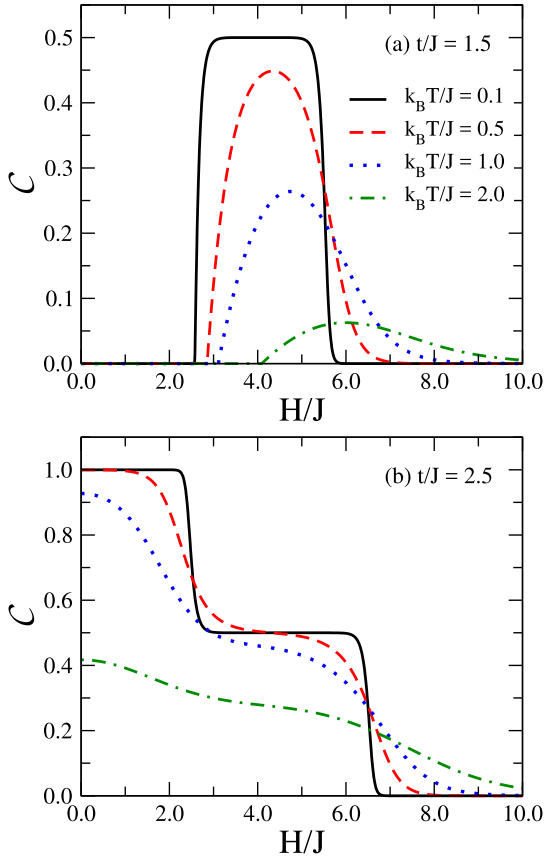


FIG. 6. The fermionic concurrence versus the magnetic field for the particular case with zero Coulomb term $U = 0$ and two representative values of the hopping amplitude, which drive the zero-field ground state of the investigated system either to: (a) the classical antiferromagnetic phase AF or (b) the quantum antiferromagnetic phase Q . Both threshold fields shift towards higher values with increasing temperatures, which means that thermal fluctuations induce the fermionic concurrence above the saturated paramagnetic phase P .

can be generated at finite temperatures above the classical antiferromagnetic ground state AF . The second threshold temperature at which the fermionic concurrence returns to zero is also displaced to larger fields. This result is taken to mean that thermal fluctuations promote the emergence of fermionic concurrence above the saturated paramagnetic phase P although the maximum entanglement that can be produced by tuning the magnetic field decreases as the temperature increases.

A full understanding of the field and temperature dependences of the fermionic concurrence can be obtained from the density plots displayed in Fig. 7. At low hopping amplitudes [see Fig. 7(a)], the low-field ground state is the classical antiferromagnetic phase AF with zero fermionic concurrence. The re-entrant behavior of the concurrence is clearly signaled by the bending of the region with finite concurrence towards larger fields. For high hopping amplitudes [see Fig. 7(b)], the low-field ground state is the quantum antiferromagnetic phase Q with maximal concurrence. In this regime, the thermally induced entanglement is also reflected by the re-entrant behavior of the quantum concurrence. It is interesting to note that the largest temperatures at which some degree of

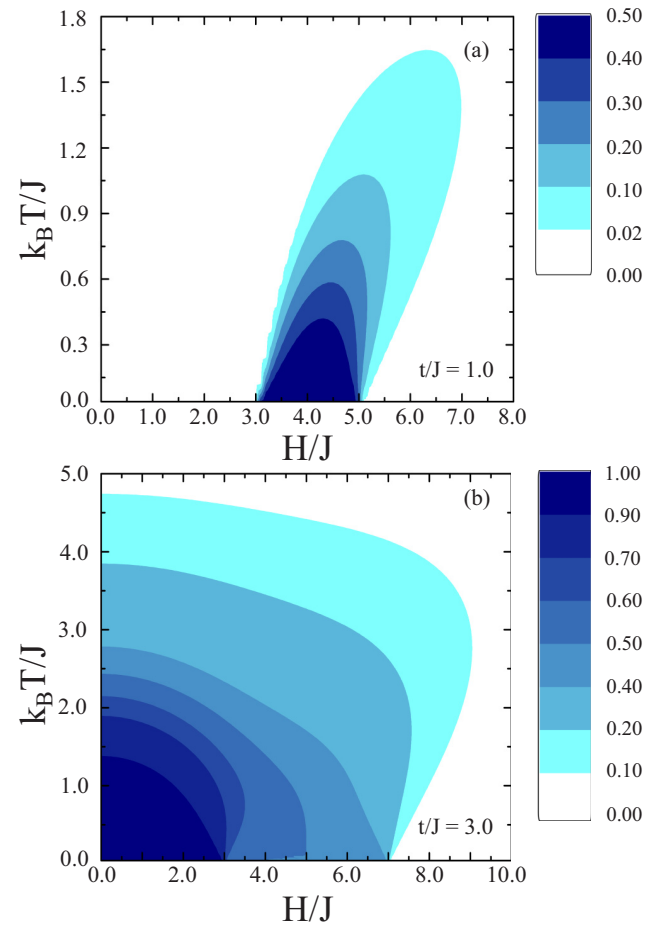


FIG. 7. Density plots of the fermionic concurrence on the $k_B T/J$ - H/J plane for the particular case without the Coulomb term $U = 0$ and two distinct values of the hopping amplitude leading to different zero-field ground states. Note the re-entrance of the region with finite fermionic concurrence. The higher temperatures at which fermionic entanglement can still be achieved are found for magnetic fields strong enough to drive the system to the classical saturated paramagnetic ground state.

quantum fermionic entanglement can be generated are found at magnetic fields corresponding to the disentangled saturated paramagnetic phase P at low enough temperatures.

The physical mechanism leading to the re-entrant character of the fermionic entanglement is the thermal excitation from a nonentangled ground state to an entangled excited state. In general, thermal fluctuations degrade quantum entanglement due to the incoherent coupling with degrees of freedom of the heat bath. However, when the energy gap between the nonentangled ground state and an excited entangled state is small (usually in the vicinity of ground-state phase transitions), the system populates the entangled state at temperatures that are not sufficient to degrade its quantum correlations. Under this condition, quantum entanglement appears at finite temperatures above a nonentangled ground state. A similar trend also occurs in other quantum spin models as, for example, in antiferromagnetic Heisenberg chains for magnetic fields slightly above the saturation value [1].

IV. SUMMARY AND CONCLUSIONS

To summarize, we have introduced a new exactly solvable Ising-Hubbard ladder model. The ladder rungs were considered to be composed of the Hubbard dimers at half-filling on each rung, which take into account a quantum-mechanical intrarung hopping process of the mobile electrons as well as the on-site Coulomb interaction. The interaction between the electrons from neighboring rungs was assumed to be Ising-like. The model was exactly solved using the exact diagonalization and transfer-matrix technique, whereas our attention was particularly focused on the most interesting case with the antiferromagnetic Ising coupling. Both cases of attractive and repulsive Hubbard interactions were considered.

It has been shown that the investigated model exhibits four possible ground states. Two of them are classical: the saturated paramagnetic phase P and the classical antiferromagnetic phase AF . The other two ground states are of quantum nature. There exists a fully quantum dimer ground-state Q with all Hubbard dimers in the same quantum entangled state. The fourth ground-state PQ has a mixed classical-quantum nature because of a regular alternation of the Hubbard dimers in the disentangled and entangled states. It has been demonstrated that the classical antiferromagnetic phase AF is fully suppressed when the Hubbard interaction becomes strongly attractive.

The degree of quantum entanglement between the pair of electrons in a given ladder rung was evaluated by computing the fermionic concurrence in the subspace of up spins. It has been convincingly evidenced that the fully quantum antiferromagnetic phase Q is maximally entangled for the special case with zero Coulomb term $U = 0$. The fermionic concurrence continuously decreases as the Coulomb term $|U|$ strengthens, whereas it approaches zero in the atomic limit $U \rightarrow \infty$. It has been also shown that thermal fluctuations generally degrade the degree of quantum entanglement especially when the ground state is of a quantum nature. The electrons remain disentangled at any temperature when the ground state is formed by the classical antiferromagnetic phase AF . By contrast, thermal fluctuations may induce

a finite degree of quantum entanglement above the classical saturated paramagnetic state. This striking finding is evidenced by a re-entrant character of the fermionic concurrence as a function of temperature when the magnetic field is chosen slightly above its saturation value. Some degree of quantum fermionic entanglement can be thus achieved at relatively high temperatures when a sufficiently strong magnetic field drives the system towards the classical paramagnetic phase. Under this condition, quantum information processing schemes can be implemented at moderated temperatures even when the system has a factorizable ground state [69].

It is worth emphasizing that the quantum concurrence in a Bose-Hubbard chain has been experimentally probed between ultracold atoms trapped in optical lattices through measures of transverse spin correlations [24]. It is our hope that the here obtained results are of general validity and provide insight for more realistic fermionic models. We believe that the phenomenology reported here will remain valid when the electron hopping is also allowed between neighboring dimers, at least, in the regime of weak inter-rung hopping amplitudes for which the Mott insulator regime is developed. However, the corresponding strongly correlated itinerant electron model is not exactly solvable, and numerical calculations based on the density matrix renormalization group technique [70] or exact diagonalization of finite chains [68] will be required to address this question. We hope that the present paper will stimulate future efforts along this line.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior), CNPq (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico), and FAPEAL (Fundação de Apoio à Pesquisa do Estado de Alagoas). J.S. acknowledges financial support by a grant from The Ministry of Education, Science, Research and Sport of the Slovak Republic under Contract No. VEGA 1/0043/16 and by a grant from the Slovak Research and Development Agency under Contract No. APVV-0097-12.

-
- [1] M. C. Arnesen, S. Bose, and V. Vedral, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 017901 (2001).
 - [2] S. Bose, *Contemp. Phys.* **48**, 13 (2007).
 - [3] M. B. Plenio and F. L. Semiao, *New J. Phys.* **7**, 73 (2005).
 - [4] M. B. Plenio and S. Virmani, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 120504 (2007).
 - [5] M. Popp, F. Verstraete, M. A. Martin-Delgado, and I. Cirac, *Appl. Phys. B* **82**, 225 (2006).
 - [6] L. Amico, A. Osterloh, F. Plastina, R. Fazio, and G. M. Palma, *Phys. Rev. A* **69**, 022304 (2004).
 - [7] T. J. G. Apollaro and F. Plastina, *Phys. Rev. A* **74**, 062316 (2006).
 - [8] F. Plastina and T. J. G. Apollaro, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 177210 (2007).
 - [9] M. J. Hartmann, M. E. Reuter, and M. B. Plenio, *New J. Phys.* **8**, 94 (2006).
 - [10] L. C. Venuti, S. M. Giampaolo, F. Illuminati, and P. Zanardi, *Phys. Rev. A* **76**, 052328 (2007).
 - [11] T. S. Cubitt and J. I. Cirac, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 180406 (2008).
 - [12] G. Gualdi, S. M. Giampaolo, and F. Illuminati, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 050501 (2011).
 - [13] M. P. Estarellas, I. D'Amico, and T. P. Spiller, *Phys. Rev. A* **95**, 042335 (2017).
 - [14] E. Dagotto and T. M. Rice, *Science* **271**, 618 (1996).
 - [15] M. Uehara, T. Nagata, J. Akimitsu, H. Takahashi, N. Môri, and K. Kinoshita, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 2764 (1996).
 - [16] T. Hong, Y. H. Kim, C. Hotta, Y. Takano, G. Tremelling, M. M. Turnbull, C. P. Landee, H.-J. Kang, N. B. Christensen, K. Lefmann, K. P. Schmidt, G. S. Uhrig, and C. Broholm, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 137207 (2010).
 - [17] M. Klanjšek, H. Mayaffre, C. Berthier, M. Horvatic, B. Chiari, O. Piovesana, P. Bouillot, C. Kollath, E. Orignac, R. Citro, and T. Giamarchi, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 137207 (2008).

- [18] K. Ninios, T. Hong, T. Manabe, C. Hotta, S. N. Herringer, M. M. Turnbull, C. P. Landee, Y. Takano, and H. B. Chan, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 097201 (2012).
- [19] D. G. Angelakis, M. F. Santos, and S. Bose, *Phys. Rev. A* **76**, 031805(R) (2007).
- [20] G. M. A. Almeida, F. Ciccarello, T. J. G. Apollaro, and A. M. C. Souza, *Phys. Rev. A* **93**, 032310 (2016).
- [21] P. Cappellaro, C. Ramanathan, and D. G. Cory, *Phys. Rev. A* **76**, 032317 (2007).
- [22] G. A. Alvarez and D. Suter, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 230403 (2010).
- [23] R. Islam, R. Ma, P. M. Preiss, M. E. Tai, A. Lukin, M. Rispoli, and M. Greiner, *Nature (London)* **528**, 77 (2015).
- [24] T. Fukuhara, S. Hild, J. Zeiher, P. Schauß, I. Bloch, M. Endres, and C. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 035302 (2015).
- [25] M. Cao and S. Q. Zhu, *Phys. Rev. A* **71**, 034311 (2005).
- [26] R. Xin, Z. Song, and C. P. Sun, *Phys. Lett. A* **342**, 30 (2005).
- [27] G. L. Kamta and A. F. Starace, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 107901 (2002).
- [28] X. G. Wang, *Phys. Rev. A* **66**, 044305 (2002).
- [29] O. Osenda, Z. Huang, and S. Kais, *Phys. Rev. A* **67**, 062321 (2003).
- [30] L. Zhou, H. S. Song, Y. Q. Guo, and C. Li, *Phys. Rev. A* **68**, 024301 (2003).
- [31] G. F. Zhang and S. S. Li, *Phys. Rev. A* **72**, 034302 (2005).
- [32] A. Tribedi and I. Bose, *Phys. Rev. A* **79**, 012331 (2009).
- [33] S.-J. Gu, H.-Q. Lin, and Y.-Q. Li, *Phys. Rev. A* **68**, 042330 (2003).
- [34] B.-Q. Jin and V. E. Korepin, *Phys. Rev. A* **69**, 062314 (2004).
- [35] L. F. Santos, G. Rigolin, and C. O. Escobar, *Phys. Rev. A* **69**, 042304 (2004).
- [36] H. A. Zad and N. Ananikian, *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 455402 (2017).
- [37] J. Strečka and J. Pavlicko, *Acta Phys. Pol. A* **132**, 167 (2017).
- [38] B. Lisnyi and J. Strečka, *Physica A* **462**, 104 (2016).
- [39] R. C. Alecio, M. L. Lyra, and J. Strečka, *J. Magn. Magn. Matter.* **417**, 294 (2016).
- [40] O. Rojas, J. Strečka, and S. M. de Souza, *Solid State Commun.* **246**, 68 (2016).
- [41] J. Strečka, R. C. Alecio, M. L. Lyra, and O. Rojas, *J. Magn. Magn. Matter.* **409**, 124 (2016).
- [42] V. V. Hovhannisyán, J. Strečka, and N. S. Ananikian, *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 085401 (2016).
- [43] Y.-D. Zheng, Z. Mao, and B. Zhou, *Acta Phys. Sin.* **66**, 230304 (2017).
- [44] J. Torrico, M. Rojas, M. S. S. Pereira, J. Strečka, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **93**, 014428 (2016).
- [45] M. Rojas, S. M. de Souza, and O. Rojas, *Phys. Rev. A* **89**, 032336 (2014).
- [46] J. Torrico, M. Rojas, S. M. de Souza, O. Rojas, and N. S. Ananikian, *Europhys. Lett.* **108**, 50007 (2014).
- [47] J. Strečka, O. Rojas, T. Verkholyak, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. E* **89**, 022143 (2014).
- [48] H. G. Paulinelli, S. M. de Souza, and O. Rojas, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 306003 (2013).
- [49] O. Rojas, M. Rojas, N. S. Ananikian, and S. M. de Souza, *Phys. Rev. A* **86**, 042330 (2012).
- [50] N. S. Ananikian, L. N. Ananikyan, L. A. Chakhmakhchyan, and O. Rojas, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 256001 (2012).
- [51] M. S. S. Pereira, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **77**, 024402 (2008).
- [52] M. S. S. Pereira, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **79**, 054427 (2009).
- [53] M. Nalbandyan, H. Lazaryan, O. Rojas, S. M. Souza, and N. Ananikian, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 074001 (2014).
- [54] H. Lazaryan, M. Nalbandyan, and N. Ananikian, *Int. J. Mod. Phys. B* **30**, 1650135 (2016).
- [55] J. Torrico, M. S. S. Pereira, J. Strečka, and M. L. Lyra, *Acta Phys. Pol. A* **132**, 140 (2017).
- [56] R. C. P. Carvalho, M. S. S. Pereira, I. N. de Oliveira, J. Strečka, and M. L. Lyra, *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 365801 (2017).
- [57] A. Moreo and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 216402 (2007).
- [58] L. Hackermüller, U. Schneider, M. Moreno-Cardoner, T. Kitagawa, T. Best, S. Will, E. Demler, E. Altman, I. Bloch, and B. Paredes, *Science* **327**, 1621 (2010).
- [59] D. Allen, F. H. L. Essler, and A. A. Nersisyan, *Phys. Rev. B* **61**, 8871 (2000).
- [60] G.-H. Liu, H.-L. Wang, and G.-S. Tian, *Phys. Rev. B* **77**, 214418 (2008).
- [61] L. J. de Jongh and A. R. Miedema, *Adv. Phys.* **23**, 1 (1974).
- [62] W. P. Wolf, *Braz. J. Phys.* **30**, 794 (2000).
- [63] M. Keyl, *Phys. Rep.* **369**, 431 (2002).
- [64] S. Hill and W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 5022 (1997).
- [65] W. K. Wootters, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 2245 (1998).
- [66] S. J. Gu, S. S. Deng, Y. Q. Li, and H. Q. Lin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 086402 (2004).
- [67] S. S. Deng and S. J. Gu, *Chin. Phys. Lett.* **22**, 804 (2005).
- [68] A. Rycerz, *New J. Phys.* **19**, 053025 (2017).
- [69] T. Chanda, T. Das, D. Sadhukhan, A. K. Pal, A. Sen(De), and U. Sen, *Phys. Rev. A* **97**, 012316 (2018).
- [70] W. L. Chan and S. J. Gu, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 345217 (2008).