

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

HELENA CAROLINA BRAGA

GEOMETRIA E SIMETRIAS DO EMARANHAMENTO

SÃO CARLOS

2011

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

HELENA CAROLINA BRAGA

GEOMETRIA E SIMETRIAS DO EMARANHAMENTO

Tese apresentada ao Departamento de Física da
Universidade Federal de São Carlos para obtenção do
título de Doutor em Ciências: Ênfase em Física Estatística.
Orientação do Prof. Dr. Salomon S. Mizrahi

SÃO CARLOS

2011

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

B813gs

Braga, Helena Carolina.

Geometria e simetrias do emaranhamento / Helena
Carolina Braga. -- São Carlos : UFSCar, 2011.
131 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos,
2011.

1. Teoria quântica. 2. Transição de fase. 3. Geometria de
Minkowski. I. Título.

CDD: 535.15 (20^a)

HELENA CAROLINA BRAGA

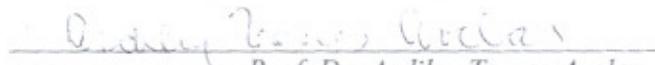
Tese de Doutorado submetida à
Coordenação do Programa de Pós-
Graduação em Física, da Universidade
Federal de São Carlos, como requisito
parcial para a obtenção do título de
Doutor em Ciências.

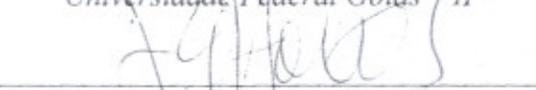
Aprovada em 20/05/2011.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Miled Hassan Youssef Moussa
Universidade de São Paulo - IFSC


Prof. Dr. Marcos César de Oliveira
Universidade Estadual de Campinas - IFGW


Prof. Dr. Ardilely Torres Avelar
Universidade Federal Goiás - IF


Prof. Dr. José Eduardo Martinho Hornos
Universidade de São Paulo - IFSC


Prof. Dr. Vivaldo Leiria Campo Junior
Universidade Federal de São Carlos - DF

Dedico esta tese aos
meus pais Ana e Dálcio.

*"Dizer que toda espécie de coisas
é dotada de uma qualidade
oculta específica pela
qual ela age e produz efeitos
manifestos é não dizer nada."
(Isaac Newton, Optics, Livro III)*

Agradecimentos

Gostaria de agradecer, em primeiro lugar, ao professor Salomon pela imensa generosidade, entusiasmo, paciência e respeito. Foram muitas as lições que aprendi com ele, e as levarei para o resto de minha vida, e não é sem um grande pesar que o deixo agora, pois sei que ainda há muito que aprender. As vezes acho que sua sabedoria é infinita, sentirei sua falta!

Em seguida, e não menos importante, gostaria de agradecer a Sinoninha (Simone F. Souza) sem a qual este trabalho não seria realizado, mas do que uma colaboradora ela sempre foi uma incentivadora e grande amiga em absolutamente todos os momentos. Só nós duas sabemos as lutas que travamos nestes anos. Sem ela nada disso seria possível.

Presto também meus agradecimentos aos professores e colegas do grupo de óptica e aos colaboradores e participantes do nosso journal club (sem citar nomes), pelo companheirismo e por todas as discussões e aprendizado em conjunto ao longo deste período de convivência. Em especial, gostaria de agradecer ao professor Gustavo Rigolin que nos introduziu neste vasto e intrigante campo de estudos que é o emaranhamento.

Agradeço ao meu marido Clodoaldo Rulli, por todo apoio, por suportar os quase 4 anos de distância, sendo sempre um entusiasta do trabalho. E também pela ajuda e incentivo, na leitura da tese e nas inúmeras discussões sobre emaranhamento.

Agradeço também aos amigos Alexandre Cacheffo, Cassius Riul, Líria, Flávio Isaac, eles que, de fato, foram meus pilares em São Carlos, com quem eu sempre pude contar, mesmo nos piores momentos, às amigas Nilva, Sandra, Márcia, pelo incentivo e carinho, e ainda aos letrados Parla, Larissa, Fabíola, Laís, Juliana e Dionísio pelos momentos de descontração e amizade.

Finalmente agradeço à minha querida família, meus pais Ana e Dálcio e às irmãs Neloca e Ana Paula por cuidarem de mim, por se preocuparem, enfim, por me darem tanto amor. Aos sobrinhos Gabriel, Miguel e Pietro agradeço pelos momentos de descontração. Agradeço também às cunhadinhas Anália e Carolina pelo carinho e aos meus segundos pais Valdir e Cidinha pela acolhida em sua família. Por fim, agradeço aos cunhados Amarildo e Eliézer pelo incentivo e às tias Neli e Nilce pelo carinho.

Agradeço por fim, às agências de fomento CNPq, FAPESP e Capes.

Resumo

O presente trabalho apresenta um método geométrico de caracterização e quantificação de emaranhamento para sistemas de dois qubits baseado em mapas não unitários. Introduzimos novos parâmetros para o operador densidade de estados, de tal forma que o produto dos autovalores, dois a dois, adquirisse a forma de distâncias quadráticas no espaço quadridimensional, estas distâncias obedecem a métrica de Minkowski. Quando tais distâncias quadráticas forem não negativas o sistema é dito separável, por outro lado quando forem negativas o sistema está emaranhado. As distâncias quadráticas propostas são invariantes por transformações unitárias e podem ser representadas graficamente em um espaço de fase hiperbólico parametrizado, onde uma análise quantitativa pode ser realizada e até mesmo trajetórias podem ser traçadas. O método é estendido para uma classe maior de estados de variedade $D-7$, isto é, com até sete parâmetros independentes, através do uso de teoria de grupos, onde classificamos os estados de acordo com as simetrias de seus sete geradores, sendo que um deles comuta com todos os outros. O método é ilustrado ao longo do trabalho com uma série de exemplos presentes na literatura. Por fim, estudamos as quebras de simetria em sistemas de Heisenberg de dois qubits procurando assinaturas de transições de fase quânticas de primeira ordem nas distâncias propostas e em suas derivadas.

Abstract

In the present work we present a geometric method to identify and measure the degree of entanglement of a two-qubit state. It is based on writing a map of the system state, from a non-unitary transformation. By introducing new parameters for such 4×4 matrix, the product of eigenvalues, two by two, acquire the form of squared 4D distances, having a Minkowski metric. If the squared distance is of the kind timelike, i.e. non-negative, the two-qubit system is separable. Otherwise, if it is spacelike, namely, the squared distance is negative, the two qubits are entangled. Besides being invariant by unitary transformations on the system state, the distances can be represented in a hyperbolic parameterized phase space, allowing a suitable graphic representation, i. e., in a phase space where the system trajectories can be drawn. The method is extended to a large class of 4×4 positive matrices having at most seven independent parameters, the D-7 manifold class. Using group theory methods we classify these states according to the symmetries of seven generators, where one of them commutes with the others. We illustrate the method and the theory by presenting several two-qubit systems found in the literature. We also study the symmetry breaking and the criticality in two-qubit Heisenberg Models, looking for signatures of quantum phase transitions in terms of the squared distances as well as in its derivatives.

Lista de Figuras

2.1	Representação de Mapas: (a) Conjunto dos mapas positivos \mathcal{P} e seus subconjuntos \mathcal{CP} e \mathcal{SP} . (b) Representação de \mathcal{CcP} como imagem de \mathcal{CP} com relação à transposição onde $\mathcal{SP} \equiv \mathcal{CP} \cap \mathcal{CcP}$	7
2.2	Representação do Isomorfismo de Jamilkowski. (a) Espaço dos mapas. (b) Espaço dos estados físicos.	9
2.3	Representação das testemunhas de emaranhamento. A testemunha W_2 é mais otimizada uma vez que também visualiza os estados emaranhados captados pelas testemunhas W_1 e W_0	12
3.1	Diagramas de Minkowski: (a) Projeção do cone de eventos no plano. O léxico da relatividade aparece entre parêntesis. (b) Analogia do cone de eventos no hiperespaço para estados quânticos.	14
3.2	Espaço de parâmetros: (a) para estados físicos $\hat{\rho}$ e (b) para seu correspondente parcialmente transposto $\hat{\rho}^{TA}$	15
3.3	Espaço de fase, (grandezas adimensionais), para os estados de Peres-Horodecki (linha tracejada) e Werner (linha sólida) variando o único parâmetro interno; Cada ponto representa um estado para um determinado valor de x , as setas indicam a direção do aumento do parâmetro de 0 a 1, de acordo com a Tabela 4. A linha pontilhada a 45° é a fronteira das regiões de estado tipo separável (separablelike) e tipo emaranhado (entangledlike).	26

3.4	Espaço de fase (adimensional) para o estado de Gisin, que depende de três parâmetros, mas com apenas dois independentes. Cada linha corresponde a uma sequência de pontos, estados, para valores fixados de a e b enquanto x é variado em seu domínio. Veja Tabela 4.	27
3.5	Trajectoria no espaço de fase para o estado dinâmico de Almeida et al. [19], dois dos parâmetros α e β são fixados enquanto o parâmetro p dependente do tempo é variado de 0 a 1. O estado representado pela linha pontilhada e tracejada, que possui $ \alpha / \beta > 1$, não cruza a linha que separa os espaços e, portanto, não sofre morte súbita do emaranhamento como ocorre com as outras duas curvas. As grandezas são adimensionais.	29
3.6	Trajectoria no espaço de fase para o estado dinâmico de Das [23]. A curva $\nu = 0$ representa o sistema sem interação entre as partículas, permanecendo emaranhado. Na curva com $\nu \neq 0$ o estado evolui cruzando a linha que separa os espaços diversas vezes, sofrendo mortes súbitas e súbitos renascimentos consecutivos, veja Tabela 4. As grandezas são adimensionais.	30
4.1	Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) para o estado de Werner, como função do parâmetro intrínseco x . No gráfico principal estão comparadas Eq.(4.2) com Eq.(4.6) e no detalhe está a comparação entre Eq.(4.4) e Eq.(4.6). As grandezas são adimensionais.	37
4.2	Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) comparadas simultaneamente para o estado de Peres-Horodecki, como função do parâmetro intrínseco x . As grandezas são adimensionais.	38
4.3	Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) para o estado de Gisin, como função do parâmetro x . O gráfico principal é para $ ab = 0.5$, onde as três curvas são coincidentes e no detalhe, em que $ ab = 0.34$, coincidem apenas a concorrência e a negatividade de Werner-Vidal. As grandezas são adimensionais.	39

4.4	Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) para o estado dinâmico de Almeida <i>et al</i> [19]. O gráfico principal é para $ \alpha / \beta = 0.5123$ (MSE em $p \approx 0.5$) e o detalhe para $ \alpha / \beta = 1.0202$ em que não há MSE. As variáveis são adimensionais.	40
4.5	Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) para o estado dinâmico de Das [23]. O gráfico principal é para sistemas interagentes ($\nu \neq 0$), e apresenta sequencias de MSE e RSE consecutivos. O detalhe é para sistemas não interagentes ($\nu = 0$), em que não há mudança de comportamento. As grandezas são adimensionais.	41
6.1	A variação das auto-energias com o acoplamento, o sistema muda de estado fundamental em J_C	60
6.2	Medida de distância quadrática $(s_2^T)^2$ com relação ao acoplamento J no modelo XXX. À medida que diminuimos a temperatura, $T \rightarrow 0$, as curvas se aproximam de uma reta que cruza o eixo x em $J = 1/2$	62
6.3	Derivada da distância em função de J no modelo XXX: A medida que nos aproximamos de $kT = 0$ derivada tem um pico maior e mais estreito. Para $kT \rightarrow 0$ a derivada diverge em $J = \frac{1}{2}$	64
6.4	A variação das auto-energias com o acoplamento, o sistema muda de estado fundamental em Δ_C	65
6.5	Medida de distância quadrática $(s_2^T)^2$ em função do acoplamento Δ no modelo XXZ. Para temperaturas $kT \rightarrow 0$ a distância se aproxima da reta $\Delta = 1$	67
6.6	Derivada da distância quadrática $(s_2^T)^2$ em função do acoplamento Δ no modelo XXZ: À medida que nos aproximamos de $kT = 0$ a derivada tem um pico maior e mais estreito. Para $\Delta = 1$ com $kT \rightarrow 0$ a derivada diverge.	68

Lista de Tabelas

2.1	Isomorfismo de Jamiolkowski	8
3.1	Invariância do espectro de autovalores para diferentes reflexões de uma partícula.	22
3.2	Invariância do espectro de autovalores para duas reflexões independentes.	23
3.3	VPs e elementos de MC para os estados estáticos W, PH e GIS e para os estados dinâmicos Alm e Das.	28
5.1	Tabela de multiplicação $\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j$	46
5.2	Tabela de comutações $[\hat{e}_i, \hat{e}_j]$	46
5.3	Variáveis $(t_{\pm}, u_{\pm}, v_{\pm}$ e $w_{\pm})$ para diferentes geradores $u(1)$. As colunas 6 e 7 contém os autovalores de sistemas de dois qubits associado a álgebra. Note que o formato dos autovalores independe de $u(1)$	56

Sumário

1	Introdução	1
2	Geometria do Emaranhamento	5
2.1	Geometria dos Estados Quânticos	5
2.1.1	Positividade dos Mapas e Estados Quânticos	5
2.1.2	Representação Gráfica dos Mapas em Termos de sua Positividade	6
2.1.3	Isomorfismos de Jamiolkowski	8
2.2	Separabilidade e Mapas positivos	8
2.2.1	Transposição Parcial	9
2.2.2	Testemunhas de Emaranhamento	11
3	Interpretação Geométrica da Separabilidade	13
3.1	Vetores de Polarização e Matriz de Correlação	15
3.2	Transposição Parcial e Simetrias de Reflexão	18
3.3	Matriz na Forma X e Parametrização do Espaço	19
3.4	Invariâncias e Simetrias do Espectro de Autovalores	22
3.5	Condições de Positividade e Separabilidade	24
4	Medida de Emaranhamento via Distâncias Quadráticas	31
4.1	Emaranhamento e Medidas	31
4.2	Medidas Geométricas de Emaranhamento	32
4.3	Medidas Algébricas de Emaranhamento	35
4.4	Medida de Distância para Estados Emaranhados	36

5	Emaranhamento para Estados de Variedade D-7	43
5.1	A álgebra $su(4)$	44
5.2	A Subálgebra $su(2) \times u(1) \times su(2)$	44
5.3	Método das Distâncias para Três Classes Distintas	47
5.3.1	Classe 1: Estados X e outros estados que comutam com operadores da forma $\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha$	47
5.3.2	Classe 2: Estados que comutam com operadores da forma $\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\beta$	50
5.3.3	Classe 3: Estados que comutam com operadores do tipo $\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{1}_j$	53
5.4	Considerações sobre a Estrutura dos Autovalores	55
6	Análise das Transições de Fase Quânticas	57
6.1	Estado Térmico XXX com Campo na Direção \hat{k}	58
6.2	Estado Térmico de Heisenberg XXZ	63
6.2.1	Modelo de Ising	69
7	Conclusões e Trabalhos Futuros	70
A	Ferramentas formais: Matrizes Hermitianas	72
A.1	Matrizes genéricas 2×2	72
A.2	Matrizes Hermitianas 2×2	74
A.3	Matrizes de dois graus de liberdade 4×4	75
B	Formas de Transposição Parcial	79
C	Reflexões em planos genéricos	82
C.1	Rotações e Reflexão de um Plano Genérico Mantendo o Eixo z	82
C.2	Aplicando ao sistema	83
C.3	Aplicando na matriz do tipo X	85
D	Exemplos calculados passo a passo	88
D.1	Estado de Werner [15]	88
D.2	Estado de Peres-Horodecki [6, 7]	90
D.3	Estado de Almeida-Davidovich [13, 17, 18, 19]	92

D.4	Estado de Gisin [16]	96
D.5	Estado de Das-Agrawal [23]	100
E	Considerações sobre a Métrica de Minkowski.	103
F	Cálculo da <i>Concurrence</i>	105
F.1	Cálculo Geral	105
F.2	Cálculo para estados do tipo X	111
G	Considerações sobre os sistemas de spin	113
G.1	Sobre a homogeneidade dos sistemas de spin	113
G.2	Estado Térmico XXX com campo na direção Z	115
G.3	Estado Térmico de Heisenberg XXZ	119
G.3.1	Modelo de Ising	123

Capítulo 1

Introdução

Objeto de estudo desde 1935 [1], o emaranhamento é um dos mais interessantes e primordiais fenômenos que aparecem no universo quântico. Não é apenas uma fonte importante de novas e intrigantes aplicações, como o teletransporte quântico [2], a codificação densa [3] e a criptografia quântica [4], entre outros, mas é também uma fonte essencial para o entendimento das manifestações da natureza a níveis microscópicos e mesoscópicos. Tradicionalmente tratou-se emaranhamento como uma correlação tipicamente quântica, essa correlação se estabelecia entre certos graus de liberdade de sistemas que estiveram em contato por algum período e que, mesmo depois de separados, permaneceram quanticamente correlacionados. No entanto, sistemas reais podem apresentar não apenas correlações clássicas ou quânticas isoladamente mas também uma mistura dessas. De forma mais geral, o emaranhamento pode ser entendido como uma subta manifestação da natureza e é muitas vezes interpretado como contraintuitivo, devido a sua natureza não local. Ainda na década de 1960, J.S. Bell [5] propôs desigualdades inhomogêneas que permitiam caracterizar um sistema quântico dentro da realidade local e não local, essas desigualdades despertaram um grande interesse da comunidade científica e se seguiu a elas uma intensa discussão sobre a completeza da teoria quântica e sobre o realismo da hipótese quântica de medida.

Nos anos 1990s o foco de estudo dos fenômenos quânticos se desviou ligeiramente a partir do estabelecimento de um critério de determinação de separabilidade para sistemas de baixa dimensão no espaço de Hilbert, esse critério ficou conhecido como trans-

posição parcial (TP) ou critério de Peres-Horodecki (PH) [6, 7]. A partir dessa década iniciaram-se os trabalhos para determinação da separabilidade e mais ainda para quantificação do emaranhamento em si [8, 9, 10]. Esses critérios, normalmente se baseiam na construção de um novo operador a partir do operador densidade de estados original do sistema por meio da realização de mapas, seguindo-se a isso a análise dos autovalores do novo operador. No critério de PH, por exemplo, o estado descrito pelo operador densidade é mapeado pela transposição dos graus de liberdade de um dos subsistemas e esse novo operador, parcialmente transposto, que não representa diretamente um estado físico, pode apresentar autovalores negativos, o que caracteriza emaranhamento. Note que o critério todo está condicionado ao mapa realizado, que deve ter certas características com relação à positividade, de forma a ser capaz de apontar os graus de liberdade que permanecem emaranhados.

Recentemente o estudo desses mapas revelou uma outra faceta do emaranhamento, a geometria do emaranhamento. O estabelecimento das chamadas testemunhas de emaranhamento [7], em outras palavras, de operadores escritos a partir dos mapas, capazes de identificar estados emaranhados com a vantagem de serem observáveis, deu ao estudo do emaranhamento um cunho absolutamente geométrico, uma vez que uma testemunha de emaranhamento faz a varredura do espaço em busca de estados emaranhados, para tal, a geometria do espaço passou a ter primordial importância. Faremos um breve apanhado das representações geométricas usuais no Capítulo 2.

Nesta tese apresentaremos uma interpretação geométrica para estados emaranhados [11] que difere das já conhecidas na literatura [12], uma vez que não se baseia no uso de testemunhas de emaranhamento mas sim no estabelecimento de distâncias próprias entre um estado emaranhado e seu correspondente separável mais próximo, os estados são escritos num espaço próprio de parâmetros, caracterizado pela métrica de Minkowski, o que nos permite não apenas determinar quantitativamente a fronteira entre os espaços de estados separáveis e emaranhados mas também traçar trajetórias para estados dinâmicos num *espaço de parâmetros* construído em analogia ao Diagrama de Minkowski.

De forma mais específica, utilizamos um operador densidade de estados $\hat{\rho}$ para sistemas de dois qubits e fazemos uma abordagem baseada nas suas simetrias de reflexão, o

que representa, *per se*, uma forma mais geral de interpretar a TP. Para isso, precisamos escrever cada operador $\hat{\rho}$ em termos de seus vetores de polarização (VPs) e de seus elementos de matriz de correlação (MC), na forma conhecida como forma de Fano, o que é uma forma equivalente de expressar $\hat{\rho}$ sem perda de generalidade, uma vez que existe uma correspondência um a um entre os elementos do grupo $SU(2)$, que transformam cada qubit e $SO(3)$ que transforma os VPs e os elementos de MC no \mathcal{R}^3 .

Em seguida, iniciamos a representação do *espaço de parâmetros* estabelecendo distâncias quadráticas com a métrica de Minkowski $s^2 = t^2 - \vec{r}^2$, em que as variáveis do espaço-tempo t , x , y e z agora são descritas em termos dos VPs e dos elementos da MC. Esse procedimento nos permite estabelecer a projeção plana do hiperespaço quadridimensional no plano t^2 vs. \vec{r}^2 , que mais adiante chamaremos de *espaço de fase*. Na relatividade, cada ponto do hiperespaço caracteriza um evento, no léxico próprio dessa teoria eventos situados na região $t^2 \geq \vec{r}^2$ são chamados tipo-tempo e eventos situados em $t^2 < \vec{r}^2$ são do tipo-espaço. Esses eventos são separados, portanto, por uma superfície cônica, o cone de eventos, cuja projeção plana é uma reta a 45° no plano t^2 vs. \vec{r}^2 . Após sofrerem reflexão de uma partícula os estados quânticos podem ser caracterizados sob os mesmos aspectos geométricos, isto é, descritos no plano t^2 vs. \vec{r}^2 , onde poderão ocupar a região $t^2 \geq \vec{r}^2$ sendo caracterizados como tipo separável ou a região $t^2 < \vec{r}^2$, em que serão caracterizados como tipo emaranhado em analogia à relatividade. esses estados podem ainda transitar entre uma e outra região estabelecendo trajetórias, no caso de estados dinâmicos, isto é, quando os parâmetros tem dependência temporal.

Focamos nossa abordagem a estados representados por matrizes 4×4 pertencentes à classe de variedade D-7, ou seja, que possuem sete parâmetros independentes. A maioria dos estados presentes na literatura, sejam eles estáticos [6, 7, 15, 16] ou dinâmicos [13, 17, 18, 19, 20, 21, 22, 23], se enquadram em um caso particular dos D-7, e são amplamente conhecidos como estados X . Toda a abordagem desenvolvida nos Capítulos 3 e 4 é relativa a esta classe particular de estados.

Ainda no Capítulo 3 mostramos uma série de exemplos de estados largamente conhecidos na literatura e seu comportamento no *espaço de parâmetros*. Inclusive estados dinâmicos, como é o caso de [19]. que apresenta morte súbita de emaranhamento, ou

ainda o estado de [23], que apresenta repetidas mortes e renascimentos do emaranhamento. No Capítulo 4 estabelecemos uma medida de emaranhamento baseada nas distâncias quadráticas e a comparamos com as medidas algébricas usuais, a *concurrence* de Wootters [8] e a negatividade de Werner-Vidal [10].

No Capítulo 5, estabelecemos, via teoria de grupos, a invariância das distâncias quadráticas $s^2 = t^2 - \vec{r}^2$ para todo subconjunto dos D-7, mostrando que o método se aplica também a estados com outras simetrias que não apenas ao já tradicional estado X [24, 25]. As simetrias dos estados e suas relações de comutação podem ser reveladoras. Mostramos que dentre as 15 categorias de estados de variedade D-7, seis só podem representar estados separáveis, uma vez que seu espectro de autovalores não se altera sob a ação de reflexões de uma partícula por planos no \mathcal{R}^3 , isto é transposições parciais. Essa é uma característica de simetria muito importante.

Finalmente, no Capítulo 6, buscamos reproduzir os resultados já conhecidos de medidas de emaranhamento como assinatura de transições de fase quânticas [26, 27], utilizando a medida proposta no Capítulo 4, baseada nas distâncias quadráticas. Para tal trabalhamos com cadeias de spins, interagindo com os primeiros vizinhos. Os modelos abordados aqui são bastante simples mas ilustrativos uma vez que nos possibilitaram reproduzir os resultados para o modelo de Ising, modelo XXX com campo externo e o modelo XXZ.

Capítulo 2

Geometria do Emaranhamento

2.1 Geometria dos Estados Quânticos

O estudo geométrico tradicional de estados quânticos consiste na determinação de distâncias, dentro de uma métrica própria, entre dois estados que possuam características distintas e excludentes, por exemplo, a quantidade de emaranhamento pode ser caracterizada pela determinação de quão distante um estado se encontra da região de separabilidade (isto é, do correspondente estado separável geodesicamente mais próximo). Existem diversas possibilidades de métricas para a caracterização geométrica dos estados dependendo do método aplicado e da geometria do espaço onde o estado está representado.

A seguir mostraremos as representações pictóricas usuais para o problema da separabilidade de estados, bem como algumas características inerentes aos métodos baseados em mapas positivos e seus isomorfismos com estados quânticos.

2.1.1 Positividade dos Mapas e Estados Quânticos

As transformações de estados físicos que descrevem processos reais, são sempre representadas por mapas ditos completamente positivos, o que garante a positividade da matriz densidade final, no entanto, por motivos operacionais, muitas vezes é interessante tra-

balhar com mapas não-completamente positivos. Para tal é necessário defini-los e ainda, relacioná-los aos estados quânticos.

Abaixo seguem alguns teoremas e definições de interesse para um mapa genérico $\hat{\Phi}$ de um dos subsistema, representado por sua matriz dinâmica $\hat{D}_\Phi = [\hat{\Phi} \otimes \hat{1}]$ [28]:

Teorema de Jamiołkowski: Um mapa linear $\hat{\Phi}$ é positivo $\{\hat{\Phi} \in \mathcal{P}\}$ se, e somente se, a matriz dinâmica correspondente D_Φ for positiva em blocos.

Teorema de Choi: Um mapa linear $\hat{\Phi}$ é completamente positivo $\{\hat{\Phi} \in \mathcal{CP}\}$ se, e somente se, a matriz dinâmica correspondente D_Φ for positiva.

Definição 1: Um mapa linear $\hat{\Phi}$ é completamente co-positivo $\{\hat{\Phi} \in \mathcal{CcP}\}$ se o mapa $\hat{T}\hat{\Phi}$ é completamente positivo, em que \hat{T} representa o mapa de uma transposição.

Definição 2: Um mapa linear $\hat{\Phi}$ é super-positivo se $\{\hat{\Phi} \in \mathcal{SP}\} \Leftrightarrow (\hat{\Phi}, \hat{\Psi}) \geq 0$ para todo $\hat{\Psi} \in P$, em que $(\hat{\Phi}, \hat{\Psi}) \equiv \langle \hat{D}_\Phi, \hat{D}_\Psi \rangle = \text{Tr}(\hat{D}_\Phi^\dagger \hat{D}_\Psi) = \text{Tr}(\hat{D}_\Phi \hat{D}_\Psi)$.

Os mapas superpositivos não são tão fáceis de descrever explicitamente, por isso, são normalmente descritos em relação outras características de positividade. Por definição, desde que um mapa $\hat{\Phi}$ seja dito super-positivo ele é também simultaneamente completamente positivo e completamente co-positivo, isto é, para um sistema bipartite, para $N = 2$. Veremos que para $N > 2$ isto não ocorre necessariamente [7, 29].

2.1.2 Representação Gráfica dos Mapas em Termos de sua Positividade

Apesar de haver diversas formas de representação gráfica de mapas que preservam o traço (inclusive a representação por meio de um tetraedro circunscrito em um cubo, cujo os vértices são operadores de Pauli [7]). Usualmente, em óptica quântica e informação quântica, condicionou-se representar estados e mapas graficamente como conjuntos compactos, semelhantes àqueles utilizados para a representação de sistemas em contato com o meio ambiente e que remontam à física estatística e anteriormente à teoria dos conjuntos.

A representação do conjunto dos mapas (e de seus estados isomórficos, como veremos a seguir) em um conjunto convexo, é no entanto, uma analogia pictórica, que não representa o espaço de Hilbert em termos de suas variáveis. Nessa representação fica claro que todos os mapas super-positivos estão contidos no conjunto dos mapas completamente positivos, que por sua vez está contido no conjunto dos mapas positivos. Essa relação está muito bem representada no diagrama (veja a Fig.2.1.a).

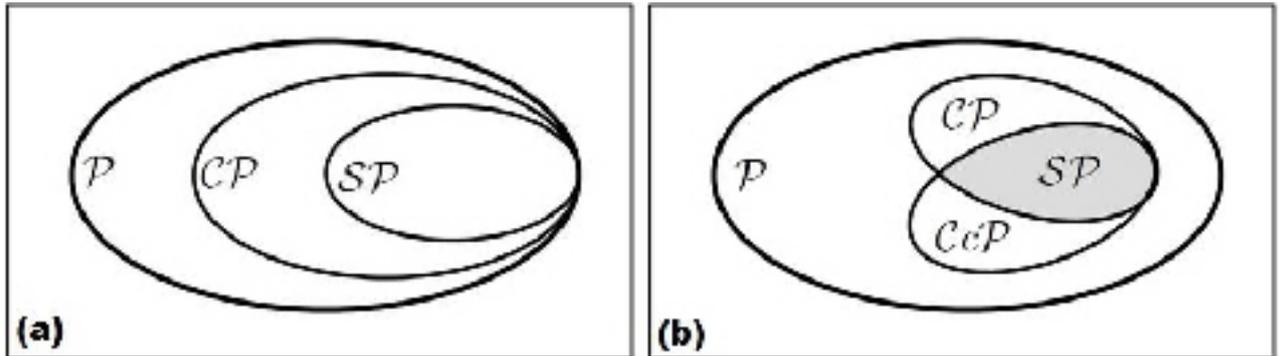


Figura 2.1: Representação de Mapas: (a) Conjunto dos mapas positivos \mathcal{P} e seus subconjuntos \mathcal{CP} e \mathcal{SP} . (b) Representação de \mathcal{CcP} como imagem de \mathcal{CP} com relação à transposição onde $\mathcal{SP} \equiv \mathcal{CP} \cap \mathcal{CcP}$.

A representação dos mapas completamente co-positivos \mathcal{CcP} não aparece explicitamente no diagrama, mas ele pode ser entendido como a imagem de \mathcal{CP} com relação à transposição (veja a Fig.2.1.b).

É importante citar que outras características desses conjuntos não são vistas a partir do diagrama. Por exemplo, um mapa positivo pode sempre ser construído pela diferença entre dois mapas completamente positivos. Para um qubit, todo o conjunto de mapas positivos pode ser obtido pela combinação de um mapa completamente positivo e um completamente co-positivo. Já para dois qubits é importante citar que um mapa $\hat{\Phi}$ que é simultaneamente completamente positivo e completamente co-positivo ($\mathcal{SP} = \mathcal{CP} \cap \mathcal{CcP}$), é também super-positivo, o que não vale para $N > 2$ uma vez que ($\mathcal{SP} \subset \mathcal{CP} \cap \mathcal{CcP}$).

As representações gráficas de estados quânticos, com relação à separabilidade seguem os mesmos preceitos das representações dos mapas descritos acima, uma vez que pode-

se estabelecer isomorfismos entre os espaços, conhecidos como isomorfismos de Jamiolkowski.

2.1.3 Isomorfismos de Jamiolkowski

Existe uma correspondência direta entre estados e mapas lineares arbitrários que preservam o traço, o que nos permite associar um mapa agindo no espaço dos estados mistos $\mathcal{M}^{(N)}$ com um operador agindo no espaço de Hilbert $\mathcal{H}_N \otimes \mathcal{H}_N$ [30].

$$\hat{\Phi} : \mathcal{M}^{(N)} \rightarrow \mathcal{M}^{(N)} \quad \longleftrightarrow \quad \hat{\rho}_{\Phi} \equiv \frac{\hat{D}_{\Phi}}{N} = [\hat{\Phi} \otimes \hat{\mathbf{1}}] (|\phi^+\rangle \langle \phi^+|). \quad (2.1)$$

Na Tabela 2.1, apresentamos alguns mapas lineares e seus operadores Hermitianos isomórficos.

Mapa Linear $\Phi : M^{(N)} \rightarrow M^{(N)}$	Operador Hermitiano $\hat{D}_{\Phi} : H_{N^2} \rightarrow H_{N^2}$
Mapas Positivos P	Operadores positivos em blocos \hat{D}
Mapas Completamente Positivos CP	Operadores positivos \hat{D} : estados mistos M
Mapas Super Positivos SP	Estados quânticos separáveis M_s
Rotações Unitárias $(\hat{U}\hat{\rho}\hat{U}^\dagger)$	Estados puros maximamente emaranhados $(\hat{U} \otimes \hat{\mathbf{1}}) \phi^+\rangle$

Tabela 2.1: Isomorfismo de Jamiolkowski

Esta dualidade entre mapas quânticos e estados quânticos é muito útil para a investigação de portas lógicas baseadas em operações unitárias e é também baseada nessa interpretação que se estabelecem as representações geométricas usuais de estados quânticos. Tais representações nada mais são do que analogias gráficas dos espaços dos mapas em espaços dos respectivos estados quânticos isomórficos. São representações pictóricas e estáticas desses estados. (veja a Fig.2.2)

2.2 Separabilidade e Mapas positivos

Um estado $\hat{\rho}$ é dito separável se ele puder ser representado em termos do produto de estados

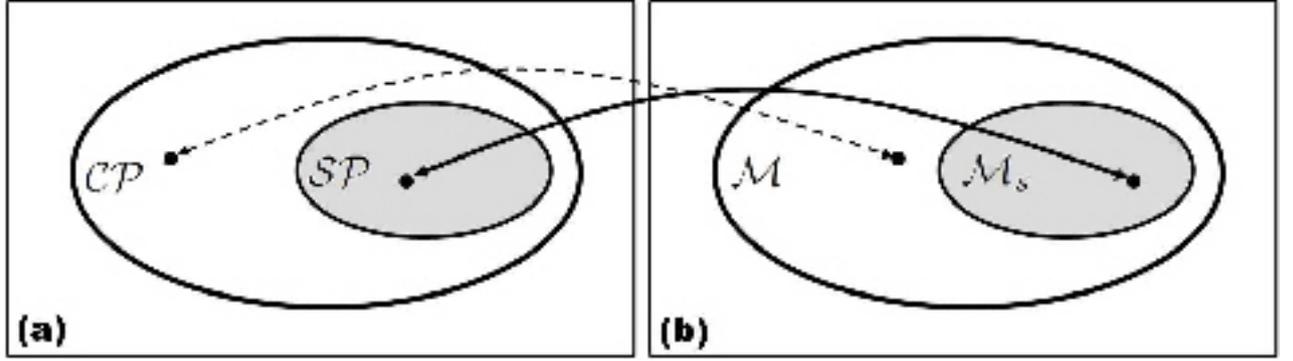


Figura 2.2: Representação do Isomorfismo de Jamilkowski. (a) Espaço dos mapas. (b) Espaço dos estados físicos.

$$\hat{\rho}_{sep} = \sum_j q_j \hat{\rho}_j^A \otimes \hat{\rho}_j^B, \quad (2.2)$$

apesar da simplicidade dessa definição, a decomposição de um estado separável não é tão simples de se obter, e não é única. No entanto, o conjunto de estados separáveis é um conjunto convexo, o que liga o problema da separabilidade intrinsecamente à positividade de mapas via isomorfismo de Jamilkowski. Essa ligação entre separabilidade e positividade de mapas fica bastante clara em Horodecki [7]

2.2.1 Transposição Parcial

Um estado separável é positivo por TP quando

$$\hat{\rho}^{T_1} = \left(\hat{T}_1 \otimes \hat{1} \right) \hat{\rho}_{sep} = \sum_j q_j \left(\hat{\rho}_j^A \right)^T \otimes \hat{\rho}_j^B \geq 0,$$

ou em outras palavras o critério dito é estabelecido da seguinte forma.

Critério 1: Estado Não Separável: Se $\hat{\rho}^{T_A} \not\geq 0$ o estado $\hat{\rho}$ é emaranhado.

Note que o critério se baseia na aplicação de um mapa $\left(\hat{T} \otimes \hat{1} \right) \hat{\rho}$ e a positividade desse mapa está intrinsecamente relacionada à separabilidade conforme estabelecido em [7].

Cr terio 2: *Mapas Positivos:* Um estado $\hat{\rho}$   separ vel se, e somente se, $\hat{\rho}' = (\hat{\Phi} \otimes \hat{1}) \hat{\rho}$ for positivo para todo mapa positivo $\hat{\Phi}$.

Um mapa $\hat{\Phi}$ est  relacionado via isomorfismos de Jamiolkowski com estados positivos por transposi o parcial (PTP ou separ veis) uma vez que $\mathcal{SP} \in \mathcal{CP} \cap \mathcal{CCP}$, em outras palavras um mapa completamente co-positivo $\hat{\Phi}$ implica que $\hat{T}\hat{\Phi}$ seja completamente positivo (Defini o 1) e portanto que $(\hat{T}\hat{\Phi} \otimes \hat{1}) \hat{\rho} \geq 0$ para qualquer $\hat{\rho}$. Logo, se o mapa completamente co-positivo resultar na positividade de $(\hat{T}\hat{\Phi} \otimes \hat{1}) \hat{\rho}$ ent o ele estar  no subspa o de intersec o $\mathcal{CP} \cap \mathcal{CCP}$ pois ser  super positivo \mathcal{SP} , o que induz   positividade da TP, mas isso ocorre apenas para estados 2x2 e 2x3. Em outras palavras, em sistemas de dimens o maior a positividade da transposi o parcial n o garante a separabilidade, uma vez que $\mathcal{SP} \subset \mathcal{CP} \cap \mathcal{CCP}$ (veja a Fig.2.1.b).

Cr terio 3: *Peres-Horodecki:* Um estado $\hat{\rho}$   separ vel se e somente se $\hat{\rho}^{TA} \geq 0$.

Note ainda que a sufici ncia deste cr terio baseia-se na positividade de $\hat{\rho}' = (\hat{\Phi} \otimes \hat{1}) \hat{\rho}$, o que nos permite dizer que $Tr(\hat{\rho}' \hat{P}) \geq 0$ para um projetor qualquer \hat{P} ,

$$\begin{aligned} \hat{\rho}' \hat{P} &= \sum_j \lambda_j |\phi_j\rangle \langle \phi_j| \theta_u\rangle \langle \theta_u|, \\ Tr(\hat{\rho}' \hat{P}) &= \sum_k \langle \phi_k | \hat{\rho}' \hat{P} | \phi_k \rangle, \end{aligned}$$

escrevendo em termo da decomposi o espectral de $\hat{\rho}'$

$$\begin{aligned} \sum_k \langle \phi_k | \hat{\rho}' \hat{P} | \phi_k \rangle &= \sum_k \sum_j \lambda_j \langle \phi_k | \phi_j \rangle \langle \phi_j | \theta_u \rangle \langle \theta_u | \phi_k \rangle \\ &= \sum_k \sum_j \lambda_j \underbrace{\langle \phi_k | \phi_j \rangle}_{\delta_{jk}} \langle \phi_j | \theta_u \rangle \langle \theta_u | \phi_k \rangle \\ &= \sum_k \sum_j \lambda_j \delta_{jk} \langle \phi_j | \theta_u \rangle \langle \theta_u | \phi_k \rangle \\ &= \sum_k \lambda_k \langle \phi_k | \theta_u \rangle \langle \theta_u | \phi_k \rangle \\ &= \sum_k \lambda_k |\langle \theta_u | \phi_k \rangle|^2, \end{aligned}$$

uma vez que $\lambda_k |\langle \theta_u | \phi_k \rangle|^2$   sempre positivo para uma $\hat{\rho}'$ positiva, com $\lambda_k \geq 0$. O adjunto de $\hat{\rho}'$ tamb m segue o mesmo racioc nio, ent o, $Tr[\hat{\rho}(\hat{\Phi} \otimes \hat{1}) \hat{P}] \geq 0$ o que nos

leva a $Tr\left(\hat{\rho}\frac{\hat{D}_{\Phi}}{N}\right) \geq 0$ a partir de Eq.(2.1) com $\hat{P} = |\phi^+\rangle\langle\phi^+|$. Logo, a positividade de $\hat{\rho}'$ implica na positividade de $Tr\left(\hat{\rho}\frac{\hat{D}_{\Phi}}{N}\right)$. A seguir, veremos que $\frac{\hat{D}_{\Phi}}{N} = \hat{W}$, é dita uma testemunha de emaranhamento.

2.2.2 Testemunhas de Emaranhamento

Tradicionalmente a estrutura dos estados quânticos é analisada geometricamente através de mapas positivos utilizando-se as chamadas testemunhas de emaranhamento. Essas testemunhas são definidas da seguinte forma:

Lemma 1 *Para qualquer estado emaranhado $\hat{\rho}$ existe uma testemunha de emaranhamento \hat{W} .*

Os operadores \hat{W} estão relacionados com mapas não-completamente positivos (*non-CP*) $\hat{\Phi}$, por meio de uma matriz dinâmica \hat{D}_{Φ} , veja Eq.(2.1), em que $\hat{W} = \frac{\hat{D}_{\Phi}}{N}$ deve ser, por definição, positiva em estados produto, o que garante a condição de separabilidade quando $Tr\left(\hat{W}\hat{\rho}\right) \geq 0$. Existem várias realizações possíveis para \hat{D}_{Φ} [31].

Qualquer testemunha \hat{W} pode ser representada como uma linha fora do espaço das matrizes densidades separáveis, como ilustrado na Fig.2.3. Os estados exteriores a essa linha são ditos emaranhados uma vez que obedecem sempre a $Tr\left(\hat{W}\hat{\rho}\right) < 0$.

É importante dizer que a análise da testemunha \hat{W} é mais fraca do ponto de vista teórico do que a análise direta do próprio mapa $\hat{\Phi}$ sob o critério $\left(\hat{\Phi} \otimes \hat{1}\right)\hat{\rho} \geq 0$. No entanto, um mapa *non-CP* não pode ser realizado na natureza, enquanto a testemunha é um observável que pode ser medido.

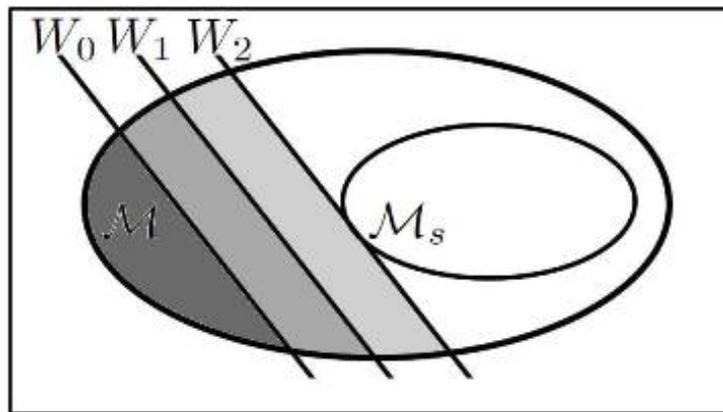


Figura 2.3: Representação das testemunhas de emaranhamento. A testemunha W_2 é mais otimizada uma vez que também visualiza os estados emaranhados captados pelas testemunhas W_1 e W_0 .

Capítulo 3

Interpretação Geométrica da Separabilidade

Neste capítulo daremos especial atenção a um método geométrico de determinação da separabilidade que nos permite fazer uma divisão formal do hiperespaço em subspaços de estados separáveis e emaranhados, inclusive com a determinação de trajetórias para estados que evoluem no tempo. Esse método nos permite uma nova interpretação gráfica, distinta das representações usuais descritas no capítulo anterior e largamente encontradas na literatura [18, 12].

Estabeleceremos distâncias quadráticas similarmente àquela desenvolvida na relatividade restrita sob a métrica de Minkowski, $s^2 = t^2 - \vec{r}^2$, mas agora com as variáveis s, t e r com suporte compacto $[0, 1]$ ao contrário da relatividade em que podem assumir valores de $[-\infty, \infty]$. Ainda de maneira similar, é possível estabelecer um diagrama de Minkowski, em que os estados são separados por um cone de eventos e a região interior ao cone caracteriza estados do *tipo tempo* e a exterior dos *tipo espaço*. No entanto, como agora as variáveis de tempo e espaço são escritas em termos das componentes dos VPs e do elemento da MC do estado $\hat{\rho}$, a fronteira do cone de eventos, determinará a separação entre estados do *tipo separável* de estados do *tipo emaranhado*.

Apesar de ser fortemente baseado no critério TP o método tem uma interpretação muito diversa e sua representação gráfica é muito mais evidente que as usuais (veja as Figs. 2.1, 2.2 e 2.3), descritas no capítulo anterior, pois executa uma divisão formal do

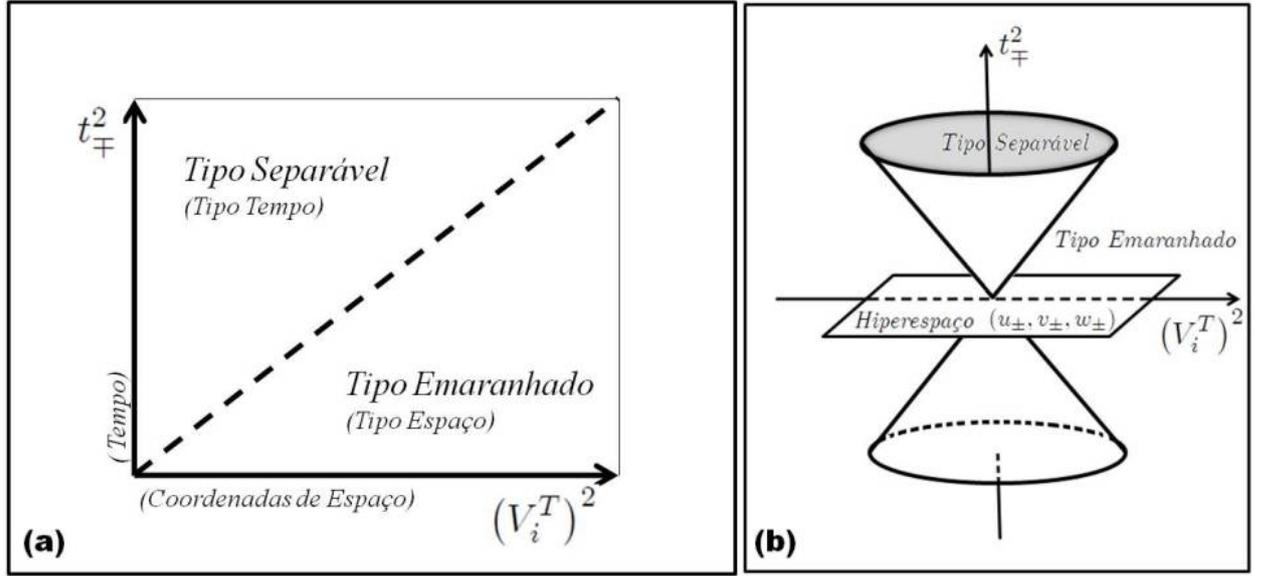


Figura 3.1: Diagramas de Minkowski: (a) Projeção do cone de eventos no plano. O léxico da relatividade aparece entre parêntesis. (b) Analogia do cone de eventos no hiperespaço para estados quânticos.

*espaço de fase*¹ em termos dos novos parâmetros $\{t_{\pm}, u_{\pm}, v_{\pm}, w_{\pm}\}$. Os estados passam a ser representados por pontos ou trajetórias num plano t_{\mp}^2 versus V_i^2 , com V_i caracterizando as distâncias no hiperplano $(u_{\pm}, v_{\pm}, w_{\pm})$. Dessa forma observamos dois subespaços restritos, separados pela projeção da superfície cônica assim como no diagrama de Minkowski no plano, isto é, pela reta a 45° passando pela origem, como mostrado na Fig. 3.1. Um estado físico possuirá distâncias $s_i^2 = t_{\mp}^2 - V_i^2 \geq 0$, sempre positivas, portanto, estará restrito à região $t_{\mp}^2 \geq V_i^2$, isto é, acima da reta tracejada indicada na Fig. 3.2 a. Por se tratar de uma reflexão, isto é, uma transformação não unitária, a transposição parcial amplia o espaço tornando possível a existência de distâncias negativas para estados físicos emaranhados. Assim um estado parcialmente transposto, cuja distância é definida segundo a mesma métrica, $(s_i^T)^2 = t_{\mp}^2 - (V_i^T)^2$ não estará mais

¹Nessa tese chamaremos de *espaço de fase*, o espaço de parâmetros caracterizado pela métrica de Minkowski, onde as trajetórias do estado quântico podem ser traçadas, em particular, definimos as variáveis que t_{\pm}^2 e V_i^2 em analogia ao espaço-tempo da relatividade. Apesar da nomenclatura é importante notar que t_{\pm}^2 e V_i^2 não são variáveis canonicamente conjugadas como no formalismo da mecânica clássica.

restrito à região $t_{\mp}^2 \geq (V_i^T)^2$ e poderá estar em qualquer ponto da região positiva do plano t_{\mp}^2 vs. $(V_i^T)^2$ (veja a Fig. 3.2.b). Neste plano, então, será possível diferenciar as regiões relacionadas a estados separáveis e emaranhados.

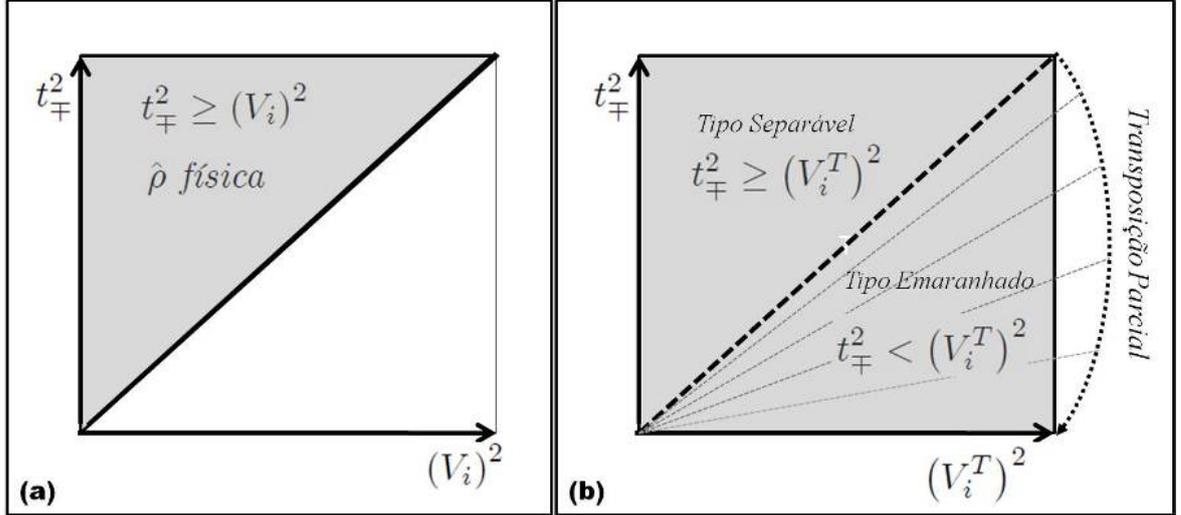


Figura 3.2: Espaço de parâmetros: (a) para estados físicos $\hat{\rho}$ e (b) para seu correspondente parcialmente transposto $\hat{\rho}^{TA}$.

Ainda por ser construído em torno de características de simetrias dentro de uma métrica bem determinada, o método nos permite analisar as simetrias de reflexão e as características de invariância dos autovalores da matriz parcialmente transposta, cujos VPs e os elementos de MC sofreram reflexão de uma partícula por um plano no \mathcal{R}^3 .

3.1 Vetores de Polarização e Matriz de Correlação

Utilizando operadores unitários de Pauli $\{\hat{1}, \hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\}$ podemos representar um estado puro mais geral de um qubit, pelo operador densidade na forma $\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{1} + \hat{r} \cdot \vec{\sigma})$, (veja o Apêndice A), em que $\hat{r} = \langle \vec{\sigma} \rangle$ é um vetor em \mathcal{R}^3 , com $|\hat{r}| = 1$, e as propriedades $Tr\hat{\rho} = Tr\hat{\rho}^2 = 1$.

Um estado misto geral tem a mesma estrutura

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{1} + \vec{\sigma} \cdot \vec{P}), \quad (3.1)$$

com $Tr\hat{\rho}^2 = \left| \vec{P} \right|^2 \leq 1$ em que \vec{P} é definido como vetor de polarização. Sob uma transformação unitária geral $U(\gamma, \hat{n}) = \exp(i\gamma\hat{n} \cdot \vec{\sigma}/2)$ o operador de estados Eq.(3.1) torna-se $\hat{\rho}' = \frac{1}{2} \left(\hat{1} + \vec{\sigma} \cdot \vec{P}' \right)$ com

$$\vec{P}' = \hat{n} \hat{n} \cdot \vec{P} + \cos \gamma \left(\vec{P} - \hat{n} \cdot \vec{P} \hat{n} \right) + \sin \gamma \vec{P} \times \hat{n}, \quad (3.2)$$

em que \hat{n} é um vetor unitário, ao redor do qual o sistema é rodado por um ângulo γ ($0 \leq \gamma < 2\pi$) e $\left| \vec{P}' \right| = \left| \vec{P} \right|$. Então, uma rotação no espaço de Hilbert no estado $\hat{\rho}$ é isomorfica a uma rotação do vetor de polarização \vec{P} no \mathcal{R}^3 , $\vec{P}' = \overleftarrow{R} \cdot \vec{P}$, sendo \overleftarrow{R} um diádico associado a uma matriz \mathbb{R} . Transformações anti-unitárias incluem também as reflexões, e tais operações são feitas pela conjugação complexa, $U(\gamma, \hat{n}) \rightarrow KU(\gamma, \hat{n})$ e a matriz \mathbb{R} se transform em $\tilde{\mathbb{R}}$ que difere pela mudança de um sinal no elemento R_{22} , nominalmente, $R_{22} \rightarrow -R_{22}$.

O estado de dois qubits mais geral (puro ou mixto traçando sobre os $N - 2$ subsistemas) pode ser escrito na forma de Fano [32]

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2^2} \left(\hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{P}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{P}_1 \otimes \hat{1}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_2 \right). \quad (3.3)$$

Essa forma de Fano é conveniente para o estudo de estados quânticos, uma vez que a separabilidade pode ser analisada observando o comportamento das correlações $M_{i,j}$, note que, quando o diádico \overleftarrow{M} puder ser escrito da forma do produto $\overleftarrow{M} = \overleftarrow{Q}_1 \overrightarrow{Q}_2$, onde \overleftarrow{Q}_1 atue apenas no subspaço da partícula 1 e \overrightarrow{Q}_2 atue apenas no subspaço da partícula 2 teremo uma matriz densidade de estados particular

$$\hat{\rho}_{part} = \frac{1}{2^2} \left(\hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \vec{\sigma}_2 \cdot \vec{P}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{P}_1 \otimes \hat{1}_2 + \left(\vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{Q}_1 \right) \otimes \left(\overrightarrow{Q}_2 \cdot \vec{\sigma}_2 \right) \right)$$

que é separável e cujas partículas tem independência estatística.

(b) Fazendo medições em $\hat{\rho}^{sep}$, a única informação que pode ser obtida é a dos VPs e a de matriz $\mathbb{M}_{1,2}$ Eq.(3.5). Os valores dos pesos p_i permanecem desconhecidos.

Apesar da representação (3.3) parecer mais complicada que a forma usual, escrita em termos dos elementos de matriz de $\rho_{ij} = \langle i | \hat{\rho} | j \rangle$, $i, j = 1, \dots, 4$ ², ela tem a vantagem de revelar algumas características interessantes sobre a natureza do emaranhamento.

As relações entre os VPs e os elementos de matriz usual é dada por

$$\mathbb{P}_1 = \begin{pmatrix} P_{1,x} & P_{1,y} & P_{1,z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2Re(\rho_{13} + \rho_{24}) & 2Im(\rho_{13} + \rho_{24}) & 2(\rho_{11} + \rho_{22}) - 1 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

e

$$\mathbb{P}_2 = \begin{pmatrix} P_{2,x} & P_{2,y} & P_{2,z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2Re(\rho_{12} + \rho_{34}) & 2Im(\rho_{12} + \rho_{34}) & 2(\rho_{11} + \rho_{33}) - 1 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Para a matriz (3.5) temos

$$\mathbb{M}_{1,2} = \begin{pmatrix} 2Re(\rho_{14} + \rho_{23}) & 2Im(\rho_{23} + \rho_{41}) & 2Re(\rho_{13} - \rho_{24}) \\ 2Im(\rho_{41} + \rho_{32}) & 2Re(\rho_{23} - \rho_{14}) & 2Im(\rho_{24} - \rho_{13}) \\ 2Re(\rho_{12} - \rho_{34}) & 2Im(\rho_{34} - \rho_{12}) & 1 - 2(\rho_{22} + \rho_{33}) \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

3.2 Transposição Parcial e Simetrias de Reflexão

Fazendo a transposição parcial em um qubit da matriz $\hat{\rho}$, uma nova matriz $\hat{\rho}^{T_2}$ é obtida, e de acordo com o critério da TP. Se a nova matriz tiver ao menos um autovalor negativo, então os qubits possuirão algum grau de emaranhamento. Logo, o método consiste em fazer a transposição parcial e analisar a positividade da matriz parcialmente transposta

$$\hat{\rho}^{T_2} = \left(\hat{1} \otimes \hat{T}_2 \right) \hat{\rho} \geq 0,$$

em que \hat{T}_2 mostra que a transposição é feita na partícula 2. Como vimos, o mapa da transposição parcial é positivo mas não completamente positivo, podendo ter autovalores negativos, a menos que o estado seja separável. Essa é uma condição necessária e suficiente para atestar a separabilidade [7].

²Para a base computacional $|1\rangle \equiv |\uparrow\uparrow\rangle$, $|2\rangle \equiv |\uparrow\downarrow\rangle$, $|3\rangle \equiv |\downarrow\uparrow\rangle$ e $|4\rangle \equiv |\downarrow\downarrow\rangle$. Podemos verificar que os vetores de polarização \vec{P}_k e os elementos da matriz de correlação \mathbb{M} permanecem invariantes sob a mudança de índices $1 \rightleftharpoons 2$ e $3 \rightleftharpoons 4$ na forma matricial $\hat{\rho}$.

Para uma matriz $\hat{\rho}$ expressa na base computacional, a matriz parcialmente transposta $\hat{\rho}^T$ é obtida fazendo as seguintes permutações dos elementos de matrizes $\rho_{12} \rightleftharpoons \rho_{21}$, $\rho_{14} \rightleftharpoons \rho_{23}$, $\rho_{32} \rightleftharpoons \rho_{41}$, $\rho_{34} \rightleftharpoons \rho_{43}$ (veja Apêndice B). Apesar desse procedimento não mostrar nenhum significado físico, quando visto sob a perspectiva da matriz (3.3), verificamos a ocorrência de mudanças locais nos VPs e na MC(3.5). Isto significa que o vetor de polarização \vec{P}_2 , associado ao qubit 2, é substituído por sua imagem refletida pelo plano cartesiano $x - z$ no \mathcal{R}^3 . As mudanças locais são:

$$\mathbb{P}_2^{-y} \equiv \mathbb{I}^{x-z} \mathbb{P}_2 = \begin{pmatrix} P_{2,x} & -P_{2,y} & P_{2,z} \end{pmatrix}^T, \quad (3.10)$$

em que

$$\mathbb{I}^{x-z} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

e o mesmo se aplica ao segundo subscrito da matriz (3.5), $\mathbb{I}_1 \mathbb{M}_{1,2} (\mathbb{I}_2^{x-z})^\top = \mathbb{M}_{1,2}^{(2,-y)}$, a matriz unitária \mathbb{I}_1 atuando no qubit 1 e \mathbb{I}_2^{x-z} no qubit 2, ambas as operações locais, o que resulta em:

$$\mathbb{M}_{1,2}^{(2,-y)} = \begin{pmatrix} M_{xx} & -M_{xy} & M_{xz} \\ M_{yx} & -M_{yy} & M_{yz} \\ M_{zx} & -M_{zy} & M_{zz} \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Isto evidencia que (3.10) e (3.11) não podem ser obtidas por transformações unitárias no estado $\hat{\rho}$. Para um estado na forma (3.3), uma operação unitária em $\vec{a} \cdot \vec{\sigma}$ faz apenas uma rotação \mathbb{R} no vetor \vec{a} , resultando em $\vec{a}' \cdot \vec{\sigma}$. Para o quarto termo da Eq.(3.3), duas transformações unitárias são aplicadas em $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{M}_{1,2} \cdot \vec{\sigma}_2$ resultando em $\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{M}'_{1,2} \cdot \vec{\sigma}_2$, sendo $\mathbb{M}'_{1,2} = \mathbb{R}_1 \mathbb{M}_{1,2} \mathbb{R}_2^T$. Uma transformação local unitária, portanto, não pode levar à transposição parcial em $\hat{\rho}$. Uma discussão mais completa é encontrada em Ref. [33].

3.3 Matriz na Forma X e Parametrização do Espaço

A física se torna mais transparente e a descrição do emaranhamento e separabilidade adquire um entendimento mais claro se utilizarmos matrizes chamadas do tipo X , que

é um caso particular de matriz com sete parâmetros independentes ³,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + P_{1,z} + P_{2,z} + M_{zz} & 0 & & & & & \\ 0 & 1 + P_{1,z} - P_{2,z} - M_{zz} & & & & & \\ 0 & M_{xx} + M_{yy} + i(M_{yx} - M_{xy}) & & & & & \\ M_{xx} - M_{yy} + i(M_{yx} + M_{xy}) & 0 & & & & & \\ 0 & M_{xx} - M_{yy} - i(M_{yx} + M_{xy}) & & & & & \\ M_{xx} + M_{yy} - i(M_{yx} - M_{xy}) & 0 & & & & & \\ 1 - P_{1,z} + P_{2,z} - M_{zz} & 0 & & & & & \\ 0 & 1 - P_{1,z} - P_{2,z} + M_{zz} & & & & & \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Do ponto de vista das reflexões locais ela possui mais simetrias do que a forma geral Eq.(3.3). A matriz X , Eq.(3.12), ocorre em muitos sistemas físicos, alguns estados emaranhados estáticos com VPs e MC dependentes de algum parâmetro intrínseco de $\hat{\rho}$, e ainda outros evoluindo no tempo, quando cada qubit interage com seu próprio banho (meio ambiente) (por exemplo para átomos de dois níveis ou para estados emaranhados de duas cavidades, cada um interagindo com seu próprio reservatório) então o tempo torna-se um parâmetro adicional do estado [13, 19, 20, 21, 22, 23]. Encontramos ainda esse tipo de matriz no caso de dois qubits interagindo via modelo de Heisenberg XYZ no equilíbrio térmico [27]. As propriedades da matriz (3.12) podem ser estendidas a matrizes que, apesar de não possuírem a forma X , possam ser reduzidas a esta forma por transformações locais de similaridade.

Os VPs $\mathbb{P}_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 & P_{k,z} \end{pmatrix}^\top$, $k = 1, 2$, (estão na direção z) e a MC torna-se

$$\mathbb{M}_{1,2} = \begin{pmatrix} M_{xx} & M_{xy} & 0 \\ M_{yx} & M_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & M_{zz} \end{pmatrix}.$$

Agora introduzimos novos parâmetros, caracterizando as variáveis do hiperespaço,

³Uma discussão mais detalhada desta classe de matrizes será feita no Capítulo 5.

$$\begin{aligned}
t_{\pm} &= \frac{1 \pm M_{zz}}{2}, & u_{\pm} &= \frac{P_{1,z} \pm P_{2,z}}{2}, \\
v_{\pm} &= \frac{M_{xx} \pm M_{yy}}{2}, & e \quad w_{\pm} &= \frac{M_{yx} \pm M_{xy}}{2},
\end{aligned} \tag{3.13}$$

todos com valores no intervalo $[0, 1]$. Então, os autovalores de Eq.(3.12) são escritos como

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= (t_- + V_1) / 2, \\
\lambda_2 &= (t_- - V_1) / 2, \\
\lambda_3 &= (t_+ + V_2) / 2 \quad e \\
\lambda_4 &= (t_+ - V_2) / 2,
\end{aligned} \tag{3.14}$$

em que

$$V_1 = \sqrt{u_-^2 + v_+^2 + w_-^2} \quad e \quad V_2 = \sqrt{u_+^2 + v_-^2 + w_+^2}. \tag{3.15}$$

caracterizando uma distância no hiperplano $(u_{\pm}, v_{\pm}, w_{\pm})$.

A transposição parcial no qubit 2 corresponde a mudanças $(t_{\pm}, u_{\pm}, v_{\pm}, w_{\pm}) \rightarrow (t_{\pm}, u_{\pm}, v_{\mp}, w_{\mp})$ e os autovalores de $\hat{\rho}^T$ assumem uma forma similar

$$\begin{aligned}
\lambda_1^T &= (t_- + V_1^T) / 2, \\
\lambda_2^T &= (t_- - V_1^T) / 2, \\
\lambda_3^T &= (t_+ + V_2^T) / 2 \quad e \\
\lambda_4^T &= (t_+ - V_2^T) / 2,
\end{aligned}$$

sendo

$$V_1^T = \sqrt{u_-^2 + v_-^2 + w_+^2}, \quad e \quad V_2^T = \sqrt{u_+^2 + v_+^2 + w_-^2}. \tag{3.16}$$

Comparando as Eq.(3.16) com as Eq.(3.15), observamos que os parâmetros u e v têm seus sinais trocados. O conjunto de autovalores $\{\lambda_i^T\}$ pode ser obtido do conjunto de $\{\lambda_i\}$ fazendo as mudanças $P_{2,y} \rightarrow -P_{2,y}$ e $M_{\beta y} \rightarrow -M_{\beta y}$ ($\beta = x, y, z$) ou equivalentemente, $\{v_{\pm}, w_{\pm}\} \rightarrow \{v_{\mp}, w_{\mp}\}$.

3.4 Invariâncias e Simetrias do Espectro de Autovalores

O critério de transposição parcial é colocado em uma perspectiva geométrica no \mathcal{R}^3 , quando analisamos as reflexões dos VPs e dos elementos da MC, seja no qubit 1 ou no qubit 2, por qualquer um dos planos cartesianos xz , yz , xy , ou por um plano arbitrário passando pela origem do sistema de coordenadas (veja o Apêndice C).

Complementarmente, fazendo duas reflexões de uma partícula independentes em (3.12), uma em cada qubit, veremos que não há alterações no espectro de autovalores da matriz original.

A transposição parcial pode ser colocada em perspectivas mais gerais, fazendo uma reflexão local simples dos vetores associados a uma das partículas ($\vec{P}_{1,\alpha}$, $\vec{M}_{\beta,\alpha} = (M_{x\alpha}, M_{y\alpha}, M_{z\alpha})$ para partícula 1 e \vec{P}_2 , $\vec{M}_{\alpha,\beta} = (M_{\alpha x}, M_{\alpha y}, M_{\alpha z})$ para partícula 2) seja pelos planos:

1. zx , onde o sinal das componentes y de uma das partículas é mudado de + para -;
2. xy , onde o sinal das componentes z de uma das partículas é mudado de + para -;
3. zy , onde o sinal das componentes x de uma das partículas é mudado de + para -; ou ainda por um plano arbitrário (veja o Apêndice C).

Essas reflexões preservam o espectro de autovalores, isto é, o conjunto de autovalores das matrizes refletidas é invariante $\{\lambda_1^T, \lambda_2^T, \lambda_3^T, \lambda_4^T\}$. Na Tabela.3.1 mostramos como esse espectro é conservado,

λ_1^T	$\lambda_1^{(2-y)}$	$\lambda_1^{(1-x)}$	$\lambda_1^{(2-x)}$	$\lambda_1^{(1-y)}$	$\lambda_3^{(1-z)}$	$\lambda_3^{(2-z)}$
λ_2^T	$\lambda_2^{(2-y)}$	$\lambda_2^{(1-x)}$	$\lambda_2^{(2-x)}$	$\lambda_2^{(1-y)}$	$\lambda_4^{(1-z)}$	$\lambda_4^{(2-z)}$
λ_3^T	$\lambda_3^{(2-y)}$	$\lambda_3^{(1-x)}$	$\lambda_3^{(2-x)}$	$\lambda_3^{(1-y)}$	$\lambda_1^{(1-z)}$	$\lambda_1^{(2-z)}$
λ_4^T	$\lambda_4^{(2-y)}$	$\lambda_4^{(1-x)}$	$\lambda_4^{(2-x)}$	$\lambda_4^{(1-y)}$	$\lambda_2^{(1-z)}$	$\lambda_2^{(2-z)}$

Tabela 3.1: Invariância do espectro de autovalores para diferentes reflexões de uma partícula.

Na Tabela 3.1 cada autovalor $\lambda^{(i-\alpha)}$ corresponde a uma mudança de sinal na partícula $i = 1$ ou 2 , em uma das componentes $\alpha = x, y$ ou z do vetor de polarização $\vec{P}_{i,\alpha}$, e nos elementos de MC $\vec{M}_{\alpha\beta}$. Note que o ordenamento das colunas 5 e 6 difere dos demais, mas o espectro total de autovalores é preservado.

O $\lambda_k^{(2-y)}$ é o k -ésimo autovalor da nova matriz (construída a partir da matriz (3.12)) para a qual as mudanças $P_{2,y} \rightarrow -P_{2,y}$ e $M_{\beta y} \rightarrow -M_{\beta y}$ foram implementadas. De fato, os vetores são ímpares sob reflexão pelo plano xz . Mas note que o conjunto dos autovalores $\{\lambda_k^{(i-\alpha)}\}$ permanece invariante. Logo, transpor parcialmente um estado é equivalente a fazer qualquer reflexão de uma partícula sob qualquer plano cartesiano⁴.

Por outro lado, duas reflexões de uma partícula, consecutivas e independentes, fazem o espectro retornar àquele do estado original $\hat{\rho}$ sem transposição, cujos autovalores são sempre positivos, como mostrado na Tabela 3.2

$\lambda_i^{(1-x,2-x)}$	$\lambda_i^{(1-y,2-y)}$	$\lambda_i^{(1-z,2-z)}$	λ_i
$\lambda_1^{(1-x,2-z)}$	$\lambda_1^{(1-y,2-z)}$	$\lambda_3^{(1-x,2-y)}$	λ_1
$\lambda_2^{(1-x,2-z)}$	$\lambda_2^{(1-y,2-z)}$	$\lambda_4^{(1-x,2-y)}$	λ_2
$\lambda_3^{(1-x,2-z)}$	$\lambda_3^{(1-y,2-z)}$	$\lambda_1^{(1-x,2-y)}$	λ_3
$\lambda_4^{(1-x,2-z)}$	$\lambda_4^{(1-y,2-z)}$	$\lambda_2^{(1-x,2-y)}$	λ_4

Tabela 3.2: Invariância do espectro de autovalores para duas reflexões independentes.

Na Tabela 3.2 os superescritos tem o mesmo significado dos da Tabela 3.1 apesar de agora existirem duas mudanças,

$$\lambda^{(\text{Partícula \# - coordenada que muda de sinal}, \text{Partícula \# - coordenada que muda de sinal})}$$

⁴No Apêndice D reflexões por planos mais gerais, escritos em termos de ângulos de Euler são abordadas.

3.5 Condições de Positividade e Separabilidade

Como cada autovalor λ_i toma valores no intervalo $[0, 1]$, Podemos definir duas desigualdades a partir da multiplicação dos autovalores $(s_1)^2 = 4\lambda_1\lambda_2$, e $(s_2)^2 = 4\lambda_3\lambda_4$,

$$s_1^2 = t_-^2 - V_1^2 \geq 0 \quad \text{e} \quad s_2^2 = t_+^2 - V_2^2 \geq 0. \quad (3.17)$$

Se indentificarmos, em analogia, o parâmetro t_{\pm} como uma “variável de tempo” e $\{u_{\pm}, v_{\pm}, w_{\pm}\}$ como “variáveis de espaço”, então usando o lexico próprio de teoria da relatividade, podemos dizer que s_1^2 e s_2^2 são distâncias do “tipo tempo”, pois são sempre positivas, logo as igualdades na Eq. (3.17) definem uma superfície cônica no hiperespaço de 4-D.

Fazendo o mesmo procedimento para os autovalores da matriz parcialmente transposta $\hat{\rho}^T$, teremos desigualdades similares com $(s_1^T)^2 = 4\lambda_1^T\lambda_2^T$, e $(s_2^T)^2 = 4\lambda_3^T\lambda_4^T$,

$$(s_1^T)^2 = t_-^2 - (V_1^T)^2 \geq 0 \quad \text{e} \quad (s_2^T)^2 = t_+^2 - (V_2^T)^2 \geq 0, \quad (3.18)$$

agora interpretadas como um critério de separabilidade uma vez que as desigualdades Eq.(3.18) poderão ser violadas. As distâncias Eq.(3.17) são sempre do “tipo tempo” uma vez que o espectro de autovalores é sempre positivo, logo elas não nos fornecem informações sobre separabilidade ou emaranhamento. No entanto, quando olhamos as desigualdades Eq.(3.18) vemos que elas serão violadas para qualquer valor negativo dos autovalores⁵. Se $\hat{\rho}$ conter algum grau de emaranhamento para o conjunto intrínseco de parâmetros, então uma das distâncias ($(s_1^T)^2$ ou $(s_2^T)^2$, ou até mesmo ambas), se tornarão negativas, i.e., o estado será dito do “tipo espaço”. Ou ainda, usando palavras mais adequadas, o estado pode ser identificado como tipo separável (*separablelike*) ou tipo emaranhado (*entangledlike*), de acordo com o sinal de $(s_k^T)^2$. Claramente as desigualdades Eq.(3.18) são violadas se o estado é emaranhado. Note ainda que as distâncias quadráticas são invariantes sob transformações de similaridade nos estados.

⁵Como $\lambda_1^T + \lambda_2^T + \lambda_3^T + \lambda_4^T = 1$, se $\lambda_1^T\lambda_2^T > 0$ e $\lambda_3^T\lambda_4^T > 0$, então necessariamente $\{\lambda_1^T, \lambda_2^T, \lambda_3^T, \lambda_4^T\}$ são todos positivos. por outro lado se $\lambda_1^T\lambda_2^T > 0$ e $\lambda_3^T\lambda_4^T < 0$ (ou $\lambda_1^T\lambda_2^T < 0$ e $\lambda_3^T\lambda_4^T > 0$), então necessariamente 3 autovalores tem o mesmo sinal e o remanescente tem o sinal oposto.

A seguir apresentaremos, a representação dos estados no espaço de fase t_{\mp}^2 vs. $(V_i^T)^2$, que são também escritos em termos dos parâmetros intrínsecos de cada estado, cujas características com relação à separabilidade e ao emaranhamento podem ser identificados conforme o estado cruza a linha tracejada a 45° que é a fronteira dividindo o *espaço de fase* em duas regiões ou subspaços dos estados separáveis aqui chamado *separablelike* e subespaço dos estados emaranhados aqui chamado *entangledlike*. Nas Figs. 3.3 e 3.4, cada ponto (associado a cada valor do parâmetro intrínseco) nesse espaço representa um estado, as linhas são portanto representações de sequências densas de pontos. Foram escolhidos alguns exemplos físicos amplamente difundidos dentre os muitos presentes na literatura para exemplificar o método proposto. A Tabela 3.3 mostra os valores de VPs e dos elementos da MC dependendo do parâmetro intrínseco para os seguintes exemplos:

1. W (Estado proposto por Werner [15], com $|x| \leq 1$);
2. PH (Estado proposto por Peres, Horodecki [6, 7], com $0 \leq x \leq 1$);
3. Gis (Estado proposto por Gisin [16], com $a > b$ e $0 \leq x \leq 1$);
4. Alm (Estado realizado experimentalmente por Almeida et al. [19], com $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ e $p = 1 - e^{-\Gamma t}$) e
5. Das (Estado proposto por Das e Agarwal [23] todos os parâmetros dependem do tempo exceto por χ).

Na Fig. 3.3 a linha sólida representa o estado de Werner [15], como é bem conhecido, este estado se torna separável para $x \leq 1/3$ (veja Apêndice D). A linha tracejada representa o estado de Peres-Horodecki [6, 7], este estado fica na região emaranhada para $x \in (0, 1]$ e é separável para um único ponto $x = 0$. A Fig. 3.4 representa o estado de Gisin [16] que depende de três parâmetros intrínsecos, apesar de somente dois deles serem independentes, cada linha corresponde a diferentes valores para o par (a, b) enquanto x é variado. Novamente o estado será separável para $x \leq \frac{1}{2|ab|+1}$.

Consideramos agora estados dinâmicos, evoluindo no tempo, cada um com dois qubits preparados inicialmente em um estado emaranhado, cada um dos qubits interage

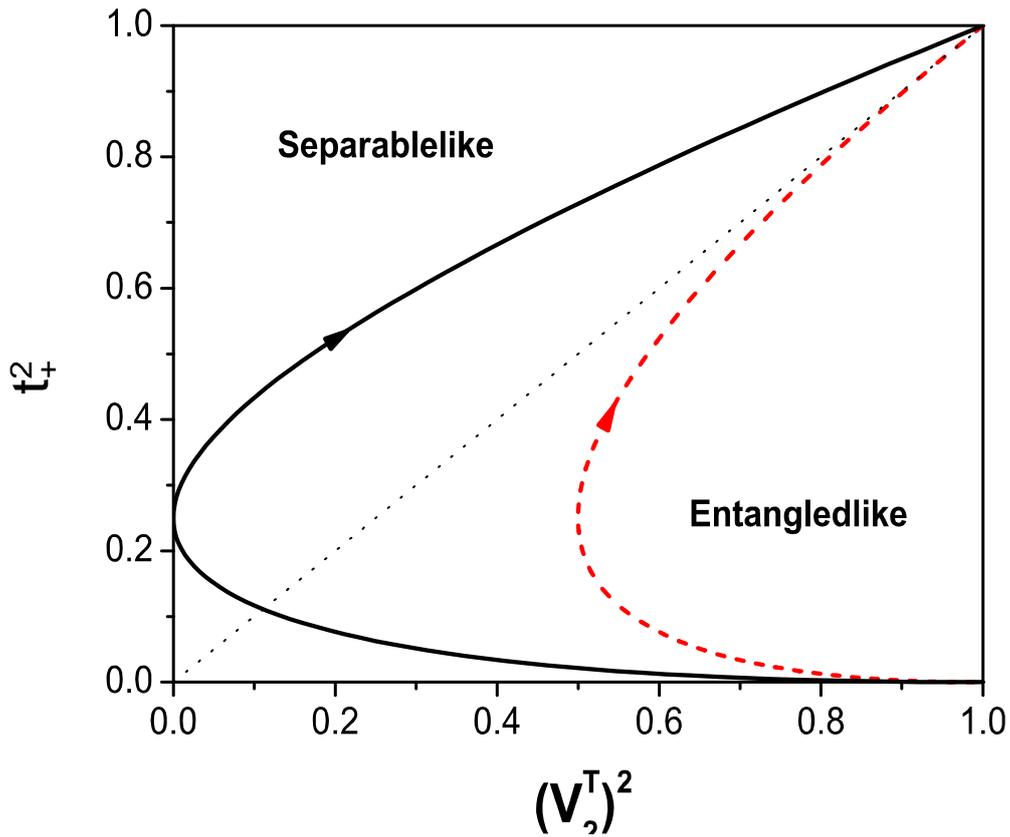


Figura 3.3: Espaço de fase, (grandezas adimensionais), para os estados de Peres-Horodecki (linha tracejada) e Werner (linha sólida) variando o único parâmetro interno; Cada ponto representa um estado para um determinado valor de x , as setas indicam a direção do aumento do parâmetro de 0 a 1, de acordo com a Tabela 4. A linha pontilhada a 45° é a fronteira das regiões de estado tipo separável (separablelike) e tipo emaranhado (entangledlike).

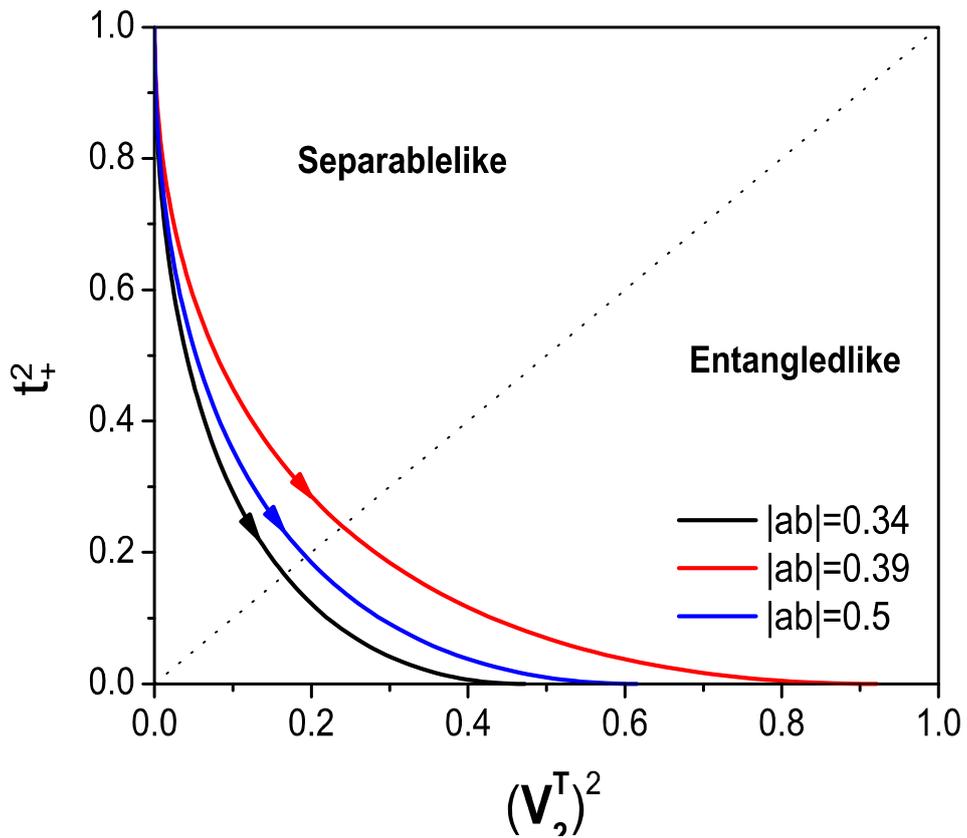


Figura 3.4: Espaço de fase (adimensional) para o estado de Gisin, que depende de três parâmetros, mas com apenas dois independentes. Cada linha corresponde a uma sequência de pontos, estados, para valores fixados de a e b enquanto x é variado em seu domínio. Veja Tabela 4.

State	$P_{1,z}$	$P_{2,z}$	M_{xx}	M_{yy}
W	0	0	$-x$	$-x$
PH	$1-x$	$1-x$	$-x$	$-x$
Gis	$2(a^2 - b^2)x$	$2(b^2 - a^2)x$	$-2xab$	$-2xab$
Alm	$2(\alpha ^2 + \beta ^2 p) - 1$	$2(\alpha ^2 + \beta ^2 p) - 1$	$2 \alpha \beta \cos\delta(1-p)$	$-2 \alpha \beta \cos\delta(1-p)$
Das	$2(a+b) - 1$	$2(a+c) - 1$	$2(z_R \cos\chi - z_I \sin\chi)$	$2(z_R \cos\chi - z_I \sin\chi)$

State	M_{xy}	M_{yx}	M_{zz}
W	0	0	$-x$
PH	0	0	$1 - 2x$
Gis	0	0	$1 - 2x$
Alm	$2 \alpha \beta \sin\delta(1-p)$	$2 \beta \alpha \sin\delta(1-p)$	$1 - 4 \beta ^2(1-p)p$
Das	$2(z_R \sin\chi + z_I \cos\chi)$	$-2(w_R \sin\chi + w_I \cos\chi)$	$1 - 2(b+c)$

Tabela 3.3: VPs e elementos de MC para os estados estáticos W, PH e GIS e para os estados dinâmicos Alm e Das.

com seu próprio reservatório. Na Figura 3.5 representamos um sistema produzido experimentalmente por [19], inspirado na proposta de [13], onde os qubits não interagem entre si, apesar de estarem inicialmente emaranhados. Cada uma das linhas representa um valor da razão entre os parâmetros intrínsecos $|\alpha|/|\beta|$, que evoluem no tempo de acordo com o parâmetro $p = 1 - e^{-\gamma t}$, $p \in [0, 1)$. Quando $p = \frac{|\alpha|}{|\beta|} < 1$ a fronteira é cruzada em um tempo finito, o que indica a morte súbita de emaranhamento (MSE). Para outros valores as trajetórias nunca cruzam a fronteira e o estado permanece emaranhado para todo tempo finito.

Na Fig. 3.6 estudamos o sistema de dois qubits interagentes [23]. Para o parâmetro intrínseco $\nu = 0$ os qubits não interagem entre si e as trajetórias nunca cruzam a fronteira. No entanto, para $\nu \neq 0$ uma drástica mudança é observada pois a trajetória cruza diversas vezes a fronteira. Diversas mortes súbitas (MSE) ocorrem quando a trajetória cruza a fronteira indo da região dos estados emaranhados para a região dos estados separáveis, e os renascimentos súbitos (RSE) ocorrem quando a trajetória cruza a fronteira no sentido oposto.

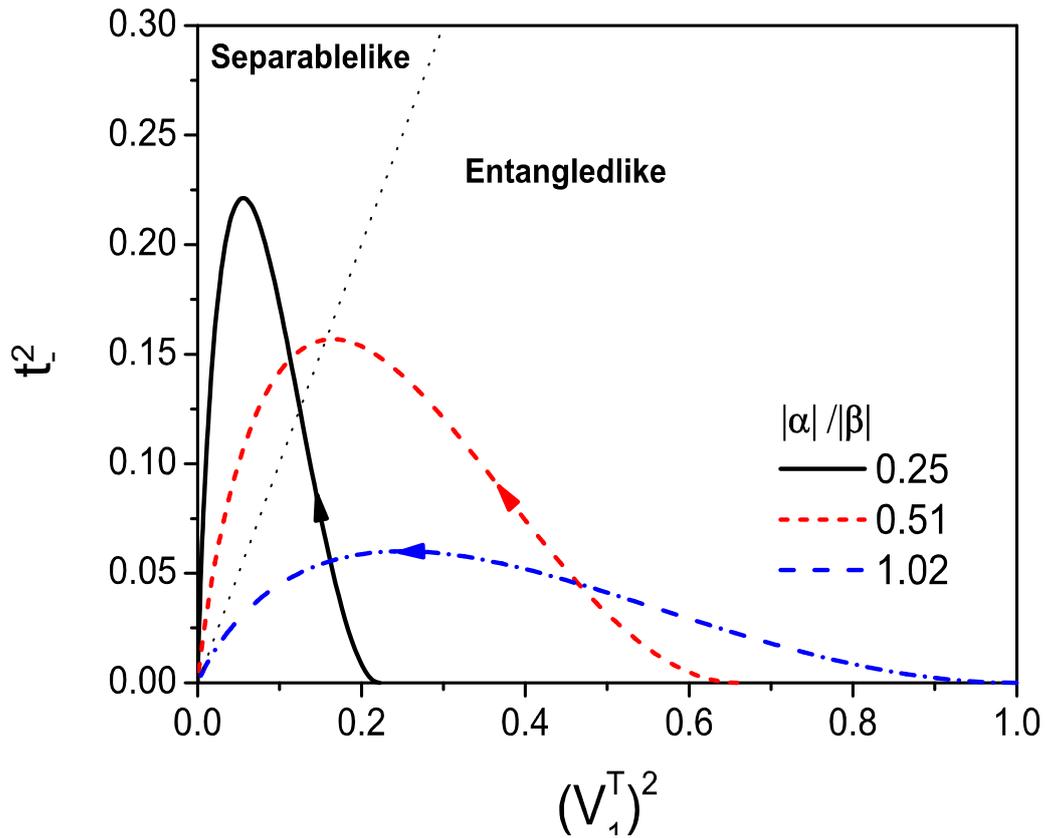


Figura 3.5: Trajetória no espaço de fase para o estado dinâmico de Almeida et al. [19], dois dos parâmetros α e β são fixados enquanto o parâmetro p dependente do tempo é variado de 0 a 1. O estado representado pela linha pontilhada e tracejada, que possui $|\alpha|/|\beta| > 1$, não cruza a linha que separa os espaços e, portanto, não sofre morte súbita do emaranhamento como ocorre com as outras duas curvas. As grandezas são adimensionais.

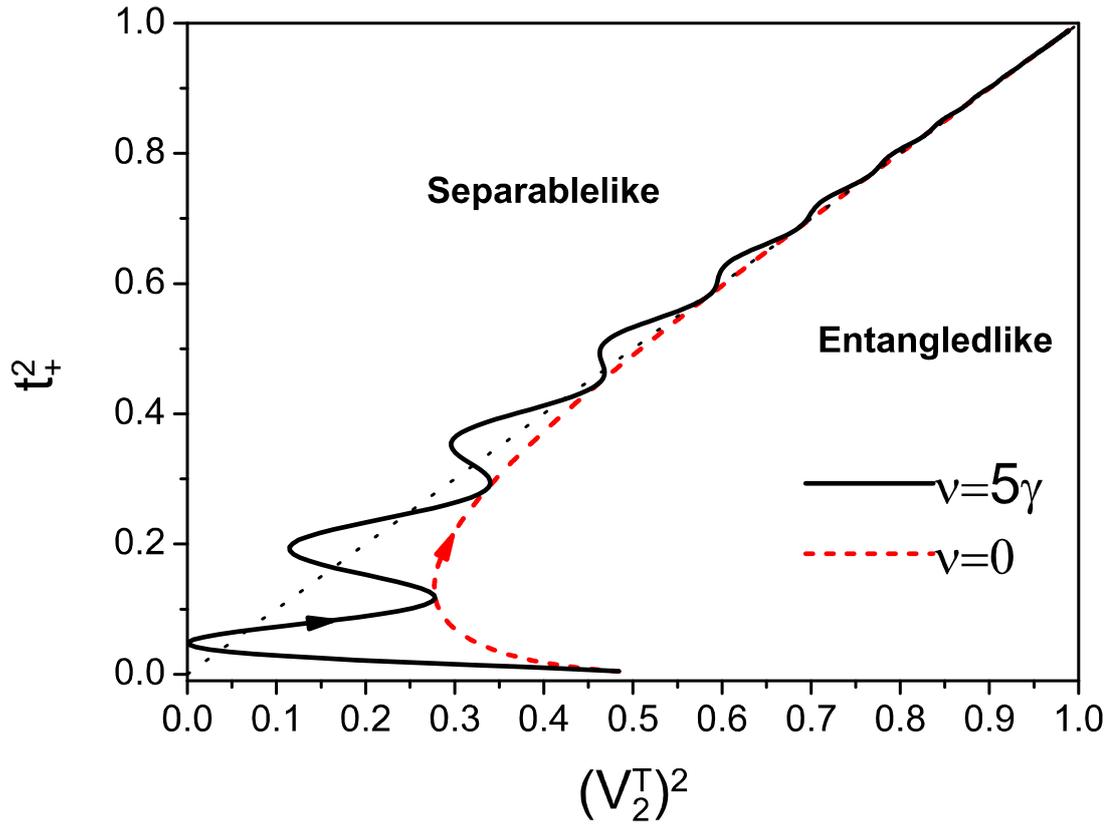


Figura 3.6: Trajetória no espaço de fase para o estado dinâmico de Das [23]. A curva $\nu = 0$ representa o sistema sem interação entre as partículas, permanecendo emaranhado. Na curva com $\nu \neq 0$ o estado evolui cruzando a linha que separa os espaços diversas vezes, sofrendo mortes súbitas e súbitos renascimentos consecutivos, veja Tabela 4. As grandezas são adimensionais.

Capítulo 4

Medida de Emaranhamento via Distâncias Quadráticas

4.1 Emaranhamento e Medidas

De fato, o emaranhamento pode ser entendido de forma simples: suponhamos que estejamos interessados em dois subsistemas de igual importância apesar de estarem localizados em dois laboratórios distintos. Possivelmente, devido à história passada do estado, o sistema pode não ser um estado produto como na Eq. (2.2), ou seja, é um operador densidade no espaço composto de Hilbert $\mathcal{H} = (\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B)$. De qualquer maneira, podemos imaginar que um estado do subsistema do laboratório A é obtido tomando o traço parcial sobre os graus de liberdade do subsistema em B tal que $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho})$, o estado resultante não precisa necessariamente ser puro, exceto se $\hat{\rho}$ for puro. Podemos, no entanto, analisar um caso simples de duas partículas (cada subespaço \mathcal{H}_A e \mathcal{H}_B com dois graus de liberdade), em que encontramos os quatro estados de Bell como base ortogonal $|\phi^\pm\rangle$ e $|\psi^\pm\rangle$, nesse caso cada partícula carrega o máximo de informação possível sobre a outra. Esta propriedade de estados emaranhados pode então ser utilizada em uma série de aplicações modernas da teoria da informação quântica, como o teletransporte quântico, a codificação densa e a criptografia quântica.

Com relação às medidas relacionadas a emaranhamento (genericamente E) podemos

dividi-las em geométricas, algébricas e operacionais. As medidas ditas operacionais, são de certa forma abstratas, são definidas implicitamente e necessitam de um grande número de cópias, com certa fidelidade, do estado analisado para que haja um procedimento de otimização sobre todos os possíveis operações locais e comunicação clássica (LOCC). Essas medidas não serão tratadas aqui, para maiores informações consulte [34].

Algumas características importantes das medidas de emaranhamento [35] são listadas a seguir; em que $\hat{\rho}$ e $\hat{\sigma}$ representam operadores densidade de estado e $E(\hat{\rho})$, ou analogamente $E(\hat{\sigma})$, a quantidade de emaranhamento dos estados descritos por $\hat{\rho}$ e $\hat{\sigma}$ respectivamente.

1. Discriminância: $E(\hat{\rho}) = 0$ somente quando $\hat{\rho} \in \mathcal{M}_S$, isto é, for separável.
2. Monotonicidade: A medida deve ser monotônica sob LOCC, isto é, a quantidade de emaranhamento $E(\hat{\rho}) \geq E(\Pi_{LOCC}(\hat{\rho}))$ não pode crescer sob LOCC.
3. Convexidade: $E(a\hat{\rho} + (1-a)\hat{\sigma}) \leq aE(\hat{\rho}) + (1-a)E(\hat{\sigma})$ com $a \in [0, 1]$.
4. A respeito da característica aditiva das medidas:
 - (a) Subaditividade: $E(\hat{\rho} \otimes \hat{\sigma}) \leq E(\hat{\rho}) + E(\hat{\sigma})$ para quaisquer $\hat{\rho}$ e $\hat{\sigma} \in \mathcal{M}$
 - (b) Aditividade: $E(\hat{\rho} \otimes \hat{\sigma}) = E(\hat{\rho}) + E(\hat{\sigma})$ para quaisquer $\hat{\rho}$ e $\hat{\sigma} \in \mathcal{M}$
 - (c) Superaditividade: $E(\hat{\rho} \otimes \hat{\sigma}) \geq E(\hat{\rho}) + E(\hat{\sigma})$ para quaisquer $\hat{\rho}$ e $\hat{\sigma} \in \mathcal{M}$
5. Extensividade: $E(\hat{\rho}^{\otimes n}) \leq nE(\hat{\rho})$
6. Normalização: Estados maximamente emaranhados devem possuir $E(\hat{\rho}) = 1$, enquanto estado separáveis $E(\hat{\sigma}_s) = 0$.
7. Computabilidade: Deve existir um método eficiente de calcular E para qualquer $\hat{\rho}$.

4.2 Medidas Geométricas de Emaranhamento

Estabelecer uma medida geométrica de emaranhamento consiste em estabelecer uma distância dentro de uma métrica bem definida entre um estado qualquer $\hat{\rho}$ e o conjunto

dos estados separáveis \mathcal{M}_S , ou seu correspondente estado separável mais próximo $\hat{\sigma}_s$. Para que seja possível a determinação de uma distância $D(\hat{\rho}, \hat{\sigma}_s) = E(\hat{\rho})$ entre estados, a medida de emaranhamento $E(\hat{\rho})$ deve possuir uma característica importantíssima a *discriminância (ou distinguibilidade)* isto é, os pontos $\hat{\rho}$ e $\hat{\sigma}_s$ devem ser distinguíveis, podendo ser coincidentes, isto é $D(\hat{\rho}, \hat{\sigma}_s) = 0$ somente quando a propriedade descrita no item 1 é satisfeita.

Para a determinação dessas distâncias precisamos definir algumas características próprias de distâncias, de forma mais geral. É natural imaginarmos as distâncias como aquelas assimiladas na geometria plana de Descartes, no entanto, a distância deve ser calculada de acordo com a métrica do espaço. Algumas características gerais das distâncias D entre dois pontos x e y são:

- A distância entre dois pontos é um escalar que será igual a zero somente quando os pontos forem coincidentes.
- Uma distância é simétrica, ou seja, $D(x, y) = D(y, x)$.
- As medidas de distância satisfazem a desigualdade triangular $D(x, y) \leq D(x, z) + D(z, y)$.

Vamos tentar restringir ainda mais esta noção de distância no intuito de que as definições acima se enquadrem na métrica. De fato, podemos dizer que uma distância obedeça a seguinte propriedade homogênea de grau 1. $D(ax, ay) = aD(x, y)$ para qualquer número não negativo a , ($0 \leq a \leq 1$) o que caracteriza uma distância de Minkowski, em outras palavras qualquer combinação convexa de dois vetores no espaço caracterizam uma linha reta na métrica bem definida, $\vec{z} = a\vec{x} + (1 - a)\vec{y}$ em que a desigualdade triangular se reduz à igualdade $D(x, y) = D(x, z) + D(z, y)$.

Existem várias realizações possíveis de medidas geométricas, em geral aquelas que relacionam a norma de um operador, como a norma traço [36], a distância de Hilbert-Schmidt [37], ou ainda, medidas relacionadas com entropia, que se comportam como distâncias no que concerne às propriedades acima listadas, como a entropia relativa de emaranhamento [38]. Ambas baseadas na noção de distância da geometria plana.

É importante notar que a medida $s_i^2 = t_{\mp}^2 - V_i^2$ está definida em Eq.(3.17) com a métrica de Minkowski em que as variáveis do hiperespaço (hiperplano para sistemas de dois qbits), $\{u_{\pm}, v_{\pm}, w_{\pm}\}$ aparecem multiplicadas por (-1) (veja Apêndice E). Desejamos agora, não apenas caracterizar a separabilidade, como já abordado no capítulo anterior, mas definir uma medida de emaranhamento no plano t_{\mp}^2 vs. $(V_i^T)^2$, para tal, basta definirmos o quão distante um estado, representado pelo ponto P_0 na região $t_{\mp}^2 < (V_i^T)^2$ está do correspondente estado separável mais próximo, para isso basta medirmos a distância entre o ponto P_0 e a reta que separa os subespaços de inclinação 45° . A reta é definida pela equação simétrica: $r : t_{\mp}^2 - (V_i^T)^2 = 0$ e o ponto será definido como $P_0 = \left((V_{0,i}^T)^2, t_{0\mp}^2 \right)$, no plano $t_{\mp}^2 - (V_i^T)^2$. A distância de P_0 a r é

$$D(P_0, r) = \frac{\left| \left[t_{\mp}^2 - (V_i^T)^2 \right]_{P_0} \right|}{\sqrt{(1)^2 + (-1)^2}},$$

em que $\left[t_{\mp}^2 - (V_i^T)^2 \right]_{P_0}$ representa a função $t_{\mp}^2 - (V_i^T)^2$ calculada no ponto P_0 . Note que como há a projeção do hiperespaço em um plano, a distância será aquela definida, no plano, sobre o segmento de reta que liga o ponto P_0 à reta r , perpendicularmente a r .

$$D(P_0, r) = \frac{\left| t_{0\mp}^2 - (V_{0,i}^T)^2 \right|}{\sqrt{2}},$$

$$D(P_0, r) = \frac{\left| (s_{0i}^T)^2 \right|}{\sqrt{2}}.$$

Lembrando que na região onde há emaranhamento a medida de $(s_i^T)^2$ assume valores negativos. Logo, nossa medida proposta de emaranhamento $(s_i^T)^2$ nada mais é do que a medida da distância entre um ponto P_0 na região $t_{\mp}^2 < (V_i^T)^2$ à reta que separa os subespaços, a menos da normalização da métrica (fator $\frac{1}{\sqrt{2}}$).

Essa medida será proposta na seção seguinte como uma medida de emaranhamento geométrica por construção, baseada na distância Eq (3.18) na métrica de Minkowski e apoiada fortemente no critério de TP. Sendo assim podemos dizer que se trata da geometrização da TP no espaço de fase, mas antes mostraremos também algumas características das medidas algébricas de emaranhamento para que tenhamos uma base de comparação.

4.3 Medidas Algébricas de Emaranhamento

Com o intuito de comparar os resultados obtidos vamos definir aqui algumas medidas algébricas de emaranhamento em termos de nossos parâmetros $(t_{\pm}, u_{\pm}, v_{\pm}, w_{\pm})$

A negatividade de Vidal-Werner (VW) proposta em [10],

$$N(\hat{\rho}) = \|\hat{\rho}^T\| - 1, \quad (4.1)$$

Em que $\|\hat{\rho}^T\|$ representa a soma dos módulos dos autovalores de $\hat{\rho}^T$; o que em termos dos parâmetros $\{t_+, t_-, V_1^T, V_2^T\}$, nos fornece

$$N(\hat{\rho}) = \frac{1}{2} [|t_- + V_1^T| + |t_- - V_1^T| + |t_+ + V_2^T| + |t_+ - V_2^T|]. \quad (4.2)$$

A *concurrence* introduzida por Wootters em [8] como medida de emaranhamento bipartite (veja Apêndice F), é deduzida da matriz densidade, após fazermos algumas operações. Para um estado de dois qubits a receita consiste em :

1. (a) construir uma matriz densidade cujos spins foram invertidos, $\tilde{\rho}$, que pode ser obtido do estado Eq.(3.3) mudando as orientações de ambos os PVs, $(\vec{P}_1, \vec{P}_2) \rightarrow (-\vec{P}_1, -\vec{P}_2)$;
- (b) em seguida fazer o produto com o estado original $\hat{\rho}\tilde{\rho}$;
- (c) calcular seus autovalores e os ordenar tal que o maior autovalor seja λ_1 ($\lambda_1 \geq (\lambda_2, \lambda_3, \lambda_4)$).
- (d) Finalmente, definir a *concurrence* como

$$C(\hat{\rho}) = \max \left\{ 0, \sqrt{\lambda_1} - \left(\sqrt{\lambda_2} + \sqrt{\lambda_3} + \sqrt{\lambda_4} \right) \right\}. \quad (4.3)$$

Dizemos que se $C(\hat{\rho}) > 0$ então o estado $\hat{\rho}$ possui algum grau de emaranhamento, enquanto que para $C(\hat{\rho}) = 0$ o emaranhamento se torna nulo, isto é, $\hat{\rho}$ é separável.

Para uma matriz X , a *concurrence* assume uma forma simplificada

$$C(\hat{\rho}) = \max \{0, C_1, C_2\}, \quad (4.4)$$

com

$$C_1 = \sqrt{v_-^2 + w_+^2} - \sqrt{t_-^2 - u_-^2}, \quad C_2 = \sqrt{v_+^2 + w_-^2} - \sqrt{t_+^2 - u_+^2}, \quad (4.5)$$

em termos dos novos parâmetros Eq.(3.13). O cálculo detalhado está no Apêndice F.

4.4 Medida de Distância para Estados Emaranhados

A partir das distâncias propostas Eq.(3.18) podemos efetivamente definir uma medida de emaranhamento que além de simétrica, pois é baseada na distância geométrica entre ponto e reta dentro de uma determinada métrica, sabemos que será também convexa pois ela parte da métrica de Minkowski, assim

$$D(at_{\mp}^2, aV_i^2) = at_{\mp}^2 - aV_i^2 = a(t_{\mp}^2 - V_i^2) = aD(t_{\mp}^2, V_i^2).$$

Nós iremos então definir esta medida a partir da violação das desigualdades Eq.(3.18), ou seja, verificando o quão negativa é a distância $(s_i^T)^2$. A essa medida de negatividade em termos das distâncias daremos o nome de N_{dist} e a definiremos como

$$N_{dist}(\hat{\rho}) = \max \left\{ 0, - (s_1^T)^2, - (s_2^T)^2 \right\}. \quad (4.6)$$

Note que esta quantidade varia monotonicamente no intervalo $[0, 1]$. Note ainda que existe uma certa equivalência entre esta distância Eq.(4.6) e a *concurrence*, uma vez que para $t_-^2 \geq u_-^2$ e $t_+^2 \geq u_+^2$ na expressão Eq.(4.5) e as desigualdades $C_1 \leq 0$ e $C_2 \leq 0$ devem ser satisfeitas para que não haja emaranhamento, simultaneamente, o que nos leva a

$$v_-^2 + w_+^2 + u_-^2 \leq t_-^2 \quad \text{e} \quad v_+^2 + w_-^2 + u_+^2 \leq t_+^2,$$

ou seja, coincide com as desigualdades propostas na Eq.(3.18). Logo, a condição para separabilidade é equivalente para ambas as medidas a negatividade proposta Eq.(4.6) e a *concurrence*.

Suponhamos ainda que $C_2 > 0$ e $C_2 > C_1$, então $C(\hat{\rho}) = C_2$ o que difere da medida de distância proposta $(s_2^T)^2 = t_+^2 - (V_2^T)^2 (\leq 0)$. No entanto, podemos encontrar uma relação entre elas

$$C_2^2 + 2C_2\sqrt{t_+^2 - u_+^2} = - (s_2^T)^2.$$

Por fim, quando $C_2 = 0$, necessariamente $s_2^T = 0$, e para $C_2 = 1$, teremos $\sqrt{v_+^2 + w_-^2} = 1 + \sqrt{t_+^2 - u_+^2}$, tal que a distância assumirá seu menor valor $(s_2^T)_{\min}^2 = -\left(1 + 2\sqrt{t_+^2 - u_+^2}\right)$. Assim $(s_2^T)^2$ diminui monotonicamente de 0 até $-\left(1 + 2\sqrt{t_+^2 - u_+^2}\right)$.

Finalmente analisaremos comparativamente as três medidas (4.2), (4.4) e (4.6) em alguns exemplos.

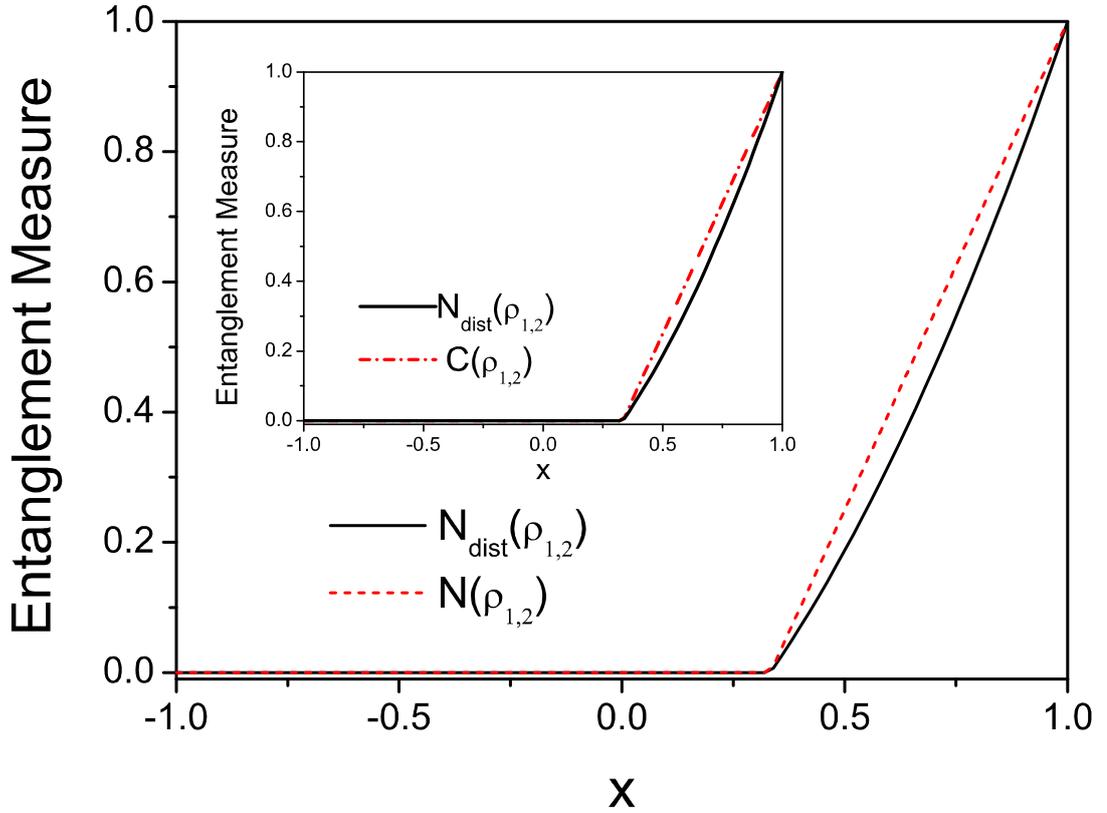


Figura 4.1: Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) para o estado de Werner, como função do parâmetro intrínseco x . No gráfico principal estão comparadas Eq.(4.2) com Eq.(4.6) e no detalhe está a comparação entre Eq.(4.4) e Eq.(4.6). As grandezas são adimensionais.

Como pode ser visto na Fig. 4.1, para o estado de Werner, há uma concordância entre as três medidas, isto é, para as curvas se tornarem positivas o estado possui algum

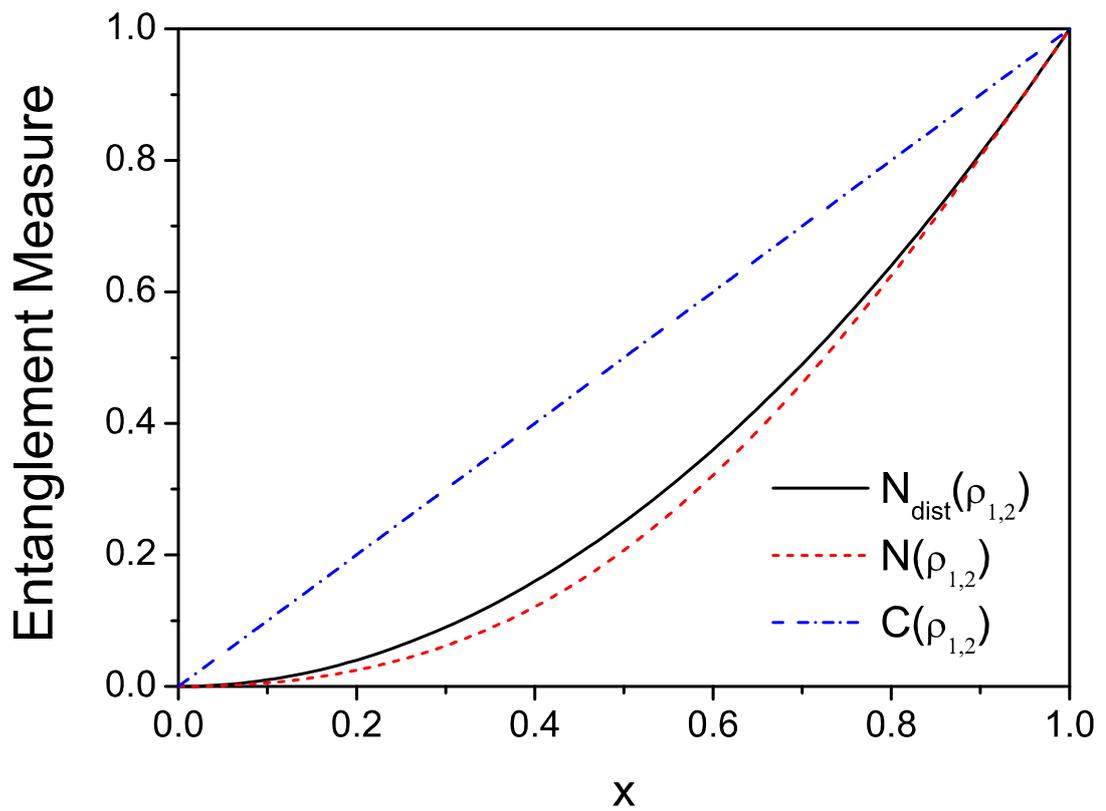


Figura 4.2: Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) comparadas simultaneamente para o estado de Peres-Horodecki, como função do parâmetro intrínseco x . As grandezas são adimensionais.

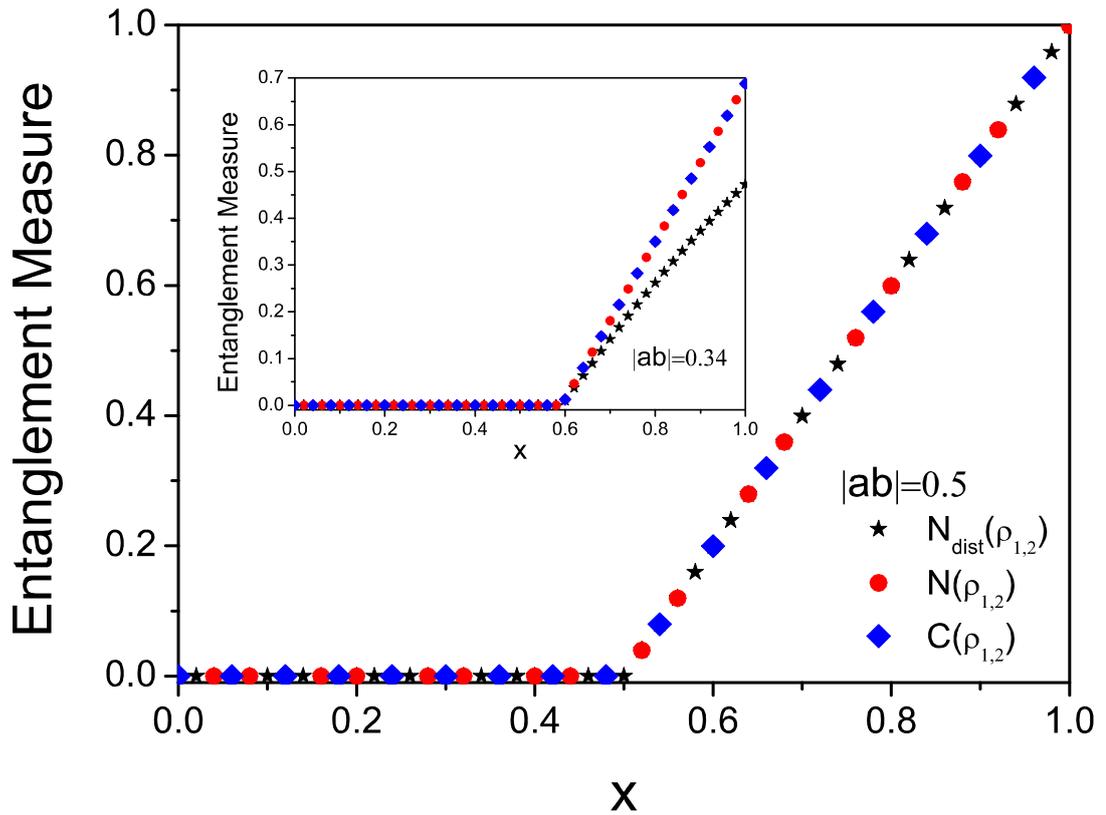


Figura 4.3: Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) para o estado de Gisin, como função do parâmetro x . O gráfico principal é para $|ab| = 0.5$, onde as três curvas são coincidentes e no detalhe, em que $|ab| = 0.34$, coincidem apenas a concorrência e a negatividade de Werner-Vidal. As grandezas são adimensionais.

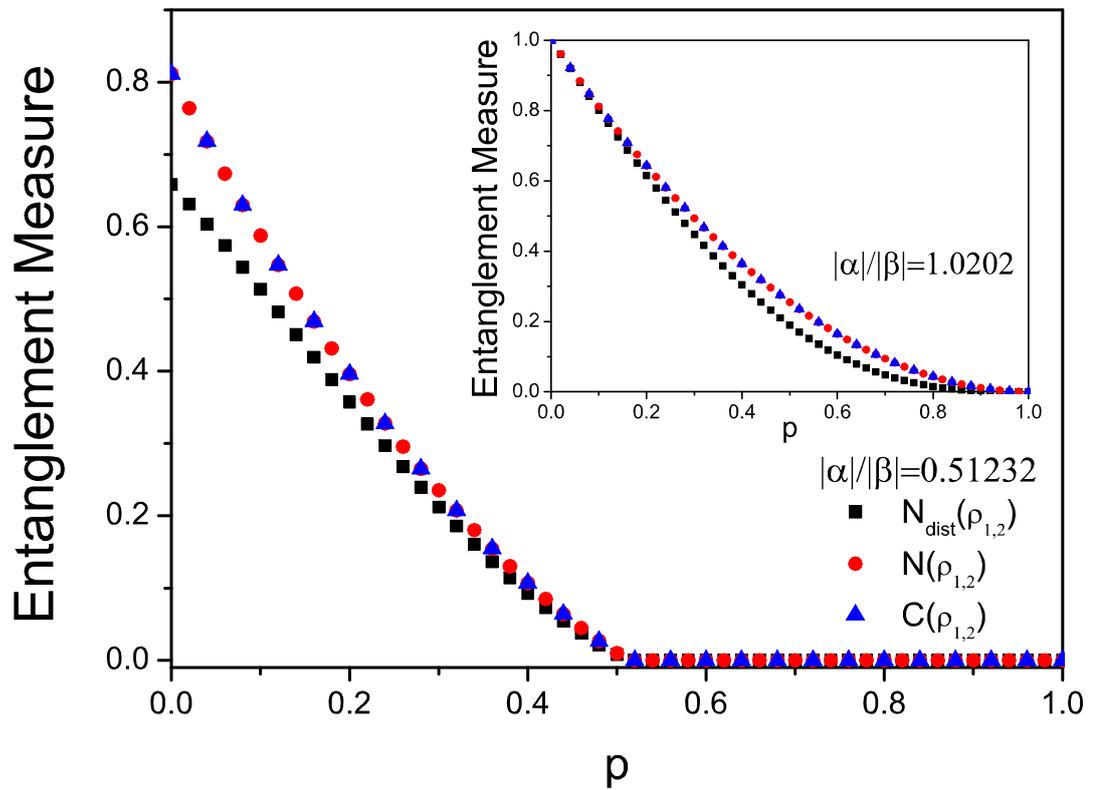


Figura 4.4: Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) para o estado dinâmico de Almeida *et al* [19]. O gráfico principal é para $|\alpha|/|\beta| = 0.5123$ (MSE em $p \approx 0.5$) e o detalhe para $|\alpha|/|\beta| = 1.0202$ em que não há MSE. As variáveis são adimensionais.

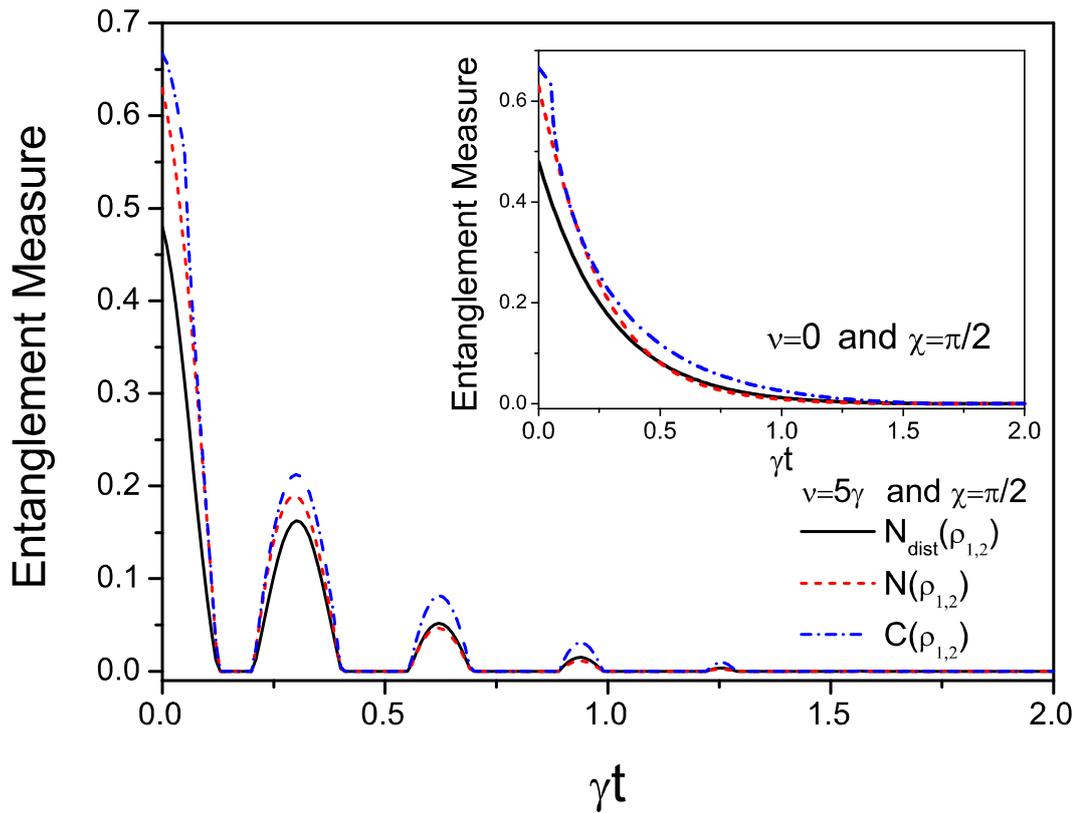


Figura 4.5: Medidas de emaranhamento (4.2), (4.4) e (4.6) para o estado dinâmico de Das [23]. O gráfico principal é para sistemas interagentes ($\nu \neq 0$), e apresenta sequencias de MSE e RSE consecutivos. O detalhe é para sistemas não interagentes ($\nu = 0$), em que não há mudança de comportamento. As grandezas são adimensionais.

grau de emaranhamento. O mesmo ocorre na Fig. 4.2, para o estado de Peres-Horodecki; no entanto, enquanto a concurrence é uma linha reta, as negatividades apresentam uma certa curvatura. Para o estado de Gisin, mostrado na Fig. 4.3, ambas as negatividade e a concorrencia coincidem para $|ab| = 0.5$, entretanto para outros valores de $|ab|$, como mostrado no detalhe, o mesmo não acontece. Analizando estados evoluindo no tempo, (veja a Fig. 4.4), para o estado considerado em [19], (veja a Tabela 3.3), há uma concordância qualitativa entre as três medidas, quando $|\alpha|/|\beta| < 1$ a morte súbita do emaranhamento ocorre para outros valores o sistema permanece emaranhado para todo tempo finito. Ainda para o sistema interagente de [23], mostrado na Fig 4.5, vemos uma sequência alternada de mortes súbitas de emaranhamento e renascimentos, no entanto as curvas diferem em sua amplitude mantendo os picos inalterados. Em resumo, podemos dizer que as as três medidas nos proporcionam a mesma informação e são qualitativamente equivalentes.

Capítulo 5

Emaranhamento para Estados de Variedade D-7

Vimos anteriormente que é possível descrever um método de medida de distância no plano $t^2 vs. V^2$ que nos fornece informações sobre a separabilidade de estados do tipo X. Esses estados, no entanto, são apenas um caso especial de estado com sete parâmetros independentes.

No entanto, existem outros conjuntos de sete operadores que constituem outras subálgebras independentes semelhantes a dos estados X [24, 25], isto é, $su(2) \times u(1) \times su(2)$. Em cada um desses conjuntos existe um elemento que comuta com todos os outros seis elementos de grupo, necessários para descrever um estado qualquer com determinadas características (nesse caso, sete parâmetros independentes). Qualquer um dos quinze operadores de Pauli para dois spins pode ser o elemento comutativo comum de uma subálgebra distinta, do tipo $su(2) \times u(1) \times su(2)$ o que nos leva a existência de 15 subálgebras.

Neste capítulo apresentaremos alternativas às desigualdades propostas nos Capítulos 3 e 4, para estados de diferentes classes da subálgebra de estados com, no máximo, sete parâmetros independentes, isto é, de variedade D-7 . Essas alternativas nos dão uma visão mais abrangente do método em termos de sua principal característica a invariância na forma dos autovalores.

5.1 A álgebra $su(4)$

Como sabemos qualquer estado de dois qubits pode ser escrito em termos de uma álgebra $su(4)$, que é representada por quinze elementos de base (produto tensorial das matrizes de Pauli $\hat{\sigma}_i \otimes \hat{\sigma}_j$) mais a identidade.

Três desses elementos têm a forma $\hat{e}_l = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha$, outros seis tem a forma $\hat{e}_l = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\beta$, mais três com $\hat{e}_l = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{1}_j$ e outros três fazendo-se a troca das partículas $i \longleftrightarrow j$, ou seja, $\hat{e}_l = \hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha$ e por fim a identidade $\hat{e}_0 = \hat{1}_i \otimes \hat{1}_j$. Os índices gregos (α, β e γ) representam (x, y e z , e suas permutações cíclicas) enquanto os índices romanos i, j se relacionam com as partículas 1 e 2.

Um estado pode ser escrito em termos desses elementos da forma

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \left[\hat{e}_0 + \sum_l k_l \hat{e}_l \right]. \quad (5.1)$$

Por outro lado, os chamados estados X possuem sete parâmetros independentes e podem ser representados em termos de apenas sete dos quinze elementos de base, o que restringe a álgebra $su(4)$ na subálgebra $su(2) \times u(1) \times su(2)$ essas subálgebras existem para todas as classes de estados de variedade diferencial D-7, dos quais os estados X são um caso particular.

Tradicionalmente aparecem largamente na literatura [12, 15, 13, 17, 18, 19] seja em estudos teóricos ou experimentais, estados que podem ser representados por geradores da álgebra $su(2) \times u(1) \times su(2)$. Essa álgebra formada por seis geradores mais a identidade, em que um deles é um elemento comutativo comum, que não a identidade, e pertence à álgebra unitária $u(1)$ os outros seis pertencem às duas subálgebras $su(2)$. Note que as duas álgebras $su(2)$ não podem ser compostas na forma de um produto direto $su(2) \times su(2)$, pois os geradores de um $su(2)$ não comutam com os do outro.

5.2 A Subálgebra $su(2) \times u(1) \times su(2)$

Por construção, podemos ter várias representações de estado da classe $D - 7$. Dado os operadores de Pauli $\hat{\sigma}^\alpha$, $\hat{\sigma}^\beta$ e $\hat{\sigma}^\gamma$ e sua conhecida estrutura de multiplicação

$$\hat{\sigma}^\alpha \hat{\sigma}^\beta = \hat{1} \delta_{\alpha\beta} + i \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{\sigma}^\gamma.$$

Alguns possíveis geradores para a álgebra $u(1)$: (1) $\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha$, (2) $\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\beta$ (3) $\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{1}_j$ que é equivalente ao $\hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha$ trocando as partículas $i \leftrightarrow j$).

(1) O elemento $\hat{e}_1 = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha$ comuta com os seis elementos do subgrupo

$$\begin{aligned}\hat{e}_2 &= \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{1}_j, \hat{e}_3 = \hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha, \hat{e}_4 = -\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma, \\ \hat{e}_5 &= \hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{\sigma}_j^\beta, \hat{e}_6 = \hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma \text{ e } \hat{e}_7 = \hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{\sigma}_j^\beta,\end{aligned}\quad (5.2)$$

($\alpha \neq \beta \neq \gamma$), que forma as álgebras $su(2)$:

$$A_1 = \{\hat{e}_2, \hat{e}_4, \hat{e}_6\}, \quad A_2 = \{\hat{e}_2, \hat{e}_5, \hat{e}_7\}, \quad A_3 = \{\hat{e}_3, \hat{e}_4, \hat{e}_7\}, \quad A_4 = \{\hat{e}_3, \hat{e}_5, \hat{e}_6\}, \quad (5.3)$$

em que, por exemplo, $[\hat{e}_2, \hat{e}_4] = 2i\hat{e}_6$. Note que $[\hat{e}_2, \hat{e}_3] = [\hat{e}_4, \hat{e}_5] = [\hat{e}_6, \hat{e}_7] = 0$, mas como cada conjunto tem elementos repetidos, não seria possível representar com subálgebras $su(2)$ independentes na forma do produto direto $su(2) \times su(2)$ escolhendo qualquer uma das quatro álgebras do conjunto $\{A_1, A_2, A_3, A_4\}$.

(2) Outra possibilidade é escolher $\hat{f}_1 = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\beta$ que comuta com

$$\begin{aligned}\hat{f}_2 &= \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{1}_j, \hat{f}_3 = \hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\beta, \hat{f}_4 = -\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha, \\ \hat{f}_5 &= \hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma, \hat{f}_6 = \hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha \text{ e } \hat{f}_7 = \hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma,\end{aligned}\quad (5.4)$$

e ($\alpha \neq \beta \neq \gamma$). As quatro álgebras $su(2)$ são $B_1 = \{\hat{f}_2, \hat{f}_4, \hat{f}_6\}$, $B_2 = \{\hat{f}_2, \hat{f}_5, \hat{f}_7\}$, $B_3 = \{\hat{f}_3, \hat{f}_4, \hat{f}_7\}$, $B_4 = \{\hat{f}_3, \hat{f}_5, \hat{f}_6\}$.

(3) Finalmente com a escolha $\hat{g}_1 = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{1}_j$ vemos que ele comuta com

$$\begin{aligned}\hat{g}_2 &= \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha, \hat{g}_3 = \hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha, \hat{g}_4 = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\beta, \\ \hat{g}_5 &= \hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\beta, \hat{g}_6 = \hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma \text{ e } \hat{g}_7 = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma,\end{aligned}\quad (5.5)$$

($\alpha \neq \beta \neq \gamma$). As quatro álgebras $su(2)$ são $C_1 = \{\hat{g}_2, \hat{g}_4, \hat{g}_6\}$, $C_2 = \{\hat{g}_2, \hat{g}_5, \hat{g}_7\}$, $C_3 = \{\hat{g}_3, \hat{g}_4, \hat{g}_7\}$, $C_4 = \{\hat{g}_3, \hat{g}_5, \hat{g}_6\}$.

Esses três tipos de subálgebras tem a mesma estrutura, ou seja, seguem a mesma tabela de multiplicação de $\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j$, veja Tabela 5.1 .

As relações de comutação, que também são comuns às três subálgebras, estão descritas na Tabela 5.2.

$\hat{e}_i \backslash \hat{e}_j$	\hat{e}_0	\hat{e}_1	\hat{e}_2	\hat{e}_3	\hat{e}_4	\hat{e}_5	\hat{e}_6	\hat{e}_7
\hat{e}_0	\hat{e}_0	\hat{e}_1	\hat{e}_2	\hat{e}_3	\hat{e}_4	\hat{e}_5	\hat{e}_6	\hat{e}_7
\hat{e}_1	\hat{e}_1	\hat{e}_0	\hat{e}_3	\hat{e}_2	\hat{e}_5	\hat{e}_4	\hat{e}_7	\hat{e}_6
\hat{e}_2	\hat{e}_2	\hat{e}_3	\hat{e}_0	\hat{e}_1	$i\hat{e}_6$	$i\hat{e}_7$	$-i\hat{e}_4$	$-i\hat{e}_5$
\hat{e}_3	\hat{e}_3	\hat{e}_2	\hat{e}_1	\hat{e}_0	$i\hat{e}_7$	$i\hat{e}_6$	$-i\hat{e}_5$	$-i\hat{e}_4$
\hat{e}_4	\hat{e}_4	\hat{e}_5	$-i\hat{e}_6$	$-i\hat{e}_7$	\hat{e}_0	\hat{e}_1	$i\hat{e}_2$	$i\hat{e}_3$
\hat{e}_5	\hat{e}_5	\hat{e}_4	$-i\hat{e}_7$	$-i\hat{e}_6$	\hat{e}_1	\hat{e}_0	$i\hat{e}_3$	$i\hat{e}_2$
\hat{e}_6	\hat{e}_6	\hat{e}_7	$i\hat{e}_4$	$i\hat{e}_5$	$-i\hat{e}_2$	$-i\hat{e}_3$	\hat{e}_0	\hat{e}_1
\hat{e}_7	\hat{e}_7	\hat{e}_6	$i\hat{e}_5$	$i\hat{e}_4$	$-i\hat{e}_3$	$-i\hat{e}_2$	\hat{e}_1	\hat{e}_0

Tabela 5.1: Tabela de multiplicação $\hat{e}_i \cdot \hat{e}_j$

$\hat{e}_i \backslash \hat{e}_j$	\hat{e}_0	\hat{e}_1	\hat{e}_2	\hat{e}_3	\hat{e}_4	\hat{e}_5	\hat{e}_6	\hat{e}_7
\hat{e}_0	0	0	0	0	0	0	0	0
\hat{e}_1	0	0	0	0	0	0	0	0
\hat{e}_2	0	0	0	0	$2i\hat{e}_6$	$2i\hat{e}_7$	$-2i\hat{e}_4$	$-2i\hat{e}_5$
\hat{e}_3	0	0	0	0	$2i\hat{e}_7$	$2i\hat{e}_6$	$-2i\hat{e}_5$	$-2i\hat{e}_4$
\hat{e}_4	0	0	$-2i\hat{e}_6$	$-2i\hat{e}_7$	0	0	$2i\hat{e}_2$	$2i\hat{e}_3$
\hat{e}_5	0	0	$-2i\hat{e}_7$	$-2i\hat{e}_6$	0	0	$2i\hat{e}_3$	$2i\hat{e}_2$
\hat{e}_6	0	0	$2i\hat{e}_4$	$2i\hat{e}_5$	$-2i\hat{e}_2$	$-2i\hat{e}_3$	0	0
\hat{e}_7	0	0	$2i\hat{e}_5$	$2i\hat{e}_4$	$-2i\hat{e}_3$	$-2i\hat{e}_2$	0	0

Tabela 5.2: Tabela de comutações $[\hat{e}_i, \hat{e}_j]$

5.3 Método das Distâncias para Três Classes Distintas

5.3.1 Classe 1: Estados X e outros estados que comutam com operadores da forma $\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha$

Os estados da forma X, estão relacionados com um grande número de estados físicos conhecidos e constituem um caso particular da classe de estados com sete parâmetros independentes, os D-7. O elemento comutativo comum, isto é, que comuta com todos os outros seis elementos do subgrupo é o $\hat{\sigma}_1^z \otimes \hat{\sigma}_2^z$. Ou seja, da forma $\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha$ e têm a estrutura de grupo descrita pelo ítem 1 da sessão anterior. Por construção, uma vez que o operador densidade de estados pode ser escrito da forma (5.1) utilizando-se os sete elementos do subgrupo como base, e como o elemento comutativo comum comuta com cada um deles em separado, isto implica que ele deve comutar também com o operador densidade. Assim tomando-se

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \left(\hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \sum_{\delta=\alpha,\beta,\gamma} \vec{P}_2^\delta \hat{\sigma}_2^\delta + \sum_{\delta=\alpha,\beta,\gamma} \vec{P}_1^\delta \hat{\sigma}_1^\delta \otimes \mathbf{1}_2 + \sum_{\delta=\alpha,\beta,\gamma} \sum_{\epsilon=\alpha,\beta,\gamma} \overleftrightarrow{M}_{1,2}^{\delta\epsilon} \hat{\sigma}_1^\delta \otimes \hat{\sigma}_2^\epsilon \right),$$

para que $[\hat{\rho}, \hat{e}_1] = 0$ devemos ter

$$\begin{aligned} [\hat{\rho}, \hat{e}_1] &= \frac{i}{2} \left[-\vec{P}_j^\beta [(\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma)] + \vec{P}_j^\gamma [(\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\beta)] + \right. \\ &\quad -\vec{P}_i^\beta [(\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha)] + \vec{P}_i^\gamma [(\hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha)] + \\ &\quad + \overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\alpha\beta} [(\hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma)] + \overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\alpha\gamma} [(\hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\beta)] + \\ &\quad \left. -\overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\beta\alpha} [(\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{1}_j)] + \overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\gamma\alpha} [(\hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{1}_j)] \right] \\ &= 0. \end{aligned} \tag{5.6}$$

Cada termo da soma Eq. (5.6) possui um elemento de base que é linearmente independente, então, para que $[\hat{\rho}, \hat{e}_1] = 0$ é necessário que o coeficiente que multiplica cada termo seja nulo, isto é,

$$\begin{aligned}
\vec{P}_i^\beta &= 0, \\
\vec{P}_i^\gamma &= 0, \\
\vec{P}_j^\beta &= 0, \\
\vec{P}_j^\gamma &= 0, \\
\overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\alpha\beta} &= 0, \\
\overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\alpha\gamma} &= 0, \\
\overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\beta\alpha} &= 0 \text{ e} \\
\overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\gamma\alpha} &= 0.
\end{aligned}$$

Isso permite que a matriz densidade tome a forma X como na Eq.(3.12). Como já mostrado no Capítulo 3, a matriz parcialmente transposta $\hat{\rho}^T$ na forma X, terá autovalores da forma,

$$\begin{aligned}
\lambda_\pm^T &= \frac{1}{4}(1 - M_{\alpha\alpha}) \pm \frac{1}{4}\sqrt{(P_{i\alpha} - P_{j\alpha})^2 + (M_{\beta\gamma} + M_{\gamma\beta})^2 + (M_{\beta\beta} - M_{\gamma\gamma})^2}, \\
\mu_\pm^T &= \frac{1}{4}(1 + M_{\alpha\alpha}) \pm \frac{1}{4}\sqrt{(P_{i\alpha} + P_{j\alpha})^2 + (M_{\beta\gamma} - M_{\gamma\beta})^2 + (M_{\beta\beta} + M_{\gamma\gamma})^2},
\end{aligned}$$

agora escritos em termos mais gerais com $(\alpha \neq \beta \neq \gamma)$, e com as partículas indexadas por i e j . O que nos leva às desigualdades

$$(s_1^T)^2 = t_-^2 - (V_1^T)^2 \geq 0 \quad \text{e} \quad (s_2^T)^2 = t_+^2 - (V_2^T)^2 \geq 0,$$

em que $V_1^T = \sqrt{u_-^2 + v_-^2 + w_+^2}$, $V_2^T = \sqrt{u_+^2 + v_+^2 + w_-^2}$ e

$$\begin{aligned}
t_\pm &= \frac{1 \pm M_{\alpha\alpha}}{2}, \quad u_\pm = \frac{P_{i\alpha} \pm P_{j\alpha}}{2}, \\
v_\pm &= \frac{M_{\beta\beta} \pm M_{\gamma\gamma}}{2}, \quad \text{e} \quad w_\pm = \frac{M_{\gamma\beta} \pm M_{\beta\gamma}}{2}.
\end{aligned} \tag{5.7}$$

Perceba que cada escolha de α, β e γ gera uma matriz densidade de formato distinto, no entanto, o formato dos autovalores e das desigualdades propostas permanecem invariantes. Vamos analisar cada escolha separadamente.

reduzindo a sete o número de parâmetros independentes Logo

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + M_{zz} & -iP_{2y} + M_{zx} & -iP_{1y} + M_{xz} & M_{xx} - M_{yy} \\ iP_{2y} + M_{zx} & 1 - M_{zz} & M_{xx} + M_{yy} & -iP_{1y} - M_{xz} \\ iP_{1y} + M_{xz} & M_{xx} + M_{yy} & 1 - M_{zz} & -iP_{2y} - M_{zx} \\ M_{xx} - M_{yy} & iP_{1y} - M_{xz} & iP_{2y} - M_{zx} & 1 + M_{zz} \end{pmatrix}. \quad (5.9)$$

5.3.2 Classe 2: Estados que comutam com operadores da forma

$$\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\beta.$$

Podemos ainda analisar a estrutura das desigualdades para a classe que tem elemento comutativo comum $\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\beta$, com $\alpha \neq \beta$, que nada mais é do que o caso descrito no ítem 2 da sessão anterior. Novamente podemos supor que $[\hat{\rho}, \hat{f}_1] = 0$ uma vez que o operador densidade é escrito em termos dos elementos do subgrupo que comutam com \hat{f}_1 . Assim

$$\begin{aligned} [\hat{\rho}, \hat{f}_1] &= \frac{i}{2} \left[\vec{P}_j^\alpha (\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma) - \vec{P}_j^\gamma (\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha) + \right. \\ &\quad - \vec{P}_i^\beta (\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{\sigma}_j^\beta) + \vec{P}_i^\gamma (\hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{\sigma}_j^\beta) + \\ &\quad + \overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\alpha\alpha} (\hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma) - \overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\alpha\gamma} (\hat{1}_i \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha) + \\ &\quad \left. - \overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\beta\beta} (\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{1}_j) + \overleftrightarrow{M}_{i,j}^{\gamma\beta} (\hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{1}_j) \right] \\ &= 0. \end{aligned}$$

Novamente para que o comutador se anule é necessário que cada termo se anule isoladamente o que nos leva a

$$\begin{aligned}
\vec{P}_i^\beta &= 0, \\
\vec{P}_i^\gamma &= 0, \\
\vec{P}_j^\alpha &= 0, \\
\vec{P}_j^\gamma &= 0, \\
\overleftarrow{M}_{i,j}^{\alpha\alpha} &= 0, \\
\overleftarrow{M}_{i,j}^{\alpha\gamma} &= 0, \\
\overleftarrow{M}_{i,j}^{\beta\beta} &= 0 \text{ e} \\
\overleftarrow{M}_{i,j}^{\gamma\beta} &= 0
\end{aligned}$$

Analogamente teremos a estrutura dos autovalores da matriz parcialmente transposta

$$\begin{aligned}
\lambda_\pm^T &= \frac{1}{4}(1 - M_{\alpha\beta}) \pm \frac{1}{4}\sqrt{(P_{i\alpha} - P_{j\beta})^2 + (M_{\beta\gamma} - M_{\gamma\alpha})^2 + (M_{\gamma\gamma} + M_{\beta\alpha})^2}, \\
\mu_\pm^T &= \frac{1}{4}(1 + M_{\alpha\beta}) \pm \frac{1}{4}\sqrt{(P_{i\alpha} + P_{j\beta})^2 + (M_{\beta\gamma} + M_{\gamma\alpha})^2 + (M_{\gamma\gamma} - M_{\beta\alpha})^2}.
\end{aligned}$$

E as desigualdades permanecem com o mesmo formato

$$(s_1^T)^2 = t_-^2 - (V_1^T)^2 \geq 0 \quad \text{e} \quad (s_2^T)^2 = t_+^2 - (V_2^T)^2 \geq 0,$$

em que $V_1^T = \sqrt{u_-^2 + v_-^2 + w_+^2}$, $V_2^T = \sqrt{u_+^2 + v_+^2 + w_-^2}$ mas agora com

$$\begin{aligned}
t_\pm &= \frac{1 \pm M_{\alpha\beta}}{2}, \quad u_\pm = \frac{P_{i\alpha} \pm P_{j\beta}}{2}, \\
v_\pm &= \frac{M_{\beta\gamma} \pm M_{\gamma\alpha}}{2}, \quad \text{e} \quad w_\pm = \frac{M_{\gamma\gamma} \pm M_{\beta\alpha}}{2}.
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Mais uma vez analisando as escolhas possíveis de α, β e γ teremos

Escolha 4: $\alpha = x, \beta = y$ e $\gamma = z$

Para $\alpha = x, \beta = y$ e $\gamma = z$, o elemento comutativo comum será $\hat{f}_1 = \hat{\sigma}_1^x \otimes \hat{\sigma}_2^y$ e a condição $[\hat{\rho}, \hat{f}_1] = 0$ será satisfeita para $P_{1y} = P_{1z} = P_{2x} = P_{2z} = M_{xx} = M_{xz} = M_{yy} = M_{zy} = 0$, o que reduz o número de parâmetros para sete e a matriz densidade se reduz a

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + P_{2z} + M_{zz} & -iP_{2y} + M_{zx} & P_{1x} - iM_{yz} & -i(M_{xy} + M_{yx}) \\ iP_{2y} + M_{zx} & 1 - P_{2z} - M_{zz} & i(M_{xy} - M_{yx}) & P_{1x} + iM_{yz} \\ P_{1x} + iM_{yz} & -i(M_{xy} - M_{yx}) & 1 - P_{1z} - M_{zz} & -iP_{2y} - M_{zx} \\ i(M_{xy} + M_{yx}) & P_{1x} - iM_{yz} & P_{2y} - M_{zx} & 1 - P_{1z} + M_{zz} \end{pmatrix}. \quad (5.11)$$

Escolha 5: $\alpha = z$, $\beta = x$ e $\gamma = y$

Para $\alpha = z$, $\beta = x$ e $\gamma = y$, o elemento comutativo comum será $\hat{f}_1 = \hat{\sigma}_1^z \otimes \hat{\sigma}_2^x$ e a condição $[\hat{\rho}, \hat{f}_1] = 0$ será satisfeita para $P_{1x} = P_{1y} = P_{2z} = P_{2y} = M_{zz} = M_{zy} = M_{xx} = M_{yx} = 0$, o que reduz o número de parâmetros para sete na matriz densidade

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + P_{1z} & P_{2x} + M_{zx} & M_{xz} - iM_{yz} & -M_{yy} - iM_{xy} \\ P_{2x} + M_{zx} & 1 + P_{1z} & M_{yy} + iM_{xy} & -M_{xz} + iM_{yz} \\ M_{xz} + iM_{yz} & M_{yy} - iM_{xy} & 1 - P_{1z} & P_{2x} - M_{zx} \\ -M_{yy} + iM_{xy} & -M_{xz} - iM_{yz} & P_{2x} - M_{zx} & 1 - P_{1z} \end{pmatrix}. \quad (5.12)$$

Escolha 6: $\alpha = y$, $\beta = z$ e $\gamma = x$

Para $\alpha = y$, $\beta = z$ e $\gamma = x$, o elemento comutativo comum será $\hat{f}_1 = \hat{\sigma}_1^y \otimes \hat{\sigma}_2^z$ e a condição $[\hat{\rho}, \hat{f}_1] = 0$ será satisfeita para $P_{1z} = P_{1x} = P_{2y} = P_{2x} = M_{yy} = M_{yx} = M_{zz} = M_{xz} = 0$, o que reduz o número de parâmetros para sete na matriz densidade

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + P_{2z} & M_{zx} - iM_{zy} & -iP_{1y} - iM_{yz} & M_{xx} - iM_{xy} \\ M_{zx} + iM_{zy} & 1 - P_{2z} & M_{xx} + iM_{xy} & -iP_{1y} + iM_{yz} \\ iP_{1y} + iM_{yz} & M_{xx} - iM_{xy} & 1 + P_{2z} & -M_{zx} + iM_{zy} \\ M_{xx} + iM_{xy} & iP_{1y} - iM_{yz} & -M_{zx} - iM_{zy} & 1 - P_{2z} \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

As outras três escolhas possíveis de elementos comutativos comuns para esta classe ($\hat{f}_1 = \hat{\sigma}_1^y \otimes \hat{\sigma}_2^x$, $\hat{f}_1 = \hat{\sigma}_1^x \otimes \hat{\sigma}_2^z$ ou $\hat{f}_1 = \hat{\sigma}_1^z \otimes \hat{\sigma}_2^y$) podem ser obtidas trocando os índices das partículas $1 \longleftrightarrow 2$, nas escolhas 4, 5 e 6 respectivamente.

5.3.3 Classe 3: Estados que comutam com operadores do tipo

$$\hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{1}_j$$

No terceiro caso o elemento comutativo comuns é da forma $\hat{g}_1 = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{1}_j$ isto é, da forma do ítem 3 da sessão anterior. Para que $\hat{\rho}$ comute com $\hat{g}_1 = \hat{\sigma}_i^\alpha \otimes \hat{1}_j$,

$$\begin{aligned} [\hat{\rho}, \hat{g}_1] &= \frac{i}{2} \left[-\vec{P}_i^\beta (\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{1}_j) + \vec{P}_i^\gamma (\hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{1}_j) + \right. \\ &\quad - \overleftarrow{M}_{i,j}^{\beta\alpha} (\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha) - \overleftarrow{M}_{i,j}^{\beta\beta} (\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{\sigma}_j^\beta) \\ &\quad - \overleftarrow{M}_{i,j}^{\beta\gamma} (\hat{\sigma}_i^\gamma \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma) + \overleftarrow{M}_{i,j}^{\gamma\alpha} (\hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{\sigma}_j^\alpha) \\ &\quad \left. + \overleftarrow{M}_{i,j}^{\gamma\beta} (\hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{\sigma}_j^\beta) + \overleftarrow{M}_{i,j}^{\gamma\gamma} (\hat{\sigma}_i^\beta \otimes \hat{\sigma}_j^\gamma) \right] \\ &= 0, \end{aligned}$$

cada um dos termos da soma de elementos linearmente independentes acima deve ser nulo isoladamente o que nos leva a

$$\begin{aligned} \vec{P}_i^\beta &= 0, \\ \vec{P}_i^\gamma &= 0, \\ \overleftarrow{M}_{i,j}^{\beta\alpha} &= 0, \\ \overleftarrow{M}_{i,j}^{\beta\beta} &= 0, \\ \overleftarrow{M}_{i,j}^{\beta\gamma} &= 0, \\ \overleftarrow{M}_{i,j}^{\gamma\alpha} &= 0, \\ \overleftarrow{M}_{i,j}^{\gamma\beta} &= 0 \text{ e} \\ \overleftarrow{M}_{i,j}^{\gamma\gamma} &= 0. \end{aligned}$$

Assim para o cálculo das desigualdades vemos que os autovalores da matriz parcialmente transposta assumem a forma

$$\begin{aligned} \lambda_\pm^T &= \frac{1}{4} (1 - P_{i\alpha}) \pm \frac{1}{4} \sqrt{(P_{j\gamma} - M_{\alpha\gamma})^2 + (P_{j\beta} - M_{\alpha\beta})^2 + (P_{j\alpha} - M_{\alpha\alpha})^2}, \\ \mu_\pm^T &= \frac{1}{4} (1 + P_{i\alpha}) \pm \frac{1}{4} \sqrt{(P_{j\gamma} + M_{\alpha\gamma})^2 + (P_{j\beta} + M_{\alpha\beta})^2 + (P_{j\alpha} + M_{\alpha\alpha})^2}. \end{aligned}$$

Mais uma vez as desigualdades permanecem invariantes

$$(s_1^T)^2 = t_-^2 - (V_1^T)^2 \geq 0 \quad \text{e} \quad (s_2^T)^2 = t_+^2 - (V_2^T)^2 \geq 0$$

em que $V_1^T = \sqrt{u_-^2 + v_-^2 + w_+^2}$, $V_2^T = \sqrt{u_+^2 + v_+^2 + w_-^2}$ mas agora os parâmetros

$$\begin{aligned} t_{\pm} &= \frac{1 \pm P_{i\alpha}}{2}, \quad u_{\pm} = \frac{P_{j\gamma} \pm M_{\alpha\gamma}}{2}, \\ v_{\pm} &= \frac{P_{j\beta} \pm M_{\alpha\beta}}{2}, \quad \text{e} \quad w_{\pm} = \frac{P_{j\alpha} \mp M_{\alpha\alpha}}{2}, \end{aligned} \quad (5.14)$$

são calculados de forma ligeiramente distinta. Estados dessa classe tem uma outra característica muito importante, a transposição parcial não altera os autovalores, isto é, esses estados da classe 3 são sempre separáveis uma vez que terão autovalores da matriz parcialmente transposta sempre positivos e iguais ao da matriz original, como mostrado será mostrado.

Escolha 7: $\alpha = x$, $\beta = y$ e $\gamma = z$

Para $\alpha = x$, $\beta = y$ e $\gamma = z$, o elemento comutativo comum será $\hat{g}_1 = \hat{\sigma}_1^x \otimes \hat{1}_2$. A condição $[\hat{\rho}, \hat{g}_1] = 0$ será satisfeita para $P_{1y} = P_{1z} = M_{yx} = M_{yy} = M_{yz} = M_{zx} = M_{zy} = M_{zz} = 0$, o que reduz a sete os parâmetros independentes da matriz densidade

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + P_{2z} & P_{2x} - iP_{2y} & P_{1x} + M_{xz} & M_{xx} - iM_{xy} \\ P_{2x} + iP_{2y} & 1 - P_{2z} & M_{xx} + iM_{xy} & P_{1x} - M_{xz} \\ P_{1x} + M_{xz} & M_{xx} - iM_{xy} & 1 + P_{2z} & P_{2x} - iP_{2y} \\ M_{xx} + iM_{xy} & P_{1x} - M_{xz} & P_{2x} + iP_{2y} & 1 - P_{2z} \end{pmatrix}. \quad (5.15)$$

Escolha 8: $\alpha = y$, $\beta = z$ e $\gamma = x$

Para $\alpha = y$, $\beta = z$ e $\gamma = x$, o elemento comutativo comum será $\hat{g}_1 = \hat{\sigma}_1^y \otimes \hat{1}_2$. A condição $[\hat{\rho}, \hat{g}_1] = 0$ será satisfeita para $P_{1z} = P_{1x} = M_{zy} = M_{zz} = M_{zx} = M_{xy} = M_{xz} = M_{xx} = 0$, o que reduz a sete os parâmetros independentes da matriz densidade

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + P_{2z} & P_{2x} - iP_{2y} & -iP_{iy} - iM_{yz} & -M_{yy} - iM_{yx} \\ P_{2x} + iP_{2y} & 1 - P_{2z} & M_{yy} - iM_{yx} & -iP_{1y} + iM_{yz} \\ iP_{1y} + iM_{yz} & M_{yy} + iM_{yx} & 1 + P_{2z} & P_{2x} - iP_{2y} \\ -M_{yy} + iM_{yx} & iP_{1y} - iM_{yz} & P_{2x} + iP_{2y} & 1 - P_{2z} \end{pmatrix}. \quad (5.16)$$

$u(1)$	$2t_{\pm}$	$2u_{\pm}$	$2v_{\pm}$	$2w_{\pm}$	$2\lambda_{\pm}$	$2\mu_{\pm}$
$\hat{\sigma}_1^{\alpha} \otimes \hat{\sigma}_2^{\alpha}$	$1 \pm M_{\alpha\alpha}$	$P_{1\alpha} \pm P_{2\alpha}$	$M_{\alpha\alpha} \pm M_{\gamma\gamma}$	$M_{\gamma\beta} \pm M_{\beta\gamma}$	$t_{-} \pm V_1$	$t_{+} \pm V_2$
$\hat{\sigma}_1^{\alpha} \otimes \hat{\sigma}_2^{\beta}$	$1 \pm M_{\alpha\beta}$	$P_{1\alpha} \pm P_{2\beta}$	$M_{\beta\gamma} \pm M_{\gamma\alpha}$	$M_{\gamma\gamma} \pm M_{\beta\alpha}$		
$\hat{\sigma}_1^{\alpha} \otimes \hat{1}_2$	$1 \pm P_{1\alpha}$	$P_{2\gamma} \pm M_{\alpha\gamma}$	$P_{2\beta} \pm M_{\gamma\alpha}$	$P_{2\alpha} \pm M_{\alpha\alpha}$		

Tabela 5.3: Variáveis ($t_{\pm}, u_{\pm}, v_{\pm}$ e w_{\pm}) para diferentes geradores $u(1)$. As colunas 6 e 7 contêm os autovalores de sistemas de dois qubits associado a álgebra. Note que o formato dos autovalores independe de $u(1)$.

separável [11]. De fato, essas distâncias configuram uma medida de emaranhamento apenas quando tratadas na matriz parcialmente transposta.

Para cada classe de matriz, Eq.(5.8) até Eq.(5.17) está especificado na Tabela 5.3 a definição das variáveis do hiperespaço ($t_{\pm}, u_{\pm}, v_{\pm}$ e w_{\pm}) para cada uma das três classes.

No artigo [11] foi discutido um teste de emaranhamento e separabilidade para sistemas de dois qubits com a estrutura dos estados X, Eq. (A.5). Geometricamente, a matriz parcialmente transposta, $\hat{\rho}^T$ é equivalente à reflexão do vetor de polarização \vec{P}_2 pelo plano x-z ($(P_x, P_y, P_z) \longrightarrow (P_x, -P_y, P_z)$) e o mesmo para a matriz de correlação ($M_{\alpha\gamma} \longrightarrow -M_{\alpha\gamma}$). Se nenhum dos autovalores de $\hat{\rho}^T$ assumir valor negativo, então, $\hat{\rho}$ é separável. Os autovalores λ_{\pm}^T e μ_{\pm}^T da matriz parcialmente transposta $\hat{\rho}^T$ são obtidos diretamente, nas classes 1 e 2, mudando $v_{\pm} \rightleftharpoons v_{\mp}$ e $w_{\pm} \rightleftharpoons w_{\mp}$ em V_1 e V_2 ; levando-os a $V_1^T = \sqrt{u_{-}^2 + v_{-}^2 + w_{+}^2}$ e $V_2^T = \sqrt{u_{+}^2 + v_{+}^2 + w_{-}^2}$ respectivamente.

De qualquer forma, os estados de classe 3, de (5.15) a (5.17), obtidos por operações de simetria a partir do elemento comutativo comum ($\hat{\sigma}_1^{\alpha} \otimes \hat{1}_2$), serão sempre separáveis uma vez que a matriz parcialmente transposta tem o mesmo espectro de autovalores da matriz original, isto é, $\lambda_{\pm}^T = \lambda_{\pm}$ e $\mu_{\pm}^T = \mu_{\pm}$, e por isso nunca serão negativos. Nesse caso os autovalores λ_{\pm}^T e μ_{\pm}^T da matriz parcialmente transposta $\hat{\rho}^T$ são obtidos efetuando duas mudanças consecutivas no elemento $v_{\pm} \rightleftharpoons v_{\mp} \rightleftharpoons v_{\pm}$, que permanece invariante.

Capítulo 6

Análise das Transições de Fase Quânticas

As transições de fase são fenômenos amplamente conhecidos, principalmente no que concerne aos estados de agregação da matéria: sólido, líquido e gasoso. Muito antes das primeiras teorias termodinâmicas, o homem já sabia que a certas condições, uma substância, como a água, por exemplo, poderia mudar drasticamente de fase. Com efeito, as transições de fase são fenômenos tão comuns, ocorrendo em uma variedade tão grande de sistemas sob as mais diversas condições, que não nos é difícil encontrar exemplos visíveis na natureza.

Atualmente, as transições de fase são caracterizadas de forma mais ampla. Hoje sabemos que durante uma transição de fase o sistema muda seu estado como consequência da variação de algum parâmetro externo¹. As fases que um sistema pode exibir não estão apenas relacionadas aos seus estados de agregação, mas são, de maneira geral, caracterizadas por uma simetria própria ou até mesmo pela ausência dela.

Com esta definição mais ampla, uma série de fenômenos críticos pode ser descrita. Podemos citar a transição que ocorre a temperaturas suficientemente baixas², em que um sistema quântico pode transicionar de um estado separável para um estado emaranhado, variando-se apenas o acoplamento entre os constituintes do sistema. Esse tipo

¹As transições de fase quânticas, normalmente ocorrem com a variação de um parâmetro de acoplamento interno que pode ser, no entanto, variado externamente.

²Se comparadas às energias próprias das transição em questão.

de transição se enquadra no que atualmente chamamos de *transições de fase quânticas* [39].

As transições de fase quânticas ocorrem quando se varia algum parâmetro do hamiltoniano de um sistema, de forma a haver mudança do nível fundamental do sistema, que por sua vez, tenderá a ocupar um novo estado fundamental. Suponha um hamiltoniano da forma

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + g\hat{H}_1,$$

com $|\phi_n\rangle$ os auto estados de \hat{H}_0 e $|\psi_n\rangle$ os auto estados de \hat{H}_1 . Quando g tender a zero, o sistema ocupará o auto estado de \hat{H}_0 , de menor energia $|\phi_0\rangle$

$$\hat{H} \approx \hat{H}_0.$$

Mas à medida que aumentamos g , a contribuição de \hat{H}_1 aumenta no hamiltoniano total. Podemos aumentar g até que \hat{H}_0 seja desprezível, então o sistema preferirá estar no auto estado de menor energia $|\psi_0\rangle$ de \hat{H}_1 .

$$\hat{H} \approx g\hat{H}_1.$$

A transição pode ser então caracterizada como de primeira ordem quando

$$\left[\hat{H}_0, \hat{H}_1 \right] = 0$$

e de segunda ordem ou contínua quando

$$\left[\hat{H}_0, \hat{H}_1 \right] \neq 0.$$

Ocorre que, entre os estados $|\phi_0\rangle$ e $|\psi_0\rangle$ podem haver diferenças substanciais, como, por exemplo, um deles ser um estado emaranhado. Assim o sistema passaria de um estado fatorável para um estado emaranhado. Como no caso de um sistema formado por dois spins e que interagem entre si com acoplamento J .

6.1 Estado Térmico XXX com Campo na Direção \hat{k}

O hamiltoniano que descreve o sistema é o de Heisenberg isotrópico

$$\hat{H} = -\omega_0\hat{\sigma}_{1,z} - \omega_0\hat{\sigma}_{2,z} + J\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2. \quad (6.1)$$

com $\hbar = 1$, em que podemos tratar, por analogia $\hat{H} = \hat{H}_0 + J\hat{H}_1$, sendo

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= -\omega_0\hat{\sigma}_{1,z} - \omega_0\hat{\sigma}_{2,z}, \\ \hat{H}_1 &= \hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2.\end{aligned}$$

Os auto estados do hamiltoniano total e suas respectivas auto energias são

Auto estados de \hat{H}	Auto energias
$ \varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle + \phi^-\rangle) = \uparrow\uparrow\rangle$,	$E_{\uparrow\uparrow} = -2\omega_0 + J$,
$ \varphi_2\rangle = \psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$,	$E_{\psi^-} = -3J$,
$ \varphi_3\rangle = \psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$,	$E_{\psi^+} = J$,
$ \varphi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle - \phi^-\rangle) = \downarrow\downarrow\rangle$,	$E_{\downarrow\downarrow} = 2\omega_0 + J$.

As auto energias do sistema dependem do valor de J . Se fizermos $J = 0$, o hamiltoniano será

$$\hat{H} = -\omega_0\hat{\sigma}_{1,z} - \omega_0\hat{\sigma}_{2,z} = \hat{H}_0.$$

Nesse caso, temos os seguintes auto estados e auto energia

auto estados de \hat{H}_0	auto energias
$ \varphi'_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle + \phi^-\rangle) = \uparrow\uparrow\rangle$,	$E'_{\uparrow\uparrow} = -2\omega_0$,
$ \varphi'_2\rangle = \psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$,	$E'_{\psi^-} = 0$,
$ \varphi'_3\rangle = \psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$,	$E'_{\psi^+} = 0$,
$ \varphi'_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle - \phi^-\rangle) = \downarrow\downarrow\rangle$,	$E'_{\downarrow\downarrow} = 2\omega_0$.

Se o sistema for colocado em contato com um reservatório térmico com temperatura zero absoluto, ele ocupará somente o estado de menor energia $|\varphi'_1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$.

Para $J \neq 0$ surgem as contribuições de \hat{H}_1 e o sistema passa a ser descrito pelo hamiltoniano total (6.1). À medida que aumentamos J , os valores das auto energias aumentam exceto a auto energia $E_{\psi^-} = -3J$ que diminui conforme aumentamos de J . É natural imaginar, portanto, que a partir de algum valor crítico de J , a energia $E_{\psi^-} = -3J$ será menor que a energia mínima $E_{\uparrow\uparrow} = -2\omega_0 + J$. No ponto crítico,

portanto, as autoenergias são idênticas,

$$E_{\psi^-} = E_{\uparrow\uparrow}$$

$$-3J = -2\omega_0 + J \quad (6.2)$$

$$\frac{J}{\omega_0} = \frac{1}{2}. \quad (6.3)$$

Para valores de J menores que J_c , Eq.(6.3), a menor energia será a do auto estado $|\varphi_1\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$, mas quando J for maior que J_c , E_{ψ^-} passa a ser menor que $E_{\uparrow\uparrow}$, veja a Fig.(6.1), e como consequência o sistema passa a ocupar o estado $|\varphi_2\rangle = |\psi^-\rangle$, que agora tem a menor energia, o que caracteriza uma *transição quântica de fase*. Por simplicidade parametrizamos $J = \frac{J}{\omega_0}$ que é equivalente a atribuir $\omega_0 = 1$, sem perda de generalidade, conforme mostrado no Apêndice G. A transição de primeira ordem deve ocorrer, portanto, em $J = \frac{1}{2}$.

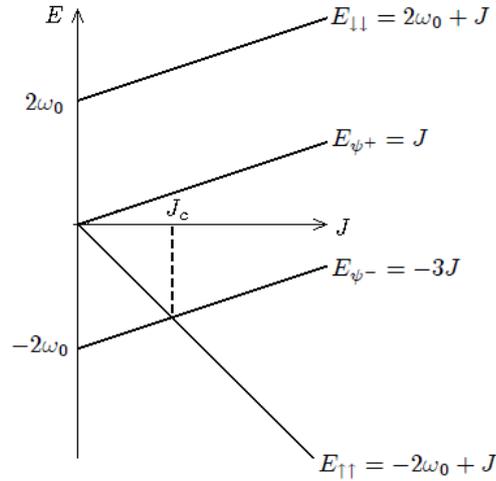


Figura 6.1: A variação das auto-energias com o acoplamento, o sistema muda de estado fundamental em J_C

As transições de fase quânticas vêm sendo caracterizadas através da medida de emaranhamento proposta por Wootters [8] e da negatividade de Werner-Vidal [10] além de outros métodos como a entropia de Von Neumann [40] ou a discordia quântica [41, 42, 43]. Isso porque, estas medidas e suas derivadas com relação ao parâmetro

de interação podem apresentar descontinuidades, ou até mesmo mudanças de comportamento evidenciando mudanças na forma como cada partícula enxerga a outra, o que leva ao rearranjo do sistema [27], e, portanto, à transição de fase quântica. Analisaremos esta transição utilizando a medida de distância de emaranhamento.

Escrevendo o operador densidade de estados, na base de spin, para esse sistema em equilíbrio térmico, $\hat{\rho} = (1/Z) \exp(-\beta\hat{H})$, $\beta = 1/kT$ sendo k a constante de Boltzman, T a temperatura, e Z é a função de partição $Z = \text{Tr} [\exp(-\beta\hat{H})]$

$$\hat{\rho}_s = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \exp\left(-\frac{2\omega_0+J}{kT}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) + \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) - \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) - \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) + \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(-\frac{2\omega_0+J}{kT}\right) \end{pmatrix},$$

com

$$Z = 2 \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) \left[1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right) \right].$$

Reescrevendo na base computacional, isto é, invertendo os qubits de ambas as partículas teremos

$$\hat{\rho}_c = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \exp\left(-\frac{2\omega_0+J}{kT}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) + \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) - \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) - \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) + \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(\frac{2\omega_0-J}{kT}\right) \end{pmatrix},$$

note que há a troca dos elementos $\rho_{11} \leftrightarrow \rho_{44}$ nesta mudança de base, mas o traço permanece invariante. Calculando os VPs e os elementos de MC vemos que os únicos elementos não nulos são os $P_{1,z} = P_{2,z}$ e os elementos $M_{xx} = M_{yy}$, e M_{zz} . Veja o cálculo detalhado no Apêndice G. As desigualdades propostas ficarão

$$(s_1^T)^2 = \left(\frac{1 + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} \right)^2 \geq 0.$$

Note que esta primeira desigualdade é sempre satisfeita. A segunda distância quadrática

é expressa como

$$(s_2^T)^2 = \left(1 - \frac{1 + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}\right)^2 - \left(\frac{1 + \exp\left(-\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} - 1\right)^2 - \left(\frac{1 - \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}\right)^2.$$

assim a distância $(s_2^T)^2$ pode assumir valores negativos.

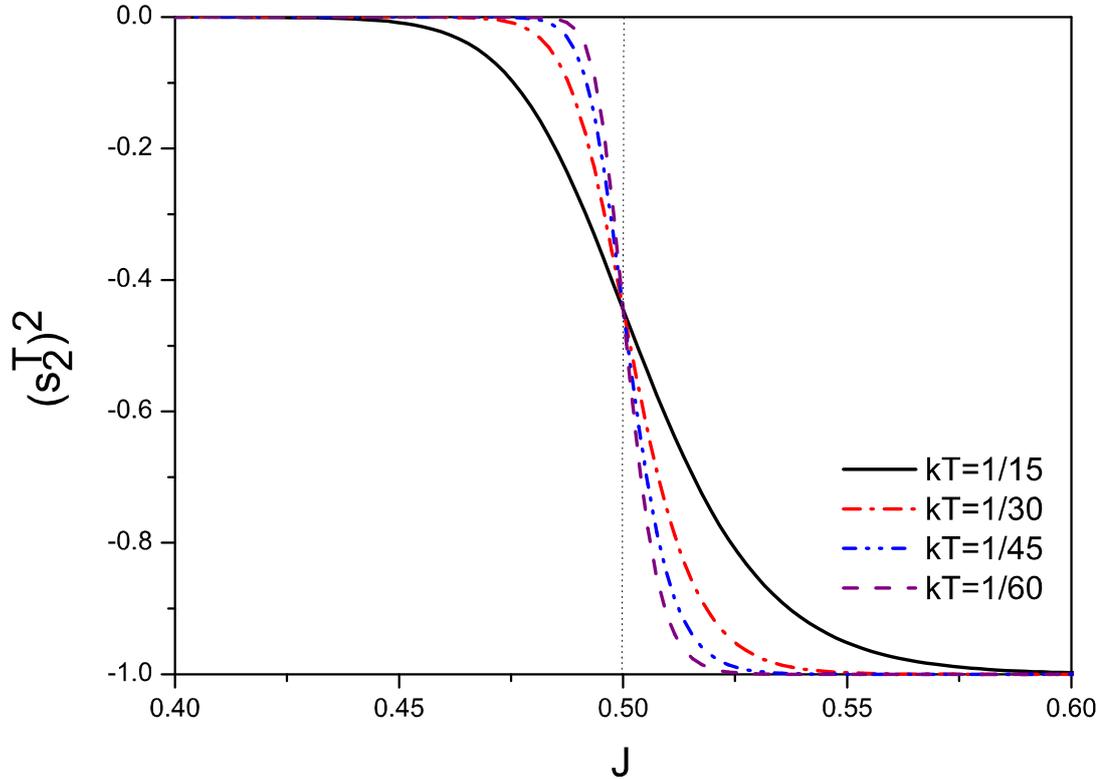


Figura 6.2: Medida de distância quadrática $(s_2^T)^2$ com relação ao acoplamento J no modelo XXX. À medida que diminuimos a temperatura, $T \rightarrow 0$, as curvas se aproximam de uma reta que cruza o eixo x em $J = 1/2$.

O gráfico (Fig. 6.2) mostra a evolução da distância quadrática $(s_2^T)^2$ em valores de

J , para diferentes temperaturas. Quanto maior a temperatura do sistema, menor o valor de J em que o sistema se torna emaranhado. À medida que nos aproximamos de $kT = 0$ a curva $(s_2^T)^2$ se aproxima da reta $J = \frac{1}{2}$. Isto fica mais claro observando o gráfico da derivada de $(s_2^T)^2$. Para tal calculamos a derivada de $(s_2^T)^2$ com relação ao parâmetro de acoplamento J . (Veja o Apêndice G). E, no ponto crítico, obtivemos

$$\left. \frac{d(s_2^T)^2}{dJ} \right|_{J=\frac{1}{2}} = \frac{\left(-\frac{32}{kT}\right) \exp\left(\frac{2}{kT}\right) \left[-1 - \exp\left(-\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4}{kT}\right) + 3 \exp\left(\frac{2}{kT}\right)\right]}{\left[2 + 3 \exp\left(\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2}{kT}\right)\right]^3},$$

calculando o limite em $T \rightarrow 0$

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left. \frac{d(s_2^T)^2}{dJ} \right|_{J=\frac{1}{2}} = -\infty,$$

observamos uma divergência na derivada de $(s_2^T)^2$ no ponto crítico.

O gráfico (Fig. 6.3) ilustra o comportamento da derivada primeira da distância $(s_2^T)^2$ com relação ao parâmetro de acoplamento J . Para $kT \rightarrow 0$ vemos que $\frac{d(s_2^T)^2}{dJ} \rightarrow -\infty$, isto é, diverge no ponto $J = \frac{1}{2}$. Esta descontinuidade na derivada no ponto $J = \frac{1}{2}$ caracteriza a transição de primeira ordem que ocorre nesse ponto.

6.2 Estado Térmico de Heisenberg XXZ

Para o sistema no equilíbrio, descrito pelo hamiltoniano do tipo Heisenberg XXZ,

$$\hat{H} = -J\hat{\sigma}_1^x\hat{\sigma}_2^x - J\hat{\sigma}_1^y\hat{\sigma}_2^y - \Delta\hat{\sigma}_1^z\hat{\sigma}_2^z, \quad (6.4)$$

os autovetores do hamiltoniano Eq.(6.4) e seus respectivos autovalores são:

auto estados de \hat{H}	auto energias
$ \varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle + \phi^-\rangle) = \uparrow\uparrow\rangle$,	$E_{\uparrow\uparrow} = -\Delta$,
$ \varphi_2\rangle = \psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle)$,	$E_{\psi^-} = \Delta + 2J$,
$ \varphi_3\rangle = \psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle)$,	$E_{\psi^+} = \Delta - 2J$,
$ \varphi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle - \phi^-\rangle) = \downarrow\downarrow\rangle$,	$E_{\downarrow\downarrow} = -\Delta$.

A transição de fase de primeira ordem deve ocorrer quando o auto estado de menor energia do sistema se alterar. A princípio para Δ pequeno, o auto estado de menor

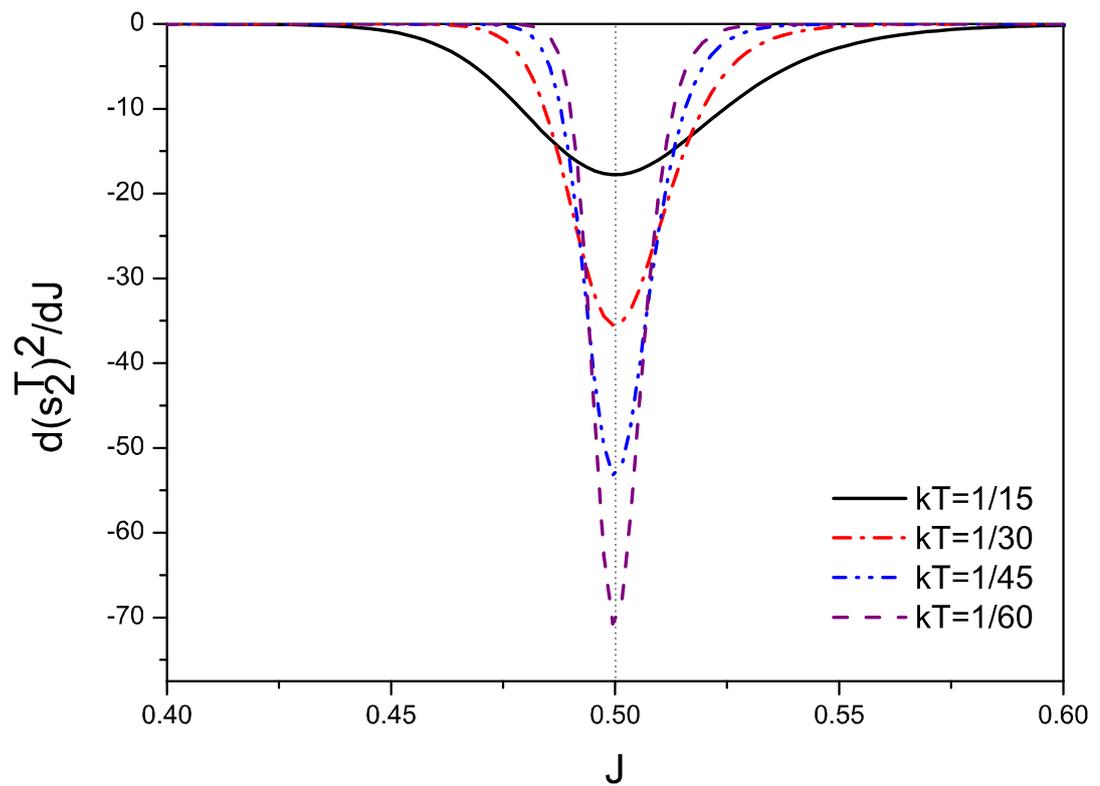


Figura 6.3: Derivada da distância em função de J no modelo XXX: A medida que nos aproximamos de $kT = 0$ derivada tem um pico maior e mais estreito. Para $kT \rightarrow 0$ a derivada diverge em $J = \frac{1}{2}$.

energia do sistema é $|\psi^+\rangle$ com energia $E_{\psi^+} = \Delta - 2J$. À medida que aumentamos o valor de Δ os estados separáveis $|\uparrow\uparrow\rangle$ e $|\downarrow\downarrow\rangle$ passam a ter energia menor, passando a ser o estado fundamental do sistema. No ponto de transição, portanto, as auto energias E_{ψ^+} e $E_{\uparrow\uparrow}$ são idênticas conforme ilustra a Fig. 6.4.

$$\begin{aligned} E_{\psi^+} &= E_{\uparrow\uparrow} \\ \Delta - 2J &= -\Delta \\ \frac{\Delta}{J} &= 1. \end{aligned}$$

Por simplicidade parametrizamos $\Delta = \frac{\Delta}{J}$, o que é equivalente a admitir $J = 1$ e variar apenas o parâmetro Δ no modelo XXZ sem perda de informações, conforme mostrado no Apêndice G. Assim a transição de primeira ordem desse sistema deve ocorrer em $\Delta = 1$.

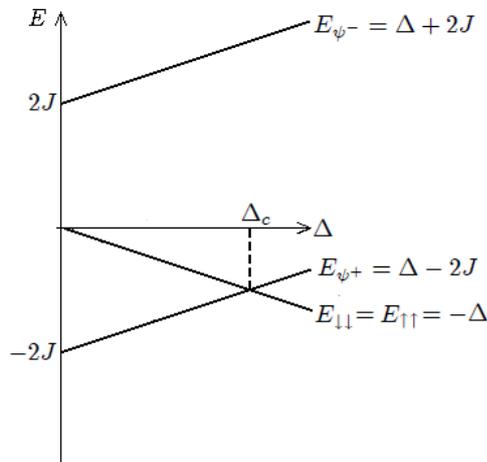


Figura 6.4: A variação das auto-energias com o acoplamento, o sistema muda de estado fundamental em Δ_C

Escrevendo o operador densidade de estados, na base de spin, para esse sistema em equilíbrio térmico $\hat{\rho} = (1/Z) \exp(-\beta\hat{H})$, $\beta = 1/kT$ sendo k a constante de Boltzman, T a temperatura, e Z é a função de partição $Z = \text{Tr} \left[\exp(-\beta\hat{H}) \right]$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) \end{pmatrix}.$$

Note que a mudança para a base computacional nesse caso não altera a matriz, tampouco a sua função de partição.

$$Z = 2 \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right) \right].$$

Os únicos elementos não nulos serão $M_{xx} = M_{yy}$ e M_{zz} . Para o cálculo detalhado veja Apêndice G. As distâncias quadráticas das matrizes parcialmente transpostas são

$$(s_1^T)^2 = \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]} \right)^2 \geq 0 \quad (6.5)$$

e

$$(s_2^T)^2 = \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]} \right)^2 - \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]} \right)^2. \quad (6.6)$$

Note que a primeira distância quadrática é sempre positiva e não caracteriza emaranhamento em si, já a segunda pode quantificar o emaranhamento quando assumir valores negativos.

A Fig. 6.5 mostra a evolução da distância $(s_2^T)^2$ com relação ao acoplamento Δ , para diferentes temperaturas. À medida que nos aproximamos de $kT = 0$ a curva $(s_2^T)^2$ se aproxima da reta $\Delta = 1$.

Em seguida calculamos também a derivada de $(s_2^T)^2$ com relação ao parâmetro de acoplamento Δ . (Veja o cálculo no Apêndice G). No ponto de crítico $\Delta = 1$ a derivada de $(s_2^T)^2$ é escrita como

$$\left. \frac{d(s_2^T)^2}{d\Delta} \right|_{\Delta=1} = \frac{\left(\frac{8}{kT}\right) \left[2 \left[1 + \exp\left(-\frac{4}{kT}\right) \right] + \left[1 + \exp\left(-\frac{8}{kT}\right) \right] - 2 \exp\left(-\frac{4}{kT}\right) \right]}{2 + \left[1 + \exp\left(-\frac{4}{kT}\right) \right]}.$$

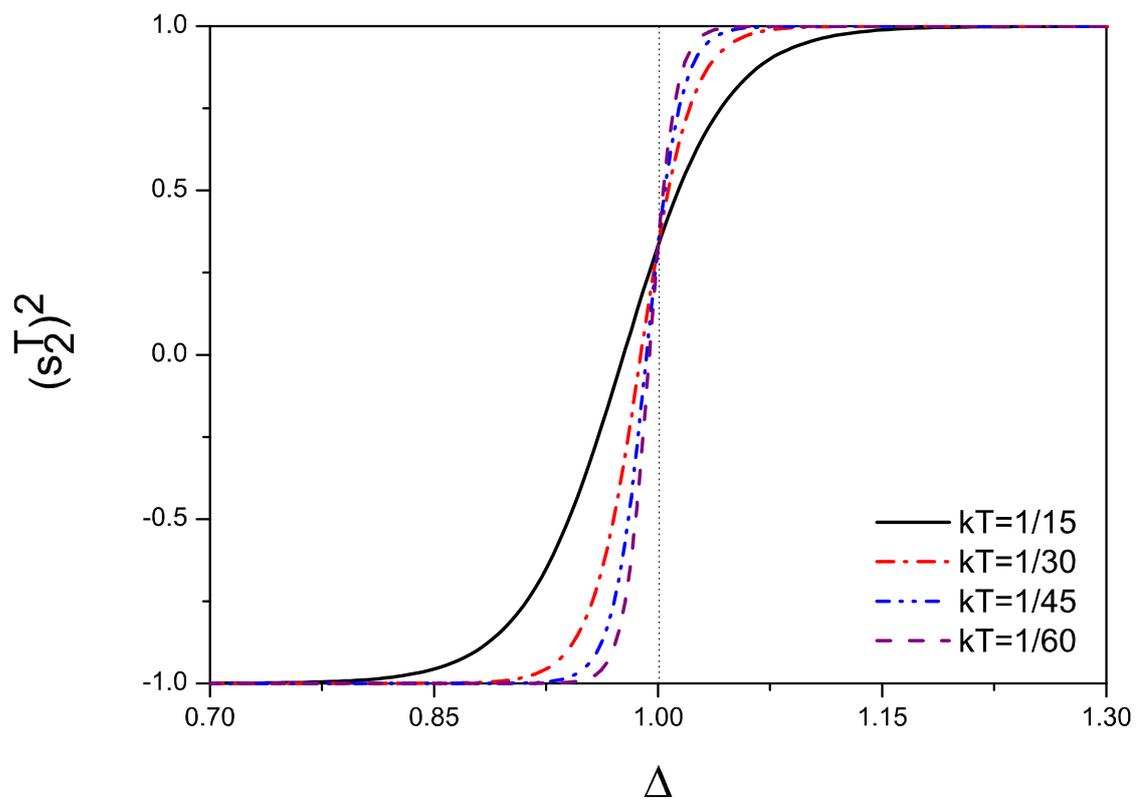


Figura 6.5: Medida de distância quadrática $(s_2^T)^2$ em função do acoplamento Δ no modelo XXZ. Para temperaturas $kT \rightarrow 0$ a distância se aproxima da reta $\Delta = 1$.

Calculando o limite para temperatura zero obtemos

$$\lim_{T \rightarrow 0} \left. \frac{d(s_2^T)^2}{d\Delta} \right|_{\Delta=1} = \infty,$$

o que caracteriza uma divergência na derivada de $(s_2^T)^2$ no ponto crítico $\Delta = 1$ quando $T \rightarrow 0$.

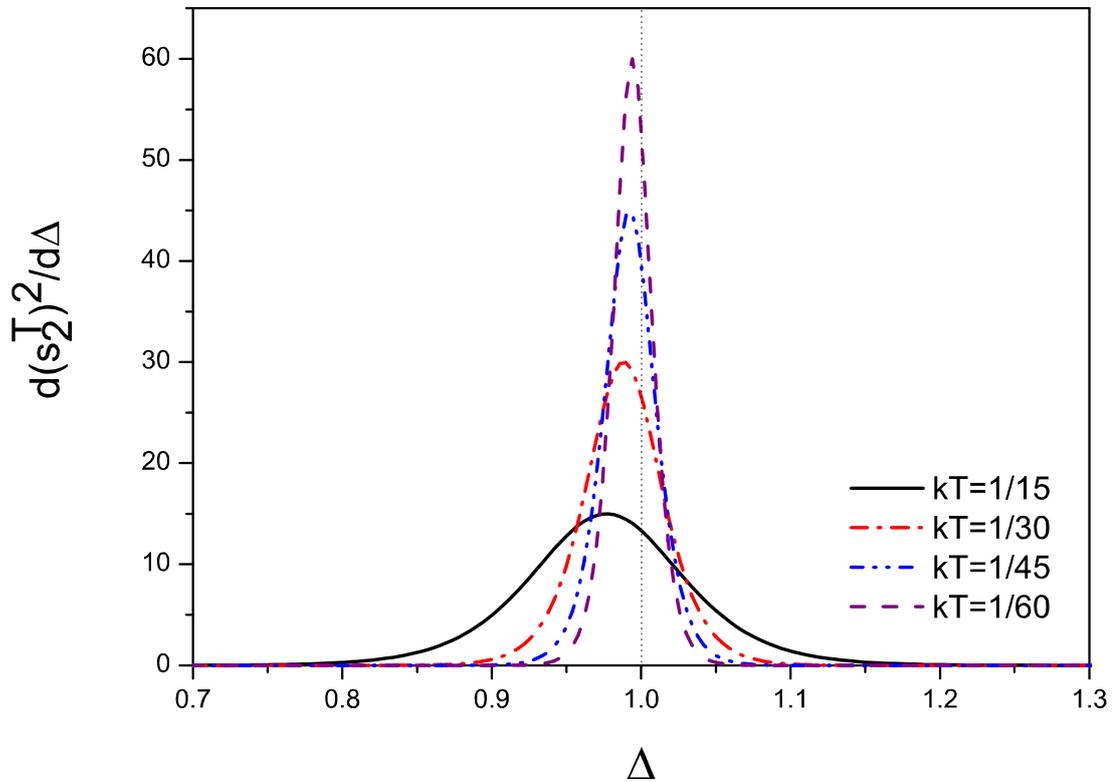


Figura 6.6: Derivada da distância quadrática $(s_2^T)^2$ em função do acoplamento Δ no modelo XXZ: À medida que nos aproximamos de $kT = 0$ a derivada tem um pico maior e mais estreito. Para $\Delta = 1$ com $kT \rightarrow 0$ a derivada diverge.

Novamente vemos que a descontinuidade na derivada (veja a Fig. 6.6) quando $kT \rightarrow 0$ no ponto $\Delta = 1$ caracteriza a transição de primeira ordem que ocorre nesse ponto.

6.2.1 Modelo de Ising

Para ilustrar ainda mais, podemos analisar um caso particular do modelo XXZ, fazendo $J = 0$. Assim, obtemos um modelo simples de Ising sem campo externo.

$$\hat{H} = -\Delta \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z, \quad (6.7)$$

logo

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) \end{pmatrix},$$

com

$$Z = 2 \left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \right]$$

O estado fundamental térmico desse sistema não é emaranhado como mostram as distâncias

$$(s_1^T)^2 = \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)}{[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)]} \right)^2 \quad (6.8)$$

e

$$(s_2^T)^2 = \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)}{[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)]} \right)^2. \quad (6.9)$$

Note que as distâncias (6.8) e (6.9) podem ser obtidas da expressão (6.5) e (6.6) para $J = 0$. Ou ainda, a partir do cálculo usual dos VPs e dos elementos da MC e finalmente, como o estado já é descrito na forma diagonal, podemos fazer o cálculo utilizando $(s_1^T)^2 = 4\lambda_1\lambda_2$ e $(s_2^T)^2 = 4\lambda_3\lambda_4$. Tomando o cuidado de identificar os autovalores segundo a forma (3.14), portanto, $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)$ e $\lambda_3 = \lambda_4 = \frac{1}{Z} \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right)$. No Apêndice G mostramos que as três formas são completamente equivalentes.

Para o modelo de Ising sem campo externo, portanto, teremos distâncias quadráticas, Eq.(6.8) e Eq.(6.9), sempre positivas, logo o estado é sempre separável.

Capítulo 7

Conclusões e Trabalhos Futuros

Nesta tese propusemos uma nova interpretação geométrica para o emaranhamento baseada em distâncias quadráticas calculadas na métrica de Minkowski. Mostramos que estas distâncias não apenas são boas para caracterizar estados emaranhados como também servem de medida de quantidade de emaranhamento e são equivalentes às medidas algébricas existentes. O método proposto também é bastante simples do ponto de vista operacional, uma vez que não exige maiores cálculos, apenas a identificação direta dos elementos da matriz densidade de estado com as componentes do espaço quadridimensional $(t, u, v, \text{ e } w)$, passando pela identificação dos vetores de polarização e dos elementos da matriz de correlação. A partir daí o cálculo subsequente das distâncias quadráticas é uma simples subtração de funções.

Do ponto de vista de simetrias, mostramos que transpor parcialmente um sistema equivale a fazer uma reflexão de uma partícula sob os vetores de polarização do estado e os elementos da matriz de correlação em um plano qualquer do \mathcal{R}^3 . Ainda nesse segmento observamos que duas reflexões consecutivas e independentes não alteram o espectro de autovalores da matriz original, não configurando assim um bom mapa para apontar emaranhamento.

Do ponto de vista das representações de estados emaranhados, obtivemos um enorme ganho com relação às representações existentes, uma vez que pudemos fazer a representação dos estados quânticos em um espaço de fase real e com geometria bem definida. Isso nos permite fazer uma análise quantitativa do emaranhamento, ao contrário das

representações usuais que são apenas pictóricas e qualitativas. Foi possível ainda traçar trajetórias de estados dinâmicos observando, por exemplo, a morte súbita do emaranhamento, quando a trajetória cruza a linha que separa os espaços, vinda da região do estados tipo emaranhado para a região em que os estados são do tipo separável em um tempo finito, ou ainda o renascimento súbito do emaranhamento quando a trajetória cruza a fronteira entre as regiões no sentido oposto.

Estendemos o método para toda a subálgebra dos D-7, mostrando que as distâncias permanecem invariantes, o que muda apenas é a definição das variáveis do espaço quadridimensional de acordo com a simetria e as relações de comutação do estado estudado. Essa análise nos permitiu concluir que existem simetrias próprias para representar estados separáveis, uma vez que seis das quinze classes de estados só podem representar estados separáveis, cuja reflexão de uma partícula ou transposição parcial resulta sempre em um espectro de autovalores positivos, iguais a do estado original. Essa é uma característica intrínseca e está largamente relacionada a simetria do sistema.

Finalmente, aplicamos o método para encontrar assinaturas de transições de fase quânticas, que são mais facilmente visualizadas em sistemas de spin, e estão relacionadas com mudanças ou quebras de simetria nas medidas de emaranhamento ou em uma de suas derivadas. A exemplo da *concurrence* de Wootters e da negatividade de Werner Vidal, a análise das distâncias e de suas derivadas se mostrou uma boa candidata a encontrar assinaturas de transições de fase quântica, sobretudo a temperatura zero. Para temperaturas finitas, no entanto, ainda a exemplo de outras medidas, ela não se mostra uma candidata consistente. Temos visto que essas assinaturas tem sido melhor quantificadas a temperaturas finitas fazendo uso da discórdia quântica [42, 43].

Trabalhamos agora em uma interpretação geométrica similar, utilizando a mesma forma de Fano no \mathcal{R}^3 , para a discórdia quântica. Acreditamos ser possível observar mudanças de comportamento na discórdia. Estas mudanças seriam responsáveis pelas assinaturas das transições de fase quântica mesmo a temperaturas finitas.

Apêndice A

Ferramentas formais: Matrizes Hermitianas

A.1 Matrizes genéricas 2×2

Uma matriz genérica 2×2 (com elementos em \mathbb{C}) pode ser escrita como a soma de duas matrizes hermitianas \mathbb{H}_1 e \mathbb{H}_2 ,

$$\mathbb{G} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \mathbb{H}_1 + i\mathbb{H}_2 \quad (\text{A.1})$$

$$= \begin{pmatrix} a_1 & c_1^* \\ c_1 & b_1 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} a_2 & c_2^* \\ c_2 & b_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

($i\mathbb{H}_2$ é anti-hermitiana) os oito elementos diferentes são rearranjados com $\{a_1, b_1, a_2, b_2\}$ números reais. As matrizes $\mathbb{H}_1, \mathbb{H}_2$ são hermitianas e

$$\mathbb{G}^\dagger = \mathbb{H}_1^\dagger - i\mathbb{H}_2^\dagger = \mathbb{H}_1 - i\mathbb{H}_2 \neq \mathbb{G}. \quad (\text{A.3})$$

cujos elementos seguem as relações:

$$\left\{ \begin{array}{l} a = a_1 + ia_2 \\ b = c_1^* + ic_2^* \\ c = c_1 + ic_2 \\ d = b_1 + ib_2 \end{array} \right\} \implies \left\{ \begin{array}{l} a_1 = \text{Re}(a), \quad a_2 = \text{Im}(a) \\ c_1 = \frac{1}{2}(c + b^*) \\ c_2 = \frac{1}{2i}(c - b^*) \\ b_1 = \text{Re}(d), \quad b_2 = \text{Im}(d) \end{array} \right\}. \quad (\text{A.4})$$

Cada matriz hermitiana $\mathbb{H}_1, \mathbb{H}_2$ pode ser escrita em termos de matrizes de Pauli $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ e a matriz unitária $\hat{1}$,

$$\hat{H}_k = \frac{1}{2} \left(\alpha_k \hat{1} + \vec{P}_k \cdot \vec{\sigma} \right) \quad k = 1, 2,$$

em que $\vec{\sigma} = \hat{\sigma}_x \hat{i} + \hat{\sigma}_y \hat{j} + \hat{\sigma}_z \hat{k}$, α_k é um escalar \vec{P}_k , é um vetor (ambos reais), são expressos em termos dos elementos de matriz (A.2)

$$\begin{aligned} \alpha_k &= a_k + b_k \\ \vec{P}_k &= (c_k + c_k^*) \hat{i} + \frac{1}{i} (c_k - c_k^*) \hat{j} + (a_k - b_k) \hat{k} \\ &= (2 \operatorname{Re}(c_k)) \hat{i} + (2 \operatorname{Im}(c_k)) \hat{j} + (a_k - b_k) \hat{k}, \end{aligned}$$

ou em termos dos elementos de matriz (A.1)

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{1}{2} \operatorname{Re}(a + d), \\ \vec{P}_1 &= \operatorname{Re}(c + b) \hat{i} + \operatorname{Im}(c - b) \hat{j} + \operatorname{Re}(a - d) \hat{k}, \\ \alpha_2 &= \frac{1}{2} \operatorname{Im}(a + d) \\ \vec{P}_2 &= \operatorname{Im}(c + b) \hat{i} - \operatorname{Re}(c - b) \hat{j} + \operatorname{Im}(d - a) \hat{k}, \end{aligned}$$

e os módulos são

$$\begin{aligned} |\vec{P}_1|^2 &= (\operatorname{Re}(c + b))^2 + (\operatorname{Im}(c - b))^2 + (\operatorname{Re}(a - d))^2, \\ |\vec{P}_2|^2 &= (\operatorname{Im}(c + b))^2 + (\operatorname{Re}(c - b))^2 + (\operatorname{Im}(d - a))^2, \end{aligned}$$

e o ângulo entre eles

$$\cos \Theta = \frac{\vec{P}_1 \cdot \vec{P}_2}{|\vec{P}_1| |\vec{P}_2|} = \frac{\operatorname{Re}(c + b) \operatorname{Im}(c + b) - \operatorname{Im}(c - b) \operatorname{Re}(c - b) + \operatorname{Re}(a - d) \operatorname{Im}(d - a)}{|\vec{P}_1| |\vec{P}_2|}.$$

Reescrevendo

$$\hat{G} = \hat{H}_1 + i\hat{H}_2 = \alpha_G \hat{1} + \frac{1}{2} \vec{P}_G \cdot \vec{\sigma},$$

com α_G e \vec{P}_G sendo quantidades complexas,

$$\begin{aligned} \alpha_G &= \alpha_1 + i\alpha_2 = \frac{1}{2} (a + d) \\ \vec{P}_G &= \vec{P}_1 + i\vec{P}_2 = (b + c) \hat{i} + i(b - c) \hat{j} + (a - d) \hat{k} \end{aligned}$$

e

$$\text{Tr}(\mathbb{G}\vec{\sigma}) = \vec{P}_G = \text{Re } \vec{P}_G + i \text{Im } \vec{P}_G,$$

é o vetor de polarização.

A.2 Matrizes Hermitianas 2×2

Para (A.1) ser uma matriz hermitiana, a e d devem ser reais ($a_1 = a$, $d_1 = d$, e $\mathbb{H}_2 = 0$, $\mathbb{G} = \mathbb{H}_1 \equiv \mathbb{H}$) e $b = c^*$, tal que o vetor $\vec{P}_G = (2 \text{Re } c) \hat{i} + (2 \text{Im } c) \hat{j} + (a - d) \hat{k}$ seja real. A matriz hermitiana 2×2

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} a & c^* \\ c & d \end{pmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

tem autovalores reais

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left[(a + d) \pm \sqrt{(a - d)^2 + 4|c|^2} \right]. \quad (\text{A.6})$$

\mathbb{H} pode ser escrito como

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left(\alpha \hat{1} + \vec{P} \cdot \vec{\sigma} \right) \quad (\text{A.7})$$

em que

$$\alpha = a + d \quad (\text{A.8})$$

$$\vec{P} = (2 \text{Re } (c)) \hat{i} + (2 \text{Im } (c)) \hat{j} + (a - d) \hat{k}. \quad (\text{A.9})$$

As condições de não negatividade são $\alpha \geq 0$ e $\alpha \geq |\vec{P}|$.

Para $\hat{H} = \hat{\rho}$ uma matriz densidade, $\text{Tr } \hat{\rho} = 1$, $\text{Tr } \hat{\rho}^2 \leq 1$, e $\hat{\rho}$ deve ser não negativo.

Isto implica que

a) $\text{Tr } \hat{\rho} = 1 \implies a + d = 1$, ou $\alpha = 1$, em

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2} \left(\hat{1} + \vec{P} \cdot \vec{\sigma} \right)$$

b) $\text{Tr } \hat{\rho}^2 \leq 1 \implies |\vec{P}| \leq 1$ desde que

$$\hat{\rho}^2 = \frac{1}{4} \left(\hat{1} + \vec{P} \cdot \vec{\sigma} \right) \left(\hat{1} + \vec{P} \cdot \vec{\sigma} \right) = 1/4 \left[\left(1 + \vec{P} \cdot \vec{P} \right) \hat{1} + 2\vec{P} \cdot \vec{\sigma} + i\vec{P} \times \vec{P} \cdot \vec{\sigma} \right]$$

(em que usamos as relações $\vec{A} \cdot \vec{\sigma} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{A} \times \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$) então,

$$\text{Tr } \hat{\rho}^2 = \frac{1}{2} \left(1 + |\vec{P}|^2 \right) \leq 1 \implies |\vec{P}| \leq 1.$$

A.3 Matrizes de dois graus de liberdade 4×4

Qualquer matriz hermitiana 4×4 pode ser escrita em quatro blocos

$$\mathbb{F} = \begin{pmatrix} \mathbb{H}_+ & \mathbb{G}^\dagger \\ \mathbb{G} & \mathbb{H}_- \end{pmatrix}; \quad \mathbb{F}^\dagger = \begin{pmatrix} \mathbb{H}_+ & \mathbb{G} \\ \mathbb{G}^\dagger & \mathbb{H}_- \end{pmatrix}, \quad (\text{A.10})$$

em que as matrizes \mathbb{H}_+ e \mathbb{H}_- são hermitianas

$$\mathbb{H}_\pm = \begin{pmatrix} a_\pm & c_\pm^* \\ c_\pm & d_\pm \end{pmatrix}$$

e podem ser escritas como

$$\hat{H}_\pm = I_\pm \hat{1}_p + \vec{R}_\pm \cdot \vec{\sigma}_p$$

com

$$I_\pm = \frac{a_\pm + d_\pm}{2}, \quad \vec{R}_\pm = (\text{Re}(c_\pm)) \hat{i} + (\text{Im}(c_\pm)) \hat{j} + \frac{(a_\pm - d_\pm)}{2} \hat{k}.$$

A matriz \mathbb{G} é não hermitiana e pode ser escrita com o a soma de duas matrizes hermitianas, uma multiplicada pelo fator i ,

$$\begin{aligned} \mathbb{G} &= \mathbb{H}_1 + i\mathbb{H}_2 \\ \mathbb{G}^\dagger &= \mathbb{H}_1^\dagger - i\mathbb{H}_2^\dagger = \mathbb{H}_1 - i\mathbb{H}_2 \neq \mathbb{G}, \end{aligned}$$

tal que $i\mathbb{H}_2$ é anti hermitiana, $(i\mathbb{H}_2)^\dagger = -(i\mathbb{H}_2)$

$$\begin{aligned} \mathbb{H}_1 &= \frac{\mathbb{G} + \mathbb{G}^\dagger}{2} = \begin{pmatrix} a_1 & c_1^* \\ c_1 & d_1 \end{pmatrix}. \\ \mathbb{H}_2 &= \frac{\mathbb{G} - \mathbb{G}^\dagger}{2i} = \begin{pmatrix} a_2 & c_2^* \\ c_2 & d_2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Então lidamos com quatro matrizes hermitianas diferentes, \mathbb{H}_+ , \mathbb{H}_- , \mathbb{H}_1 , \mathbb{H}_2 . Na forma operatorial é

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= J_1 \hat{1}_p + \vec{Q}_1 \cdot \vec{\sigma}_p \\ \hat{H}_2 &= J_2 \hat{1}_p + \vec{Q}_2 \cdot \vec{\sigma}_p \end{aligned}$$

com

$$J_{1,2} = \frac{a_{1,2} + d_{1,2}}{2}, \quad \vec{Q}_{1,2} = (\text{Re}(c_{1,2})) \hat{i} + (\text{Im}(c_{1,2})) \hat{j} + \frac{(a_{1,2} - d_{1,2})}{2} \hat{k}.$$

Então,

$$\begin{aligned}\hat{G} &= J_1 \hat{1}_p + \vec{Q}_1 \cdot \vec{\sigma}_p + i \left(J_2 \hat{1}_p + \vec{Q}_2 \cdot \vec{\sigma}_p \right) \\ &= J \hat{1}_p + \vec{Q} \cdot \vec{\sigma}_p,\end{aligned}$$

em que

$$J = J_1 + iJ_2, \quad \text{e} \quad \vec{Q} = \vec{Q}_1 + i\vec{Q}_2$$

e

$$\hat{G}^\dagger = J^* \hat{1}_p + \vec{Q}^* \cdot \vec{\sigma}_p$$

portanto,

$$\mathbb{F} = \begin{pmatrix} I_+ \hat{1}_p + \vec{R}_+ \cdot \vec{\sigma}_p & J^* \hat{1}_p + \vec{Q}^* \cdot \vec{\sigma}_p \\ J \hat{1}_p + \vec{Q} \cdot \vec{\sigma}_p & I_- \hat{1}_p + \vec{R}_- \cdot \vec{\sigma}_p \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

o subscrito p é para a paridade s de spin. Interpretação: I_+ e I_- representam as intensidades dos tipos de graus de liberdade (ou partículas) e, \vec{R}_+/I_+ e \vec{R}_-/I_- são vetores de polarização dos feixes (duas partículas), \vec{Q}_R e \vec{Q}_I caracterizam a polarização de interferência entre os dois graus de liberdade (partículas). Os elementos de (A.11) são obtidos pelo cálculo dos traços

$$\begin{aligned}I_+ \hat{1}_p + \vec{R}_+ \cdot \vec{\sigma}_p &= \text{Tr}_s \left(\frac{\hat{1}_s + \sigma_{s,z}}{2} \mathbb{F} \right) \\ I_- \hat{1}_p + \vec{R}_- \cdot \vec{\sigma}_p &= \text{Tr}_s \left(\frac{\hat{1}_s - \sigma_{s,z}}{2} \mathbb{F} \right) \\ J \hat{1}_p + \vec{Q} \cdot \vec{\sigma}_p &= \text{Tr}_s \left(\frac{\sigma_{s,x} + i\sigma_{s,y}}{2} \mathbb{F} \right) = \text{Tr}_s (\sigma_{s,+} \mathbb{F}) \\ J^* \hat{1}_p + \vec{Q}^* \cdot \vec{\sigma}_p &= \text{Tr}_s \left(\frac{\sigma_{s,x} - i\sigma_{s,y}}{2} \mathbb{F} \right) = \text{Tr}_s (\sigma_{s,-} \mathbb{F})\end{aligned}$$

em que o subscrito s referen-se a matriz (A.11) assumindo que esses elementos dão números, nem operadores, nem matrizes.

A matriz \mathbb{F} pode ser escrita como uma matriz 4×4

$$\mathbb{F} = \begin{pmatrix} I_+ + R_{+z} & R_{+x} - iR_{+y} & J^* + Q_z^* & Q_x^* - iQ_y^* \\ R_{+x} + iR_{+y} & I_+ - R_{+z} & Q_x^* + iQ_y^* & J^* - Q_z^* \\ J + Q_z & Q_x - iQ_y & I_- + R_{-z} & R_{-x} - iR_{-y} \\ Q_x + iQ_y & J - Q_z & R_{-x} + iR_{-y} & I_- - R_{-z} \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

que é positiva semi-definida (todos os autovalores são não negativos) para

$$I_+ \geq \left| \vec{R}_+ \right|, \quad (\text{A.13})$$

$$I_- \geq \left| \vec{R}_- \right| \quad (\text{A.14})$$

$$2I_+I_- \geq |J|^2 + \left| \vec{Q} \right|^2 \quad (\text{A.15})$$

e

$$\begin{aligned} I_+ \left(|I_-|^2 - \left| \vec{R}_- \right|^2 \right) + I_- \left(|I_+|^2 - \left| \vec{R}_+ \right|^2 \right) &\geq (I_+ + I_-) \left(|J|^2 + \left| \vec{Q} \right|^2 \right) \\ &- \left(\vec{R}_+ + \vec{R}_- \right) \cdot \left(J\vec{Q}^* + J^*\vec{Q} \right) - i \left(\vec{R}_+ - \vec{R}_- \right) \cdot \left(\vec{Q} \times \vec{Q}^* \right) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

($\left| \vec{Q} \right|^2 = |Q_x|^2 + |Q_y|^2 + |Q_z|^2$, o mesmo para $\left| \vec{R}_\pm \right|^2$) e obviamente, $\det \mathbb{F} \geq 0$. Para \mathbb{F} sendo um operador densidade, $Tr \mathbb{F} = 1$, implica

$$2(I_+ + I_-) = 1 \quad (\text{A.17})$$

e $Tr \mathbb{F}^2 \leq 1$ implicando

$$2 \left[\left(|I_+|^2 + |I_-|^2 + 2|J|^2 \right) + \left(\vec{R}_+^2 + \vec{R}_-^2 + 2\left| \vec{Q} \right|^2 \right) \right] \leq 1, \quad (\text{A.18})$$

em que $\left| \vec{Q} \right|^2 = \vec{Q} \cdot \vec{Q}^*$.

Na forma operatorial da matriz (A.12) é

$$\begin{aligned} \hat{F} &= \frac{1}{2} \left[\left(I_+ \hat{1}_p + \vec{R}_+ \cdot \vec{\sigma}_p \right) + \left(I_- \hat{1}_p + \vec{R}_- \cdot \vec{\sigma}_p \right) \right] \otimes \hat{1}_s \\ &+ \frac{1}{2} \left[\left(I_+ \hat{1}_p + \vec{R}_+ \cdot \vec{\sigma}_p \right) - \left(I_- \hat{1}_p + \vec{R}_- \cdot \vec{\sigma}_p \right) \right] \otimes \hat{\sigma}_{z,s} \\ &+ \frac{1}{2} \left[\left(J^* \hat{1}_p + \vec{Q}^* \cdot \vec{\sigma}_p \right) + J \hat{1}_p + \vec{Q} \cdot \vec{\sigma}_p \right] \otimes \hat{\sigma}_{x,s} \\ &+ \frac{1}{2i} \left[\left(J \hat{1}_p + \vec{Q} \cdot \vec{\sigma}_p \right) - \left(J^* \hat{1}_p + \vec{Q}^* \cdot \vec{\sigma}_p \right) \right] \otimes \hat{\sigma}_{y,s} \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} \hat{F} &= \left(\frac{I_+ + I_-}{2} \right) \hat{1}_p \otimes \hat{1}_s + \left(\frac{\vec{R}_+ + \vec{R}_-}{2} \right) \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{1}_s \\ &+ \left(\frac{I_+ - I_-}{2} \right) \hat{1}_p \otimes \hat{\sigma}_{z,s} + \left(\frac{\vec{R}_+ - \vec{R}_-}{2} \right) \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{\sigma}_{z,s} \\ &+ J_R \hat{1}_p \otimes \hat{\sigma}_{x,s} + \vec{Q}_R \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{\sigma}_{x,s} \\ &+ J_I \hat{1}_p \otimes \hat{\sigma}_{y,s} + \vec{Q}_I \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{\sigma}_{y,s} \end{aligned}$$

$$\hat{F} = \left(\frac{I_+ + I_-}{2} \right) \hat{1}_p \otimes \hat{1}_s + \hat{1}_p \otimes \left[J_R \hat{\sigma}_{x,s} + J_I \hat{\sigma}_{y,s} + \left(\frac{I_+ - I_-}{2} \right) \hat{\sigma}_{z,s} \right] + \left(\frac{\vec{R}_+ + \vec{R}_-}{2} \right) \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{1}_s$$

$$+ \left[\vec{Q}_R \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{\sigma}_{x,s} + \vec{Q}_I \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{\sigma}_{y,s} + \left(\frac{\vec{R}_+ - \vec{R}_-}{2} \right) \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{\sigma}_{z,s} \right]$$

Definindo os vetores

$$\frac{1}{2} \vec{\Lambda}_s = \left(J_R, J_I, \frac{I_+ - I_-}{2} \right)$$

$$\frac{1}{2} \vec{\Lambda}_p = \frac{\vec{R}_+ + \vec{R}_-}{2}$$

e o tensor

$$\overleftarrow{M} = \overleftarrow{Q}_R \hat{i} + \overleftarrow{Q}_I \hat{j} + \left(\frac{\overleftarrow{R}_+ - \overleftarrow{R}_-}{2} \right) \hat{k}$$

temos

$$\hat{F} = \left(\frac{I_+ + I_-}{2} \right) \hat{1}_p \otimes \hat{1}_s + \frac{1}{2} \hat{1}_p \otimes \vec{\Lambda}_s \cdot \vec{\sigma}_s + \frac{1}{2} \vec{\Lambda}_p \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{1}_s + \vec{\sigma}_p \cdot \overleftarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_s$$

$$= \left(\frac{I_+ + I_-}{2} \right) \hat{1}_p \otimes \hat{1}_s + \frac{1}{2} \hat{1}_p \otimes \vec{\Lambda}_s \cdot \vec{\sigma}_s + \frac{1}{2} \vec{\Lambda}_p \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{1}_s + \overleftarrow{M} : \vec{\sigma}_p \otimes \vec{\sigma}_s$$

que é também conhecida como forma de Fano, em que

$$\vec{\sigma}_p \cdot \overleftarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_s = \overleftarrow{M} : \vec{\sigma}_p \otimes \vec{\sigma}_s$$

$$= \vec{Q}_R \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{\sigma}_{x,s} + \vec{Q}_I \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{\sigma}_{y,s} + \left(\frac{\vec{R}_+ - \vec{R}_-}{2} \right) \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \hat{\sigma}_{z,s}$$

$$= \vec{Q}_R \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \vec{\sigma}_s \cdot \hat{i} + \vec{Q}_I \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \vec{\sigma}_s \cdot \hat{j} + \left(\frac{\vec{R}_+ - \vec{R}_-}{2} \right) \cdot \vec{\sigma}_p \otimes \vec{\sigma}_s \cdot \hat{k}$$

$$= \left(\vec{Q}_R \cdot \hat{i} + \vec{Q}_I \cdot \hat{j} + \left(\frac{\vec{R}_+ - \vec{R}_-}{2} \right) \cdot \hat{k} \right) (\vec{\sigma}_p \otimes \vec{\sigma}_s)$$

$$= \vec{\sigma}_p \cdot \begin{pmatrix} \vec{Q}_R \\ \vec{Q}_I \\ \frac{\vec{R}_+ - \vec{R}_-}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \end{pmatrix} \cdot \vec{\sigma}_s$$

Apêndice B

Formas de Transposição Parcial

Suponha uma matriz genérica, na base computacional,

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} \end{pmatrix}.$$

Essa matriz pode sempre ser reescrita, em termos dos operadores de Pauli, em termos do produto tensorial de duas matrizes de base

$$\hat{\Sigma} = \begin{pmatrix} \hat{P}_1^+ & \hat{\sigma}_1^+ \\ \hat{\sigma}_1^- & \hat{P}_1^- \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \hat{P}_2^+ & \hat{\sigma}_2^+ \\ \hat{\sigma}_2^- & \hat{P}_2^- \end{pmatrix}.$$

Note que aqui definimos como $\hat{P}_i^\pm = \frac{\hat{1} \pm \hat{\sigma}_{i,z}}{2}$ os operadores de população, esses \hat{P}_i^\pm nada tem a ver com os vetores de polarização definidos anteriormente, e $\hat{\sigma}_i^\pm = \frac{\hat{\sigma}_{i,x} \pm i\hat{\sigma}_{i,y}}{2}$ em que $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ e $\hat{\sigma}_z$ são os operadores de Pauli e o índice i refere-se ao subsistema $i = 1, 2$. Expressando a matriz $\hat{\rho}$ em termos de $\hat{\Sigma}$. Teremos

$$\begin{aligned} \hat{\rho} = & \rho_{11} \left(\hat{P}_1^+ \otimes \hat{P}_2^+ \right) + \rho_{12} \left(\hat{P}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \rho_{13} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{P}_2^+ \right) + \rho_{14} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \\ & \rho_{21} \left(\hat{P}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{22} \left(\hat{P}_1^+ \otimes \hat{P}_2^- \right) + \rho_{23} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{24} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{P}_2^- \right) + \\ & \rho_{31} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{P}_2^+ \right) + \rho_{32} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \rho_{33} \left(\hat{P}_1^- \otimes \hat{P}_2^+ \right) + \rho_{34} \left(\hat{P}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \\ & \rho_{41} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{42} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{P}_2^- \right) + \rho_{43} \left(\hat{P}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{44} \left(\hat{P}_1^- \otimes \hat{P}_2^- \right). \end{aligned}$$

1. Transpondo o primeiro subsistema teremos

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{T_1} = & \rho_{11} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^+ \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^+ \right) + \rho_{12} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \rho_{13} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^+ \right) + \rho_{14} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \\ & \rho_{21} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{22} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^+ \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^- \right) + \rho_{23} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{24} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^- \right) + \\ & \rho_{31} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^+ \right) + \rho_{32} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \rho_{33} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^- \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^+ \right) + \rho_{34} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \\ & \rho_{41} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{42} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^- \right) + \rho_{43} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{44} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^- \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^- \right).\end{aligned}$$

Note que esse procedimento equivale a trocar os elementos $\rho_{13} \leftrightarrow \rho_{31}, \rho_{14} \leftrightarrow \rho_{32}, \rho_{23} \leftrightarrow \rho_{41}$ e $\rho_{24} \leftrightarrow \rho_{42}$. ou em outras palavras trocar os blocos 2 e 3

$$\hat{\rho}^{T_1} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{31} & \rho_{32} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{41} & \rho_{42} \\ \rho_{13} & \rho_{14} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{23} & \rho_{24} & \rho_{43} & \rho_{44} \end{pmatrix}.$$

2. Transpondo o segundo subsistema teremos

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{T_2} = & \rho_{11} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^+ \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^+ \right) + \rho_{12} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{13} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^+ \right) + \rho_{14} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \\ & \rho_{21} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \rho_{22} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^+ \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^- \right) + \rho_{23} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \rho_{24} \left(\hat{\sigma}_1^+ \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^- \right) + \\ & \rho_{31} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^+ \right) + \rho_{32} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \rho_{33} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^- \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^+ \right) + \rho_{34} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^- \right) + \\ & \rho_{41} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \rho_{42} \left(\hat{\sigma}_1^- \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^- \right) + \rho_{43} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^- \otimes \hat{\sigma}_2^+ \right) + \rho_{44} \left(\hat{\mathbf{P}}_1^- \otimes \hat{\mathbf{P}}_2^- \right).\end{aligned}$$

Note que esse procedimento equivale a trocar os elementos $\rho_{12} \leftrightarrow \rho_{21}, \rho_{14} \leftrightarrow \rho_{23}, \rho_{32} \leftrightarrow \rho_{41}$ e $\rho_{34} \leftrightarrow \rho_{43}$. ou em outras palavras transpor cada um dos blocos separadamente

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^{T_2} = & \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{12} \\ \rho_{21} & \rho_{22} \end{pmatrix}^T & \begin{pmatrix} \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{23} & \rho_{24} \end{pmatrix}^T \\ \begin{pmatrix} \rho_{31} & \rho_{32} \\ \rho_{41} & \rho_{42} \end{pmatrix}^T & \begin{pmatrix} \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{43} & \rho_{44} \end{pmatrix}^T \end{pmatrix} \\ \hat{\rho}^{T_2} = & \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{21} & \rho_{13} & \rho_{23} \\ \rho_{12} & \rho_{22} & \rho_{14} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{41} & \rho_{33} & \rho_{43} \\ \rho_{32} & \rho_{42} & \rho_{34} & \rho_{44} \end{pmatrix}.\end{aligned}$$

Comparando os dois procedimentos vemos que a matriz parcialmente transposta no subsistema 1 $\hat{\rho}^{T_1}$ nada mais é do que a transposta (total) da matriz que foi parcialmente transposta no subsistema 2 $\hat{\rho}^{T_2}$. Assim,

$$\hat{\rho}^{T_1} = (\hat{\rho}^{T_2})^T,$$

como transposições totais não afetam o espectro de autovalores podemos dizer que $\hat{\rho}^{T_1}$ e $\hat{\rho}^{T_2}$ tem o mesmo espectro de autovalores, portanto os dois procedimentos são totalmente equivalentes no que diz respeito à análise da positividade dos autovalores.

Apêndice C

Reflexões em planos genéricos

C.1 Rotações e Reflexão de um Plano Genérico Mantendo o Eixo z

Vamos fazer uma rotação dos eixos de coordenadas x e y

$$\begin{pmatrix} \bar{x} \\ \bar{y} \\ \bar{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\bar{x} = x \cos \theta - y \sin \theta$$

$$\bar{y} = x \sin \theta + y \cos \theta$$

$$\bar{z} = z$$

Qualquer reflexão no plano $\bar{x} - \bar{z}$, ou seja, plano $\bar{x} - z$ significa trocar o sinal da componente normal ao plano. A componente normal ao plano é dada por

$$n = \bar{x} \times z$$

$$n = (x \cos \theta - y \sin \theta) \times z$$

$$n = y \cos \theta + x \sin \theta$$

$$n = \bar{y}$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \bar{P}_{1,x} \\ \bar{P}_{1,y} \\ \bar{P}_{1,z} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{1,x} \\ P_{1,y} \\ P_{1,z} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} P_{1,x} \cos \theta - P_{1,y} \sin \theta \\ P_{1,x} \sin \theta + P_{1,y} \cos \theta \\ P_{2,z} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \bar{P}_{2,x} \\ \bar{P}_{2,y} \\ \bar{P}_{2,z} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & -\cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_{2,x} \\ P_{2,y} \\ P_{2,z} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} P_{2,x} \cos \theta - P_{2,y} \sin \theta \\ -P_{2,x} \sin \theta - P_{2,y} \cos \theta \\ P_{2,z} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

temos

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{xx} & M_{xy} & M_{xz} \\ M_{yx} & M_{yy} & M_{yz} \\ M_{zx} & M_{zy} & M_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & -\cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} M_{xx} \cos^2 \theta - (M_{xy} + M_{yx}) \sin \theta \cos \theta + M_{yy} \sin^2 \theta \\ (M_{xx} - M_{yy}) \cos \theta \sin \theta - M_{xy} \sin^2 \theta + M_{yx} \cos^2 \theta \\ M_{zx} \cos \theta - M_{zy} \sin \theta \\ (M_{yy} - M_{xx}) \sin \theta \cos \theta - M_{xy} \cos^2 \theta + M_{yx} \sin^2 \theta & M_{xz} \cos \theta - M_{yz} \sin \theta \\ -M_{xx} \sin^2 \theta - (M_{xy} + M_{yx}) \cos \theta \sin \theta - M_{yy} \cos^2 \theta & M_{xz} \sin \theta + M_{yz} \cos \theta \\ -M_{zx} \sin \theta - M_{zy} \cos \theta & M_{zz} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

C.3 Aplicando na matriz do tipo X

Para uma matriz de sete parâmetros independentes na forma X

$$\hat{\rho} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 + P_{1,z} + P_{2,z} + M_{zz} & & & 0 \\ 0 & & 1 + P_{1,z} - P_{2,z} - M_{zz} & \\ 0 & & M_{xx} + M_{yy} - i(M_{xy} - M_{yx}) & \\ M_{xx} - M_{yy} + i(M_{xy} + M_{yx}) & & & 0 \\ 0 & & M_{xx} - M_{yy} - i(M_{xy} + M_{yx}) & \\ M_{xx} + M_{yy} + i(M_{xy} - M_{yx}) & & & 0 \\ 1 - P_{1,z} + P_{2,z} - M_{zz} & & & 0 \\ 0 & & 1 - P_{1,z} - P_{2,z} + M_{zz} & \end{pmatrix},$$

aplicando a rotação sobre a primeira partícula e a rotação com reflexão sobre a segunda:

$$\begin{pmatrix} \bar{P}_{1,x} \\ \bar{P}_{1,y} \\ \bar{P}_{1,z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P_{1,z} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P_{2,z} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \bar{P}_{2,x} \\ \bar{P}_{2,y} \\ \bar{P}_{2,z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & -\cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P_{2,z} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ P_{2,z} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \bar{M}_{xx} & \bar{M}_{xy} & 0 \\ \bar{M}_{yx} & \bar{M}_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{M}_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_{xx} & M_{xy} & 0 \\ M_{yx} & M_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & M_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & -\cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$= \begin{pmatrix} M_{xx} \cos^2 \theta - (M_{xy} + M_{yx}) \sin \theta \cos \theta + M_{yy} \sin^2 \theta \\ (M_{xx} - M_{yy}) \cos \theta \sin \theta - M_{xy} \sin^2 \theta + M_{yx} \cos^2 \theta \\ 0 \\ (M_{yy} - M_{xx}) \sin \theta \cos \theta - M_{xy} \cos^2 \theta + M_{yx} \sin^2 \theta & 0 \\ -M_{xx} \sin^2 \theta - (M_{xy} + M_{yx}) \cos \theta \sin \theta - M_{yy} \cos^2 \theta & 0 \\ 0 & M_{zz} \end{pmatrix}.$$

Os termos que devemos analisar são $u_{\pm} = P_{1,z} \pm P_{2,z}$, $v_{\pm} = (M_{xx} \pm M_{yy})$, $w_{\pm} = M_{xy} \pm M_{yx}$

$$\bar{u}_{\pm} = u_{\pm},$$

$$\begin{aligned} \bar{v}_+ &= -(M_{xx} - M_{yy}) (\sin^2 \theta - \cos^2 \theta) - (M_{xy} + M_{yx}) 2 \sin \theta \cos \theta \\ &= -v_- \sin 2\theta - w_+ \cos 2\theta, \end{aligned}$$

$$\bar{v}_- = M_{xx} (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) + M_{yy} (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) = M_{xx} + M_{yy} = v_+,$$

$$\begin{aligned} \bar{w}_- &= (M_{yy} - M_{xx}) 2 \sin \theta \cos \theta + (M_{xy} + M_{yx}) (\sin^2 \theta - \cos^2 \theta) \\ &= -v_- \cos 2\theta + w_+ \sin 2\theta, \end{aligned}$$

$$\bar{w}_+ = -M_{xy} (\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) + M_{yx} (\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) = M_{yx} - M_{xy} = -w_-,$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \bar{V}_1^2 &= \bar{u}_-^2 + \bar{v}_+^2 + \bar{w}_-^2 \\ &= u_-^2 + (-v_- \sin 2\theta - w_+ \cos 2\theta)^2 + (-v_- \cos 2\theta + w_+ \sin 2\theta)^2 \\ &= u_-^2 + v_-^2 (\sin^2 2\theta + \cos^2 2\theta) + w_+^2 (\sin^2 2\theta + \cos^2 2\theta) \\ &= u_-^2 + v_-^2 + w_+^2, \\ \bar{V}_2^2 &= \bar{u}_+^2 + \bar{v}_-^2 + \bar{w}_+^2 \\ &= u_+^2 + v_+^2 + (-w_-)^2 \\ &= u_+^2 + v_+^2 + w_-^2, \end{aligned}$$

Os autovalores da matriz, rodada em ambas partículas e reletida na segunda partícula, serão

$$\begin{aligned}\bar{\lambda}_1 &= \frac{1}{4} \left[1 - M_{zz} + \sqrt{u_-^2 + v_-^2 + w_+^2} \right], \\ \bar{\lambda}_2 &= \frac{1}{4} \left[1 - M_{zz} - \sqrt{u_-^2 + v_-^2 + w_+^2} \right], \\ \bar{\lambda}_3 &= \frac{1}{4} \left[1 + M_{zz} + \sqrt{u_+^2 + v_+^2 + w_-^2} \right], \\ \bar{\lambda}_4 &= \frac{1}{4} \left[1 + M_{zz} - \sqrt{u_+^2 + v_+^2 + w_-^2} \right],\end{aligned}$$

comparando com os autovalores da tranposição parcial vemos que são idênticos

Autovalores da matriz $\hat{\rho}^T$	
$\lambda_1^T = \frac{1}{4}$	$\left[1 - M_{zz} + \sqrt{u_-^2 + v_-^2 + w_+^2} \right],$
$\lambda_2^T = \frac{1}{4}$	$\left[1 - M_{zz} - \sqrt{u_-^2 + v_-^2 + w_+^2} \right],$
$\lambda_3^T = \frac{1}{4}$	$\left[1 + M_{zz} + \sqrt{u_+^2 + v_+^2 + w_-^2} \right],$
$\lambda_4^T = \frac{1}{4}$	$\left[1 + M_{zz} - \sqrt{u_+^2 + v_+^2 + w_-^2} \right].$

Assim temos que os autovalores são invariantes sob tais transformações.

$\bar{\lambda}_1 = \lambda_1^T,$
$\bar{\lambda}_2 = \lambda_2^T,$
$\bar{\lambda}_3 = \lambda_3^T,$
$\bar{\lambda}_4 = \lambda_4^T.$

Apêndice D

Exemplos calculados passo a passo

D.1 Estado de Werner [15]

Suponhamos o estado descrito por

$$\hat{\rho}_W = \begin{pmatrix} \frac{1-x}{4} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1+x}{4} & -\frac{x}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{x}{2} & \frac{1+x}{4} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-x}{4} \end{pmatrix},$$

teremos três autovalores iguais a $\frac{(1-x)}{4}$ e um igual a $\frac{(3x+1)}{4}$ sendo esses positivos para qualquer $-\frac{1}{3} \leq x \leq 1$.

Vamos analisar o traço de $\hat{\rho}_W^2$ e encontrar para qual intervalo de x ele representa um estado físico:

$$\rho_W^2 = \begin{pmatrix} \left[\frac{1-x}{4}\right]^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \left[\frac{1+x}{4}\right]^2 + \left[-\frac{x}{2}\right]^2 & 2\left[\frac{1+x}{4}\right]\left[-\frac{x}{2}\right] & 0 \\ 0 & 2\left[\frac{1+x}{4}\right]\left[-\frac{x}{2}\right] & \left[\frac{1+x}{4}\right]^2 + \left[-\frac{x}{2}\right]^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \left[\frac{1-x}{4}\right]^2 \end{pmatrix},$$

logo

$$\text{Tr}\hat{\rho}_W^2 = 2\left[\frac{1-x}{4}\right]^2 + 2\left[\frac{1+x}{4}\right]^2 + 2\left[-\frac{x}{2}\right]^2.$$

Para que ele seja um estado físico devemos ter $\text{Tr}\hat{\rho}_W^2 \leq 1$. Vejamos então, para quais

valores de x esse é um estado físico

$$2 \left[\frac{1-x}{4} \right]^2 + 2 \left[\frac{1+x}{4} \right]^2 + 2 \left[-\frac{x}{2} \right]^2 \leq 1$$

$$|x| \leq 1,$$

logo, para que o estado seja físico devemos ter $-1 \leq x \leq 1$.

Fazendo a transposta parcial dessa matriz e diagonalizando teremos três autovalores iguais a $\frac{(1+x)}{4}$ e um igual a $\frac{(1-3x)}{4}$ e esses autovalores serão positivos para qualquer $x \leq 1/3$, ou seja para esses valores teremos uma matriz separável.

Para esse estado encontramos

$$P_{1,z} = 0,$$

$$P_{2,z} = 0,$$

$$M_{xx} = -x,$$

$$M_{yy} = -x,$$

$$M_{xy} = 0,$$

$$M_{yx} = 0,$$

$$M_{zz} = -x.$$

Logo

$$u_+ = \frac{P_{1,z} + P_{2,z}}{2} = 0,$$

$$u_- = \frac{P_{1,z} - P_{2,z}}{2} = 0,$$

$$v_+ = \frac{(M_{xx} + M_{yy})}{2} = -x,$$

$$v_- = \frac{(M_{xx} - M_{yy})}{2} = 0,$$

$$w_+ = \frac{M_{xy} + M_{yx}}{2} = 0,$$

$$w_- = \frac{M_{xy} - M_{yx}}{2} = 0,$$

$$t_+^2 = \frac{(2 - |1 - M_{zz}|)^2}{4} = \frac{(1 + M_{zz})^2}{4} = \frac{(1 - x)^2}{4},$$

$$t_-^2 = \frac{(2 - |1 + M_{zz}|)^2}{4} = \frac{(1 - M_{zz})^2}{4} = \frac{(1 + x)^2}{4}.$$

No caso geral

$$\begin{aligned} \text{Desigualdade 1 : } (s_1^T)^2 &= t_-^2 - (u_-^2 + v_-^2 + w_+^2) \geq 0 \\ (1+x)^2 \geq 0 &\longrightarrow x^2 + 2x + 1 \geq 0, \\ -\infty \leq x &\leq +\infty \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{Desigualdade 2 : } (s_2^T)^2 &= t_+^2 - (u_+^2 + v_+^2 + w_-^2) \geq 0 \\ (1-x)^2 - (4x^2) \geq 0 &\longrightarrow 1 - 2x + x^2 - 4x^2 \geq 0 \\ -3x^2 - 2x + 1 \geq 0 &\longrightarrow 3x^2 + 2x - 1 \leq 0 \\ x = 1/3 \text{ e } x = -1 & \\ x \leq 1/3 & \end{aligned}$$

Logo, o intervalo de separabilidade é $x \leq 1/3$.

D.2 Estado de Peres-Horodecki [6, 7]

Um estado descrito como

$$\hat{\rho}_{PH} = \begin{pmatrix} 1-x & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{x}{2} & -\frac{x}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{x}{2} & \frac{x}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

possui dois autovalores nulos e os demais valendo x e $1-x$, que são positivos para qualquer $0 \leq x \leq 1$.

Vamos analisar o traço de $\hat{\rho}_{PH}^2$ e encontrar para qual intervalo de x esse estado representa um estado físico:

$$\hat{\rho}_{PH}^2 = \begin{pmatrix} [1-x]^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & [-\frac{x}{2}]^2 + [\frac{x}{2}]^2 & 2[\frac{x}{2}][-\frac{x}{2}] & 0 \\ 0 & 2[\frac{x}{2}][-\frac{x}{2}] & [-\frac{x}{2}]^2 + [\frac{x}{2}]^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

logo

$$\text{Tr}\hat{\rho}_{PH}^2 = [1 - x]^2 + 2 \left[-\frac{x}{2}\right]^2 + 2 \left[\frac{x}{2}\right]^2.$$

Para que esse seja um estado físico devemos ter $\text{Tr}\hat{\rho}_{PH}^2 \leq 1$. Vejamos então, para quais valores de x esse é um estado físico

$$\begin{aligned} [1 - x]^2 + 2 \left[-\frac{x}{2}\right]^2 + 2 \left[\frac{x}{2}\right]^2 &\leq 1 \\ x^2 - x &\leq 0 \end{aligned}$$

logo para que o estado seja físico devemos ter $0 \leq x \leq 1$.

Fazendo a transposição parcial e calculando os autovalores, vemos que para esse estado, somente em $x = 0$ teremos um caso separável. Para todos os demais valores de x o estado está emaranhado.

Para esse estado encontramos

$$P_{1,z} = 1 - x,$$

$$P_{2,z} = 1 - x,$$

$$M_{xx} = -x,$$

$$M_{yy} = -x,$$

$$M_{xy} = 0,$$

$$M_{yx} = 0,$$

$$M_{zz} = 1 - 2x.$$

Logo

$$\begin{aligned}
u_+ &= \frac{P_{1,z} + P_{2,z}}{2} = \frac{2 - 2x}{2}, \\
u_- &= \frac{P_{1,z} - P_{2,z}}{2} = 0, \\
v_+ &= \frac{(M_{xx} + M_{yy})}{2} = -x, \\
v_- &= \frac{(M_{xx} - M_{yy})}{2} = 0, \\
w_+ &= \frac{M_{xy} + M_{yx}}{2} = 0, \\
w_- &= \frac{M_{xy} - M_{yx}}{2} = 0, \\
t_+^2 &= \frac{(2 - |2x|)^2}{4} = \frac{(2 - 2x)^2}{4}, \\
t_-^2 &= \frac{(1 - 1 + 2x)^2}{4} = \frac{(2x)^2}{4}.
\end{aligned}$$

No caso geral

$$\begin{aligned}
\text{Desigualdade 1 : } (s_1^T)^2 &= t_-^2 - (u_-^2 + v_-^2 + w_+^2) \geq 0 \\
(2x)^2 \geq 0 &\longrightarrow 4x^2 \geq 0 \\
-\infty \leq x &\leq +\infty
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Desigualdade 2 : } (s_2^T)^2 &= t_+^2 - (u_+^2 + v_+^2 + w_-^2) \geq 0 \\
(2 - 2x)^2 - [(2 - 2x)^2 + (-2x)^2] &\geq 0 \\
4 - 8x + 4x^2 - [4 - 8x + 4x^2 + 4x^2] &\geq 0 \\
-4x^2 &\geq 0 \\
x &= 0
\end{aligned}$$

Como as duas devem ser satisfeitas ao mesmo tempo, teremos que somente em $x = 0$ o estado é separável.

D.3 Estado de Almeida-Davidovich [13, 17, 18, 19]

O operador densidade é escrito como

$$\hat{\rho}_D = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 + |\beta|^2 p^2 & 0 & 0 & |\alpha| |\beta| e^{-i\delta} (1-p) \\ 0 & |\beta|^2 (1-p)p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & |\beta|^2 (1-p)p & 0 \\ |\beta| |\alpha| e^{i\delta} (1-p) & 0 & 0 & |\beta|^2 (1-p)^2 \end{pmatrix},$$

com $0 \leq p \leq 1$. Calculando a expressão da concurrence para esse estado encontraremos

$$C = \max \{0, 2(1-p) |\beta| (|\alpha| - p|\beta|)\}.$$

Dessa expressão, vemos que para $|\beta| \leq |\alpha|$, o emaranhamento desaparece somente quando $p = 1$. Enquanto que para $|\beta| > |\alpha|$ o emaranhamento desaparece para $p = |\alpha/\beta| < 1$, que corresponde a um tempo finito. Esse fenômeno foi chamado de morte súbita do emaranhamento.

Vamos analisar o traço de $\hat{\rho}_D^2$ e encontrar para qual intervalo de x esse estado representa um estado físico:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \hat{\rho}_D^2 &= [|\alpha|^2 + |\beta|^2 p^2]^2 + [|\alpha| |\beta| (1-p)]^2 + 2 [|\beta|^2 (1-p)p]^2 \\ &\quad + [|\beta| |\alpha| (1-p)]^2 + [|\beta|^2 (1-p)^2]^2 \\ &= |\alpha|^4 + |\beta|^2 \{ |\beta|^2 + 2|\alpha|^2 - 4p [1 - (2|\beta|^2 + |\alpha|^2)p + 2|\beta|^2 p^2 - |\beta|^2 p^3] \}. \end{aligned}$$

Ou seja, p deve estar entre 0 e 1.

Para esse estado encontramos

$$\begin{aligned} P_{1,z} &= 2 (|\alpha|^2 + |\beta|^2 p) - 1, \\ P_{2,z} &= 2 (|\alpha|^2 + |\beta|^2 p) - 1, \\ M_{xx} &= 2 |\alpha| |\beta| \cos(\delta) (1-p), \\ M_{yy} &= -2 |\alpha| |\beta| \cos(\delta) (1-p), \\ M_{xy} &= 2 |\beta| |\alpha| \sin(\delta) (1-p), \\ M_{yx} &= 2 |\beta| |\alpha| \sin(\delta) (1-p), \\ M_{zz} &= 1 - 4 |\beta|^2 (1-p)p. \end{aligned}$$

Logo

$$\begin{aligned}
u_+ &= \frac{P_{1,z} + P_{2,z}}{2} = \frac{[4(|\alpha|^2 + |\beta|^2 p) - 2]}{2}, \\
u_- &= \frac{P_{1,z} - P_{2,z}}{2} = 0, \\
v_+ &= \frac{(M_{xx} + M_{yy})}{2} = 0, \\
v_- &= \frac{(M_{xx} - M_{yy})}{2} = 2|\alpha||\beta|\cos(\delta)(1-p), \\
w_+ &= \frac{M_{xy} + M_{yx}}{2} = 2|\beta||\alpha|\sin(\delta)(1-p), \\
w_- &= \frac{M_{xy} - M_{yx}}{2} = 0, \\
t_+^2 &= \frac{(1 + M_{zz})^2}{4} = \frac{[2 - 4|\beta|^2(1-p)p]^2}{4}, \\
t_-^2 &= \frac{(1 - M_{zz})^2}{4} = \frac{[4|\beta|^2(1-p)p]^2}{4}.
\end{aligned}$$

No caso do estado Davidovich na morte subita $p = |\alpha/\beta| \leq 1$ não haverá violação uma vez que o estado torna-se separável. No caso geral, para o regime em que

$$\begin{aligned}
\text{Desigualdade 1 : } & (s_1^T)^2 = t_-^2 - (u_-^2 + v_-^2 + w_+^2) \geq 0 \\
& [4|\beta|^2(1-p)p]^2 - \{[4|\alpha||\beta|\cos(\delta)(1-p)]^2 + [4|\beta||\alpha|\sin(\delta)(1-p)]^2\} \geq 0 \\
16|\beta|^4(1-p)^2p^2 - & \{16|\alpha|^2|\beta|^2(1-p)^2\cos^2(\delta) + 16|\alpha|^2|\beta|^2(1-p)^2\sin^2(\delta)\} \geq 0 \\
16|\beta|^4(1-p)^2p^2 - & 16|\alpha|^2|\beta|^2(1-p)^2 \geq 0 \\
16|\beta|^2(1-p)^2(|\beta|^2p^2 - & |\alpha|^2) \geq 0 \\
|\beta|^2p^2 - |\alpha|^2 & \geq 0 \\
-\infty \leq p \leq -\frac{|\alpha|}{|\beta|} \cup & \frac{|\alpha|}{|\beta|} \leq p \leq \infty,
\end{aligned}$$

mas essa desigualdade acima deve valer apenas para o intervalo físico $0 \leq p \leq 1$, isto é a separabilidade ocorre em $\frac{|\alpha|}{|\beta|} \leq p \leq 1$, para $\frac{|\alpha|}{|\beta|} \leq 1$ e o emaranhamento ocorre em $0 \leq p < \frac{|\alpha|}{|\beta|}$

A violação da separabilidade (i.e. emaranhamento) ocorre no intervalo complementar: $0 \leq p < \frac{|\alpha|}{|\beta|}$, portanto o emaranhamento desaparece em $p = \frac{|\alpha|}{|\beta|}$, para $\frac{|\alpha|}{|\beta|} \leq 1$, o que carac-

teriza a morte subita.

$$\begin{aligned}
& \text{Desigualdade 2 : } (s_2^T)^2 = t_+^2 - (u_+^2 + v_+^2 + w_-^2) \geq 0 \\
& 2^2 [1 - 2|\beta|^2(1-p)p]^2 - 2^2 [2(|\alpha|^2 + |\beta|^2 p) - 1]^2 \geq 0 \\
& |2(|\alpha|^2 + |\beta|^2 p) - 1| \leq |1 - 2|\beta|^2(1-p)p| \\
& -|1 - 2|\beta|^2(1-p)p| \leq (2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2 p - 1) \leq |1 - 2|\beta|^2(1-p)p|
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
1^a \text{ Parte: } & -|1 - 2|\beta|^2(1-p)p| \leq (2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2 p - 1) \\
& |1 - 2|\beta|^2(1-p)p| \leq -(2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2 p - 1) \\
(2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2 p - 1) & \leq 1 - 2|\beta|^2(1-p)p \leq -(2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2 p - 1)
\end{aligned}$$

$$\text{Parte 1.1: } 2p - p^2 \leq \frac{2 - 2|\alpha|^2}{2|\beta|^2}$$

$$\text{Parte 1.2: } p^2 \leq \frac{-|\alpha|^2}{|\beta|^2}$$

$$\text{Parte 1.1: } 2p - p^2 \leq \frac{1 - |\alpha|^2}{|\beta|^2}$$

$$\text{Parte 1.2: } p^2 \leq \frac{-|\alpha|^2}{|\beta|^2}$$

$$\text{Parte 1.1: } 2p - p^2 - \frac{1 - |\alpha|^2}{|\beta|^2} \leq 0$$

$$[p - 1][p - 1] \leq 0$$

$$p \leq 1,$$

$$\text{Parte 1.2: } p^2 \leq \frac{-|\alpha|^2}{|\beta|^2}$$

na parte 1.1 $p \leq 1$, não é violada nunca no estado físico $0 \leq p \leq 1$, e na parte 1.2 $p^2 \leq \frac{-|\alpha|^2}{|\beta|^2}$ não vale pois p deve ser real.

$$2^a \text{ Parte: } (2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2 p - 1) \leq |1 - 2|\beta|^2(1-p)p|$$

$$\text{Parte 2.1: } 1 - 2|\beta|^2(1-p)p \geq (2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2 p - 1)$$

$$2p - p^2 \leq -\frac{2|\alpha|^2 - 2}{2|\beta|^2}$$

$$[p - 1][p - 1] \leq 0,$$

$$p \leq 1,$$

novamente $p \leq 1$, não é violada nunca no estado físico $0 \leq p \leq 1$

$$\text{Parte 2.2: } 1 - 2|\beta|^2(1-p)p \leq -(2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2 p - 1)$$

$$p^2 \leq \frac{-|\alpha|^2}{|\beta|^2}$$

e $p^2 \leq \frac{-|\alpha|^2}{|\beta|^2}$ não vale pois p deve ser real. A segunda desigualdade não é violada nunca no caso do Davidovich.

D.4 Estado de Gisin [16]

Para uma matriz densidade $\hat{\rho}_G$

$$\hat{\rho}_G = \begin{pmatrix} \frac{1-x}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & xa^2 & xab & 0 \\ 0 & xab & xb^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1-x}{2} \end{pmatrix},$$

com

$$a^2 + b^2 = 1.$$

Sendo os autovalores

$$\lambda_1 = \frac{1}{2}[x + |x|],$$

$$\lambda_2 = \frac{1}{2}[x - |x|],$$

$$\lambda_3 = \lambda_4 = \frac{1}{2}(1 - x).$$

Vamos analisar o traço de $\hat{\rho}_G^2$ e encontrar para qual intervalo de x esse estado representa um estado físico:

$$\hat{\rho}_G^2 = \begin{pmatrix} \left[\frac{1-x}{2}\right]^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & [xa^2]^2 + [xab]^2 & [xa^2][xab] + [xab][xb^2] & 0 \\ 0 & [xa^2][xab] + [xab][xb^2] & [xa^2]^2 + [xab]^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \left[\frac{1-x}{2}\right]^2 \end{pmatrix},$$

logo

$$\text{Tr}\hat{\rho}_G^2 = 2 \left[\frac{1-x}{2}\right]^2 + 2 [xa^2]^2 + 2 [xab]^2.$$

Para que esse seja um estado físico devemos ter $\text{Tr}\hat{\rho}_G^2 \leq 1$. Vejamos então, para quais valores de x esse é um estado físico

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} [1-x]^2 + 2x^2a^4 + 2x^2a^2b^2 &\leq 1 \\ x^2 \left(\frac{1}{2} + 2a^4 + 2a^2b^2 \right) - x - \frac{1}{2} &\leq 0 \\ x &= \frac{1 \pm \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2} \\ \left(x - \frac{1 + \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2} \right) \left(x - \frac{1 - \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2} \right) &\leq 0 \\ \text{ou } \left(x - \frac{1 + \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2} \right) \geq 0 \text{ e } \left(x - \frac{1 - \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2} \right) &\leq 0 \text{ ou} \\ \left(x - \frac{1 + \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2} \right) \leq 0 \text{ e } \left(x - \frac{1 - \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2} \right) &\geq 0, \end{aligned}$$

logo para que o estado seja físico devemos ter

$$\text{ou } x \geq \frac{1 + \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2} \text{ e } x \leq \frac{1 - \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2},$$

como não existe intersecção entre esses intervalos, esse será o intervalo de validade

$$\text{ou } \frac{1 + \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2} \geq x \geq \frac{1 - \sqrt{2 + 4a^2}}{1 + 4a^2}.$$

Fazendo a transposição parcial e calculando os autovalores vemos que para esse estado

$$\hat{\rho}_G^T = \begin{pmatrix} \frac{1-x}{2} & 0 & 0 & xab \\ 0 & xa^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & xb^2 & 0 \\ xab & 0 & 0 & \frac{1-x}{2} \end{pmatrix},$$

com os seguintes autovalores

$$\begin{aligned}\lambda_1^T &= \frac{1}{2}(x + |x|), \\ \lambda_2^T &= \frac{1}{2}(x - |x|), \\ \lambda_3^T &= \frac{1}{2}\left(a + d + \sqrt{a^2 - 2ad + d^2 + 4|w|^2}\right), \\ \lambda_3^T &= \frac{1}{2}\left(a + d - \sqrt{a^2 - 2ad + d^2 + 4|w|^2}\right),\end{aligned}$$

teremos caso de emaranhamento para $x > (1 + 2|ab|)^{-1}$.

Para esse estado encontramos

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix} P_{1,x} \\ P_{1,y} \\ P_{1,z} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2 \operatorname{Re}(\rho_{13} + \rho_{24}) \\ -2 \operatorname{Im}(\rho_{13} + \rho_{24}) \\ 2(\rho_{11} + \rho_{22}) - 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2xa^2 - x \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} P_{2,x} \\ P_{2,y} \\ P_{2,z} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2 \operatorname{Re}(\rho_{12} + \rho_{34}) \\ -2 \operatorname{Im}(\rho_{12} + \rho_{34}) \\ 2(\rho_{11} + \rho_{33}) - 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2xb^2 - x \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} M_{xx} & M_{xy} & M_{xz} \\ M_{yx} & M_{yy} & M_{yz} \\ M_{zx} & M_{zy} & M_{zz} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2xab & 0 & 0 \\ 0 & 2xab & 0 \\ 0 & 0 & 1 - 2x \end{pmatrix},\end{aligned}$$

o que nos leva a

$$\begin{aligned}P_{1,z} &= 2xa^2 - x, \\ P_{2,z} &= 2xb^2 - x, \\ M_{xx} &= 2xab, \\ M_{yy} &= 2xab, \\ M_{xy} &= 0, \\ M_{yx} &= 0, \\ M_{zz} &= 1 - 2x.\end{aligned}$$

Logo

$$\begin{aligned}
u_+ &= \frac{P_{1,z} + P_{2,z}}{2} = x(a^2 + b^2 - 1) = 0, \\
u_- &= \frac{P_{1,z} - P_{2,z}}{2} = x(a^2 - b^2), \\
v_+ &= \frac{(M_{xx} + M_{yy})}{2} = 2xab, \\
v_- &= \frac{(M_{xx} - M_{yy})}{2} = 0, \\
w_+ &= \frac{M_{xy} + M_{yx}}{2} = 0, \\
w_- &= \frac{M_{xy} - M_{yx}}{2} = 0, \\
t_+^2 &= \frac{(1 + M_{zz})^2}{4} = \frac{(2 - 2x)^2}{4}, \\
t_-^2 &= \frac{(1 - M_{zz})^2}{4} = \frac{(2x)^2}{4}.
\end{aligned}$$

Vamos calcular as desigualdades. Para o caso geral

$$\begin{aligned}
\text{Desigualdade 1 : } (s_1^T)^2 &= t_-^2 - (u_-^2 + v_-^2 + w_+^2) \geq 0 \\
(2x)^2 - [2x(a^2 - b^2)]^2 &\geq 0 \\
4x^2 [1 - (a^2 - b^2)^2] &\geq 0 \\
4x^2 [a^2 - a^4] &\geq 0 \\
-\infty \leq x &\leq +\infty
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Desigualdade 2 : } (s_2^T)^2 &= t_+^2 - (u_+^2 + v_+^2 + w_-^2) \geq 0 \\
(2 - 2x)^2 - (4xab)^2 &\geq 0 \\
4[x^2(1 - 4|ab|^2) - 2x + 1] &= 0 \\
\text{raízes: } x &= \frac{1}{2|ab| + 1} \text{ e } x = -\frac{1}{2|ab| - 1} \\
\left(x - \frac{1}{2|ab| + 1}\right) \left(x + \frac{1}{2|ab| - 1}\right) &\geq 0 \\
\text{ou } \left(x - \frac{1}{2|ab| + 1}\right) &\geq 0 \text{ e } \left(x + \frac{1}{2|ab| - 1}\right) \geq 0 \text{ ou} \\
\left(x - \frac{1}{2|ab| + 1}\right) &\leq 0 \text{ e } \left(x + \frac{1}{2|ab| - 1}\right) \leq 0
\end{aligned}$$

$$\text{ou } x \geq \frac{1}{2|ab|+1} \text{ e } x \geq -\frac{1}{2|ab|-1} \text{ ou}$$

$$x \leq \frac{1}{2|ab|+1} \text{ e } x \leq -\frac{1}{2|ab|-1}$$

Olhando o primeiro conjunto de desigualdades, vemos que ambas $x \geq \frac{1}{2|ab|+1}$ e $x \geq -\frac{1}{2|ab|-1}$ são satisfeitas ao mesmo tempo quando:

$$x \geq \frac{1}{2|ab|+1}$$

que é o intervalo de separabilidade. Analizando o segundo conjunto de desigualdades $x \leq \frac{1}{2|ab|+1}$ e $x \leq -\frac{1}{2|ab|-1}$ vemos que:

$$x \leq \frac{1}{2|ab|+1} \text{ e } x \leq -\frac{1}{2|ab|-1}$$

valem simultaneamente. O que nos deixa como intervalo de separabilidade apenas $x \leq \frac{1}{2|ab|+1}$.

D.5 Estado de Das-Agrawal [23]

Dada a matriz

$$\rho' = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} a(t) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(t) & z(t) \exp(i\chi) & 0 \\ 0 & w(t) \exp(-i\chi) & c(t) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d(t) \end{pmatrix}.$$

teremos que os coeficientes são no tempo $t = 0$

$$a(0) = p,$$

$$b(0) = 1,$$

$$c(0) = 1,$$

$$d(0) = 1 - p,$$

$$z(0) = 1$$

$$w(0) = \exp(2i\chi) \{ \cos^2(\chi) - \sin^2(\chi) - 2i \sin(\chi) \cos(\chi) \},$$

para a evolução temporal consideramos

$$\begin{aligned}
a(t) &= p \exp(2\gamma t), \\
b(t) &= \exp(-\gamma t) [1 - \sin(\chi) \sin(2\nu t) - p \exp(-\gamma t) + \exp(2\gamma t) p], \\
c(t) &= \exp(-\gamma t) \{1 + \sin(\chi) \sin(2\nu t) + p[1 - \exp(-\gamma t)]\}, \\
d(t) &= p \exp(-2\gamma t) - 2 \exp(-\gamma t) [1 + p] + 3, \\
z(t) &= \exp(-\gamma t) \{ \cos^2(\chi) + \sin^2(\chi) \cos(2\nu t) + i \sin(\chi) \cos(\chi) [\cos(2\nu t) - 1] \}, \\
w(t) &= \exp(-\gamma t) \exp(2i\chi) \{ \cos^2(\chi) - \sin^2(\chi) \cos(2\nu t) - i \sin(\chi) \cos(\chi) [\cos(2\nu t) + 1] \}.
\end{aligned}$$

Calculando os VPs e os elementos de MC

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} P_{1,x} \\ P_{1,y} \\ P_{1,z} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2(a(t) + b(t)) - 1 \end{pmatrix}, \\
\begin{pmatrix} P_{2,x} \\ P_{2,y} \\ P_{2,z} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2(a(t) + c(t)) - 1 \end{pmatrix}, \\
\begin{pmatrix} M_{xx} & M_{xy} & M_{xz} \\ M_{yx} & M_{yy} & M_{yz} \\ M_{zx} & M_{zy} & M_{zz} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 2z(t) \cos(\chi) & 2z(t) \sin(\chi) & 0 \\ -2w(t) \sin(\chi) & 2z(t) \cos(\chi) & 0 \\ 0 & 0 & 1 - 2(b(t) + c(t)) \end{pmatrix},
\end{aligned}$$

$$P_{1,z} = 2(a(t) + b(t)) - 1,$$

$$P_{2,z} = 2(a(t) + c(t)) - 1,$$

$$M_{xx} = 2z(t) \cos(\chi),$$

$$M_{yy} = 2z(t) \cos(\chi),$$

$$M_{xy} = 2z(t) \sin(\chi),$$

$$M_{yx} = -2w(t) \sin(\chi),$$

$$M_{zz} = 1 - 2(b(t) + c(t)).$$

Logo

$$\begin{aligned}
u_+ &= \frac{P_{1,z} + P_{2,z}}{2} = \frac{4a(t) + 2b(t) + 2c(t) - 2}{2}, \\
u_- &= \frac{P_{1,z} - P_{2,z}}{2} = \frac{2b(t) - 2c(t)}{2}, \\
v_+ &= \frac{(M_{xx} + M_{yy})}{2} = 2z(t) \cos(\chi), \\
v_- &= \frac{(M_{xx} - M_{yy})}{2} = 0, \\
w_+ &= \frac{M_{xy} + M_{yx}}{2} = \frac{[z(t) - w(t)] 2 \sin(\chi)}{2}, \\
w_- &= \frac{M_{xy} - M_{yx}}{2} = \frac{[z(t) + w(t)] 2 \sin(\chi)}{2}, \\
t_+^2 &= \frac{(1 + M_{zz})^2}{4} = \frac{(2 - 2(b(t) + c(t)))^2}{4}, \\
t_-^2 &= \frac{(1 - M_{zz})^2}{4} = \frac{(2(b(t) + c(t)))^2}{4}.
\end{aligned}$$

As desigualdades ficam escritas como

$$\begin{aligned}
\text{Desigualdade 1 : } (s_1^T)^2 &= t_-^2 - (u_-^2 + v_-^2 + w_+^2) \geq 0, \\
4((b(t) + c(t)))^2 - 4[[b(t) - c(t)]^2 + [[z(t) - w(t)] \sin(\chi)]^2] &\geq 0, \\
[b(t) + c(t)]^2 - [[b(t) - c(t)]^2 + [[z(t) - w(t)] \sin(\chi)]^2] &\geq 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{Desigualdade 2 : } (s_2^T)^2 &= t_+^2 - (u_+^2 + v_+^2 + w_-^2) \geq 0, \\
&[1 - (b(t) + c(t))]^2 + \\
&- [[2a(t) + b(t) + c(t) - 1]^2 + [2z(t) \cos(\chi)]^2 + [[z(t) + w(t)] \sin(\chi)]^2] \geq 0, \\
&[1 - (b(t) + c(t))]^2 + \\
&- [[2a(t) + b(t) + c(t) - 1]^2 + [2z(t) \cos(\chi)]^2 + [(z(t) + w(t)) \sin(\chi)]^2] \geq 0.
\end{aligned}$$

Os intervalos de separabilidade serão cíclicos.

Apêndice E

Considerações sobre a Métrica de Minkowski.

A transformação de Lorentz em conjunto com as rotações em um espaço real tridimensional \mathcal{R}^3 formam um grupo homogêneo. De fato a transformação de Lorentz é construída tal que a forma quadrática $c^2t^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$ permaneça invariante. Sendo c é a velocidade da luz, t o tempo e x_i são as coordenadas espaciais. Quando a forma quadrática é zero $c^2t^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 = 0$ isto implica que no tempo t a luz viaja uma distância $\left(\sum_i x_i^2\right)^{\frac{1}{2}}$ a velocidade c . A forma quadrática portanto define uma distância quadrática no hiperespaço

$$s^2 = x_0^2 - \vec{x}^2;$$

com $x_0^2 = c^2t^2$. e $\vec{x}^2 = (x_1^2, x_2^2, x_3^2)$ esse espaço-tempo quadrimensional cuja métrica é definida a partir de $x_0^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$ é conhecido como espaço de Minkowski, cujo tensor métrico é dado por

$$g_{\mu\nu} = g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

logo para $x^\mu = (x_0, \vec{x})$ teremos $x_\mu = g_{\mu\nu}x^\nu = (x_0, -\vec{x})$. Portanto,

$$x^\mu g_{\mu\nu} x^\nu = x_0^2 - \vec{x}^2.$$

Note que para que a distância s^2 seja positiva $x_0^2 > \vec{x}^2$ em outras palavras, o espaço máximo percorrido não pode ser maior do que aquele percorrido pela luz com velocidade c no mesmo intervalo de tempo t . Portanto, qualquer velocidade v não deve ultrapassar c no espaço-tempo com $s^2 \geq 0$. Esses eventos caracterizados por distâncias positivas no espaço-tempo são ditos do tipo tempo ou *timelike*. Distâncias negativas por sua vez, caracterizam eventos em que $\vec{x}^2 > x_0^2$, definidos como eventos do tipo espaço ou *spacelike*. A realidade física que conhecemos é dita *timelike*.

A partir dessa definição Minkowski idealizou uma projeção desse hiperespaço no espaço tridimensional em que uma superfície cônica delimita a fronteira entre os eventos *timelike* (interiores ao cone) e *spacelike* (exteriores ao cone). A essa representação damos o nome de cone de eventos e sua projeção no plano t vs. \vec{x} é conhecida como diagrama de Minkowski.

Apêndice F

Cálculo da *Concurrence*

F.1 Cálculo Geral

A *concurrence* de Wootters é definida a partir da transformação

$$\tilde{\rho} = (\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y) \hat{\rho}^* (\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y). \quad (\text{F.1})$$

Tomando

$$\hat{\rho}_{12} = \frac{1}{4} \left[1_1 \otimes 1_2 + 1_1 \otimes \vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2 + \vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1 \otimes 1_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{M}_{1,2} \cdot \vec{\sigma}_2 \right],$$

logo

$$\hat{\rho}^* = \frac{1}{4} \left[1_1 \otimes 1_2 + 1_1 \otimes \vec{P}_2^* \cdot \vec{\sigma}_2^* + \vec{P}_1^* \cdot \vec{\sigma}_1^* \otimes 1_2 + \vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftrightarrow{M}_{1,2}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* \right],$$

$$\vec{P}^* \cdot \vec{\sigma}^* = P_x^* \hat{\sigma}_x - P_y^* \hat{\sigma}_y + P_z^* \hat{\sigma}_z$$

pois $\hat{\sigma}_x^* = \hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y^* = -\hat{\sigma}_y$ e $\hat{\sigma}_z^* = \hat{\sigma}_z$.

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^* &= \frac{1}{4} \left[1_1 \otimes 1_2 + 1_1 \otimes (P_{2,x}^* \hat{\sigma}_{2,x} - P_{2,y}^* \hat{\sigma}_{2,y} + P_{2,z}^* \hat{\sigma}_{2,z}) \right] + \\ &\quad + \frac{1}{4} \left[(P_{1,x}^* \hat{\sigma}_{1,x} - P_{1,y}^* \hat{\sigma}_{1,y} + P_{1,z}^* \hat{\sigma}_{1,z}) \otimes 1_2 + \vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftrightarrow{M}_{1,2}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* \right], \end{aligned}$$

usando a Eq. (F.1)

$$\tilde{\rho} = (\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y) \hat{\rho}^* (\hat{\sigma}_y \otimes \hat{\sigma}_y),$$

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} &= \frac{1}{4} [\hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes (P_{x,2}^* \hat{\sigma}_{y,2} \hat{\sigma}_{x,2} \hat{\sigma}_{y,2} - P_{y,2}^* \hat{\sigma}_{y,2} \hat{\sigma}_{y,2} \hat{\sigma}_{y,2} + P_{z,2}^* \hat{\sigma}_{y,2} \hat{\sigma}_{z,2} \hat{\sigma}_{y,2}) + \\ &+ (P_{x,1}^* \hat{\sigma}_{y,1} \hat{\sigma}_{x,1} \hat{\sigma}_{y,1} - P_{y,1}^* \hat{\sigma}_{y,1} \hat{\sigma}_{y,1} \hat{\sigma}_{y,1} + P_{z,1}^* \hat{\sigma}_{y,1} \hat{\sigma}_{z,1} \hat{\sigma}_{y,1}) \otimes \hat{1}_2] + \\ &+ \frac{1}{4} [(\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2}) \vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftarrow{M}_{1,2}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* (\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2})] \end{aligned}$$

mas como $\hat{\sigma}_\alpha^2 = \hat{1}$ e

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y &= -\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x = i \hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z &= -\hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y = i \hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_x &= -\hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_z = -i \hat{\sigma}_y, \end{aligned}$$

logo

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y &= i \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z = -\hat{\sigma}_x, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_z \hat{\sigma}_y &= i \hat{\sigma}_x \hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_z, \\ \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_y &= \hat{1} \hat{\sigma}_y = \hat{\sigma}_y. \end{aligned}$$

Portanto

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} &= \frac{1}{4} [\hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes (-P_{x,2}^* \hat{\sigma}_{x,2} - P_{y,2}^* \hat{\sigma}_{y,2} - P_{z,2}^* \hat{\sigma}_{z,2}) + \\ &+ (-P_{x,1}^* \hat{\sigma}_{x,1} - P_{y,1}^* \hat{\sigma}_{y,1} - P_{z,1}^* \hat{\sigma}_{z,1}) \otimes \hat{1}_2] + \\ &+ \frac{1}{4} [(\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2}) \vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftarrow{M}_{1,2}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* (\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2})], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\rho} &= \frac{1}{4} [\hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes (-\vec{P}_2^* \cdot \vec{\sigma}_2) + (-\vec{P}_1^* \cdot \vec{\sigma}_1) \otimes \hat{1}_2] + \\ &+ \frac{1}{4} [(\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2}) \vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftarrow{M}_{1,2}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* (\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2})]. \end{aligned}$$

Analizando o termo $\left[(\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2}) \vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftarrow{M}_{1,2}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* (\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2}) \right]$, primeiramente temos que

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_2 = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \hat{\sigma}_{\alpha,1} M_{\alpha\beta} \hat{\sigma}_{\beta,2},$$

com $\alpha, \beta = x, y$ ou z , ou ainda $\alpha, \beta = 1, 2$ ou 3 , (com 1 indicando x , 2 indicando y e 3 indicando z).

$$\vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftrightarrow{M}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (-1)^{\alpha+\beta+2} \hat{\sigma}_{\alpha,1} M_{\alpha\beta}^* \hat{\sigma}_{\beta,2},$$

mas $(-1)^2 = 1$ então

$$\vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftrightarrow{M}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (-1)^{\alpha+\beta} \hat{\sigma}_{\alpha,1} M_{\alpha\beta}^* \hat{\sigma}_{\beta,2}.$$

Aplicando $(\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2})$ em ambos os lados, chegamos a

$$\begin{aligned} (\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2}) \vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftrightarrow{M}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* (\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2}) &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (-1)^{\alpha+\beta} \hat{\sigma}_{y,1} \hat{\sigma}_{y,2} \hat{\sigma}_{\alpha,1} M_{\alpha\beta}^* \hat{\sigma}_{\beta,2} \hat{\sigma}_{y,1} \hat{\sigma}_{y,2} \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (-1)^{\alpha+\beta} \hat{\sigma}_{y,1} \hat{\sigma}_{\alpha,1} \hat{\sigma}_{y,1} M_{\alpha\beta}^* \hat{\sigma}_{y,2} \hat{\sigma}_{\beta,2} \hat{\sigma}_{y,2}. \end{aligned}$$

Portanto

$$\hat{\sigma}_y \hat{\sigma}_{\alpha} \hat{\sigma}_y = (-1)^{\alpha} \hat{\sigma}_{\alpha}.$$

$$\begin{aligned} (\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2}) \vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftrightarrow{M}^* \cdot \vec{\sigma}_2^* (\hat{\sigma}_{y,1} \otimes \hat{\sigma}_{y,2}) &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (-1)^{\alpha+\beta} (-1)^{\alpha} \hat{\sigma}_{\alpha,1} M_{\alpha\beta}^* (-1)^{\beta} \hat{\sigma}_{\beta,2} \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} (-1)^{2(\alpha+\beta)} \hat{\sigma}_{\alpha,1} M_{\alpha\beta}^* \hat{\sigma}_{\beta,2} \\ &= \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \hat{\sigma}_{\alpha,1} M_{\alpha\beta}^* \hat{\sigma}_{\beta,2} \\ &= \vec{\sigma}_1^* \cdot \overleftrightarrow{M}^* \cdot \vec{\sigma}_2^*. \end{aligned}$$

Como $\overleftrightarrow{M}^* = \overleftrightarrow{M}$, $\vec{P}_2^* = \vec{P}_2$ e $\vec{P}_1^* = \vec{P}_1$

Portanto:

$$\tilde{\rho} = \frac{1}{4} \left[\hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \hat{1}_1 \otimes \left(-\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2 \right) + \left(-\vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1 \right) \otimes \hat{1}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_2 \right]$$

A única alteração é a mudança de sinal das polarizações das partículas.

Podemos assim separar a $\hat{\rho}$ em duas partes, uma delas sem polarização, invariante e a outra apenas com os termos referentes à polarização, tal que

$$\hat{\rho} = \hat{\chi}_1 + \hat{\chi}_2,$$

$$\tilde{\rho} = \hat{\chi}_1 - \hat{\chi}_2,$$

com

$$\begin{aligned}\hat{\chi}_1 &= \frac{1}{4} \left[\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{M}} \cdot \vec{\sigma}_2 \right], \\ \hat{\chi}_2 &= \frac{1}{4} \left[\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \left(\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2 \right) + \left(\vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1 \right) \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 \right],\end{aligned}$$

note também que

$$\begin{aligned}\text{Tr}_1(\hat{\chi}_1) &= \frac{1}{2} \hat{\mathbf{1}}_2; \quad \text{Tr}_2(\hat{\chi}_1) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{1}}_1 \text{ e } \text{Tr}_{12}(\hat{\chi}_1) = 1, \\ \text{Tr}_1(\hat{\chi}_2) &= \frac{1}{2} \vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2; \quad \text{Tr}_2(\hat{\chi}_2) = \frac{1}{2} \vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1 \text{ e } \text{Tr}_{12}(\hat{\chi}_2) = 0.\end{aligned}$$

Fazendo agora a multiplicação

$$\tilde{\rho}\hat{\rho} = (\hat{\chi}_1 - \hat{\chi}_2)(\hat{\chi}_1 + \hat{\chi}_2) = \hat{\chi}_1^2 - \hat{\chi}_2^2 + [\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2], \quad (\text{F.2})$$

$$\hat{\rho}\tilde{\rho} = (\hat{\chi}_1 + \hat{\chi}_2)(\hat{\chi}_1 - \hat{\chi}_2) = \hat{\chi}_1^2 - \hat{\chi}_2^2 - [\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2], \quad (\text{F.3})$$

assim

$$[\hat{\rho}, \tilde{\rho}] = -2[\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2].$$

Calculando termo a termo teremos

$$\begin{aligned}\hat{\chi}_1^2 &= \frac{1}{4^2} \left[\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{M}} \cdot \vec{\sigma}_2 \right] \left[\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{M}} \cdot \vec{\sigma}_2 \right] \\ &= \frac{1}{4^2} \left[\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot 2\overleftrightarrow{\mathbf{M}} \cdot \vec{\sigma}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{M}} \cdot \vec{\sigma}_2 \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{M}} \cdot \vec{\sigma}_2 \right],\end{aligned}$$

em que $\vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{M}} \cdot \vec{\sigma}_2 \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{M}} \cdot \vec{\sigma}_2 = \sum_{ijkl} \sigma_{1i} \sigma_{2j} \sigma_{1k} \sigma_{2l} M_{ij} M_{kl}$ mas $\sigma_i \sigma_k = i \varepsilon_{ikm} \sigma_m$ e $\sigma_j \sigma_l = i \varepsilon_{jln} \sigma_n$. Assim o termo fica $\sum_{m,n} \underbrace{\sum_{ijkl} -\varepsilon_{ikm} \varepsilon_{jln} M_{ij} M_{kl} \sigma_{1m} \sigma_{2n}}_{\Lambda_{mn}} = \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{\Lambda}} \cdot \vec{\sigma}_2$, logo

$$\begin{aligned}\hat{\chi}_1^2 &= \frac{1}{4^2} \left[\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot 2\overleftrightarrow{\mathbf{M}} \cdot \vec{\sigma}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{\Lambda}} \cdot \vec{\sigma}_2 \right] \\ \hat{\chi}_1^2 &= \frac{1}{4^2} \left[\hat{\mathbf{1}}_1 \otimes \hat{\mathbf{1}}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \underbrace{\left(2\overleftrightarrow{\mathbf{M}} + \overleftrightarrow{\mathbf{\Lambda}} \right)}_{\text{Novo objeto de correlação}} \cdot \vec{\sigma}_2 \right].\end{aligned}$$

O segundo termo

$$\begin{aligned}
\hat{\chi}_2^2 &= \frac{1}{4^2} \left[\hat{1}_1 \otimes (\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2) + (\vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1) \otimes \hat{1}_2 \right] \left[\hat{1}_1 \otimes (\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2) + (\vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1) \otimes \hat{1}_2 \right] \\
&= \frac{1}{4^2} \left[(\vec{P}_1^2 + \vec{P}_2^2) \hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \underbrace{\vec{\sigma}_1 \cdot 2\overleftarrow{P}_1 \vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2}_{\text{separável}} \right],
\end{aligned}$$

pois $\vec{A} \cdot \vec{\sigma} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} = \vec{A} \cdot \vec{B} \hat{1} + i (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{\sigma}$, assim $\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2 \vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2 = \vec{P}_2^2 \hat{1}_1$

Fazendo

$$\hat{\chi}_1^2 - \hat{\chi}_2^2 = \frac{1}{4^2} \left\{ (1 - \vec{P}_1^2 - \vec{P}_2^2) \hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \left[2 \left(\overleftarrow{M} - \overleftarrow{P}_1 \vec{P}_2 \right) + \overleftarrow{\Lambda} \right] \cdot \vec{\sigma}_2 \right\}.$$

Falta ainda calcular os comutadores da expressão Eq.(F.2) e Eq.(F.3)

$$[\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2] = \hat{\chi}_1 \hat{\chi}_2 - \hat{\chi}_2 \hat{\chi}_1.$$

Termo a termo

$$\begin{aligned}
\hat{\chi}_1 \hat{\chi}_2 &= \frac{1}{4^2} \left[\hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_2 \right] \left[\hat{1}_1 \otimes (\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2) + (\vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1) \otimes \hat{1}_2 \right] \\
&= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_2 \left[\hat{1}_1 \otimes (\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2) + (\vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1) \otimes \hat{1}_2 \right] \right\},
\end{aligned}$$

que pode ser escrito como

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_2 \left[\hat{1}_1 \otimes (\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2) + (\vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1) \otimes \hat{1}_2 \right] = \sum_{ijk} M_{ij} (\sigma_{1i} P_{2k} \sigma_{2j} \sigma_{2k} + P_{1k} \sigma_{1i} \sigma_{1k} \sigma_{2j}),$$

mas $\sigma_j \sigma_k = i \varepsilon_{jkm} \sigma_m$ e $\sigma_i \sigma_k = i \varepsilon_{ikm} \sigma_m$. Assim,

$$\vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_2 \left[\hat{1}_1 \otimes (\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2) + (\vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1) \otimes \hat{1}_2 \right] = \sum_{ijkm} i M_{ij} (\varepsilon_{jkm} P_{2k} \sigma_{1i} \sigma_{2m} + \varepsilon_{ikm} P_{1k} \sigma_{1m} \sigma_{2j}),$$

$$\hat{\chi}_1 \hat{\chi}_2 = \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + i M_{ij} (\varepsilon_{jkm} P_{2k} \sigma_{1i} \sigma_{2m} + \varepsilon_{ikm} P_{1k} \sigma_{1m} \sigma_{2j}) \right\}.$$

Trocando j por m na primeira soma e i por m na segunda

$$\begin{aligned}
\hat{\chi}_1 \hat{\chi}_2 &= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + i (M_{im} \varepsilon_{mkj} P_{2k} \sigma_{1i} \sigma_{2j} + M_{mj} \varepsilon_{mki} P_{1k} \sigma_{1i} \sigma_{2j}) \right\} \\
&= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + i \sigma_{1i} (M_{im} P_{2k} \varepsilon_{mkj} + \varepsilon_{mki} P_{1k} M_{mj}) \sigma_{2j} \right\} \\
&= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + i \sigma_{1i} \underbrace{(M_{im} P_{2k} \varepsilon_{mkj} + \varepsilon_{imk} P_{1k} M_{mj})}_{\Omega_{ij}} \sigma_{2j} \right\},
\end{aligned}$$

ou seja,

$$\hat{\chi}_1 \hat{\chi}_2 = \frac{1}{4^2} \left(\hat{\chi}_2 + i \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{\Omega} \cdot \vec{\sigma}_2 \right).$$

Analogamente

$$\begin{aligned} \hat{\chi}_2 \hat{\chi}_1 &= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + \left[\hat{1}_1 \otimes \left(\vec{P}_2 \cdot \vec{\sigma}_2 \right) + \left(\vec{P}_1 \cdot \vec{\sigma}_1 \right) \otimes \hat{1}_2 \right] \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{M} \cdot \vec{\sigma}_2 \right\} \\ &= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + M_{ij} P_{2k} \sigma_{1i} \sigma_{2k} \sigma_{2j} + M_{ij} P_{1k} \sigma_{1k} \sigma_{1i} \sigma_{2j} \right\} \\ &= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + i M_{ij} \varepsilon_{kjm} P_{2k} \sigma_{1i} \sigma_{2m} + i M_{ij} \varepsilon_{kim} P_{1k} \sigma_{1m} \sigma_{2j} \right\}. \end{aligned}$$

Trocando j por m na primeira soma e i por m na segunda

$$\begin{aligned} \hat{\chi}_2 \hat{\chi}_1 &= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + i M_{im} \varepsilon_{kmj} P_{2k} \sigma_{1i} \sigma_{2j} + i M_{mj} \varepsilon_{kmi} P_{1k} \sigma_{1i} \sigma_{2j} \right\} \\ &= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + i \sigma_{1i} \left[M_{im} P_{2k} \varepsilon_{kmj} + i M_{mj} P_{1k} \varepsilon_{ikm} \right] \sigma_{2j} \right\}, \end{aligned}$$

trocando $\varepsilon_{kmj} = -\varepsilon_{mkj}$ e $\varepsilon_{ikm} = -\varepsilon_{imk}$

$$\begin{aligned} \hat{\chi}_2 \hat{\chi}_1 &= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + i \sigma_{1i} \left[M_{im} P_{2k} (-\varepsilon_{mkj}) + M_{mj} P_{1k} (-\varepsilon_{imk}) \right] \sigma_{2j} \right\} \\ &= \frac{1}{4^2} \left\{ \hat{\chi}_2 + i \sigma_{1i} \underbrace{\left(-M_{im} P_{2k} \varepsilon_{mkj} - M_{mj} P_{1k} \varepsilon_{imk} \right)}_{-\Omega_{ij}} \sigma_{2j} \right\}. \end{aligned}$$

Portanto,

$$\hat{\chi}_2 \hat{\chi}_1 = \frac{1}{4^2} \left(\hat{\chi}_2 + i \vec{\sigma}_1 \cdot \left(-\overleftarrow{\Omega} \right) \cdot \vec{\sigma}_2 \right).$$

Assim o comutador

$$\begin{aligned} [\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2] &= \hat{\chi}_1 \hat{\chi}_2 - \hat{\chi}_2 \hat{\chi}_1 \\ &= \frac{1}{4^2} \left(\hat{\chi}_2 + i \vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{\Omega} \cdot \vec{\sigma}_2 \right) - \frac{1}{4^2} \left(\hat{\chi}_2 + i \vec{\sigma}_1 \cdot \left(-\overleftarrow{\Omega} \right) \cdot \vec{\sigma}_2 \right), \end{aligned}$$

se escreve

$$\begin{aligned} [\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2] &= \frac{i}{4^2} \left(\vec{\sigma}_1 \cdot 2 \overleftarrow{\Omega} \cdot \vec{\sigma}_2 \right) \\ [\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2] &= \frac{2i}{4^2} \left(\vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{\Omega} \cdot \vec{\sigma}_2 \right). \end{aligned}$$

Concluindo temos que a transformação na matriz densidade para a o cálculo da

concurrence é dada por

$$\begin{aligned}
\tilde{\rho}\hat{\rho} &= \hat{\chi}_1^2 - \hat{\chi}_2^2 + [\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2] \\
&= \frac{1}{4^2} \left\{ \left(1 - \vec{P}_1^2 - \vec{P}_2^2\right) \hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \left[2 \left(\overleftarrow{M} - \overleftarrow{P}_1 \vec{P}_2 \right) + \overleftarrow{\Lambda} \right] \cdot \vec{\sigma}_2 \right\} + \frac{2i}{4^2} \left(\vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{\Omega} \cdot \vec{\sigma}_2 \right) \\
&= \frac{1}{4^2} \left\{ \left(1 - \vec{P}_1^2 - \vec{P}_2^2\right) \hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \left[2 \left(\overleftarrow{M} - \overleftarrow{P}_1 \vec{P}_2 \right) + \overleftarrow{\Lambda} + 2i \overleftarrow{\Omega} \right] \cdot \vec{\sigma}_2 \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}\tilde{\rho} &= \hat{\chi}_1^2 - \hat{\chi}_2^2 - [\hat{\chi}_1, \hat{\chi}_2] \\
&= \frac{1}{4^2} \left\{ \left(1 - \vec{P}_1^2 - \vec{P}_2^2\right) \hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \left[2 \left(\overleftarrow{M} - \overleftarrow{P}_1 \vec{P}_2 \right) + \overleftarrow{\Lambda} \right] \cdot \vec{\sigma}_2 \right\} - \frac{2i}{4^2} \left(\vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{\Omega} \cdot \vec{\sigma}_2 \right) \\
&= \frac{1}{4^2} \left\{ \left(1 - \vec{P}_1^2 - \vec{P}_2^2\right) \hat{1}_1 \otimes \hat{1}_2 + \vec{\sigma}_1 \cdot \left[2 \left(\overleftarrow{M} - \overleftarrow{P}_1 \vec{P}_2 \right) + \overleftarrow{\Lambda} - 2i \overleftarrow{\Omega} \right] \cdot \vec{\sigma}_2 \right\}.
\end{aligned}$$

Assim vemos que

$$[\hat{\rho}, \tilde{\rho}] = -\frac{i}{4} \left(\vec{\sigma}_1 \cdot \overleftarrow{\Omega} \cdot \vec{\sigma}_2 \right).$$

F.2 Cálculo para estados do tipo X

Para uma matriz do tipo X

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

teremos que a concurrence possui uma forma analítica simples

$$C = \max \{0, C_1, C_2\},$$

sendo

$$C_1 = 2 |\rho_{14}| - 2\sqrt{\rho_{22}\rho_{33}}$$

$$C_2 = 2 |\rho_{23}| - 2\sqrt{\rho_{11}\rho_{44}}.$$

Para a matriz

$$\hat{\rho}^T = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} t_+ + u_+ & 0 & 0 & v_+ + iw_- \\ 0 & t_- + u_- & v_- - iw_+ & 0 \\ 0 & v_- + iw_+ & t_- - u_- & 0 \\ v_+ - iw_- & 0 & 0 & t_+ - u_+ \end{pmatrix},$$

teremos

$$C_1 = 2 \left| \frac{v_+ + iw_-}{2} \right| - 2 \sqrt{\left(\frac{t_- + u_-}{2} \right) \left(\frac{t_- - u_-}{2} \right)} = \sqrt{v_+^2 + w_-^2} - \sqrt{t_-^2 - u_-^2},$$

$$C_2 = 2 \left| \frac{v_- - iw_+}{2} \right| - 2 \sqrt{\left(\frac{t_+ + u_+}{2} \right) \left(\frac{t_+ - u_+}{2} \right)} = \sqrt{v_-^2 + w_+^2} - \sqrt{t_+^2 - u_+^2},$$

mas sabemos que $C_1 \geq 0$ e $C_2 \geq 0$, para estados emaranhados, logo

$$\begin{aligned} \sqrt{v_+^2 + w_-^2} \geq \sqrt{t_-^2 - u_-^2} &\quad \rightarrow \quad t_-^2 - (u_-^2 + v_+^2 + w_-^2) \leq 0, \\ \sqrt{v_-^2 + w_+^2} \geq \sqrt{t_+^2 - u_+^2} &\quad \rightarrow \quad t_+^2 - (u_+^2 + v_-^2 + w_+^2) \leq 0. \end{aligned}$$

Que são as desigualdades propostas.

Apêndice G

Considerações sobre os sistemas de spin

G.1 Sobre a homogeneidade dos sistemas de spin

Suponhamos um operador \hat{H} diagonalizável escrito como

$$\hat{H} = J\hat{A} + \Delta\hat{B}.$$

Sendo diagonalizável, o mesmo possui uma base $|n\rangle$ de autovetores, tal que

$$\hat{H}|n\rangle = E_n(J, \Delta)|n\rangle.$$

Isso nos diz que o autovalor do n – ésimos autovetor é uma função dos coeficientes J e Δ . Em alguns casos, quando $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$, o próprio $|n\rangle = |n, J, \Delta\rangle$, porém, por enquanto suporemos J e Δ fixos e portanto $|n\rangle$ não varia.

Suponhamos agora um outro operador

$$\hat{P} = \hat{A} + \frac{\Delta}{J}\hat{B}.$$

Esse operador compartilha com \hat{H} a mesma base de autovetores

$$\hat{P}|n\rangle = \varepsilon_n|n\rangle.$$

Uma vez que \hat{P} depende apenas da razão $\frac{\Delta}{J}$, então ε_n também dependerá somente dessa razão. Assim

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n \left(\frac{\Delta}{J} \right),$$

Mas uma relação entre E_n e ε_n pode ser estabelecida conforme veremos a seguir.

Da definição de \hat{H} e \hat{P} temos

$$\hat{H} = J\hat{P},$$

$$\begin{aligned} \hat{H} |n\rangle &= J\hat{P} |n\rangle \\ E_n(J, \Delta) |n\rangle &= J\varepsilon_n \left(\frac{\Delta}{J} \right) |n\rangle, \end{aligned}$$

em que

$$E_n(J, \Delta) = J\varepsilon_n \left(\frac{\Delta}{J} \right).$$

Fazendo $J = 1$ e $\Delta = x$

$$E_n(1, x) = \varepsilon_n(x),$$

assim

$$E_n(J, \Delta) = JE_n \left(1, \frac{\Delta}{J} \right). \quad (\text{G.1})$$

Dizemos então que a função $E_n(J, \Delta)$ é uma função homogênea. O que, na prática, significa dizer que \hat{H} e \hat{P} possuem os mesmos auto estados, e que os autovalores de \hat{H} são também autovalores de \hat{P} multiplicados por J .

Na maioria dos problemas estamos interessados no operador matricial dado por

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \exp \left(-\frac{\hat{H}}{kT} \right), \quad (\text{G.2})$$

utilizando a igualdade

$$\hat{1} = \sum_n |n\rangle \langle n| \quad (\text{G.3})$$

e multiplicando Eq.(G.2) por Eq.(G.3), temos

$$\hat{\rho} \cdot \hat{1} = \frac{1}{Z} \exp \left(-\frac{\hat{H}}{kT} \right) \cdot \sum_n |n\rangle \langle n|,$$

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}(J, \Delta, T) &= \frac{1}{Z} \sum_n \exp\left(-\frac{\hat{H}}{kT}\right) |n\rangle \langle n| \\
&= \frac{1}{Z} \sum_n \exp\left(-\frac{E_n(J, \Delta)}{kT}\right) |n\rangle \langle n|.
\end{aligned}$$

Porém, pela propriedade (G.1),

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}(J, \Delta, T) &= \frac{1}{Z} \sum_n \exp\left(-\frac{JE_n\left(1, \frac{\Delta}{J}\right)}{kT}\right) |n\rangle \langle n| \\
&= \frac{1}{Z} \sum_n \exp\left(-\frac{E_n\left(1, \frac{\Delta}{J}\right)}{k\left(\frac{T}{J}\right)}\right) |n\rangle \langle n|,
\end{aligned}$$

logo

$$\hat{\rho}(J, \Delta, T) = \hat{\rho}\left(1, \frac{\Delta}{J}, \frac{T}{J}\right). \quad (\text{G.4})$$

Ou seja, o estado do sistema depende apenas das razões $\frac{\Delta}{J}$ e $\frac{T}{J}$. Geometricamente, a relação indica que, dado um ponto (J, Δ, T) no espaço tridimensional, todos os pontos localizados sobre a reta que liga Esse ponto à origem, apresentam o mesmo estado, ele é constante ao longo da reta. Assim, podemos escolher um plano e mapear nele todos os pontos do espaço, transformando um problema tridimensional em um problema bidimensional.

Fazemos, então, $\frac{\Delta}{J} = \Delta$ e $\frac{T}{J} = T$ e resolvemos o sistema descrito pelo hamiltoniano $\hat{H}(\Delta) = \hat{A} + \Delta\hat{B}$ em um ambiente com temperatura T , em vez de resolver $\hat{H} = J\hat{A} + \Delta\hat{B}$. Eliminamos uma variável, através desta parametrização.

G.2 Estado Térmico XXX com campo na direção \mathbf{Z}

O hamiltoniano que descreve o sistema XXX com campo externo na direção \hat{k} é o hamiltoniano de Heisenberg isotrópico

$$\hat{H} = -\omega_0\hat{\sigma}_{1,z} - \omega_0\hat{\sigma}_{2,z} + J\hat{\sigma}_1 \cdot \hat{\sigma}_2,$$

na forma matricial

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -2\omega_0 + J & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -J & 2J & 0 \\ 0 & 2J & -J & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2\omega_0 + J \end{pmatrix}.$$

Os auto estados desse hamiltoniano total e suas respectivas auto energias são

Auto estados de \hat{H}	Auto energias
$ \varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle + \phi^-\rangle) = \uparrow\uparrow\rangle,$	$E_{\uparrow\uparrow} = -2\omega_0 + J,$
$ \varphi_2\rangle = \psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle),$	$E_{\psi^-} = -3J,$
$ \varphi_3\rangle = \psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle),$	$E_{\psi^+} = J,$
$ \varphi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle - \phi^-\rangle) = \downarrow\downarrow\rangle,$	$E_{\downarrow\downarrow} = 2\omega_0 + J.$

No ponto crítico, portanto,

$$\begin{aligned} E_{\psi^-} &= E_{\uparrow\uparrow} \\ -3J &= -2\omega_0 + J \\ \frac{J}{\omega_0} &= \frac{1}{2}, \end{aligned}$$

Escrevendo o operador densidade de estados, na base de spin, para Esse sistema em equilíbrio térmico $\hat{\rho} = (1/Z) \exp(-\beta\hat{H})$, $\beta = 1/kT$ com k a constante de Boltzman , T a temperatura, e Z é a função de partição $Z = \text{Tr} [\exp(-\beta\hat{H})]$

$$\hat{\rho}_s = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \exp\left(-\frac{2\omega_0+J}{kT}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) + \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) - \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) - \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) + \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(-\frac{2\omega_0+J}{kT}\right) \end{pmatrix},$$

com

$$Z = 2 \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) \left[1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right) \right].$$

Reescrevendo na base computacional, isto é, invertendo os qubits de ambas as partículas teremos a inversão de $\rho_{11} \leftrightarrow \rho_{44}$

$$\hat{\rho}_c = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \exp\left(-\frac{2\omega_0+J}{kT}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) + \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) - \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) - \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{J}{kT}\right) + \exp\left(\frac{3J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(\frac{2\omega_0-J}{kT}\right) \end{pmatrix},$$

o traço permanece invariante. Calculando os VPs e a MC teremos

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_1 &= \begin{pmatrix} P_{1,x} & P_{1,y} & P_{1,z} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 2(\rho_{11} + \rho_{22}) - 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1 + \exp(-\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})}{1 + \cosh(\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})} - 1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\mathbb{P}_2 &= \begin{pmatrix} P_{2,x} & P_{2,y} & P_{2,z} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{1 + \exp(-\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})}{1 + \cosh(\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})} - 1 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

Para a matriz Eq.(3.5) teremos

$$\mathbb{M}_{1,2} = \begin{pmatrix} \frac{1 - \exp(\frac{4J}{kT})}{1 + \cosh(\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1 - \exp(\frac{4J}{kT})}{1 + \cosh(\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})} & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \frac{2[1 + \exp(\frac{4J}{kT})]}{1 + \cosh(\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})} \end{pmatrix}.$$

escrevendo os parâmetros

$$\begin{aligned}t_+ &= \frac{1 + M_{zz}}{2} = 1 - \frac{1 + \exp(\frac{4J}{kT})}{1 + \cosh(\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})}, \\ t_- &= \frac{1 - M_{zz}}{2} = \frac{1 + \exp(\frac{4J}{kT})}{1 + \cosh(\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})}, \\ u_+ &= \frac{P_{1,z} + P_{2,z}}{2} = \frac{1 + \exp(-\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})}{1 + \cosh(\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})} - 1, \\ u_- &= \frac{P_{1,z} - P_{2,z}}{2} = 0, \\ v_+ &= \frac{M_{xx} + M_{yy}}{2} = \frac{1 - \exp(\frac{4J}{kT})}{1 + \cosh(\frac{2\omega_0}{kT}) + \exp(\frac{4J}{kT})}, \\ v_- &= \frac{M_{xx} - M_{yy}}{2} = 0, \\ w_+ &= \frac{M_{yx} + M_{xy}}{2} = 0, \\ w_- &= \frac{M_{yx} - M_{xy}}{2} = 0,\end{aligned}$$

em que

$$(V_1^T)^2 = u_-^2 + v_-^2 + w_+^2, \quad (\text{G.5})$$

$$= 0, \quad (\text{G.6})$$

$$(V_2^T)^2 = u_+^2 + v_+^2 + w_-^2 \quad (\text{G.7})$$

$$= \left(\frac{1 + \exp\left(-\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} - 1 \right)^2 + \left(\frac{1 - \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} \right)^2 \quad (\text{G.8})$$

$$(s_1^T)^2 = \left(\frac{1 + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} \right)^2 \geq 0,$$

$$(s_2^T)^2 = \left(1 - \frac{1 + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} \right)^2 - \left(\frac{1 + \exp\left(-\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} - 1 \right)^2 - \left(\frac{1 - \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} \right)^2,$$

Calculamos também a derivada de $(s_2^T)^2$

$$\begin{aligned} \frac{d(s_2^T)^2}{dj} &= 2 \left(1 - \frac{1 + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} \right)^2 \cdot \\ &\cdot \left(\frac{-\left(\frac{4\omega_0}{kT}\right) \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} + \frac{\left(\frac{4\omega_0}{kT}\right) (1 + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)) \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{[1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)]^2} \right) \\ &- \left(\frac{1 + \exp\left(-\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} - 1 \right) \cdot \\ &\cdot \left(\frac{\left(\frac{4\omega_0}{kT}\right) \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)} - \frac{\left(\frac{4\omega_0}{kT}\right) (1 + \exp\left(-\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)) \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{[1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)]^2} \right) \\ &+ \frac{\left(\frac{8\omega_0}{kT}\right) [1 - \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)] \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{[1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)]^2} + \frac{\left(\frac{8\omega_0}{kT}\right) [1 - \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)]^2 \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{[1 + \cosh\left(\frac{2\omega_0}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)]^3}, \end{aligned}$$

fazendo $\omega_0 = 1$ e substituindo

$$\begin{aligned} \cosh\left(\frac{2}{kT}\right) &= \frac{1}{2} \left[\exp\left(\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2}{kT}\right) \right], \\ \sinh\left(\frac{2}{kT}\right) &= \frac{1}{2} \left[\exp\left(\frac{2}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{2}{kT}\right) \right]. \end{aligned}$$

Após algumas manipulações teremos

$$\begin{aligned} \frac{d(s_2^T)^2}{dJ} &= \frac{\left(-\frac{32}{kT}\right) \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)}{\left[2 + \exp\left(\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2}{kT}\right) + 2 \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)\right]^3} \cdot \\ &\cdot \left[-2 - \exp\left(\frac{2}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{2}{kT}\right)\right. \\ &\left. + \exp\left(\frac{4J}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(\frac{2}{kT}\right)\right] + 4 \exp\left(\frac{4J}{kT}\right)\right], \end{aligned}$$

No ponto crítico, $J = \frac{1}{2}$

$$\left. \frac{d(s_2^T)^2}{dJ} \right|_{J=\frac{1}{2}} = \frac{\left(-\frac{32}{kT}\right) \exp\left(\frac{2}{kT}\right) \left[-1 - \exp\left(-\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4}{kT}\right) + 3 \exp\left(\frac{2}{kT}\right)\right]}{\left[2 + 3 \exp\left(\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2}{kT}\right)\right]^3},$$

calculando o limite em $T \rightarrow 0$ termos

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} \left. \frac{d(s_2^T)^2}{dJ} \right|_{J=\frac{1}{2}} &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{\left(-\frac{32}{kT}\right) \exp\left(\frac{2}{kT}\right) \left[-1 - \exp\left(-\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(\frac{4}{kT}\right) + 3 \exp\left(\frac{2}{kT}\right)\right]}{\left[2 + 3 \exp\left(\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2}{kT}\right)\right]^3} \\ \lim_{T \rightarrow 0} \left. \frac{d(s_2^T)^2}{dJ} \right|_{J=\frac{1}{2}} &= -\infty. \end{aligned}$$

G.3 Estado Térmico de Heisenberg XXZ

Para o sistema no equilíbrio. No caso de um hamiltoniano do tipo Heisenberg XXZ, em que

$$\hat{H} = -J\hat{\sigma}_1^x\hat{\sigma}_2^x - J\hat{\sigma}_1^y\hat{\sigma}_2^y - \Delta\hat{\sigma}_1^z\hat{\sigma}_2^z,$$

portanto,

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\Delta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta & -2J & 0 \\ 0 & -2J & \Delta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\Delta \end{pmatrix},$$

diagonalizando \hat{H} teremos

Auto estados de \hat{H}	Auto energias
$ \varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle + \phi^-\rangle) = \uparrow\uparrow\rangle,$	$E_{\uparrow\uparrow} = -\Delta,$
$ \varphi_2\rangle = \psi^-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle - \downarrow\uparrow\rangle),$	$E_{\psi^-} = \Delta + 2J,$
$ \varphi_3\rangle = \psi^+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\uparrow\downarrow\rangle + \downarrow\uparrow\rangle),$	$E_{\psi^+} = \Delta - 2J,$
$ \varphi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi^+\rangle - \phi^-\rangle) = \downarrow\downarrow\rangle,$	$E_{\downarrow\downarrow} = -\Delta.$

A transição de fase deve ocorrer em

$$\begin{aligned} E_{\uparrow\uparrow} &= E_{\psi^-} \\ \frac{\Delta}{J} &= 1. \end{aligned}$$

Escrevendo o operador densidade de estados, na base de spin, para Esse sistema em equilíbrio térmico $\hat{\rho} = (1/Z) \exp(-\beta\hat{H})$, $\beta = 1/kT$ com k a constante de Boltzman , T a temperatura, e Z é a função de partição $Z = \text{Tr} [\exp(-\beta\hat{H})]$

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right) & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) \end{pmatrix}.$$

Note que a mudança para a base computacional nEsse caso não altera a matriz, nem tão pouco a sua função de partição.

$$Z = 2 \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right) \right].$$

Fazendo a identificação, calculando os VPs e os elementod de MC

$$\mathbb{P}_1 = \left(0 \quad 0 \quad \frac{2 \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) (1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right))}{2 \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) [1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)]} - 1 \right),$$

$$\mathbb{P}_2 = \left(0 \quad 0 \quad \frac{2 \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) (1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right))}{2 \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) [1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)]} - 1 \right).$$

em que apenas

$$\begin{aligned} M_{xx} &= \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]}, \\ M_{yy} &= \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]}, \\ M_{zz} &= 1 - \frac{2 \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]}. \end{aligned}$$

são diferentes de zero em

$$\mathbb{M}_{1,2} = \begin{pmatrix} M_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & M_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & M_{zz} \end{pmatrix}.$$

Definindo

$$\begin{aligned} t_{\pm} &= \frac{1 \pm M_{zz}}{2}, & u_{\pm} &= \frac{P_{1,z} \pm P_{2,z}}{2}, \\ v_{\pm} &= \frac{M_{xx} \pm M_{yy}}{2}, & w_{\pm} &= \frac{M_{yx} \pm M_{xy}}{2}. \end{aligned}$$

$$t_+ = 1 - \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]},$$

$$t_- = \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]},$$

$$u_{\pm} = 0,$$

$$v_+ = \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]},$$

$$v_- = 0,$$

$$w_{\pm} = 0.$$

assim obteremos as seguintes distâncias

$$(s_1^T)^2 = \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]} \right)^2,$$

$$\begin{aligned} (s_2^T)^2 &= \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]} \right)^2 - \\ &\quad - \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]} \right)^2, \end{aligned}$$

Calculamos também a derivadas de $(s_2^T)^2$ com relação a Δ .

$$\begin{aligned} \frac{d(s_2^T)^2}{d\Delta} &= 2 \left(1 - \frac{\exp(-\frac{2\Delta}{kT}) \cosh(\frac{2J}{kT})}{[1 + \exp(-\frac{2\Delta}{kT}) \cosh(\frac{2J}{kT})]} \right)^2 \cdot \\ &\cdot \left(\frac{2\beta \exp(-\frac{2\Delta}{kT}) \cosh(\frac{2J}{kT})}{[1 + \exp(-\frac{2\Delta}{kT}) \cosh(\frac{2J}{kT})]} - \frac{(\frac{2J}{kT}) \exp(-\frac{4\Delta}{kT}) \cosh^2(\frac{2J}{kT})}{[1 + \exp(-\frac{2\Delta}{kT}) \cosh(\frac{2J}{kT})]^2} \right) - \\ &- \frac{2(\frac{2J}{kT}) \exp(-\frac{4\Delta}{kT}) \sinh^2(\frac{2J}{kT})}{[1 + \exp(-\frac{2\Delta}{kT}) \cosh(\frac{2J}{kT})]^2} - \frac{2(\frac{2J}{kT}) \exp(-\frac{6\Delta}{kT}) \sinh^2(\frac{2J}{kT}) \cosh(\frac{2J}{kT})}{[1 + \exp(-\frac{2\Delta}{kT}) \cosh(\frac{2J}{kT})]^3}, \end{aligned}$$

fazendo $J = 1$ e substituindo

$$\begin{aligned} \cosh\left(\frac{2}{kT}\right) &= \frac{1}{2} \left[\exp\left(\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2}{kT}\right) \right], \\ \sinh\left(\frac{2}{kT}\right) &= \frac{1}{2} \left[\exp\left(\frac{2}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{2}{kT}\right) \right]. \end{aligned}$$

Após algumas manipulações teremos

$$\begin{aligned} \frac{d(s_2^T)^2}{d\Delta} &= \frac{(\frac{8}{kT}) \exp(-\frac{2\Delta}{kT})}{2 + \exp(-\frac{2\Delta}{kT}) [\exp(\frac{2}{kT}) + \exp(-\frac{2}{kT})]} \cdot \\ &\cdot \left[2 \left[\exp\left(\frac{2}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{2}{kT}\right) \right] + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{4}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{4}{kT}\right) \right] \right] \\ &- 2 \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right). \end{aligned}$$

No ponto crítico $\Delta = 1$, teremos que

$$\left. \frac{d(s_2^T)^2}{d\Delta} \right|_{\Delta=1} = \frac{(\frac{8}{kT}) [2 [1 + \exp(-\frac{4}{kT})] + \exp(-\frac{4}{kT}) [\exp(\frac{4}{kT}) + \exp(-\frac{4}{kT})] - 2 \exp(-\frac{4}{kT})]}{2 + [1 + \exp(-\frac{4}{kT})]}.$$

Calculando o limite para temperaturas zero obtemos

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} \left. \frac{d(s_2^T)^2}{d\Delta} \right|_{\Delta=1} &= \lim_{T \rightarrow 0} \frac{(\frac{8}{kT}) [2 [1 + \exp(-\frac{4}{kT})] + [1 + \exp(-\frac{8}{kT})] - 2 \exp(-\frac{4}{kT})]}{2 + [1 + \exp(-\frac{4}{kT})]} \\ \lim_{T \rightarrow 0} \left. \frac{d(s_2^T)^2}{d\Delta} \right|_{\Delta=1} &= \lim_{T \rightarrow 0} \left(\frac{8}{kT} \right) = \infty. \end{aligned}$$

Portanto a curva diverge nesse ponto para temperatura zero

G.3.1 Modelo de Ising

Para o modelo de Ising

$$\hat{H} = -\Delta \hat{\sigma}_1^z \hat{\sigma}_2^z,$$

$$J_x = J_y = 0,$$

$$J_z = \Delta.$$

Logo

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) \end{pmatrix},$$

com

$$Z = 2 \left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \right]. \quad (\text{G.9})$$

Podemos calcular os vetores de polarização e os elementos da matriz de correlção

$$\mathbb{P}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbb{P}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\mathbb{M}_{1,2} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \frac{2 \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right]} \end{pmatrix}.$$

com

$$t_+ = 1 - \frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right]},$$

$$t_- = \frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right]},$$

$$u_{\pm} = 0,$$

$$v_+ = 0,$$

$$v_- = 0,$$

$$w_{\pm} = 0.$$

O que nos leva às desigualdades

$$(s_1^T)^2 = \left(\frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2 \geq 0, \quad (\text{G.10})$$

$$(s_2^T)^2 = \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2 \geq 0 \quad (\text{G.11})$$

Ou ainda, podemos obter as distâncias quadráticas a partir do modelo XXZ fazendo $J = 0$. O que resulta em

$$(s_1^T)_{xxz}^2 = \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]} \right)^2 \\ \stackrel{J=0}{=} \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2,$$

$$(s_2^T)_{xxz}^2 = \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]} \right)^2 \\ - \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \sinh\left(\frac{2J}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \cosh\left(\frac{2J}{kT}\right)\right]} \right)^2 \\ \stackrel{J=0}{=} \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2.$$

Logo

$$(s_1^T)^2 = \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2, \quad (\text{G.12})$$

$$(s_1^T)^2 = \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2. \quad (\text{G.13})$$

Podemos, por fim, efetuar os cálculos diretamente a partir dos autovalores com $\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)$ e $\lambda_3 = \lambda_4 = \frac{1}{Z} \exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right)$ e Z definido na Eq.(G.9)

$$(s_1^T)^2 = 4\lambda_1\lambda_2 \\ (s_1^T)^2 = 4 \left(\frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{2 \left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2, \quad (\text{G.14})$$

$$\begin{aligned}
(s_2^T)^2 &= 4\lambda_1\lambda_2 \\
(s_2^T)^2 &= 4 \left(\frac{\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right)}{2 \left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \right]} \right)^2. \tag{G.15}
\end{aligned}$$

Para mostrar a equivalência dos três métodos de cálculo, tomaremos a expressão calculada de forma usual Eq.(G.10). Primeiramente notamos que Eq.(G.10) já é idêntica a Eq.(G.14).

A seguir fazemos algumas manipulações matemáticas na expressão Eq.(G.10)

$$\begin{aligned}
(s_1^T)^2 &= \left(\frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \right]} \right)^2 \\
&= \left(\frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \right]} \right)^2 \\
&= \left(\frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \right]} \right)^2 \\
&= \left(\frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right) \right]} \right)^2,
\end{aligned}$$

resultando na Eq.(G.12).

Podemos fazer o mesmo para a segunda distância Eq.(G.11). Após algumas manipulações matemáticas.

$$\begin{aligned}
(s_2^T)^2 &= \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \right]} \right)^2 \\
&= \left(\frac{\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \right]} \right)^2 \\
&= \left(\frac{\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \right]} \right)^2,
\end{aligned}$$

vemos que a expressão Eq. (G.11) é idêntica a Eq.(G.15). O mesmo pode ser provado

com relação a Eq.(G.13)

$$\begin{aligned}
 (s_2^T)^2 &= \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) + \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2 \\
 &= \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\exp\left(\frac{\Delta}{kT}\right) \left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2 \\
 &= \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right) \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2 \\
 &= \left(1 - \frac{\exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)}{\left[1 + \exp\left(-\frac{2\Delta}{kT}\right)\right]} \right)^2 .
 \end{aligned}$$

Portanto, as três formas de escrever as distâncias Eq.(G.10), Eq.(G.12) e Eq.(G.14) são completamente equivalentes. O mesmo ocorre para Eq.(G.11), Eq.(G.13) e Eq.(G.15) que também são idênticas.

Referências Bibliográficas

- [1] EINSTEIN, A., PODOLSKI, E. e ROSEN, N., *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete?*, **Phys. Rev.**, v. 47, p. 777-780, 1935.
- [2] BENNETT, C. H., BRASSARD, G., CREPEAU, C., JOZSA, R., PERES, A. e WOOTTERS, W. K., *Teleporting an unknown quantum state via dual classic and Einstein-Podolsky-Rosen channels*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 70, p. 1895-1899, 1993.
- [3] BENNETT, C. H. e WIESNER, S. J., *Communication via one-and two-particle operators on Einstein-Podolsky-Rosen states*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 69, p. 2881, 1992.
- [4] EKERT, A.K., *Quantum cryptography based on Bell's theorem*. **Phys Rev Lett.**, v. 67, p. 661-663, ago. 1991; BENNETT, C. H., BRASSARD, C. H. e EKERT, A.K., *Quantum cryptography*, **Scientific American**, p. 50-57, out.1992.
- [5] BELL, J. S., *On the Einstein-Podolsky-Rosen Paradox*, **Physica** **1**, p.195-200, 1964.
- [6] PERES, A., *Separability Criterion for Density Matrices*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 77, p.1413-1415, 1996.
- [7] HORODECKI, M., HORODECKI, P. e HORODECKI, R., *Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions*, **Phys. Lett. A**, v. 223, p. 1-8, 1996.
- [8] WOOTTERS, W. K., *Entanglement of Formation of an Arbitrary State of Two Qubits*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 80, p. 2245-2258, 1998.

- [9] MINTERT, F., CARVALHO, A.R.R., KUS, M. e BUCHLEITNER, A., *Measures and dynamics of entangled states*, **Physics Reports**, v. 415, p. 207-259, 2005.
- [10] VIDAL, G. e WERNER R. F., *Computable measure of entanglement*, **Phys. Rev. A**, v. 65, p. 032314-032325, 2002.
- [11] BRAGA, Helena, SOUZA, Simone e MIZRAHI, Salomon S., *Geometrical meaning of two-qubit entanglement and its symmetries*, **Phys. Rev. A**, v. 81, p. 042310-042318, 2010.
- [12] TERRA CUNHA, M.O., *The geometry of entanglement sudden death*, **New J. Phys.**, v. 9, 237, 2007.
- [13] YU, T. e EBERLY, J. H., *Finite-Time Disentanglement Via Spontaneous Emission*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 93, p. 140404-140408, 2004.
- [14] LEE, T.D. e YANG, C.N., *Possible Interference Phenomena between Parity Doublets*, **Phys. Rev.**, v. 104, p. 822-827, 1956.
- [15] WERNER, R.F., *Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model*, **Phys. Rev. A**, v. 40, p. 4277-4281, 1989.
- [16] GISIN, N., *Hidden quantum nonlocality revealed by local filters*, **Phys. Lett. A**, v. 210, p. 151-156, 1996.
- [17] YU, T. e EBERLY, J. H., *Sudden Death of Entanglement: Classical Noise Effects*, **Opt. Comm.**, v. 264, p. 393-398, 2006.
- [18] YU, T. e EBERLY, J. H., *Negative Entanglement Measure, and What It Implies*, **J. Mod. Opt.**, v. 54, p. 2289-2296, 2007.
- [19] ALMEIDA, M. P., DE MELO, F., HOR-MEYLL, M., SALLES, A., WALBORN, S. P., SOUTO RIBEIRO, P. H., e DAVIDOVICH, L., *Environment-Induced Sudden Death of Entanglement*, **Science**, v. 316, p. 579-582, abr 2007.
- [20] BELLOMO B., LO FRANCO, R., e COMPAGNO, G., *Non-Markovian Effects on the Dynamics of Entanglement*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 99, p. 160502-160506, 2007.

- [21] MAZZOLA, L., MANISCALCO, S., PILO J., SUOMINEN K. A., e GARRAWAY, B.M., *Sudden death and sudden birth of entanglement in common structured reservoirs*, **Phys. Rev. A**, v. 79, p. 042302-042306, 2009.
- [22] LÓPEZ, C. E., ROMERO, G., LASTRA, F., SOLANO, E. e RETAMAL, J. C., *Sudden Birth versus Sudden Death of Entanglement in Multipartite Systems*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 101, p. 080503-080507, 2008.
- [23] DAS, S. e AGRAWAL, G. S., *Bright and Dark periods in the Entanglement Dynamics of Interacting Qubits in Contact with the Environment*, **J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.**, v. 42, p. 141003, 2009.
- [24] RAU, A.R.P., *Algebraic characterization of X-states in quantum information*, **J. Phys. A: Math. Gen.**, v.42, p. 412002-412009, 2009.
- [25] VINJANAMPATHY, S. e RAU, A.R.P., *Generalized X states of N qubits and their symmetries*, **Phys. Rev. A**, v. 82, p. 032336-032340, 2010.
- [26] OSBORNE, T. J., e NIELSEN, M. A., *Entanglement in a simple quantum phase transition*, **Phys. Rev. A**, v. 66, p. 032110-032124, 2002.
- [27] RIGOLIN, G., *Thermal entanglement in the two-qubit Heisenberg XYZ model*, **Int. J. Quant. Inf.**, v. 2, p. 393-406, 2004; e DE OLIVEIRA, Thiago R., RIGOLIN, Gustavo, DE OLIVEIRA, Marcos C. e MIRANDA, Eduardo, *Multipartite Entanglement Signature of Quantum Phase Transitions*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 97, p. 170401-170405, 2006.
- [28] SUDARSHAN, E. C.G., MATHEWS, P. M. e RAU, Jayaseetha, *Stochastic Dynamics of Quantum-Mechanical Systems*, **Phys. Rev.**, v. 121, p. 920-924, 1961.
- [29] HORODECKI, M., HORODECKI, P. e HORODECKI, R., *Limits for Entanglement Measures*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 84, p. 2014-2017, 2000.
- [30] JAMIOLKOLSKI, A., *Linear transformations which preserve trace and positive semidefiniteness of operators*, **Rep Math. Phys.**, v. 3, p. 275-278, 1972.

- [31] BARBIERI, M., DE MARTINI, F., DI NEPI, G., MATALONI, P., D'ARIANO, G. M. e MACCHIAVELLO, C., *Detection of Entanglement with Polarized Photons: Experimental Realization of an Entanglement Witness*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 91, p. 227901-227905, 2003.
- [32] FANO, U., *Pairs of two-level systems*, **Rev. Mod. Phys.**, v. 55, p. 855-874, 1983.
- [33] ALTAFINI, C. e HAVEL, T.F., *Reflection symmetries for multiqubit densities*, **J. Math Phys.**, v. 47, p. 032104, 2006.
- [34] BENNETT, C. H., DIVINCENZO, D. P., SMOLIN, J. A. e WOOTTERS, W. K., *Mixed-state entanglement and quantum error correction*, **Phys. Rev. A** , v. 54, p. 3824-3851, 1996.
- [35] POPESCU, S. e ROHRLICH, D., *Thermodynamics and the measure of entanglement*, **Phys. Rev. A**, v. 56, p. R3319-R3321, 1997.
- [36] EISERT, J , AUDENAERT, K e PLENIO, M B , *Remarks on entanglement measures and non-local state distinguishability*, **J. Phys. A: Math. Gen.**, v. 36, p. 5605, 2003.
- [37] WITTE, C. e TRUCKS, M., *A new entanglement measure induced by the Hilbert-Schmidt norm*, **Phys. Lett. A**, v. 257, p. 14-20, 1999.
- [38] VEDRAL, V., PLENIO, M. B., RIPPIN, M. A. e KNIGHT, P. L., *Quantifying Entanglement*, **Phys. Rev. Lett.**, v. 78, p. 2275-2279, 1997.
- [39] SACHDEV, S., *Quantum Phase Transitions*, Cambridge University Press , 1999.
- [40] RULLI, C. C. e SARANDY, M. S., *Entanglement and local extremes at an infinite-order quantum phase transition*, **Phys. Rev. A** , v. 81, p. 032334-032341, 2010.
- [41] SARANDY, M. S., *Classical correlation and quantum discord in critical systems*, **Phys. Rev. A** , v.80, p. 022108-022117, 2010.

- [42] WERLANG, T., TRIPPE, C., RIBEIRO, G. A. P. e RIGOLIN, Gustavo, *Quantum Correlations in Spin Chains at Finite Temperatures and Quantum Phase Transitions*, **Phys. Rev. Lett** , v.105, p. 095702-095706, 2010.
- [43] MAZIERO, J., GUZMAN, H. C., CÉLERI, L. C., SARANDY, M. S. e SERRA, R. M., *Quantum and classical thermal correlations in the XY spin-1/2 chain*, **Phys. Rev. A**, v. 82, p. 012106-012112, 2010.